

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СЛОИСТЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР МЕТОДОМ ИК ОТРАЖЕНИЯ

© К.О.Болтарь, В.А.Федирко

Московский государственный технологический университет «Станкин»,
101472 Москва, Россия
(Получена 14 июля 1995 г. Принята к печати 27 декабря 1995 г.)

Исследованы экспериментальные ИК спектры отражения структур, содержащих до 5 полупроводниковых слоев AlGaAs на подложках арсенида галлия, а также диффузионно-легированных и ионно-имплантированных структур кремния. Задача определения профилей концентрации и мольной доли в твердых растворах полупроводниковых структур решалась путем нахождения на ЭВМ набора значений параметров, при которых модельный спектр ИК отражения наименее отличался от измеренного. Полученные результаты для ряда структур сравниваются с данными, полученными другими методами.

В настоящее время изготовление как серийных, так и экспериментальных интегральных схем осуществляется, как правило, на основе промышленных эпитаксиальных структур. Такая структура содержит обычно ряд полупроводниковых слоев с заданными параметрами, выращенных на подложке. Надежное измерение этих параметров позволяет совершенствовать технологию и проводить входной контроль структур с целью повышения процента выхода годных.

Эффективная методика неразрушающего контроля многослойных структур может быть создана с использованием ИК спектроскопии отражения. Спектр отражения многослойной полупроводниковой структуры в ИК диапазоне имеет сложную структуру, обусловленную интерференцией волн, отраженных от границ слоев, и дисперсией диэлектрической проницаемости. Спектр отражения определяется толщинами слоев, характерными частотами колебаний кристаллической решетки, концентрацией и подвижностью свободных носителей заряда. При известных значениях указанных параметров нетрудно рассчитать модельный спектр ИК отражения структуры. Известные трудности при решении обратной задачи определения значений параметров по измеренному спектру отражения, разумеется, возрастают с увеличением числа определяемых параметров.

Концентрация свободных носителей заряда в однородных полупроводниках традиционно определяется по частоте минимума коэффициента отражения ИК излучения от поверхности полупроводника [1,2]. В

работе [3] предложены номограммы для определения толщины и концентрации носителей заряда тонкого легированного слоя кремния на поверхности кремниевой подложки по частоте и ширине минимума в ИК спектрах отражения. В работе [4] для определения параметров одного эпитаксиального слоя на подложке материалов $A^{III}B^V$ и твердых растворов на их основе использовался модельный расчет ИК спектра на ЭВМ.

Нами разработана и опробована методика диагностики многослойных полупроводниковых структур по спектрам ИК отражения в широком спектральном диапазоне. Исследовались ИК спектры отражения структур, содержащих до 5 полупроводниковых слоев $AlGaAs$ на подложках арсенида галлия, а также диффузионно-легированных и ионно-имплантированных структур кремния. Задача определения параметров полупроводниковых структур решалась путем нахождения на ЭВМ набора значений параметров, при которых модельный спектр ИК отражения наименее отличался от измеренного. Измерения и расчет модельных спектров выполнялся на фурье-спектрометре ИФС-113 фирмы «Брукер», оснащенном ЭВМ «Аспект-3000».

Измерения ИК спектров отражения производились в диапазоне волновых чисел $\nu = 50 \div 5000 \text{ см}^{-1}$ с разрешением 2 см^{-1} . Диаметр пятна излучения на образце составлял 5 мм, угол падения излучения 5° , угловая сходимость пучка $\sim 2\%$. Точность измерения спектров отражения $\sim 1\%$.

В качестве определяемых параметров принимались толщины эпитаксиальных слоев, мольная доля $AlAs$ x в композиции $Al_xGa_{1-x}As$ и концентрации носителей заряда в слоях структуры и подложке. Диэлектрическая проницаемость свободных носителей ϵ_e рассчитывалась в модели Друде:

$$\epsilon_c(\nu) = \frac{N \cdot e^2}{\pi \cdot c^2 \cdot m^* \cdot \nu(\nu + i\nu_c)}, \quad (1)$$

где N — концентрация свободных носителей, e — заряд электронов, m^* — эффективная масса носителей, ν_c — характерная частота столкновений носителей. При расчетах использовались значения эффективных масс $m_e^* \cong 0.26m_0$ и $m_h^* = 0.37m_0$ для электронов и дырок в кремниевых структурах [1], и $m_e^* = (0.07 + 0.08x)m_0$, $m_h^* = (0.4 + 0.6x)m_0$ для композиции $Al_xGa_{1-x}As$ [5], где m_0 — масса свободного электрона. Зависимость частоты столкновений электронов ν_e и дырок ν_h от концентрации носителей с достаточной для наших целей точностью может быть аппроксимирована эмпирическим выражением (ср. [3]):

$$\nu_c = f_c(\nu) \max(1, 0.57 \cdot 10^{-8} \sqrt{N}), \quad (2)$$

где $f_c(\nu)$ — кусочно-гладкая функция частоты, различная для электронов и дырок, восстанавливаемая по экспериментальным зависимостям коэффициента поглощения ИК излучения от частоты в материале слоя [1,2].

Диэлектрическая проницаемость кремния принималась равной 11.7. Для полярных кристаллов $Al_xGa_{1-x}As$ величина диэлектрической про-

ницаемость решетки определялась в модели классического гармонического осциллятора для двух оптических ветвей [2,5]:

$$\varepsilon_p(\nu) = \varepsilon_1 \left(1 + \frac{\nu_{L1}^2 - \nu_{T1}^2}{\nu_{T1}^2 - \nu^2 + i\nu \cdot \Gamma_1} + \frac{\nu_{L2}^2 - \nu_{T2}^2}{\nu_{T2}^2 - \nu^2 - i\nu \cdot \Gamma_2} \right) \quad (3)$$

со значениями: $\varepsilon_1 = 10.89 - 2.73x$, $\nu_{L1} = 292 - 53x + 15x^2 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{T1} = 268 - 5x - 9x^2 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{L2} = 359 + 71x - 27x^2 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{T2} = 359 + 4x - 2x^2 \text{ см}^{-1}$, $\Gamma_1 = 0.01 \cdot \nu_{T1}$, $\Gamma_2 = 0.02 \cdot \nu_{T2}$.

Расчет спектров отражения многослойных структур проводился матричным методом [6] при заданных значениях толщин слоев d_n , концентрации носителей N_n , мольной доли x_n в слоях и подложке, где n — номер слоя. При заданном наборе параметров d_n , N_n , x_n , ($n = 0 \div 5$) вычислялся коэффициент отражения $T(\nu_m, d_n, N_n, x_n)$ для каждой частоты ν_m и сумма квадратов отклонений вычисленного спектра отражения от измеренного:

$$L(d_n, N_n, x_n) = \sum_{m=1}^M \left[T(\nu_m, d_n, N_n, x_n) - T_e(\nu_m) \right]^2 / M, \quad (4)$$

где M — число точек в спектре, T_e — экспериментально измеренный коэффициент отражения. Минимизируя функционал L , получим значения параметров d_n , N_n , x_n . Минимизация осуществлялась многократным чередованием операций нахождения минимума функционала L методом Ньютона по каждому параметру в отдельности и методом градиентного спуска по всем параметрам одновременно.

Выбор начального приближения существенно влияет на скорость вычисления и возможность появления неверных решений. Начальное приближение параметров задается по характерным особенностям спектра отражения или известным примерным значениям параметров.

Программа написана на языке «Фортран» и реализована на ЭВМ «Аспект-3000» фурье-спектрометра ИФС-113. Модельный спектр ИК отражения записывается на диск ЭВМ в том же формате, что и измеренные спектры, и может в дальнейшем обрабатываться и изображаться на всех устройствах ЭВМ спектрометра. Количество точек спектра M задается исходя из изрезанности экспериментального спектра и требуемой точности вычислений и обычно составляет от 20 до 200. Затраты машинного времени составляют от нескольких минут однослойной структуры до нескольких часов для пятислойной структуры.

На рис. 1 представлены измеренный (кривая 1) спектр ИК отражения двухслойной эпитаксиальной структуры $n^+ - n - n^-$ арсенида галлия и рассчитанный спектр (кривая 2). При вычислениях величины ν_c по формуле (2) использовались зависимости $f_c = \nu/120$ при $\nu < 600 \text{ см}^{-1}$, $f_c = 5 \text{ см}^{-1}$ при $600 < \nu < 2000 \text{ см}^{-1}$, $f_c = \nu^2 / (8 \cdot 10^5)$ при $\nu > 2000 \text{ см}^{-1}$ для электронов, и $f_c = 150 \text{ см}^{-1}$ при $\nu < 600 \text{ см}^{-1}$, $f_c = 9 \cdot 10^4 / \nu$ при $\nu > 600 \text{ см}^{-1}$ для дырок.

Среднее квадратичное отклонение (СКО) измеренного и модельного спектров составляет 0.29%. На вставке рис. 1 измеренный по рассматриваемой методике профиль концентрации $N(d)$ этой структуры

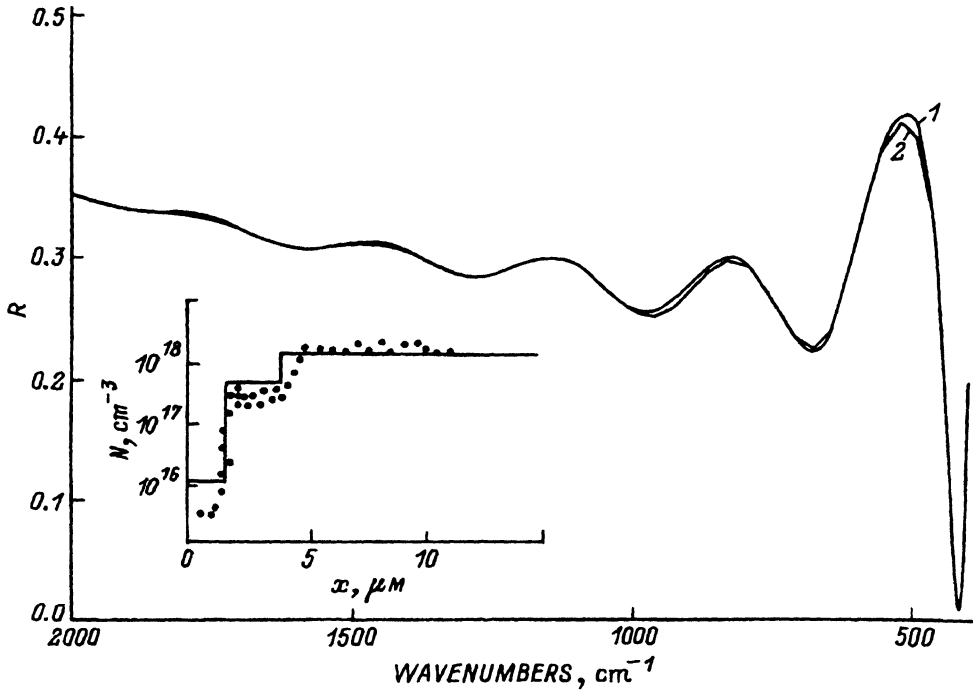


Рис. 1. Спектры отражения двухслойной эпитаксиальной структуры $n^+ - n - n^-$ арсенида галлия.

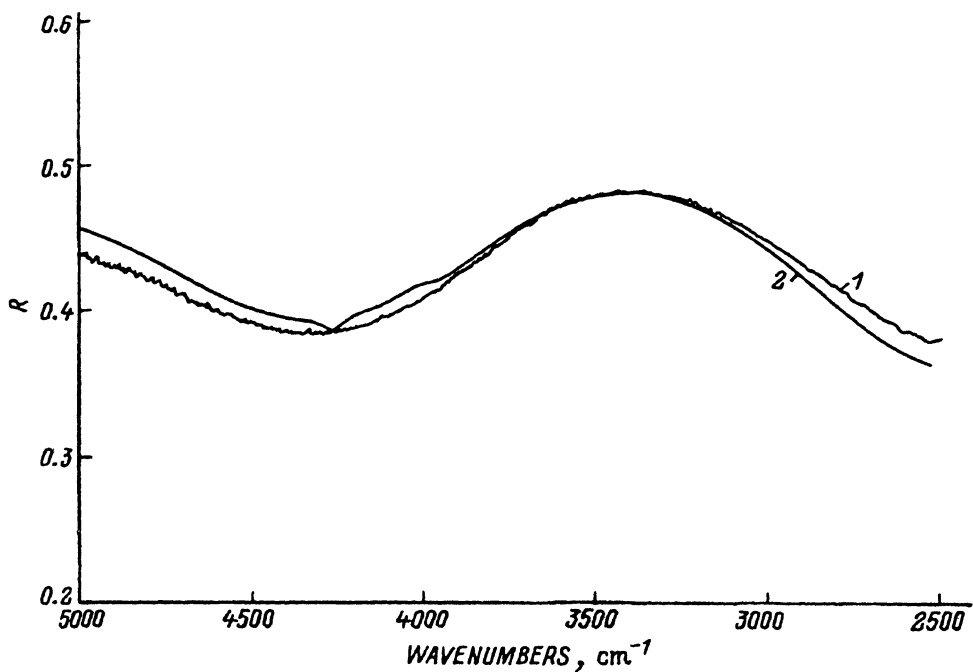


Рис. 2. Спектры отражения четырехслойной эпитаксиальной структуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

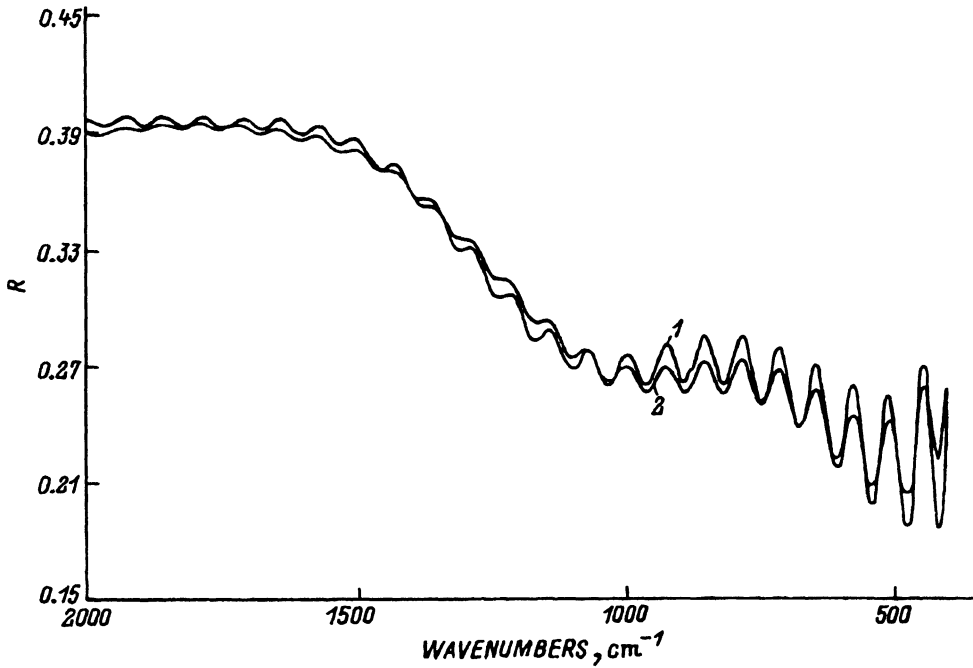


Рис. 3. Спектры отражения четырехслойной эпитаксиальной структуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

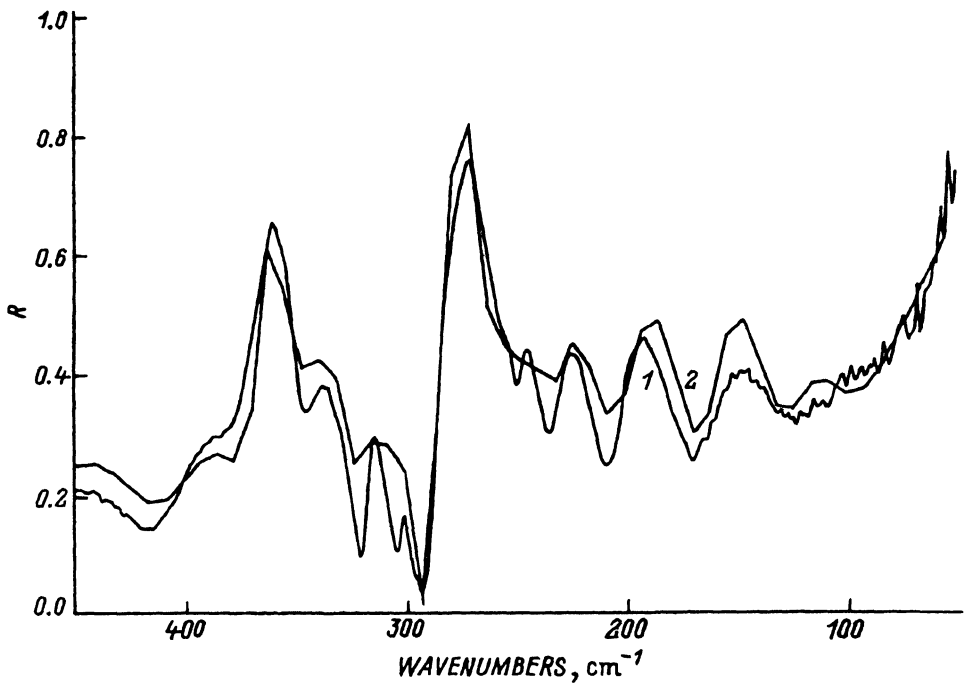


Рис. 4. Спектры отражения четырехслойной эпитаксиальной структуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

(ломанная) сравнивается с измеренным по вольт-фарадной методике электрохимическим травлением (точки).

В пределах точности измерений обоих методик результаты совпадают. Метод ИК спектроскопии отражения не позволяет измерять концентрацию носителей в слабо легированных (менее 10^{16} см^{-3}) слоях и тонкую структуру переходных слоев. Вместе с тем этот метод, что характерно для оптических методов вообще, дает более точные значения толщин измеряемых слоев.

С целью получения более точных результатов для многослойных AlGaAs структур измерения спектров отражения производились в полном диапазоне $50 \div 5000 \text{ см}^{-1}$, а моделирование выполнялось по отдельности в трех спектральных поддиапазонах. В диапазоне волновых чисел $5000 \div 2500 \text{ см}^{-1}$ определяются толщины и мольная доля AlAs в слоях x . Концентрация носителей в слоях в этом диапазоне практически не влияет на ИК спектр. Мольная доля AlAs определяет также положение и интенсивность пиков в диапазоне $50 \div 450 \text{ см}^{-1}$. В диапазоне $450 \div 2000 \text{ см}^{-1}$ наиболее отчетливо проявляется влияние свободных носителей заряда.

На рис. 2-4 (кривые 1) представлены ИК спектры отражения в диапазонах волновых чисел $5000 \div 2500$, $2000 \div 400$, $450 \div 50 \text{ см}^{-1}$ сложной эпитаксиальной структуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, содержащей подложку арсенида галлия n -типа с $N = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, слой толщиной 18.7 мкм n -типа с $N < 10^{16} \text{ см}^{-3}$, слой 1.3 мкм p -типа с $N = 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, слой $\text{Ga}_{0.18}\text{Al}_{0.82}\text{As}$ 0.27 мкм p -типа с $N = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, слой $\text{Ga}_{0.90}\text{Al}_{0.10}\text{As}$ 0.67 мкм p -типа с $N = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Указанные значения параметров получены моделированием на ЭВМ по измеренным ИК спектрам и примерно соответствуют значениям, заданным производителями структуры. Модельные ИК спектры отражения представлены кривыми 2 на рис. 2-4. Величины СКО составили 1.02, 0.71 и 5.51% соответственно.

Результаты измерений мольной доли AlAs в диапазонах $5000 \div 2500 \text{ см}^{-1}$ и $450 \div 50 \text{ см}^{-1}$ отличаются не более чем на 0.04. Результаты измерения мольной доли AlAs по данным ИК спектроскопии отражения для двух контрольных образцов с $x = 0.24$ и $x = 0.74$ отличались от мольной доли, измеренной на микрорентгеновском анализаторе не более чем на 0.07. Большее отклонение спектров в диапазоне длинных волн (рис. 4) связано, по-видимому, с повышенным влиянием погрешности использованной зависимости $f_{e,h}(\nu)$ на вид моделируемого спектра в этом диапазоне.

Методика была использована также для исследования плавных профилей легирования путем аппроксимации их ступенчатыми. Для определения оптимального числа разбиений исследовались однослойная, трехслойная и пятислойная аппроксимации.

На рис. 5 представлены измеренный спектр отражения диффузионно-легированной структуры кремния $n^+ - n$ -типа (кривая 1) и рассчитанные спектры для однослойной (кривая 2), трехслойной (кривая 3) и пятислойной (кривая 4) ступенчатых аппроксимаций профиля легирования этой структуры. При вычислении величины ν_c по формуле (2) для кремния использовались значения $f_c = 200 \text{ см}^{-1}$ для электронов и дырок. Величины СКО спектров составили 2.56, 0.9, 0.61% соответственно. Увеличение числа слоев выше 5 целесообразно только при

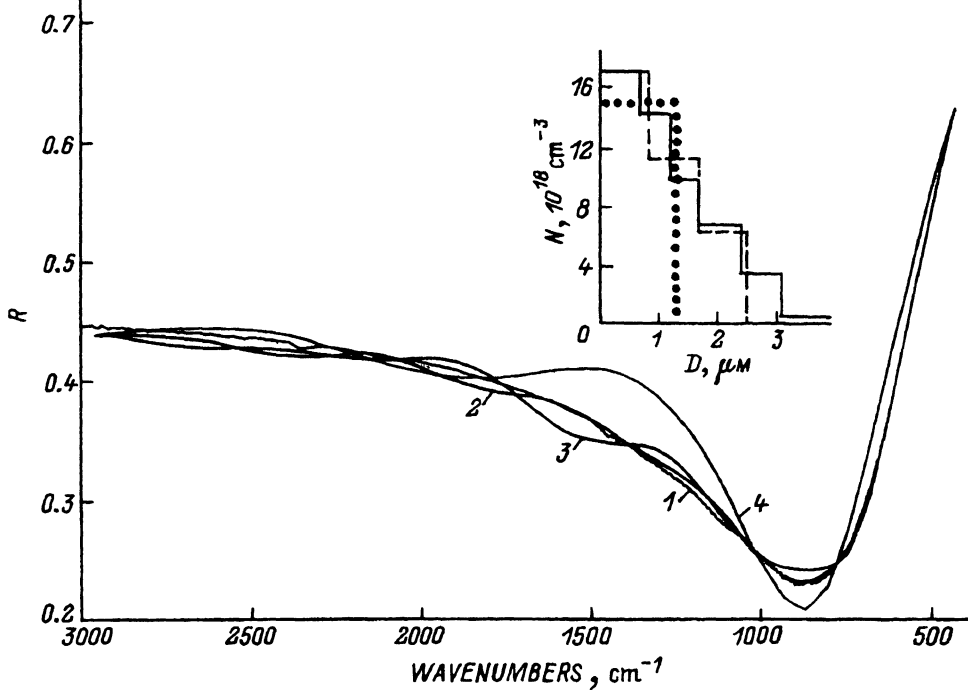


Рис. 5. Спектры отражения диффузионно-легированной структуры кремния.

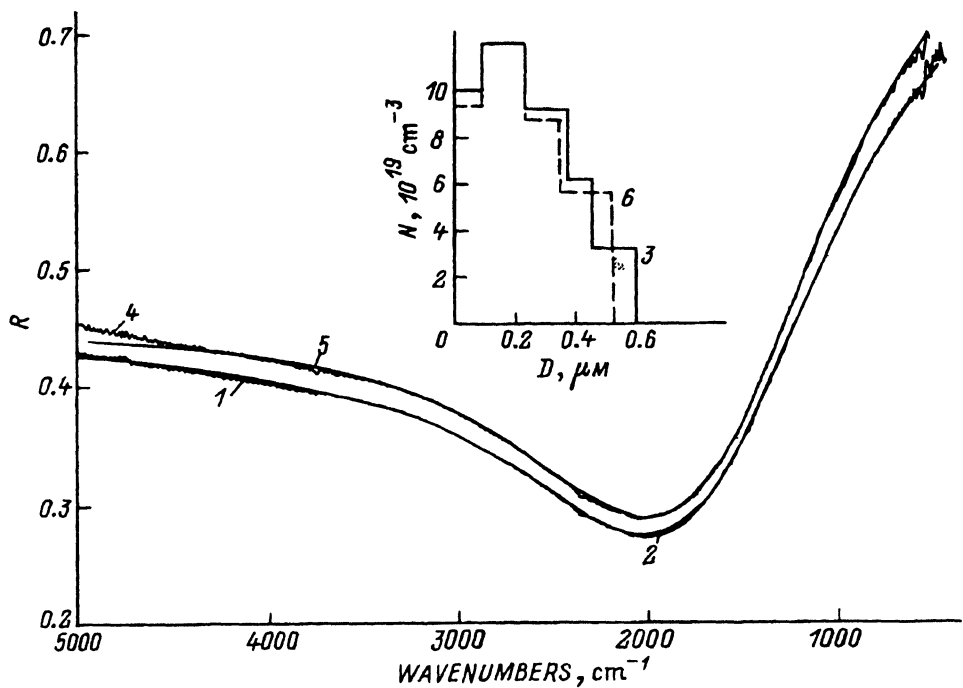


Рис. 6. Спектры отражения ионно-имплантированной структуры кремния.

повышения точности измерения ИК спектров отражения. Ступенчатые профили легирования структуры изображены на вставке рис. 5.

С использованием полученных параметров слоев и известной концентрационной зависимости подвижности [7] было рассчитано поверхностное сопротивление структуры. Расчетное значение $R = 21.1 \text{ Ом}/\square$ хорошо согласуется с измеренным четырехзондовым методом $R_n = 17.5 \text{ Ом}/\square$.

На рис. 6 представлены измеренный спектр отражения ионно-имплантированной структуры кремния $p^+ - p$ -типа (кривая 1) и рассчитанный спектр для пятислойной ступенчатой аппроксимации профиля легирования этой структуры (кривая 2). Величина СКО составила 0.21%. Ступенчатая аппроксимация профиля легирования изображена на вставке (кривая 3). Расчетное значение поверхностного сопротивления структуры $R = 23.9 \text{ Ом}/\square$ хорошо согласуется с измеренным $R_n = 22 \text{ Ом}/\square$.

Проведена оценка влияния точности измерения ИК спектров на значения определяемых этим методом параметров. Измеренный спектр (рис. 6, кривая 1) был умножен на коэффициент 1.05 (отклонение в 5 раз превышает точность использованных измерений). Для полученного таким образом спектра (кривая 4) также были определены модельный спектр (кривая 5) и профиль концентрации носителей (кривая 6). Значение поверхностного сопротивления изменилось при этом всего на 16%. Структура профиля концентрации изменилась также незначительно.

Как показали результаты исследований, метод определения параметров многослойных полупроводниковых структур по ИК спектрам отражения позволяет получать информацию о параметрах сложных полупроводниковых структур. Хотя математическая задача восстановления параметров полупроводниковых структур по ИК спектрам отражения является некорректной, для практически интересных структур значения параметров полупроводниковых слоев находятся в удовлетворительном согласии с результатами измерений структур другими методами. Точность измерения толщин слоев составляет 0.05 мкм, для слоев толщиной 0.2–500 мкм, точность определения концентрации носителей в слое толщиной 1 мкм — порядка 10^{17} см^{-3} , а толщиной 10 мкм — порядка 10^{16} см^{-3} . Чувствительность к измерению мольной доли AlAs в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ составляет 7%. Воспроизводимость результатов моделирования не выходит за пределы погрешности физических измерений. Особенно плодотворно использование этого метода для неразрушающего контроля соответствия параметров партий структур заданному набору, когда начальное приближение параметров достаточно хорошо известно. В этом случае затраты машинного времени невелики и метод может рассматриваться как экспрессный.

Список литературы

- [1] Л.П. Павлов. *Методы измерения параметров полупроводниковых материалов* (М., Высш. шк., 1987).
- [2] К. Зеегер. *Физика полупроводников* (М., Мир, 1976).
- [3] Н.А. Денисов, Т.А. Крузе, А.В. Резвов, Д.И. Тетельбаум. *Микроэлектроника*, **13**, 269 (1984).

- [4] А.Э. Бочкарев, Г.М. Зингер, М.А. Ильин и др. *Тез. докл. X Всес. конф. по физике полупроводников* (Минск, 1985) ч. 1, с. 178.
- [5] S. Adachi. *J. Appl. Phys.*, **58**, R1 (1985).
- [6] М. Борн, Э. Вольф. *Основы оптики* (М., Мир, 1970).
- [7] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984) т. 1.

Редактор В.В. Чалдышев

Finding parameters of layer semiconductor structures by infra red reflection method

K.O. Boltar, V.A. Fedirko

Moscow State Technological University STANKIN, 101472 Moscow
