

УДК 535.51

ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ПЕРЕХОДНЫХ СЛОЕВ ПОЛУПРОВОДНИК – ДИЭЛЕКТРИК

Н.И. Стаськов¹, И.В. Ивашкевич¹, Н.А.Крекотень²

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

²НТЦ БМС ОАО «Интеграл», Минск

ELLIPSOMETRY OF THE TRANSITIVE LAYERS SEMICONDUCTOR – DIELECTRIC

N.I. Stas'kov¹, I.V. Ivashkevich¹, N.A. Krekoten²

¹A.A. Kuleshov Mogilev State University, Mogilev

²Belmicrosystems Reserch & Desing Center Branch of the JSC INTEGRAL, Minsk

Для тонких ($d < 0,1\lambda$) оксидных слоев на кремниевой подложке установлена связь поляризуемости слоя с его оптической толщиной. Показано, что структуру неоднородного поверхностного слоя при термообработке пластин кремния КДБ 12 можно интерпретировать комбинированной пятислойной моделью с одиннадцатью параметрами, которые учитывают поверхностный слой, прозрачный оксидный слой, первый промежуточный слой, эффективный переходный слой, второй промежуточный слой и подложку.

Ключевые слова: эллипсометрия, оптическая модель, переходный слой, шероховатые и оптически неоднородные слои, поляризуемость.

The polarizability bound of the layer with its optical thickness is established for thin oxide surfaces on a silicon substrate. It is revealed that the structure of the inhomogeneous surface layer can be interpreted by a five-layer model with 11 parameters at the heat treatment of the silicon plates.

Keywords: ellipsometry, optical model, transition layer, rough and optically inhomogeneous layers, polarizability.

Введение

Развитие интегральной микроэлектроники выдвигает задачи по определению параметров нанометровых (до 20 нм) диэлектрических слоев на полупроводниковых подложках, например, SiO₂ – Si [1], [2]. Особый интерес представляют возможности обнаружения неоднородных поверхностных и переходных областей, которые определяют эксплуатационные качества электронных и оптоэлектронных устройств. При этом результативность неразрушающих оптических исследований, среди которых особое место занимает эллипсометрия, определяется адекватностью теоретической электродинамической модели реальному образцу и соответствием дисперсионных характеристик слоев материалам структуры [3], [4]. Известно [5], что численное решение обратной эллипсометрической задачи напрямую связано с числом параметров электродинамической модели исследуемого образца. Поэтому в реальных ситуациях необходима модель с минимальным числом свободных параметров. В работе [6] при сравнении трех моделей слоев на подложке, которые использовались для исследования влияния параметров естественного поверхностного слоя ($d < 4$ нм) на определяемые методом спектральной эллипсометрии дисперсионные зависимости показателей преломления $n_2(\lambda)$ и поглощения $k_2(\lambda)$ ($N_2(\lambda) = n_2(\lambda) - ik_2(\lambda)$)

кремниевых пластин КДБ 12, продемонстрирована эффективность модели слоя с одной комплексной поляризуемостью α_z .

Для тонких переходных слоев между подложкой и внешней средой основное уравнение эллипсометрии можно представить как сумму

$$\operatorname{tg}\Psi_e(\varphi_0, \lambda, x_i) e^{i\Delta_e(\varphi_0, \lambda, x_i)} = \frac{\bar{R}_p}{R_s} + \delta \left(\frac{R_p}{R_s} \right), \quad (0.1)$$

в которой первое слагаемое является основным уравнением эллипсометрии для чистой подложки, а второе – поправка, вызванная наличием слоя. В случае однопараметрической модели слоя неизвестную величину α_z легко выразить из (0.1) в явном виде, не прибегая к трудоемким численным методам. Выражение (0.1) указывает, во-первых, на взаимосвязь параметров тонкого слоя в разных моделях одного и того же образца. И, во-вторых, в случае тонких неоднородных поверхностных слоев разделить методами эллипсометрии вклад в параметр $\delta \left(\frac{R_p}{R_s} \right)$ шероховатости поверхности и неоднородности физической структуры слоя можно только определенными математическими функциями, с помощью которых задается оптическая неоднородность слоя при некоторой среднеквадратичной высоте неровностей поверхности σ [4]. В качестве критерия

адекватности модели реальному образцу в этом случае выбирается значение целевой функции или функционала невязки:

$$I(x_j) = \sum_{k=1}^m \left\{ \left[\Psi_e(\varphi_0, \lambda_k) - \Psi(\varphi_0, \lambda_k, x_j) \right]^2 + \left[\Delta_e(\varphi_0, \lambda_k) - \Delta(\varphi_0, \lambda_k, x_j) \right]^2 \right\} \quad (0.2)$$

экспериментальных $\Psi_e(\varphi_0, \lambda_k)$, $\Delta_e(\varphi_0, \lambda_k)$ и соответствующих рассчитанных $\Psi(\varphi_0, \lambda_k, x_j)$, $\Delta(\varphi_0, \lambda_k, x_j)$ эллисометрических углов. В формуле (0.2) x_j ($j = \overline{1, n}$) – вещественные параметры электродинамической модели плоскостройной среды, m – число точек в спектре для фиксированного угла падения излучения φ_0 (спектральная эллисометрия) или число углов падения для фиксированной длины волны (многоугольная эллисометрия). Оптимальные значения x_j определяются из условия глобального минимума функции $I(x_j)$. Так как параметры $\Psi_e(\varphi_0, \lambda_k)$, $\Delta_e(\varphi_0, \lambda_k)$ измеряются обычно с неопределенностью $\pm 0,01^0$, то при толщине слоя значительно меньшей длины волны ($d \ll \lambda$) можно указать большое число математических функций электродинамических моделей, приводящих к одинаковым параметрам $\Psi(\varphi_0, \lambda_k, x_j)$, $\Delta(\varphi_0, \lambda_k, x_j)$, а в итоге – к одинаковым локальным минимумам функции (0.2). Если достижение минимального значения функции $I(x_j)$ при решении обратных оптических задач является необходимым условием, то для достаточного условия получения физически обоснованного решения потребуем определение параметров некоторого известного элемента структуры, например, подложки или ее оксидного слоя.

В данной работе по результатам эллисометрии окисленных кремниевых пластин КДБ 12 устанавливается связь поляризуемости поверхностного оксидного слоя с его макропараметрами (толщиной и показателем преломления) и рассматривается возможность учета шероховатости поверхности слоя SiO_2 при исследовании структурной неоднородности контактной зоны между оксидным слоем и кристаллической Si подложкой.

1 Численное моделирование слоев на пластинах КДБ 12

1.1. Многоугольная эллисометрия на фиксированной длине волны подложки со слоем

Предположим, что на подложке КДБ 12 находится однородный слой SiO_2 . По уравнению Друде для этого случая

$$\text{tg} \Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s}, \quad (1.1)$$

где

$$R_p = \frac{r_{01p} + r_{12p} e^{-2i\delta}}{1 + r_{01p} r_{12p} e^{-2i\delta}};$$

$$R_s = \frac{r_{01s} + r_{12s} e^{-2i\delta}}{1 + r_{01s} r_{12s} e^{-2i\delta}};$$

$\delta = \frac{2\pi d}{\lambda} N_1 \cos \varphi_1$ – фазовая толщина слоя; r_{01p} ,

r_{12p} , r_{01s} , r_{12s} – амплитудные коэффициенты Френеля для соответствующих границ раздела воздух – оксид (01) и оксид – кристаллический кремний (12):

$$r_{01p} = \frac{N_1 \cos \varphi_0 - N_0 \cos \varphi_1}{N_1 \cos \varphi_0 + N_0 \cos \varphi_1};$$

$$r_{01s} = \frac{N_0 \cos \varphi_0 - N_1 \cos \varphi_1}{N_0 \cos \varphi_0 + N_1 \cos \varphi_1};$$

$$r_{12p} = \frac{N_2 \cos \varphi_1 - N_1 \cos \varphi_2}{N_2 \cos \varphi_1 + N_1 \cos \varphi_2};$$

$$r_{12s} = \frac{N_1 \cos \varphi_1 - N_2 \cos \varphi_2}{N_1 \cos \varphi_1 + N_2 \cos \varphi_2}.$$

Рассчитаем эллисометрические углы Δ и Ψ как функции толщины слоя ($0 \leq d \leq 0,1$ мкм; $\lambda = 0,6328$ мкм; $N_0 = 1$; $N_1 = 1,456$; $N_2 = 3,826 - i 0,02$) для углов падения 65° и 70° .

Затем, по основному уравнению эллисометрии для подложки со слоем диполей [6]:

$$\begin{aligned} \text{tg} \Psi e^{i\Delta} &= \\ &= \frac{(\cos \varphi_0 + N_2 \cos \varphi_2)(N_2 \cos \varphi_0 - \cos \varphi_2)}{(\cos \varphi_0 - N_2 \cos \varphi_2)(N_2 \cos \varphi_0 + \cos \varphi_2)} + \\ &\quad + 2i\alpha_z \frac{\pi}{\lambda} N_2^2 \sin^2 \varphi_0 \times \\ &\quad \times \frac{\cos \varphi_0 (\cos \varphi_0 + N_2 \cos \varphi_2)}{(\cos \varphi_0 - N_2 \cos \varphi_2)(N_2 \cos \varphi_0 + \cos \varphi_2)^2} \end{aligned} \quad (1.2)$$

при заданных φ_0 , N_0 , λ и рассчитанных по выражению (1.1) углах Ψ и Δ определим зависимость параметра α_z от толщины слоя d (рисунок 1.1). При этом, на основании закона преломления перейдем от углов преломления φ_1 и φ_2 к углу падения φ_0 .

По физическому смыслу (электростатическое приближение) $\alpha_z < 0$ и является действительным числом, имеющим размерность длины. Так как (1.2) – комплексное тождество, то в общем случае $\alpha_z = \text{Re}(\alpha_z) + i\text{Im}(\alpha_z)$. Величина мнимой части α_z указывает на соответствие сравниваемых моделей поверхностного слоя на подложке. Как и следовало ожидать, с увеличением d действительная часть параметра α_z увеличивается линейно. Однако, мнимая часть этого параметра при толщине слоя большей $0,08$ мкм начинает резко возрастать. Это указывает на несоответствие двух рассматриваемых моделей слоев на полупроводниковой подложке, т. е. однородные слои SiO_2 с $d > 0,1 \lambda$ нельзя рассматривать как тонкие двойные слои связанных зарядов

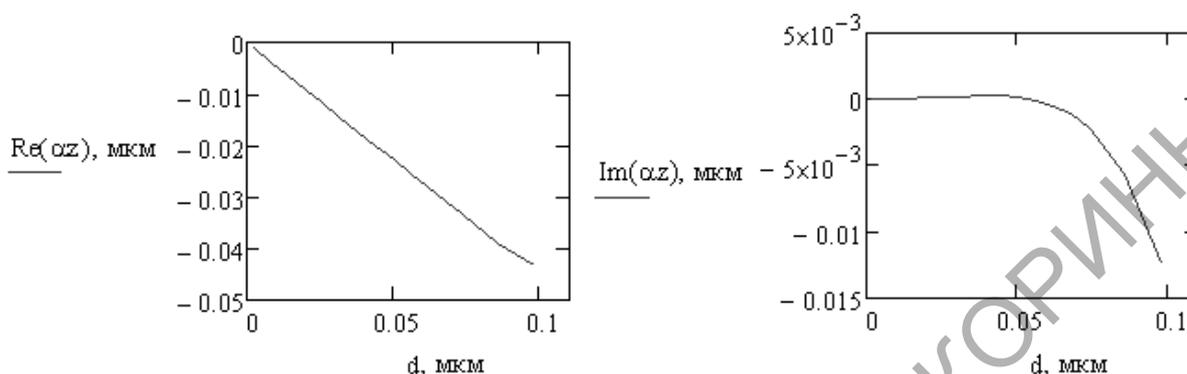


Рисунок 1.1 – Зависимости действительной ($\text{Re}(\alpha_z)$) и мнимой ($\text{Im}(\alpha_z)$) части поляризуемости α_z от толщины слоя SiO_2

вертикально поляризованных диполей. Данные рисунка 1.1 показывают, что действительную часть поляризуемости α_z можно представить как произведение некоторой постоянной безразмерной величины α_0 на оптическую толщину плоского слоя $N_1 d$, т. е. $\text{Re}(\alpha_z) = \alpha_0 N_1 d$. На рисунке 1.2 представлены отношения действительной части α_z к толщине слоя d , найденные из рисунка 1.1. Для толщин до $0,1 \lambda$ это отношение остается практически постоянным ($-0,452$).

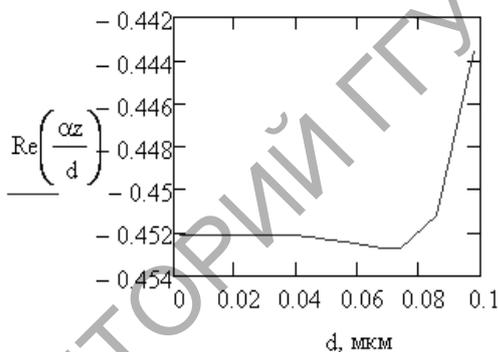


Рисунок 1.2 – Зависимость $\text{Re}(\alpha_z / d)$ от толщины слоя d

Таким образом, при эллипсометрическом контроле кремниевых пластин КДБ 12 с поверхностными слоями, толщина которых меньше $0,1 \lambda$, можно использовать трехпараметрическую модель: подложка (n_2, k_2) со слоем поляризованных диполей α_z . В таких случаях по величине α_z и отношению $\text{Re}(\alpha_z/d) = -0,452$ находится толщина поверхностного слоя, а при известной толщине слоя по величине α_z можно определить его показатель преломления N_1 .

1.2. Спектральная эллипсометрия подложки со слоем

Для рассмотрения возможности перехода от трехпараметрической модели плоского слоя SiO_2 к слою с одним параметром $\alpha_z(\lambda)$ по выражениям

(1.1) были рассчитаны спектры поляризационных углов $\Psi(\lambda)$ и $\Delta(\lambda)$ в интервале $0,480 \text{ мкм} \leq \lambda \leq 1 \text{ мкм}$ с шагом $0,04 \text{ мкм}$ при $d = 0,008 \text{ мкм}$ и углах падения 65° и 70° . Для этого значения $n_2(\lambda)$ и $k_2(\lambda)$ КДБ 12 из работы [6] интерполировались функциями

$$n_2(\lambda) = a_1 + b_1 \lambda^2 + \frac{c_1}{\lambda^2} + \frac{d_1}{\lambda^4} + \frac{f_1}{\lambda^6}; \quad (1.3)$$

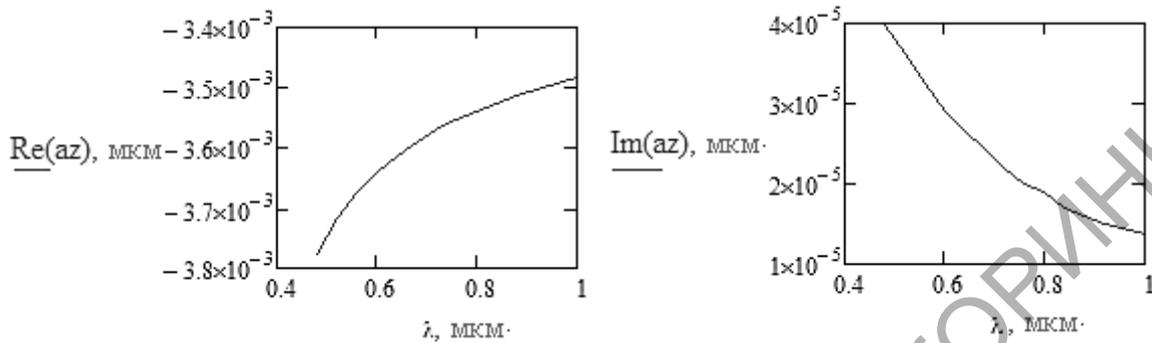
$$k_2(\lambda) = a_2 + b_2 \lambda^2 + \frac{c_2}{\lambda^2} + \frac{d_2}{\lambda^4} + \frac{f_2}{\lambda^6}; \quad (1.4)$$

где $a_1 = 3,3557$; $a_2 = -0,0520$; $b_1 = 0,0243 \text{ мкм}^{-2}$; $b_2 = 0,0233 \text{ мкм}^{-2}$; $c_1 = 0,1882 \text{ мкм}^2$; $c_2 = 0,0363 \text{ мкм}^2$; $d_1 = -0,0138 \text{ мкм}^4$; $d_2 = -0,0083 \text{ мкм}^4$; $f_1 = 0,0049 \text{ мкм}^6$; $f_2 = 0,0015 \text{ мкм}^6$; а значения $n_1(\lambda)$ оксида кремния из таблицы «OptiLayer» – функцией

$$n_1(\lambda) = A + B \lambda^2 + \frac{C}{\lambda^2} + \frac{D}{\lambda^4} + \frac{F_1}{\lambda^6}; \quad (1.5)$$

где $A = 1,4584$; $B = -0,0046 \text{ мкм}^{-2}$; $C = -0,0041 \text{ мкм}^2$; $D = 0,0022 \text{ мкм}^4$; $F = -0,0002 \text{ мкм}^6$. На рисунке 1.3 приведены спектры действительной и мнимой частей поляризуемости $\alpha_z(\lambda)$ слоя на подложке, рассчитанные по выражению (1.2). Для этого использовались вышеуказанные спектры углов $\Psi(\lambda)$ и $\Delta(\lambda)$ однородного слоя и функции (1.3)–(1.5).

Расчеты $\alpha_z(\lambda)$ при углах $\varphi_0 65^\circ$ и 70° показывают, что соответствующие действительные и мнимые части поляризуемости от угла падения не зависят. Данные рисунка 1.3 подтверждают вывод в работе [6] о том, что в случае тонких поверхностных слоев при оценке их толщины дисперсией $\alpha_z(\lambda)$ можно пренебречь. И в этом случае отношение $\text{Re}(\alpha_z(\lambda)/d)$ близко к $-0,45$. Таким образом, по измеренным спектрам $\Psi_e(\lambda)$ и $\Delta_e(\lambda)$ полупроводниковых пластин можно найти $\alpha_z(\lambda)$ и, разделив эту величину на параметр $-0,45$, можно оценить толщину естественного слоя на их поверхности. Расчет показывает, что при $d = 0,008 \text{ мкм}$ погрешность в оценке толщины составляет $\pm 0,0003 \text{ мкм}$.

Рисунок 1.3 – Спектры действительной и мнимой части поляризуемости $\alpha_2(\lambda)$

1.3. Многоугольная эллисометрия подложки с шероховатым неоднородным слоем

Рассмотрим возможность моделирования шероховатого слоя на полированном свинцовосиликатном стекле ($n_c = 1,632$, $k_c = 0$ при $\lambda = 632,8$ нм) тонким слоем поляризованных диполей. Для этого воспользуемся экспериментальными эллисометрическими углами $\Psi_e(\varphi_0)$ и $\Delta_e(\varphi_0)$, которые приведены в монографии [4] для углов падения 50° , 60° и 65° . Такое количество данных позволяет определить не более шести неизвестных параметров любой модели. Методом наименьших квадратов минимизировалась функция (0.2) при решении обратных задач эллисометрии для следующих пяти моделей полированного свинцовосиликатного стекла:

1) однородная подложка с $n_{eff} = 1,633$ и $k_{eff} = 0,033$ ($I_1(2) = 0,048$);

2) слой с $\alpha_{z1} = -0,997$ нм на известной подложке с $n_c = 1,632$, $k_c = 0$ ($I_2(1) = 0,0273$);

2*) слой с $\alpha_{z1} = -0,965$ нм на подложке с $n_2 = 1,634$ и $k_2 = 0,5 \cdot 10^{-4}$ ($I_2(3) = 0,0094$);

3) плоский слой с $n_1 = 1,428$; $k_1 = 0,034$ и $d_1 = 8,1$ нм на известной подложке с $n_c = 1,632$, $k_c = 0$ ($I_3(3) = 0,0095$);

3*) плоский слой с $n_1 = 1,800$; $k_1 = 0,003$ и $d_1 = 7,8$ нм на подложке с $n_2 = 1,629$; $k_2 = 0,007$ ($I_3(5) = 0,0084$);

4) два плоских слоя соответственно с $n_1 = 1,007$; $k_1 = 0,042$; $d_1 = 1,83$ нм и $n_2 = 1,796$; $k_2 = 0,9 \cdot 10^{-4}$; $d_2 = 7,05$ нм на известной подложке с $n_c = 1,632$, $k_c = 0$ ($I_4(6) = 0,0096$);

4*) два прозрачных плоских слоя соответственно с $n_1 = 1,007$; $d_1 = 1,8$ нм и $n_2 = 1,798$; $d_2 = 6,8$ нм на подложке с $n_3 = 1,629$ и $k_3 = 0,0008$ ($I_4(6) = 0,0092$);

5) три слоя: слой с $\alpha_{z1} = -0,013$ нм на прозрачном подслое с $n_2 = 1,798$, $d_2 = 6,83$ нм и слой с $\alpha_{z3} = -0,031$ нм – на известной подложке с $n_c = 1,632$, $k_c = 0$ ($I_5(5) = 0,047$);

5*) три слоя: слой с $\alpha_{z1} = -0,021$ нм на прозрачном подслое с $n_2 = 1,797$, $d_2 = 7,4$ нм и слой с $\alpha_{z3} = -0,023$ нм – на подложке с $n_4 = 1,630$, $k_4 = 0,0002$ ($I_5(6) = 0,0088$).

Основное уравнение эллисометрии для пятой модели записывалось в рекуррентной форме, аналогичной (1.1). Такая модель использовалась при учете переходных слоев в структуре с Si – SiO₂ – pSi [7]. Эффективные параметры первой модели указывают на наличие тонкого ($n_{eff} \approx n_c$) поверхностного слоя с большим показателем преломления, чем у подложки. Модель 2* лучше характеризует стекло в сравнении с моделью 2 ($I_2(1) > I_2(3)$). Однако, при неопределенности $\pm 0,01^\circ$ экспериментальных углов $\Psi_e(\varphi_0)$ и $\Delta_e(\varphi_0)$ сравнительно большое значение целевой функции $I_2(3)$ требует уточнения модели поверхностного слоя. Последний вывод подтверждается данными, полученными при использовании модели 3*. В этом случае находились параметры плоского слоя и подложки. Толщина однородного слоя в этом случае удовлетворительно согласуется с толщиной неоднородного слоя на стекле $d_c = (7,3 \pm 0,3)$ нм, которая была определена в работе [4]. При не большом значении целевой функции $I_3(5)$ в этом случае параметры подложки не соответствуют свинцовосиликатному стеклу. Это можно объяснить тем, что модель 3* приближенно учитывает неоднородности слоя стекла и позволяет определить лишь толщину поверхностного слоя [6]. Если такой слой представить состоящим из двух подслоев (модель 4*), то суммарная толщина поверхностного слоя на стекле ($d_1 + d_2 = 8,6$ нм) оказывается больше, чем толщина, определенная с использованием модели 3*. Параметры подложки n_3 и k_3 оказались ближе к характеристикам стекла. Эти данные свидетельствуют о том, что параметры модели 4* позволяют оценить толщину шероховатого слоя по параметру d_1 и толщину неоднородного слоя по параметру d_2 . Пятая модель учитывает шероховатый поверхностный слой, промежуточный слой и переходный слой на подложке. Значение целевой функции $I_5(6)$ указывает на удовлетворительное совпадение рассчитанных и измеренных эллисометрических углов. Параметры $n_4 = 1,630$ и $k_4 = 0,0002$ этой модели позволяют сделать заключение не только о материале подложки (свинцовосиликатное стекло), но и о том,

что параметры трех слоев правдоподобно отражают структуру неоднородного поверхностного слоя стекла. Если параметр α_{z1} модели 2* соответствует толщине слоя 7,8 нм модели 3*, то параметрам α_{z1} и α_{z3} модели 5* соответствуют слои, толщина которых $d_1 = 0,17$ нм и $d_2 = 0,19$ нм. Суммарная толщина неоднородного слоя ($d = d_1 + d_2 + d_3$) по данным модели 5* оказывается равной 7,8 нм. Это значение удовлетворительно согласуется со значением, рассчитанным в работе [4].

Таким образом, в эллипсометрии стекла с тонким неоднородным поверхностным слоем, который включает шероховатости поверхности и неоднородности структуры, можно использовать модель: слой поляризованных диполей (α_{z1}) на подслое (n_2, k_2, d_2), который отделен от подложки (n_4, k_4) слоем поляризованных диполей (α_{z3}). Если при решении обратных задач задавать параметры подложки, то минимумы функции (0.2) являются локальными. Это особенно важно при определении дисперсионных характеристик и контроле качества поверхности материалов.

2 Экспериментальные результаты и их анализ

Эксперименты выполнены на промышленных пластинах КДБ 12, обработанных в буферном растворе после предварительной шлифовки и полировки. Затем эти пластины подвергались термической обработке (800 °С) в атмосфере газов O_2, N_2 и H_2 в течение 15 (образец № 1), 10 (образец № 2) и 5 (образцы № 3, 4) минут. Шероховатость пластин, определенная на профилометре Talystep (фирма Taylor-Hobson) иглой с радиусом закругления $R = 2$ мкм, не превышала 1 нм. Распределение концентраций атомов O и Si по нормали z , направленной от поверхности вглубь образовавшихся пленок SiO_2 , исследовали на Оже-спектрометре РН1 660 (PerkinElmer) путем послойного распыления пленок с шагом 1 нм и онами Ag^+ . Измерения поляризационных углов $\Psi_e(\varphi_0, \lambda_k)$ и $\Delta_e(\varphi_0, \lambda_k)$ осуществляли на лазерном эллипсометре ЛЭФ 3М-1 ($\lambda = 632,8$ нм) при углах падения от 65° до 77° с шагом 1° и спектральном

эллипсометре ES 2 с бинарной модуляцией состояния поляризации [8] в диапазоне длин волн от 480 нм до 1000 нм при углах падения 65° и 70° . По $\Psi_e(\varphi_0, \lambda_k)$ и $\Delta_e(\varphi_0, \lambda_k)$ и уравнениям (1.1) и (1.2) методом наименьших квадратов рассчитывали спектры параметров поверхностного слоя и подложки. При этом предполагалось, что поверхностный слой является плоским с тремя макропараметрами (модель 3*) или это слой связанных зарядов вертикально поляризованных диполей (модель 2*). На рисунке 2.1 приведены рассчитанные спектры $\alpha_z(\lambda)$ естественного слоя на исходной пластине КДБ 12.

Анализ данных рисунка 2.1 показывает, что поляризуемость $\alpha_z(\lambda)$ слабо зависит от угла падения и длины волны. Величина $Re(\alpha_z)$ поверхностного слоя исходной пластины, определенная ранее методом многоугловой эллипсометрии на длине волны $\lambda = 632,8$ нм, составляет $-1,756$ нм [7]. Это значение хорошо согласуется с данными рисунка 2.1. Мнимая часть поляризуемости $\alpha_z(\lambda)$ близка к нулю. Это указывает на адекватность модели слоя вертикально поляризованных диполей на подложке реальной пластины с естественным поверхностным слоем. На рисунке 2.2 приведены спектры отношения $Re(\alpha_z(\lambda) / (-0,452))$, которое определяет толщину естественного поверхностного слоя на КДБ 12.

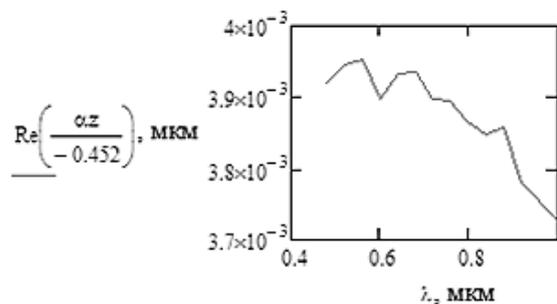


Рисунок 2.2 – Спектр отношения $Re(\alpha_z(\lambda) / (-0,452))$

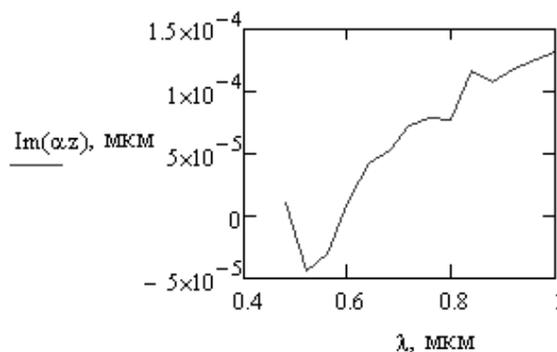
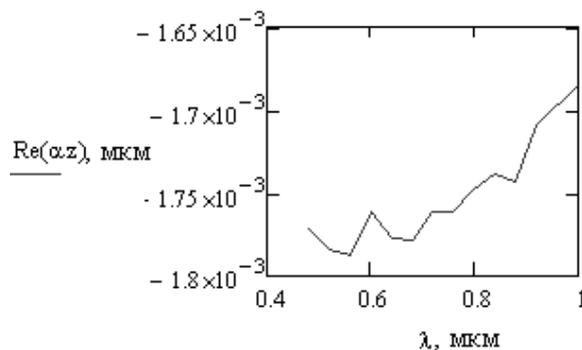


Рисунок 2.1 – Спектры действительной и мнимой части поляризуемости слоя на исходной пластине КДБ 12

Из рисунка 2.2 видно, что отношение $\text{Re}(\alpha_z(\lambda) / (-0,452))$ слабо зависит от длины волны. По данным двух сравниваемых моделей толщина слоя оказалась равной $(3,8 \pm 0,3)$ нм.

В области углов падения от 65° до 77° параметры Ψ_e и Δ_e наиболее чувствительны к характеристикам слоя и подложки КДБ 12. Для решения обратных эллисометрических задач методом наименьших квадратов число углов падения превышало число неизвестных электродинамических параметров в (0.2). В таблице 2.1 приведены средние значения толщин слоев четырех термообработанных образцов, найденные с использованием моделей 2* и 3*. Последняя строчка таблицы содержит параметры естественного слоя необработанной пластины.

Таблица 2.1 – Параметры поверхностных слоев пластин КДБ 12

№ образца	α_z , нм	$d = \text{Re}(\alpha_z(\lambda)) / (-0,452)$, нм	d , нм (Модель Друде)
1	$-3,590+0,260i$	7,9	8,1
2	$-2,661+0,0636i$	5,9	5,5
3	$-1,844-0,175i$	4,1	3,6
4	$-1,986-0,355i$	4,4	4,0
исходный	$-1,756-5,3 \cdot 10^{-5}i$	3,9	3,8

Как видно из данных таблицы 2.1, обе модели в рамках погрешностей ($\Delta d / d = 0,05$) приводят к одинаковым результатам относительно толщин слоев.

Для исследования структуры поверхностного слоя на Si подложке в модель 5* были добавлены слои с n_4, k_4, d_4 и слой с α_{z5} . Подложка в

этом случае имела параметры n_6, k_6 (модель б). Для решения обратной задачи многоугольной эллисометрии параметры Ψ_e и Δ_e использовались при всех вышеуказанных углах падения от 65° до 77° . Оказалось, что на образце № 1 находится неоднородный слой. Его удалось разделить на пять подслоев с параметрами ($\lambda = 632,8$ нм): шероховатый с $\alpha_{z1} = -0,012$ нм; оксидный (SiO_2) с $n_2 = 1,46, k_2 = 0, d_2 = 3,9$ нм; первый промежуточный $\alpha_{z1} = -0,102$ нм; переходный с $n_4 = 3,025, k_4 = 0,355, d_4 = 4,4$ нм; второй промежуточный с $\alpha_{z5} = -0,089$ нм и подложка с $n_6 = 3,825, k_6 = 0,034$. При увеличении числа измеряемых углов увеличивается суммарная экспериментальная погрешность. Это приводит к увеличению глобального минимума целевой функции $I_6(11) = 0,494$. Суммарная толщина поверхностного слоя на пластине КДБ 12, которая окислялась 15 мин., составляет около 8,8 нм. Этот результат удовлетворительно согласуется с данными оже-спектроскопии. На рисунке 2.3 приведены относительные концентрационные профили атомов O и Si в зависимости от времени шаговой ионно-плазменной обработки поверхности образца № 1. Его поверхностный слой толщиной 4 нм по стехиометрическому составу соответствует оксиду кремния SiO_2 . Между этим слоем и подложкой находится неоднородный переходной слой толщиной 5 нм.

Параметры переходного слоя между SiO_2 и Si по оптическим характеристикам не соответствует известным фазам кремния aSi, pSi и cSi. Увеличение концентрации атомов Si и соответствующее уменьшение концентрации атомов O (рисунок 2.3) в переходном слое можно объяснить уменьшением доли оксида и увеличением доли кристаллического кремния при увеличении z от 4 нм до 9 нм. Это приводит к зависимости показателя преломления переходного слоя n_2 от z .

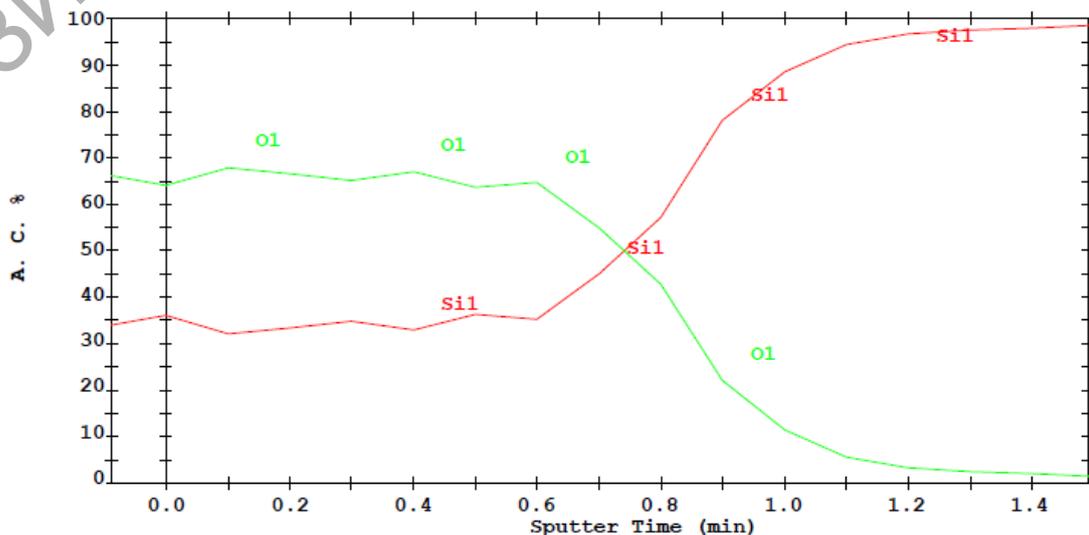


Рисунок 2.3 – Распределение атомов O и Si по толщине поверхностного слоя образца № 1

Таким образом, из-за структурной неоднородности переходного слоя его параметры $n_2 = 3,025$ и $k_2 = 0,355$ имеют смысл эффективных характеристик бинарной среды. На основании линейного приближения Бруггемана (ВЕМА) слой между двумя промежуточными слоями соответственно с α_{z3} и α_{z5} состоит из SiO_2 (33%) и КДБ 12 (67%). Если предположить распределение долей оксида и КДБ 12, вытекающее из рисунка 2.3, то $1,46 \leq n_2(z) \leq 3,825$. Электростатические приближения эффективных сред не учитывают дисперсионные зависимости диэлектрических проницаемостей компонент наполнителей и матрицы. Поэтому доли компонент в эффективной среде оказываются комплексными величинами, мнимая часть которых указывает на соответствие модели эффективной среды материалу слоя. Так, если предположить, что в переходном слое находится SiO_2 и aSi, и по эффективному показателю слоя найти соответствующие доли ($f_{\text{SiO}_2} = 45\%$, $f_{\text{aSi}} = 55\%$), то мнимая часть долей компонент уменьшается вдвое. Расчеты с использованием других моделей эффективных сред показывают, что содержание в переходном слое образца кремниевых фаз составляет aSi – 60% и cSi – 7%, т. е. больше, чем SiO_2 (33%). Более строго определить структуру переходного слоя можно методами спектральной эллипсометрии.

Заключение

Глобальный минимум, обеспечивающий устойчивое решение многопараметрических обратных задач эллипсометрии, достигается при определении всех параметров электродинамической модели исследуемой структуры.

Шероховатые ($\sigma < 1$ нм) и оптически неоднородные поверхностные слои можно учитывать тонкими двойными слоями связанных зарядов вертикально поляризованных диполей при эллипсометрических исследованиях полупроводниковых и диэлектрических подложек. Для слоев, толщина которых не превышает $0,1 \lambda$, поляризуемость является линейной функцией их оптической толщины.

Предложенная модель (6) для эллипсометрии ПД в отличие от обычной пятислойной модели с 17 параметрами включает пять слоев с 11 параметрами, по которым можно интерпретировать структуру неоднородного поверхностного

слоя на Si подложке. При термической обработке пластин КДБ 12 на поверхности увеличивается оксидный слой, который в образце № 1 отделен от подложки неоднородным переходным слоем с фазами кремния aSi (60%), cSi (7%) и диоксида SiO_2 (33%). Состав и толщина этого слоя зависят, главным образом, от времени окисления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гриценко, В.А. Структура границ раздела кремний/оксид и нитрид/оксид / В.А. Гриценко // Успехи физических наук. – 2009. – Т. 179, № 9. – С. 921–930.
2. 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, вып. 9. – С. 1050–1055.
3. Аззам, Р. Эллипсометрия и поляризованный свет / Р. Аззам, Н. Башара: перевод с англ. под ред. А.В. Ржанова, К.К. Свиташева. – М.: Изд-во «Мир», 1981. – 582 с.
4. Пшеницын, В.И. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях / В.И. Пшеницын, М.И. Абаев, Н.Ю. Лызлов // М.: Изд-во «Химия», 1986. – 152 с.
5. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин // М.: Наука, 1979. – 285 с.
6. Учет влияния естественного поверхностного слоя при исследовании кремниевых пластин методом спектральной эллипсометрии / Н.И. Стаськов [и др.] // Проблемы физики, математики и техники. – 2012. – № 1 (10). – С. 26–30.
7. Стаськов, Н.И. Моделирование переходных слоев в структуре полупроводник – диэлектрик – полупроводник / Н.И. Стаськов, И.В. Ивашкевич // Оптика неоднородных структур», матер. III междунар. научно-практ. конф. / редкол.: В.А. Карпенко (отв. ред.). – Могилев: МГУ им. А.А. Кулешова, 2011. – С. 92–94.
8. Спектральная эллипсометрия многослойных гетероструктур ZnS/ZnSe / В.И. Ковалев [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2002. – Т. 69, № 2. – С. 258–263.

Поступила в редакцию 04.04.13.