

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ОТРАЖЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ЭЛЕКТРОННО-ЗОНДОВОМ ПРОФИЛИРОВАНИИ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$

Буянов А. В., Лютович К. Л., Пека Г. П., Ткаченко В. Н.

Для гетероструктур $\text{Si} - \text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ со средним атомным номером $\bar{Z} < 20$ (легкая мишень), проведен расчет координатной зависимости сигнала отраженных электронов (ОЭ) при сканировании электронным зондом по склону гетероструктуры. В расчете учтены координатное изменение плотности и среднего атомного номера эпитаксиального слоя, выход ОЭ с боковой поверхности эпитаксии, «прострел» эпитаксиального слоя отраженными электронами, «генерированными» в подложке. Использован нелокальный источник ОЭ. По данным расчета возможно получение профиля распределения Ge по толщине эпитаксиальных слоев как постоянного, так и переменного составов в широком диапазоне толщин (0.1—100 мкм).

Предложенный подход экспериментально апробирован на гетероструктурах $\text{Si} - \text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x < 0.2$) как с постоянным, так и переменным по координате составами в широком диапазоне толщин эпитаксиальных слоев. Функция источника ОЭ аппроксимировалась гауссовским распределением, параметры которого определялись экспериментально. Получено хорошее согласие расчета с экспериментом.

Данная модель профилирования может быть использована для измерения параметров других гетероструктур с $\bar{Z} < 20$ ($\text{Si}-\text{SiO}_2$, $\text{Si}-\text{SiC}$ и др.).

В решении задач диагностики и измерения геометрических и электрофизических параметров материалов и приборных структур для микроэлектроники интенсивно используются методы количественной растровой электронной микроскопии [1]. К числу этих методов относится метод отраженных электронов (ОЭ), позволяющий в режиме контраста по среднему атомному номеру определять геометрические параметры эпитаксиальных слоев и количественное содержание компонентов твердых растворов в них.

Авторами [2–5] показана возможность использования сигнала ОЭ в профилировании многослойных гетероструктур (ГС) на основе соединений $\text{A}'\text{B}'\text{V}$ в широком диапазоне толщин эпитаксиальных слоев при постоянном [2–4] и переменном [5] распределении компонентов твердых растворов в них. Данные работы используют модель Арчарда [6], позволяющую количественно описать сигнал ОЭ в материалах со средним атомным номером $\bar{Z} > 20$ (тяжелая мишень), что справедливо практически для всех соединений $\text{A}'\text{B}'\text{V}$. В то же время развитие микроэлектронных технологий на основе молекулярно-лучевой эпитаксии стимулировало интерес к целому ряду новых соединений и, в частности, эпитаксиальным слоям твердых растворов соединений 4-й группы — $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ на подложках Si. Данный класс соединений характеризуется низким средним атомным номером ($\bar{Z} < 20$) и плотностью ρ (легкая мишень). Это существенным образом сказывается на характере сигнала ОЭ, так что метод ОЭ применительно к таким структурам требует специального рассмотрения.

Цель настоящей работы — исследование физического механизма формирования сигнала ОЭ в гетероструктурах с легкой матрицей, включающих в себя области переменного состава твердого раствора на примере $\text{Si} - \text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$, и использование метода ОЭ для получения количественного распределения компонентов твердого раствора по толщине эпитаксиального слоя как для толстых (~ 10 мкм), так и субмикронных слоев, а также определения толщин слоев в широком диапазоне их значений.

Расчет

Рассмотрим сигнал ОЭ при сканировании электронным зондом поверхности склона ГС вдоль линии, перпендикулярной плоскости гетерограницы (рис. 1). Для количественного описания сигнала ОЭ за основу принята диффузационная модель [2, 5]. В рамках этой модели электроны зонда с энергией E_0 проникают в толщу исследуемого материала на глубину «диффузии» y_d без изменения первоначального направления, после чего изотропно «диффундируют» во всех направлениях на величину полного пробега R , полностью термализуясь. Использован источник «генерации» ОЭ конечных размеров, позволяющий более точно описать сигнал ОЭ вблизи гетероперехода (ГП) и свободной поверхности слоя, чем обычно используемый при исследовании толстых слоев точечный источник.

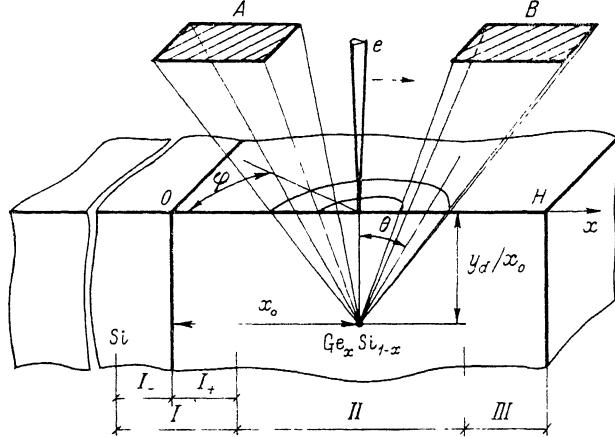


Рис. 1. Схема профилирования.

A, B — парные детекторы.

Учет низких значений средних атомных номеров исследуемых гетероструктур ($14 < \bar{Z} < 20$) накладывает следующие условия на используемую диффузционную модель.

1. В легкой мишени глубина диффузии y_d существенно больше, чем в тяжелой, и достигает значений $(0.35—0.45)R$. Согласно диффузационной модели Томлина [7],

$$y_d/R = 8/(\bar{Z} + 8). \quad (1)$$

При этом соотношение между R и энергией зонда E_0 в легкой мишени с учетом координатной зависимости плотности задается эмпирическим выражением [8]

$$R(x) = 0.0642E_0^{1.7}/\rho(x), \quad (2)$$

где $[R]$ — мкм, $[E_0]$ — кэВ, $[\rho]$ — г/см³.

2. Большая глубина диффузии первичных электронов в легкой мишени приводит к тому, что предельный угол вылета ОЭ из мишени $\theta_{\text{пп}}$ становится существенно зависим от \bar{Z} и ρ . Большой скачок среднего атомного номера и плотности на ГП приводит к резкому уменьшению $\theta_{\text{пп}}$ вылета ОЭ, «генерированных» в подложке вблизи ГП и вылетающих в направлении слоя. Данная ситуация не свойственна системам с $\bar{Z} > 20$, где $\theta_{\text{пп}}$ обычно превышает максимальный угол «захвата» отраженных электронов детекторами ОЭ и не учитывается в расчетах. В легких мишенях учет предельного угла вылета ОЭ необходим.

Представим интенсивность сигнала ОЭ в виде

$$I(x_0) = k \int_{\Omega_0} E(\theta, \varphi, x) d\Omega^* F(x, x_0), \quad (3)$$

где k — постоянный коэффициент; Ω_0 — телесный угол захвата ОЭ используемыми детекторами отраженных электронов; $F(x, x_0)$ — функция аппроксимации

ции источника ОЭ. Рассмотренные особенности легких мишеней учитываются при расчете энергии отраженных электронов $E(\theta, \varphi, x)$, выходящих под углами θ и φ , которая описывается выражением

$$E(\theta, \varphi, x) = E_0 \sqrt{1 - \frac{8}{Z(x) + 8} - \varepsilon(\theta, \varphi, x)}. \quad (4)$$

Величина $\varepsilon(\theta, \varphi, x)$ представляется в виде

$$\varepsilon(\theta, \varphi, x) = \int_x^{x+y_d \operatorname{tg} \theta \cos \varphi} \frac{d\xi}{\sin \theta \cos \varphi R(\xi)}, \quad (5)$$

где ξ — текущая координата вдоль оси X . Вблизи свободной поверхности эпитаксиальной пленки толщиной H , когда $x > H - y_d \operatorname{tg} \theta \cos \varphi$, верхний предел интегрирования в выражении (5) изменяется на H .

Предельный угол вылета ОЭ из мишени $\theta_{\text{пп}}$ определяется из соотношения (4) с учетом (1):

$$\frac{y_d(x)}{R(x)} + \varepsilon(\theta_{\text{пп}}, \varphi, x) = 1. \quad (6)$$

Для градиентных ГС параметры $Z(x)$, $\rho(x)$, $y_d(x)$, $R(x)$ координатно зависят. При линейном профиле состава

$$Z(x) = ax + b; \quad \rho(x) = cx + d. \quad (7)$$

Более сложная координатная зависимость Z может быть представлена кусочно-линейными функциями. Выражение (7) описывает и случай гомозонного эпитаксиального слоя при $a=0$, $c=0$ и координатно независимых параметрах Z , ρ , y_d , R .

Будем считать пленку толстой, если при заданном ускоряющем напряжении можно не учитывать выход ОЭ, генерированных в подложке, через свободную поверхность слоя; переходные области в слое вблизи гетерограницы и свободной поверхности (области псевдорельефа) удалены друг от друга в соответствии с критерием

$$2y_d(H/2) \operatorname{tg} \theta_{\text{пп}} < H. \quad (8)$$

Учитывая местоположение зонда относительно свободной поверхности эпитаксиального слоя и гетерограницы, можно выделить ряд характерных областей, различающихся формированием сигнала ОЭ, для которых следует рассчитать $E(\theta, \varphi, x)$ и $I(x_0)$, определив предварительно $\varepsilon(\theta, \varphi, x)$ из выражения (5) с учетом (1), (2) и (7).

Подложка

Для описания энергии ОЭ, выходящих из глубины подложки, можно воспользоваться выражением

$$E_s(\theta, \varphi, x) = E_0 \sqrt{1 - \frac{8}{Z+8} \left[1 + \frac{1}{\cos \theta} \right]}. \quad (9)$$

Для модельной структуры $\text{Si}-\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{Z}=14$.

Толстая пленка

1. Область эпитаксиального слоя вдали от ГП и свободной поверхности эпитаксии (область II, рис. 1). Здесь имеем

$$E_{II}(\theta, \varphi, x) = E_0 \sqrt{1 - \frac{8}{Z(x) + 8} \left[1 + \frac{1}{\cos \theta} \right] - \frac{c y_d^2(x) \operatorname{tg}^2 \theta \cos \varphi}{12.84 \cdot 10^{-2} E_0^{1.7} \sin \theta}}. \quad (10)$$

Границы области II задаются неравенствами

$$y_d(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi| < x < H - y_d(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi|. \quad (11)$$

2. Окрестность ГП со стороны подложки (область I_- на рис. 1). В этой области ОЭ, возбужденные в гомозонной подложке, проходят через ГП и прилежащий градиентный эпитаксиальный слой. Здесь

$$E_{I_-}(\theta, \varphi, x) = E_0 \sqrt{1 - \frac{8}{Z(x) + 8} \left[1 + \frac{1}{\cos \theta} \right] + \left[\frac{1}{R_s} - \frac{1}{R(0)} \right]} \times \\ \times \left[\frac{y_{ds}}{\cos \theta} + \frac{x}{\sin \theta |\cos \varphi|} \right] - \frac{c(x + y_{ds}(x) \operatorname{tg} \theta)^2 \cos \varphi}{12.84 \cdot 10^{-2} E_0^{1.7} \sin \theta} \quad (12)$$

при

$$-y_{ds}(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi| < x < 0. \quad (13)$$

3. В окрестности ГП со стороны эпитаксиального слоя (область I_+ на рис. 1) часть ОЭ, возбуждаемых в градиентном слое, проникает в подложку через гетеропереход. В результате

$$E_{I_+}(\theta, \varphi, x) = E_0 \sqrt{1 - \frac{8}{Z(x) + 8} \left[1 + \frac{1}{\cos \theta} \right] + \left[\frac{1}{R(x)} - \frac{1}{R_s} \right]} \times \\ \times \left[\frac{y_d(x)}{\cos \theta} + \frac{x}{\sin \theta |\cos \varphi|} \right] - \frac{cx^2 \cos \varphi}{12.84 \cdot 10^{-2} E_0^{1.7} \sin \theta} \quad (14)$$

при

$$0 < x < y_d(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi|. \quad (15)$$

4. Приповерхностная область III , в которой следует учитывать выход отраженных электронов со стороны боковой свободной поверхности слоя. При этом

$$E_{III}(\theta, \varphi, x) = E_0 \sqrt{1 - \frac{8}{Z(x) + 8} - \frac{c(H^2 - x^2) + d(H - x)}{12.84 \cdot 10^{-2} E_0^{1.7} \sin \theta |\cos \varphi|}} \quad (16)$$

для

$$H - y_d(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi| < x < H. \quad (17)$$

Тонкие пленки

Для тонких ГС необходимо дополнительно учесть «прострел» пленки электронами, отраженными в подложке, с последующим их вылетом со стороны боковой свободной поверхности слоя при

$$H - y_{ds}(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi| < x < 0. \quad (18)$$

Здесь

$$E_{IV}(\theta, \varphi, x) = E_0 \times \\ \times \sqrt{1 - \frac{8}{Z(x) + 8} - \frac{H}{R(0) \sin \theta |\cos \varphi|} + \frac{x}{R_s \sin \theta |\cos \varphi|} - \frac{cH^2}{12.84 \cdot 10^{-2} E_0^{1.7} \sin \theta |\cos \varphi|}}. \quad (19)$$

Следует также учесть перекрытие сигналов ОЭ, сформированных вблизи ГП и свободной поверхности эпитаксиального слоя, которое имеет место при

$$H - y_d(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi| < x < y_d(x) \operatorname{tg} \theta |\cos \varphi|; x < H. \quad (20)$$

В последнем случае энергия ОЭ определяется суммой энергий ОЭ, рассчитанных для каждой из перекрывающихся областей с весовым коэффициентом 0,5, так как движение в противоположные стороны можно считать равновероятным:

$$E_V(\theta, \varphi, x) = 0.5E_{I_+}(\theta, \varphi, x) + 0.5E_{III}(\theta, \varphi, x). \quad (21)$$

Таким образом, задавая закон изменения среднего атомного номера по толщине эпитаксиального слоя и подставляя полученные выражения (9)–(21)

¹ Индекс s обозначает значение данного параметра в подложке.

в зависимость (3), получаем количественные координатные зависимости сигнала ОЭ, которые могут быть измерены экспериментально. При расчете должны быть заданы энергия первичных электронов, толщина слоя, аппроксимационная функция источника ОЭ, закон изменения среднего атомного номера и плотности по толщине эпитаксиального слоя. Анализ расчетных кривых показывает, что в толстых структурах вид координатного распределения сигнала ОЭ существенно зависит от профиля состава твердого раствора и практически не зависит от размера источника ОЭ (аппроксимационной функции). Это позволяет из экспериментальной зависимости I от x_0 определить профиль состава.

В тонких структурах ситуация усложняется наложением областей псевдорельефа у ГП и свободной поверхности слоя. В этом случае для определения профиля состава предлагается использовать компьютерное моделирование. Данный подход обеспечивает нахождение профиля распределения компонентов твердого раствора при совпадении расчетной зависимости с экспериментальной.

Эксперимент

Эксперимент выполнялся на растровом электронном микроскопе РЭМ-100У с использованием плоскостных парных детекторов отраженных электронов [9].

Расположение исследуемых образцов относительно детекторного блока ОЭ в камере электронного микроскопа обеспечивало изменение азимутального угла и угла выхода ОЭ в пределах $-0.2 < \varphi < 0.2$ рад; $0.45 < \theta < 1.05$ рад.

Объектами исследований были эпитаксиальные гетероструктуры $n\text{-Si}-n\text{-Ge}_x\text{Si}_{1-x}\langle\text{B}\rangle$ с постоянными и переменными профилями распределения Ge

№ образца	E_0 , кэВ	$I_{\text{зонд}} \cdot 10^{10}$, А	σ , мкм
1	30	4	1.36
2	19	6	0.70
3	15	8	0.48
4	10	12	0.32

по толщине эпитаксиального слоя. Эпитаксиальные слои выращивались методом газо-фазной эпитаксии на подложках $n\text{-Si}$ с ориентацией (100). Проводимость слоев — 1—2 Ом·см.

Для описания функции источника использовалось распределение Гаусса:

$$F(x, x_0) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (22)$$

где σ — дисперсия источника отраженных электронов.

Параметры функции источника (22) определялись путем сравнения экспериментального сигнала ОЭ для толстых, более 10 микрон, эпитаксиальных гомозонных гетероструктур с резким ГП и известными профилями состава с расчетным координатным сигналом ОЭ при варьировании параметра σ . В таблице представлены значения σ в зависимости от ускоряющего напряжения E_0 .

Экспериментальное профилирование ГС с использованием развитого подхода показано результатами, приведенными на рис. 2 (пленки постоянного состава) и рис. 3 (пленки переменного состава).

На рис. 2, а представлены данные профилирования толстой пленки $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ с $H=21$ мкм. Точками отмечены данные рентгеновского микроанализа, подтверждающие правомерность развитого подхода. Как видно из рисунка, переходные области не вносят особых трудностей в обработку сигнала ОЭ и с достаточной точностью могут быть исключены путем простой экстраполяции линейного участка сигнала ОЭ.

Для тонких слоев переходные области распространяются на всю толщину эпитаксиального слоя и выделение искомого профиля невозможно без математической обработки сигнала. На рис. 2, б представлено экспериментальное и расчетное профилирование ГС $\text{Si}-\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$, $H=1.2$ мкм, с обработкой сигнала

ОЭ, использующей выражения (9)–(21). Источник ОЭ аппроксимировался выражением (22). Координатный профиль Z (нижняя часть рисунка) получен из

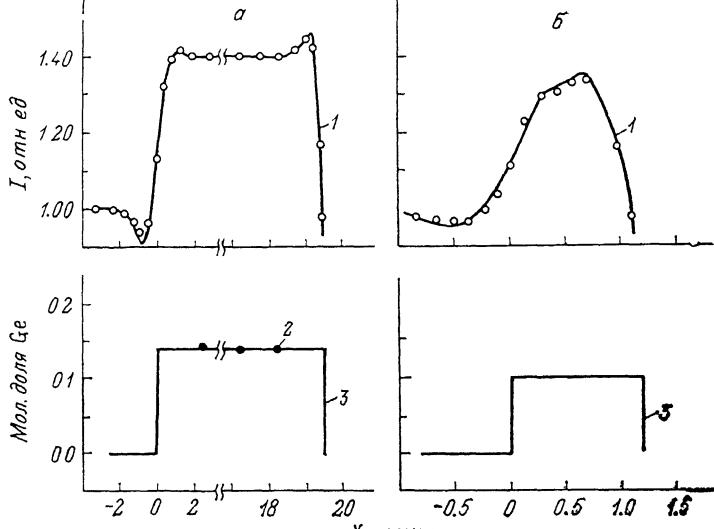


Рис. 2. Профилирование эпитаксиальных слоев $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ постоянного состава.
 a — толстый слой; $E_0=15$ кэВ, $H=21$ мкм; b — тонкий слой; $E_0=10$ кэВ, $H=1.2$ мкм; 1 — эксперимент, 2 — данные рентгеновского микроанализа, 3 — расчетные кривые (восстановленный профиль распределения Ge).

экспериментального сигнала ОЭ путем компьютерного моделирования. Входным параметром моделирования являлся задаваемый профиль распределения

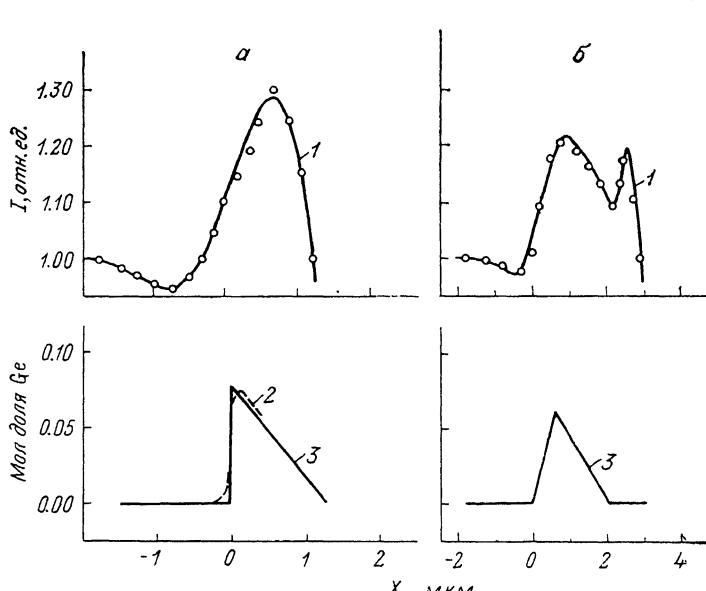


Рис. 3. Профилирование эпитаксиальных слоев $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ [переменного состава].
 a — линейное изменение состава; $E_0=15$ кэВ, $H=1.3$ мкм; b — произвольное изменение состава (экстраполяция кусочно-линейными функциями); $E_0=15$ кэВ, $H=3.1$ мкм; 1 — эксперимент, 2 — данные ожидаемого профилирования, 3 — расчетные кривые (восстановленный профиль распределения Ge).

Ge по толщине слоя. Задаваемый профиль можно считать искомым при совпадении расчетных и экспериментальных координатных зависимостей сигнала ОЭ.

Экспериментальное и расчетное профилирование тонких ГС переменного состава представлено на рис. 3. Профилирование проводилось как для струк-

тур с линейным распределением Ge по толщине эпитаксиального слоя (рис. 3, а), так и для более сложного распределения, экстраполированного в расчете кусочно-линейными зависимостями (рис. 3, б). Видно хорошее согласие расчетных и экспериментальных зависимостей. Профиль распределения Ge, представленный на рис. 3, а, был подтвержден независимыми измерениями на оже-профилометре.

Данная модель профилирования «легких» эпитаксиальных систем может быть использована для измерения геометрических параметров и состава в соединениях типа Si—SiO₂, Si—SiC и на других объектах.

Список литературы

- [1] Конников С. Г., Сидоров А. Ф. Электронно-зондовые методы исследования полупроводниковых материалов и приборов. М., 1978. 136 с.
- [2] Бакалейников Л. А., Конников С. Г., Соловьев В. А., Уманский В. Е. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1987. Т. 51. В. 3. С. 458—461.
- [3] Конников С. Г., Соловьев В. А., Уманский В. Е. // Полупроводники и гетеропереходы / Под ред. А. И. Розенталя. Таллинн, 1987. С. 30—32.
- [4] Соловьев В. А., Соловьев С. А., Уманский В. Е. // Тез. докл. VI Всес. симп. РЭМ-89. Звенигород, 1989. С. 68.
- [5] Буянов А. В., Пека Г. П., Ткаченко В. Н. // ФТТ. 1990. Т. 32. В. 8. С. 1043—1048.
- [6] Archaard G. D. // J. Appl. Phys. 1961. V. 32. N 8. P. 1505—1509.
- [7] Matsukawa T., Murata K., Shimizu R. // Phys. St. Sol. (b). 1973. V. 55. P. 371—383.
- [8] Leamy H. J. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. N 6. P. 51—80.
- [9] Иванов Е. И., Лопатина Л. Б., Суханов В. Л., Тучкович В. В., Шмидт Н. М. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 1. С. 207—210.

Производственное объединение
«Киевский радиозавод»

Получена 4.04.1991
Принята к печати 17.05.1991