

УДК 535.51

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ ДЛЯ ПОГЛОЩАЮЩЕГО СЛОЯ НА ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПОДЛОЖКЕ С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ

Н.И. Стаськов¹, С.О. Парашков¹, А.В. Шилов¹, Н.А. Крекотень²

¹Могилевский государственный университет им. А.А. Кулешова, Могилев, Беларусь

²ОАО «Интеграл», Минск, Беларусь

ANALYTICAL SOLUTION OF THE INVERSE PROBLEM OF A SPECTROPHOTOMETER ABSORBING LAYER ON AN ABSORBING SUBSTRATE WITH A DIELECTRIC LAYER

N.I. Staskov¹, S.O. Parashkov¹, A.V. Shylov¹, N.A. Krekoten²

¹A.A. Kuleshov Mogilev State University, Mogilev, Belarus

²JSC "INTEGRAL", Minsk, Belarus

На примере двухслойной структуры полупроводник – диэлектрик – полупроводник рассмотрена возможность аналитического определения оптических параметров $n_1(\lambda)$, $k_1(\lambda)$ и толщины d_1 верхнего слоя по огибающим спектров отражения при нормальном падении света. Рассчитать такие функции даже для случая отсутствия переходных зон между слоями очень сложно. Несовпадение огибающих расчетных и измеренных коэффициентов отражения в определенных областях спектров указывает на наличие неоднородных поверхностных и переходных зон в реальных структурах pSi – SiO₂ – cSi.

Ключевые слова: двухслойная структура, оптические спектры, огибающие экстремумов, переходные слои, pSi – SiO₂ – cSi.

On the example of a two-layer structure of a semiconductor – insulator – semiconductor the possibility of an analytical determination of the optical parameters and thickness of the upper layer on the reflection spectrum envelope at normal incidence of light is considered. It is very difficult to calculate these functions even in the case of absence of the transition zones between the layers. Mismatching envelopes calculated and measured reflection coefficients in certain areas of the spectra indicates the presence of inhomogeneous surface and transition zones in real structures pSi – SiO₂ – cSi.

Keywords: bilayer structure, optical spectra, envelopes extrema, transition layers, pSi – SiO₂ – cSi.

Введение

В настоящее время считается, что одним из наиболее перспективных оптических методов определения всех параметров многослойной структуры является интерференционная спектrophотометрия отраженного и прошедшего света [1]–[3]. Разрабатываются методики решения ее основных уравнений для определения коэффициентов Френеля на границах раздела структуры и аналитического расчета оптических и геометрических характеристик слоев и подложки. Для этого на спектрах (отражения $R(\varphi, \lambda)$ или пропускания $T(\varphi, \lambda)$), измеренных или при постоянном угле падения (φ), или при постоянной длине волны (λ), строят огибающие экстремумов. Из данных работы [4], полученных на основании модельных расчетов, следует, что в случае пяти толстых ($d > \lambda$) диэлектрических слоев спектры $R(\varphi)$ и $T(\varphi)$ не похожи на интерференционные спектры одного слоя на подложке. Их максимумы и минимумы имеют разную интенсивность. Они не имеют четкой периодичности. На отдельных интервалах по таким спектрам затруднительно

определить положение огибающих экстремумов. Такая операция является основной при решении обратных задач по определению электродинамических параметров структуры. О трудностях построения огибающих для двухслойной структуры отмечалось в работе [5].

Можно ли вообще построить огибающие спектра $R(\varphi, \lambda)$, например, двухслойной структуры, и определить коэффициенты отражения хотя бы одного слоя? В данной работе мы попытались решить эту задачу при нормальном ($\varphi = 0$) падении света и рассмотреть возможность аналитического определения параметров поглощающего слоя ($n_1(\lambda)$, $k_1(\lambda)$, d_1) на известной поглощающей подложке ($n_3(\lambda)$, $k_3(\lambda)$) с диэлектрическим слоем ($n_2(\lambda)$, d_2). Цель работы определяется тем, что двухслойные структуры полупроводник – диэлектрик – полупроводник на основе кремния широко используются в микро и оптоэлектронном приборостроении. В связи с этим особый интерес представляет разработка оптического метода контроля параметров слоя поликристаллического кремния (pSi), нанесенного

на подложку кристаллического кремния (cSi) со слоем оксида кремния (SiO₂). Так как толстые ($d = 3\text{ мм}$) полупроводниковые подложки непрозрачны для видимого света, то анализ обсуждаемой структуры можно проводить только по спектрам отражения.

Для определения двух характеристик первого слоя в рассматриваемом случае можно выполнить измерения спектров $R(\lambda)$ в двух средах.

1 Теория метода

Пусть свет падает из среды с $n_0(\lambda)$ на слой pSi. Если это воздух, то $n_0^*(\lambda) = 1$. В другом случае это может быть прозрачная иммерсионная жидкость, например, вода с показателем преломления

$$n_0^{**}(\lambda) = 1,3226 + 4,1654 \cdot 10^{-3} \lambda^{-2} - 2,4851 \cdot 10^{-4} \lambda^{-4} \quad (\lambda \text{ в } \mu\text{м}).$$

Представим комплексные показатели преломления поглощающих сред в форме $N = n - ik$. Выражение для отражательной способности нашей структуры при нормальном падении света имеет вид [6]

$$R(\lambda) = \left| \frac{r_{01}(\lambda) + r_{13}(\lambda) \exp(-i2\delta_1(\lambda))}{1 + r_{01}(\lambda)r_{13}(\lambda) \exp(-i2\delta_1(\lambda))} \right|^2, \quad (1.1)$$

где

$$r_{13}(\lambda) = \frac{r_{12}(\lambda) + r_{23}(\lambda) \exp(-i2\delta_2(\lambda))}{1 + r_{12}(\lambda)r_{23}(\lambda) \exp(-i2\delta_2(\lambda))},$$

$$r_{01}(\lambda) = \frac{n_0(\lambda) - N_1(\lambda)}{n_0(\lambda) + N_1(\lambda)},$$

$$r_{12}(\lambda) = \frac{N_1(\lambda) - n_2(\lambda)}{N_1(\lambda) + n_2(\lambda)},$$

$$r_{23}(\lambda) = \frac{n_2(\lambda) - N_3(\lambda)}{n_2(\lambda) + N_3(\lambda)},$$

$$\delta_1(\lambda) = 2\pi d_1 \lambda^{-1} N_1(\lambda),$$

$$\delta_2(\lambda) = 2\pi d_2 \lambda^{-1} n_2(\lambda).$$

В таком случае легко найти выражения для огибающих максимумов (+) и минимумов (-) спектра $R(\lambda)$

$$R_{\pm}(\lambda) = \left| \frac{|r_{01}(\lambda)| \pm |r_{13}(\lambda)| \exp(-4\pi d_1 \lambda^{-1} k_1(\lambda))}{1 + |r_{01}(\lambda)| |r_{13}(\lambda)| \exp(-4\pi d_1 \lambda^{-1} k_1(\lambda))} \right|^2. \quad (1.2)$$

Это в свою очередь позволяет рассчитать отражательную способность $|r_{01}(\lambda)|^2 = R_{01}(\lambda)$ на границе раздела среда с $n_0(\lambda)$ – подложка с $N_1(\lambda)$

$$R_{01}(\lambda) = \left| \frac{1 + \sqrt{R_+(\lambda)R_-(\lambda)} - \sqrt{(1-R_+(\lambda))(1-R_-(\lambda))}}{\sqrt{R_+(\lambda)} + \sqrt{R_-(\lambda)}} \right|^2 \quad (1.3)$$

и параметр $\left[|r_{13}(\lambda)| \exp(-4\pi d_1 \lambda^{-1} k_1(\lambda)) \right]^2 = R_{13}(\lambda)$,

который характеризует отражение света на границе раздела среда с $N_1(\lambda)$ – подложка $N_3(\lambda)$ с диэлектрическим слоем

$$R_{13}(\lambda) = \left| \frac{1 - \sqrt{R_+(\lambda)R_-(\lambda)} - \sqrt{(1-R_+(\lambda))(1-R_-(\lambda))}}{\sqrt{R_+(\lambda)} - \sqrt{R_-(\lambda)}} \right|^2. \quad (1.4)$$

Таким образом, для аналитического определения оптических функций первого слоя $n_1(\lambda)$, $k_1(\lambda)$ необходимо:

- измерить спектры $R^*(\lambda)$ и $R^{**}(\lambda)$ в двух средах с $n_0^*(\lambda)$ и $n_0^{**}(\lambda)$;
- построить две пары соответствующих огибающих ($R_+^*(\lambda)$, $R_+^{**}(\lambda)$);
- по выражению (1.3) определить отражательные способности $R_{01}^*(\lambda)$ (воздух – среда с $N_1(\lambda)$) и $R_{01}^{**}(\lambda)$ (иммерсионная жидкость – среда с $N_1(\lambda)$).

После этого находим неизвестные оптические характеристики слоя

$$n_1(\lambda) = \frac{0.5(R_{01}^{**}(\lambda) - 1)(R_{01}^*(\lambda) - 1) \left[(n_0^{**}(\lambda))^2 - 1 \right]}{(R_{01}^*(\lambda) + 1)(R_{01}^{**}(\lambda) - 1) - n_0^{**}(\lambda)(R_{01}^*(\lambda) + 1)(R_{01}^*(\lambda) - 1)}, \quad (1.5)$$

$$k_1(\lambda) = \sqrt{\frac{2n_1(\lambda)(R_{01}^*(\lambda) + 1)}{1 - R_{01}^*(\lambda)} - (n_0^{**}(\lambda))^2 - 1}. \quad (1.6)$$

Для определения толщины первого слоя (d_1) необходимо найти длины волн не менее, чем двух экстремумов в спектре $R(\lambda)$ и при этих длинах волн рассчитать фазы $\alpha_{01}(\lambda_m)$ и $\alpha_{13}(\lambda_m)$ коэффициентов отражения

$$r_{01}(\lambda_m) = |r_{01}(\lambda_m)| \exp(i\alpha_{01}(\lambda_m)),$$

$$r_{13}(\lambda_m) = |r_{13}(\lambda_m)| \exp(i\alpha_{13}(\lambda_m)).$$

Так как

$$r(\lambda_m) = \sqrt{R(\lambda_m)} \exp(i\alpha(\lambda_m)),$$

то

$$\alpha(\lambda_m) = \alpha_{13}(\lambda_m) - \alpha_{01}(\lambda_m) + 4\pi d_1 \lambda_m^{-1} n_1(\lambda). \quad (1.7)$$

Если принять во внимание, что максимумы порядка m приходятся на длины волн, удовлетворяющих условию $\alpha(\lambda_m) = 2m\pi$, а минимуму – на длины волн, удовлетворяющих условию $\alpha(\lambda_{m+1}) = (2m+1)\pi$, то можно получить два выражения для определения толщины первого слоя. В работе [1] для определения толщины слоя на подложке рекомендовано использование экстремумов m и $m+p$ порядков. В таком случае нет необходимости определять m . Удобно номер, например, максимума (v) присваивать по спектру слева на право. Тогда, для двух любых максимумов с $\lambda_v < \lambda_{v+p}$ на основании (1.4) получаем выражение для определения толщины слоя

$$d_1(\lambda) = \quad (1.8)$$

$$= \frac{[2p\pi + \alpha_{13}(\lambda_v) - \alpha_{13}(\lambda_{v+p}) - \alpha_{01}(\lambda_v) + \alpha_{01}(\lambda_{v+p})] \lambda_v \lambda_{v+p}}{4\pi[\lambda_{v+p} n_1(\lambda_v) - \lambda_v n_1(\lambda_{v+p})]}$$

Для двух соседних экстремумов с длинами волн для максимума λ_1 и для минимума λ_2 при $\lambda_1 > \lambda_2$ имеем

$$d_1 = \quad (1.9)$$

$$= \frac{[-\pi + \alpha_{01}(\lambda_1) - \alpha_{13}(\lambda_1) - \alpha_{01}(\lambda_2) + \alpha_{13}(\lambda_2)] \lambda_1 \lambda_2}{4\pi[\lambda_2 n_1(\lambda_1) - \lambda_1 n_1(\lambda_2)]}$$

2 Эксперимент

На растровом электронном микроскопе РЭМ S-4800 фирмы Hitachi было получено изображение скола промышленной структуры pSi – SiO₂ – cSi (КДБ12) (рисунок 2.1), из которого можно оценить толщины слоев pSi (0,38μm) и SiO₂ (0,10μm).

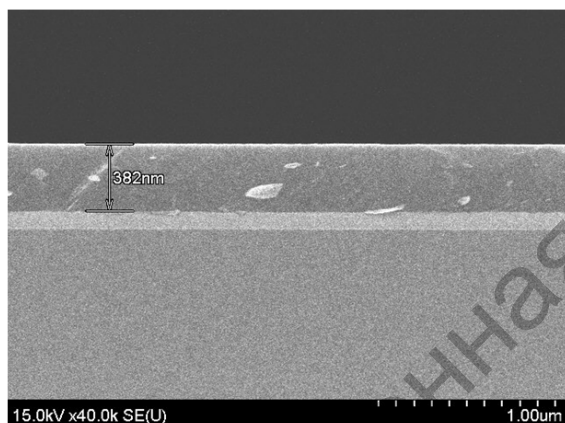


Рисунок 2.1 – Фотография скола структуры pSi – SiO₂ – cSi

Спектры $R_e(\lambda)$ (рисунок 2.2, кривая 1) этого образца измеряли в воздухе на спектрофотометре MPV – SP фирмы Leica (Германия) в видимой области спектра от 0,4μm до 0,8μm при нормальном падении света. По этому спектру строились огибающие максимумов и минимумов (кривые 3, 4).

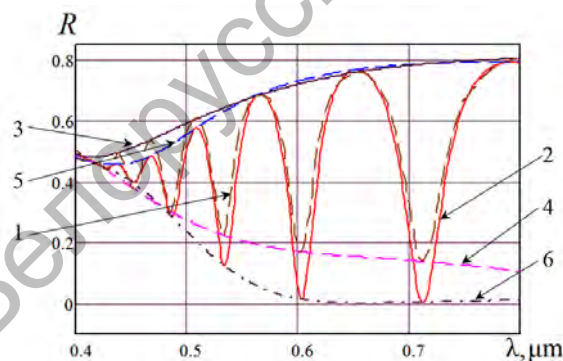


Рисунок 2.2 – Измеренный (1) и рассчитанный (2) спектры $R(\lambda)$ структуры pSi – SiO₂ – cSi и им соответствующие спектры огибающих (3, 4) и (5, 6) при $n_0(\lambda)=1$

3 Численное моделирование

Для численного моделирования спектры (0,4μm ≤ λ ≤ 0,8μm) оптических характеристик pSi и подложки cSi (КДБ12) со слоем SiO₂ взяты соответственно из ПО к спектральному эллипсометру ES-2 и работы [7]. Толщина слоя SiO₂ варьировалась в пределах от 0 до 1μm. На основании спектров оптических характеристик материалов слоев и подложки численно определялись такие толщины d_1 и d_2 , при которых соответствующие длины волн максимумов и минимумов измеренного и на основании выражения (1.1) рассчитанного спектров отражения (рисунок 2.2, кривые 1 и 2) совпадали. Оказалось, что $d_1 = 0,374\mu\text{m}$ и $d_2 = 0,103\mu\text{m}$. В дальнейшем при моделировании структуры толщина слоя pSi не изменялась. На рисунке 3.1 приведены спектры (кривые 1) модельной структуры в воздухе для $d_2 = 0$ (а) и $d_2 = 0,6\mu\text{m}$ (б) и воде $d_2 = 0,103\mu\text{m}$ (в), которые были рассчитаны по выражениям (1.1). На основании выражения (1.2) построены спектры огибающих максимумов (+) (кривые 2) и минимумов (–) (кривые 3).

Такие же огибающие $R_{\pm}^*(\lambda)$ рассчитаны для спектра 2 (рисунок 2.2, кривые 5 и 6). Подобные расчеты были выполнены для исследуемой структуры, помещенной в воду.

При нормальном падении света глубина проникновения оценивается условно по выражению $d_p(\lambda) = \lambda(4\pi k_1(\lambda))^{-1}$. С увеличением длины волны в области 0,4μm ≤ λ ≤ 0,8μm уменьшается показатель поглощения слоя поликристаллического кремния. Это приводит к увеличению глубины проникновения света в структуру и увеличению влияния параметров слоя оксида кремния и подложки на коэффициенты отражения $R^*(\lambda)$, $R^{**}(\lambda)$ и их огибающие. При отсутствии слоя SiO₂ (рисунок 3.1, а) огибающие являются монотонно убывающими функциями, которые легко найти аналитически по экстремумам спектра. Когда толщина оксидного слоя равна длине волны средней части спектра (б), такую операцию выполнить очень трудно. Появляются максимумы и минимумы, которые отсутствуют при $d_2 = 0$. Эти экстремумы не являются следствием интерференции света только на первом слое. Отмеченный эффект сильнее проявляется при использовании иммерсии.

Мы рассмотрели возможность оценки толщины первого слоя двухслойной структуры по выражению (1.8), в которое подставляли длины волн максимумов (таблица 1) из спектров $R(\lambda)$ (рисунок 2.2). Для определения фаз отраженных лучей по (1.1) и (1.7) использовались дисперсионные функции материалов слоев, подложки и

значения параметра $d_2 = 0,103 \mu\text{m}$. Оказалось (таблица 3.1), что толщина слоя поликристаллического кремния очень хорошо совпадает с найденной численно $d_1 = (0,374 \pm 0,004) \mu\text{m}$. Это позволило определить номера максимумов m в интерференционном спектре (последний столбец таблицы) и тем самым проверить выражение (1.8).

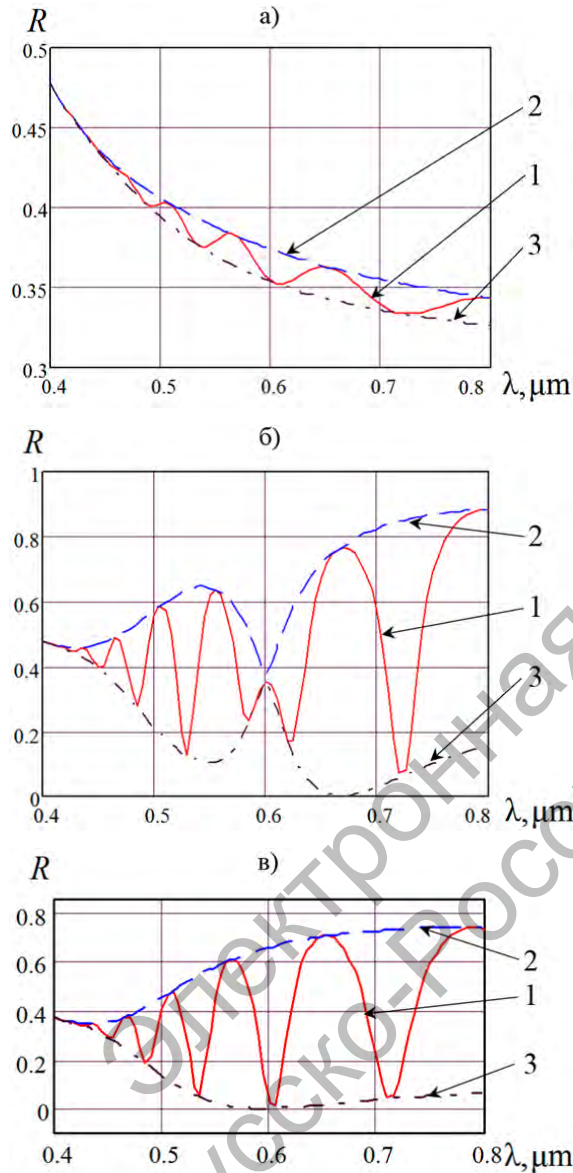


Рисунок 3.1 – Расчетные спектры структуры pSi – SiO₂ – cSi в воздухе а), б) и в воде в) при $d_1 = 0,374 \mu\text{m}$

Таблица 3.1 – Толщина слоя pSi

ν	$\lambda_\nu, \mu\text{m}$	$\nu, \nu + p$	$d_1, \mu\text{m}$	m
1	0,438	1, 6	0,375	7,854 (8)
2	0,468	2, 3	0,373	6,895 (7)
3	0,509	3, 6	0,374	5,915 (6)
4	0,566	1, 4	0,378	4,973 (5)
5	0,655	2, 5	0,373	3,995 (4)
6	0,798	4, 6	0,371	3,059 (3)

Как отмечалось выше, спектры $R^*(\lambda)$, $R^{**}(\lambda)$ и их огибающие $R_\pm^*(\lambda)$ и $R_\pm^{**}(\lambda)$ чувствительны к оптическим характеристикам среды, из которой падает свет, параметрам второго слоя и подложки. Поэтому, отражательные способности $|r_{01}^*(\lambda)|^2$ и $|r_{01}^{**}(\lambda)|^2$ из выражений (1.1) (рисунок 3.2, кривые соответственно 1 и 2) лишь частично ($\lambda < 0,63 \mu\text{m}$) совпадают с соответствующими спектрами $R_{01}^*(\lambda)$ и $R_{01}^{**}(\lambda)$ (кривые 3 и 4), определенными по огибающим $R_\pm^*(\lambda)$ и $R_\pm^{**}(\lambda)$ спектра 2 (рисунок 2.2) и соответственно спектра на рисунок 3.1 в).

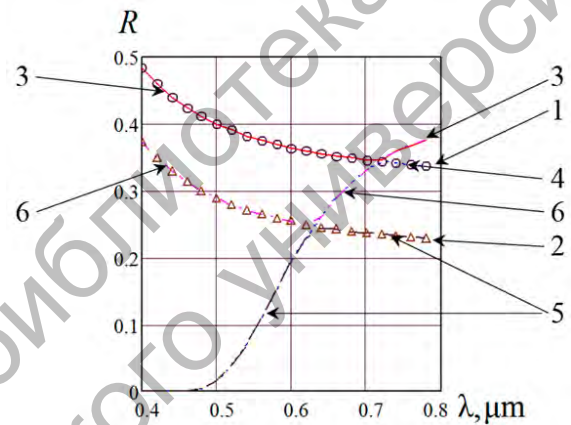


Рисунок 3.2 – Спектры отражательных способностей разных лучей

Более того в области от $0,63 \mu\text{m}$ до $0,72 \mu\text{m}$ спектр $|r_{01}^{**}(\lambda)|^2$ совпадает со спектром $R_{13}^{**}(\lambda)$, а в области от $0,72 \mu\text{m}$ до $0,8 \mu\text{m}$ для аналитического определения оптических спектров первого слоя необходимо будет в выражениях (1.5) и (1.6) $R_{01}^*(\lambda)$ и $R_{01}^{**}(\lambda)$ заменить соответственно на $R_{13}^*(\lambda)$ и $R_{13}^{**}(\lambda)$ (кривые 5 и 6).

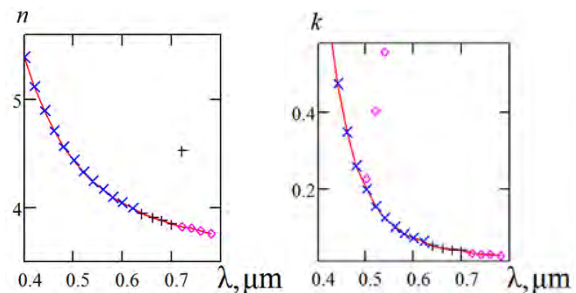


Рисунок 3.3 – Спектры $n_1(\lambda)$ и $k_1(\lambda)$ первого слоя модельной структуры

Расчитанные на основании (1.5) и (1.6) по спектрам $R_{01}^*(\lambda)$ и $R_{01}^{**}(\lambda)$ спектры $n_1(\lambda)$ и $k_1(\lambda)$ (рисунок 3.3, крестики $\times \times \times$) лишь в области от $0,4 \mu\text{m}$ до $0,63 \mu\text{m}$ совпадают с заданными аналитически (сплошные кривые). В области от

0,63 μm спектры $n_1(\lambda)$ и $k_1(\lambda)$ (рисунок 3.3, дискретные точки) совпадают с аналитически заданными (сплошные кривые), если выполнить вышеуказанную замену $R_{01}^{**}(\lambda)$ на $R_{13}^{**}(\lambda)$ ($0,63 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 0,72 \mu\text{m}$, + + +) и $R_{01}^*(\lambda)$ и $R_{01}^{**}(\lambda)$ на $R_{13}^*(\lambda)$ и $R_{13}^{**}(\lambda)$ ($0,72 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 0,8 \mu\text{m}$, $\diamond \diamond \diamond$).

Попробуем качественно объяснить несовпадение интенсивностей экстремумов спектров 1 и 2 на рисунке 2.2. Как уже отмечалось, глубина проникновения света в однородную среду при нормальном падении зависит от длины волны и показателя поглощения. В исследуемой спектральной области ее величина составляет примерно от 0,033 μm до 3 μm . Ранее в работах [8] и [9] соответственно методами спектральной и многоугловой эллипсометрии структур pSi – SiO₂ – cSi с более тонкими слоями ($d_1 \sim 0,2 \mu\text{m}$, $d_2 \sim 0,04 \mu\text{m}$) было показано, что границы раздела воздух – pSi [8] и воздух – pSi – SiO₂ – cSi [9] являются переходными зонами. Следовательно, при $0,4 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 0,5 \mu\text{m}$ информативность спектра обуславливает сложный по структуре слой pSi, на котором находится переходная зона (приповерхностный слой) с воздушными порами. Эта область по данным многоугловой эллипсометрии имеет толщину около 0,011 μm и с помощью модели Бруггемана представляется состоящей из воздушных пор, аморфного кремния и оксида SiO₂. В области $0,5 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 0,6 \mu\text{m}$ вклад в спектр $R_c(\lambda)$ добавляет слой оксида с окруженными переходными зонами. Толщина зоны pSi – SiO₂ около 0,008 μm . При $\lambda > 0,6 \mu\text{m}$ вклад в спектр вносит пятислойная структура pSi – SiO₂ – cSi с переходной зоной SiO₂ – cSi. Толщина этой зоны около 0,012 μm . Доля переходной зоны воздух – pSi очень мала по отношению к толщине всего покрытия на подложке. На это указывает различие соответствующих огибающих $R_1(\lambda)$ (рисунок 2.2, кривые 3 и 5) в области от 0,4 μm до 0,55 μm и $R(\lambda)$ (кривые 4 и 6) в области $\lambda > 0,48 \mu\text{m}$.

Заключение

Таким образом, по предложенному выражению (1.8) можно аналитически определить толщину верхнего слоя двухслойной структуры, например, полупроводник – диэлектрик – полупроводник с известными дисперсионными функциями материалов слоев и подложки. Рассчитать

такие функции для верхнего слоя методом огибающих даже для случая отсутствия переходных зон между слоями очень сложно. Несовпадение огибающих расчетных и измеренных коэффициентов отражения в определенных областях спектров указывает на наличие неоднородных поверхностных и переходных зон в реальных структурах pSi – SiO₂ – cSi.

ЛИТЕРАТУРА

1. Филиппов, В.В. Аналитический метод определения оптических постоянных и толщины поглощающих пленок по спектрам отражения / В.В. Филиппов // Оптика и спектроскопия. – 1995. – Т. 78, № 5. – С. 798–801.
2. Minkov, D. Computation of the optical constants of a thin dielectric layer on a transmitting substrate from the reflection spectrum at inclined incidence of light / D. Minkov // JOSA A. – 1991. – Vol. 8, № 2. – P. 306–310.
3. Комраков, В.М. Измерение параметров оптических покрытий. / В.М. Комраков, Б.А. Шапочкин // Машиностроение, 1986. – 136 с.
4. Кособуцкий, П.С. Аналитические функции огибающих спектров Фабри – Перо многослойных структур / П.С. Кособуцкий // Письма в ЖТФ. – 2008. – Т. 34, № 10. – С. 79–82.
5. Филиппов, В.В. Метод огибающих для исследования системы двух пленок на отражающей подложке / В.В. Филиппов // Оптика и спектроскопия. – 2006. – Т. 101, № 3. – С. 485–489.
6. Борн, М. Основы оптики; пер. с англ. / М. Борн, Э. Вольф. – М.: Наука, 1970. – 856 с.
7. Стаськов, Н.И. Эллипсометрия переходных слоев полупроводник – диэлектрик / Н.И. Стаськов, И.В. Ивашкевич, Н.А. Кречотень // Проблемы физики, математики и техники. – 2013. – № 2 (15). – С. 18–24.
8. Беляева, А.И. Границы раздела слоев и шероховатость в многослойной кремниевой структуре. / А.И. Беляева, А.А. Галуза, С.Н. Коломиец // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38, № 9. – С. 1050–1055.
9. Стаськов, Н.И. Моделирование переходных слоев в структуре полупроводник – диэлектрик – полупроводник / Н.И. Стаськов, И.В. Ивашкевич // Оптика неоднородных структур: материалы III междунар. науч.-практ. конф., Могилев, 2011 г. / МГУ им. А.А. Кулешова; ред.: В.А. Карпенко (отв. ред.). – Могилев, 2011. – С. 92 – 94.

Поступила в редакцию 14.09.14.