

Диэлектрический отклик кристалла с приповерхностным нарушенным слоем в области продольно-поперечного расщепления

© Е.Ф. Венгер, А.В. Гончаренко, С.Н. Завадский

Институт физики полупроводников Академии наук Украины,
03028 Киев, Украина

(Поступила в Редакцию 21 июля 2000 г.
В окончательной редакции 2 ноября 2000 г.)

Рассмотрена модель диэлектрической функции приповерхностного слоя, возникающего в результате механической обработки поверхности кристалла, в области оптических колебаний решетки. Для учета влияния дислокаций предложен подход, основанный на непрерывном распределении дипольно-активных колебаний. Показано, что используемая модель позволяет удовлетворительно описать снижение отражательной способности SiC6H с полированной поверхностью в окрестности частоты поперечного оптического фонона.

Оптические свойства кристаллов с разупорядоченным слоем вблизи поверхности в настоящее время привлекают значительное внимание. Подобные системы могут проявлять необычные свойства, такие, например, как андерсоновская локализация света и обусловленные ею эффекты [1,2], поверхностное усиление рамановского рассеяния [3] или генерация поверхностных поляритонов s -поляризованным светом [4]. Настоящее рассмотрение посвящено практически важному вопросу, связанному, в частности, с методикой оптического контроля приповерхностных нарушенных слоев полупроводниковых пластин, образующихся в результате механической обработки.

1. Математическая модель

Хорошо известно, что обработка кристаллических структур абразивами приводит к образованию в объеме и на поверхности дефектов — источников локальных напряжений. Считается, что основными механизмами необратимой пластической деформации являются дислокационные механизмы скольжения и двойникования [5]. При очень высокой плотности дефектов в нарушенном приповерхностном слое в результате суммирования локальных полей упругих напряжений могут образовываться даже сплошные поля таких напряжений. Отметим, что образование дислокационных сеток при механической обработке доказано с помощью электронно-микроскопических исследований.

В то же время существует ряд подходов к описанию аморфных материалов на основе дислокационных моделей (см., например, [6–8]). Действительно, введение в идеальный кристалл дислокаций приводит к нарушению дальнего порядка. Предполагается, что если ввести их достаточно много, то решетка может деформироваться таким образом, что сохранится только ближний порядок, а дальний полностью исчезнет.

Исходной точкой в нашей работе является представление о нарушенном слое, полученном в резуль-

тате механической обработки, как о частично разупорядоченной (аморфизированной) структуре. Одна из особенностей некристаллических материалов состоит в том, что из-за отсутствия дальнего порядка становятся трудноопределимыми классические понятия поперечных и продольных нормальных колебаний. Однако при этом сохраняется возможность описания колебательных свойств с помощью концепции плотности колебательных состояний $g(\omega)$. Из используемых методов расчета функции $g(\omega)$, ИК- и КР-спектров аморфных полупроводников [9] можно выделить так называемый метод уравнений движения [10]. В частности, для функции $g(\omega)$ этим методом было получено $g(\omega) \sim \Sigma_s [\Delta(\omega + \omega_s) + \Delta(\omega - \omega_s)]$, где ω_s — частота s -й нормальной моды, $\Delta(\omega) = \int_0^\tau \exp(-\lambda t^2) \cos(\omega t) dt$, τ и λ — некоторые феноменологические параметры модели. При $\tau \rightarrow \infty$ и $\lambda \rightarrow +0$ $\Delta(\omega)$ вырождается в δ -функцию; для конечных τ и λ функция $\Delta(\omega)$ является гауссовой с полушириной, пропорциональной τ^{-1} .

Простой и удобный подход к описанию диэлектрической функции аморфных материалов предложен в работе [11]. Он основан на идее о непрерывном (гауссовом) распределении осцилляторов (дипольно-активных колебательных резонансов) по частоте. Если следовать упомянутой работе, диэлектрическая функция разупорядоченного кристалла может быть записана в виде

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_j \frac{s_j}{\sqrt{2\pi\sigma_j}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-(x - \omega)^2/2\sigma_j^2]}{x^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j} dx, \quad (1)$$

где ε_∞ — фоновая (высокочастотная) диэлектрическая проницаемость, s_j , Γ_j — соответственно силы и константы затухания j -го осциллятора, σ_j — параметры гауссовой функции распределения.

Подобный подход, но с использованием однородного (в виде "ступеньки") распределения осцилляторов по частоте предложен в работе [12]. В этом случае вместо

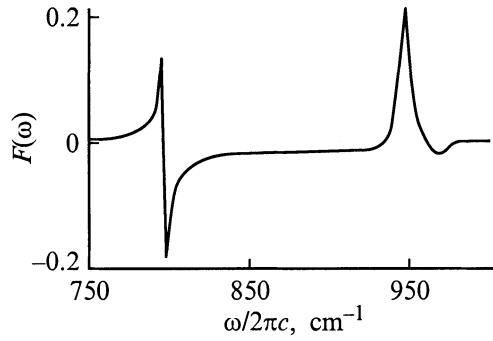


Рис. 1. Вид зависимости $F(\omega)$ для карбида кремния в области продольно-поперечного расщепления (расчет).

(1) результирующее выражение для $\varepsilon(\omega)$ примет вид

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_j \frac{s_j}{\sigma_j} \int_{\omega_T - \sigma/2}^{\omega_T + \sigma/2} \frac{dx}{x^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma}, \quad (2)$$

где параметр σ имеет смысл ширины функции распределения (ступеньки). Отметим, однако, что при достаточно малых σ вид упомянутой функции распределения не должен существенно влиять на результаты. Формула (1) выглядит физически более оправданной, и мы будем использовать ее в дальнейших численных расчетах. С другой стороны, формула (2) позволяет выполнить интегрирование и получить аналитический результат в явном виде для $\varepsilon(\omega)$. Так, если ограничиться в выражении (2) одним осциллятором ($j = 1$), то после интегрирования нетрудно получить

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{s}{\omega_T^2 - (\sigma/2 + \sqrt{\omega^2 + i\omega\Gamma})^2}. \quad (3)$$

При условии $\sigma \ll \omega_T$ получаем

$$\varepsilon(\omega) \approx \varepsilon^0(1 + \Delta), \quad (4)$$

где

$$\varepsilon^0 = \varepsilon(\omega, \sigma = 0),$$

$$\Delta = \frac{\sigma s}{\varepsilon^0} \frac{\sqrt{\omega^2 + i\omega\Gamma}}{(\omega_T^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma)^2}, \quad |\Delta| \ll 1.$$

Рассмотрим теперь влияние слабого изменения $\varepsilon(\omega)$ на отражательную способность. Для этого воспользуемся соотношением (4) и разложим выражение для коэффициента отражения при нормальном падении

$$R = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon^0(1 + \Delta)} - 1}{\sqrt{\varepsilon^0(1 + \Delta)} + 1} \right|^2 \quad (5)$$

в степенной ряд, удерживая только линейное по Δ слагаемое. Как нетрудно убедиться, результат может быть представлен в виде

$$R = R_0 + \sigma F, \quad (6)$$

где

$$R_0 = |r_0|^2 = \left| \frac{\varepsilon^0 - 1}{\varepsilon^0 + 1} \right|^2,$$

$$F = \text{Re}(\gamma)\text{Re}(r_0) + \text{Im}(\gamma)\text{Im}(r_0),$$

$$\gamma = \frac{\Delta}{\sigma} \frac{1}{\varepsilon^0 + \sqrt{\varepsilon^0}}.$$

Для иллюстрации на рис. 1 приведен вид функции $F(\omega)$ для карбида кремния в окрестности области продольно-поперечного расщепления (остаточных лучей). Как видно, эта функция имеет две особенности на частотах, приблизительно соответствующих частотам поперечного и продольного оптических фононов. Кроме того, она отрицательна практически во всей области остаточных лучей, что соответствует уменьшению отражательной способности кристалла. На удалении от области остаточных лучей функция F близка к нулю.

2. Эксперимент

Энергетическая глубина проникновения света в материал при нормальном падении равна

$$l = \frac{1}{2\text{Im}(k)} = \frac{c}{2\omega\text{Im}\sqrt{\varepsilon}}, \quad (7)$$

где c — скорость света, $k = \omega/c\sqrt{\varepsilon}$ — величина волнового вектора в среде. Ясно, что если характерная толщина приповерхностного нарушенного слоя $d \ll l$, то наблюдать эффект изменения отражательной способности нереально. Достичь значительных величин d на практике, по-видимому, непросто, поскольку акт взаимодействия абразивного зерна с локальным микрообъемом (а следовательно, и его напряженное состояние, и нагрев) продолжается очень короткое время, и дислокации не успевают глубоко проникнуть в кристалл. (Энергия активации перемещения дислокаций при комнатной температуре обычно много больше энергии тепловых колебаний решетки [13]). Возможность достичь малого значения l является, видимо, более реальной. Действительно, если $\text{Im}\sqrt{\varepsilon}$ достаточно велико, необходимое условие $d > l$ может быть выполнено. Такая ситуация возможна на соответствующих частотах в кристаллах, поперечные оптические фононы которых обладают большой силой осциллятора и слабым затуханием. Так, для исходного кристалла ($\sigma = 0$) при $\omega = \omega_T$ из (1) и (6) следует

$$l \approx \frac{c}{2} \sqrt{\frac{\Gamma}{s}} \omega_T^{-\frac{3}{2}}, \quad (8)$$

что фактически соответствует минимуму глубины проникновения.

Эксперимент был выполнен для кристаллов слабо легированного карбида кремния SiC6H , подвергнутых длительной полировке высокодисперсным абразивом карбида бора ВС-3. Политип SiC6H характеризуется слабой оптической анизотропией, большой силой осциллятора

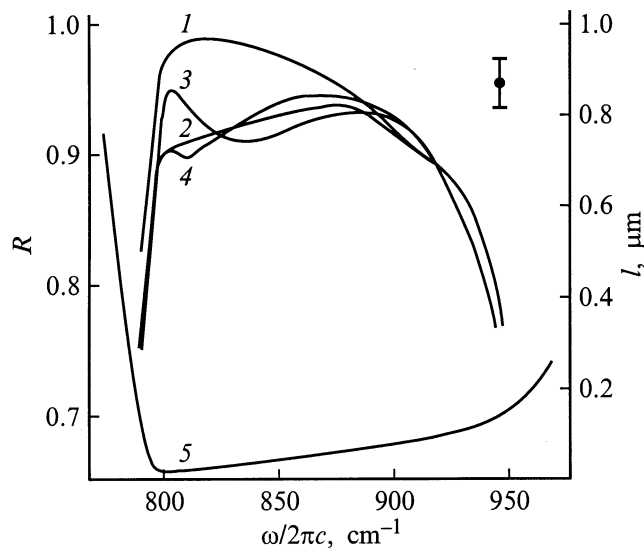


Рис. 2. Спектры нормального отражения карбида кремния. 1 — до механической обработки, 2 — после обработки, 3, 4 — результаты подгонки с использованием ступенчатой и экспоненциальной модели для нарушенного слоя соответственно. Кривая 5 — глубина проникновения света в кристалл (расчет).

на частоте $\omega_T/2\pi c = 797 \text{ cm}^{-1}$ и низкой соответствующей феноменологической константой фоновонного затухания $\Gamma/2\pi c \approx 3 \text{ cm}^{-1}$ [14,15]. Экспериментальный спектр отражения и глубина проникновения света для исходного кристалла представлены на рис. 2 кривыми 1 и 5 соответственно. Методом дисперсионного анализа из кривой 1 были определены параметры лоренцевской диэлектрической функции, а также параметры полупроводниковой плазмы. Они оказались равными $\varepsilon_\infty = 6.5$, $s/\omega_T^2 = 3.1$, $\Gamma = 3 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_p = 295 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_p\tau = 0.3$ (здесь ω_p и τ — соответственно частота собственных колебаний и время релаксации полупроводниковой плазмы). Отметим, что в (1) не учитывается вклад плазменной подсистемы в диэлектрическую функцию, но ее влияние на $\varepsilon(\omega)$ в актуальной области резонансного изменения последней, согласно нашим оценкам, было весьма незначительным. В дальнейших расчетах мы, однако, учитывали вклад полупроводниковой плазмы в диэлектрическую функцию с помощью известной аддитивной формулы Гельмгольца–Кеттлера

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon(\omega) - \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}. \quad (9)$$

Экспериментальный спектр отражения образца после механической обработки представлен кривой 2. Как видно, он отличается от спектра отражения исходного кристалла лишь в области $800\text{--}880 \text{ cm}^{-1}$, где глубина проникновения света в кристалл мала. В полном соответствии с вышеприведенными соображениями здесь наблюдается уменьшение коэффициента отражения. Вне

указанной области глубина проникновения света в кристалл высока, и здесь отражение определяется объемными параметрами материала. При этом почти полное соответствие отражательной способности образцов за пределами указанной области может служить доказательством того, что диффузное рассеяние света поверхностью полированного образца весьма незначительно. Другое обстоятельство, позволяющее не учитывать в рассеянии диффузионную компоненту, состояло в том, что коэффициент отражения как исходного образца, так и образца после обработки практически не зависел от угловой апертуры спектрального прибора [16].

Рассматривая отражение в системе нарушенный слой (толщиной d)–исходный кристалл (подложка), мы провели оптимизацию отклонения экспериментальной кривой отражения 2 от рассчитанной с использованием соотношений (1) и (9) (кривая 3). Подгоночные значения варьируемых параметров оказались следующими: $d = 0.1 \mu\text{m}$, $\sigma = 22 \text{ cm}^{-1}$, среднеквадратичное отклонение по спектру $\langle \Delta R \rangle$ составило 0.03.

Можно предположить, что параметр σ , характеризующий степень пластической деформации приповерхностного слоя, изменяется экспоненциально по глубине пластины (подобно функции распределения плотности трещин [5])

$$\sigma(z) = \sigma_0 \exp(-z/z_0). \quad (10)$$

В таком случае задача нахождения величин σ и d заменяется определением параметров σ_0 и z_0 функции $\sigma(z)$. Очевидно, что параметр z_0 определенным образом характеризует глубину нарушенного слоя. Результатом оптимизации экспериментального спектра отражения с использованием модельных приближений (1) и (10) является кривая 4, которой соответствуют подгоночные значения параметров $\sigma_0 = 35 \text{ cm}^{-1}$ и $z_0 = 0.04 \mu\text{m}$. Как видно, модель (10) позволяет значительно лучше, чем предыдущая (однослойная) модель, описать наши экспериментальные результаты, не увеличивая количества варьируемых параметров. Таким образом, спектр отражения оказался чувствительным к состоянию нарушенного слоя на глубине проникновения света $l \leq 0.1 \mu\text{m}$, что представляется достаточно разумными.

Авторы выражают признательность Ю.А. Пасечнику, любезно предоставившему образцы для измерений.

Список литературы

- [1] A.R. McGurn. Surf. Sci. Rep. **33**, 357 (1990).
- [2] A.R. McGurn, A.A. Maradudin. Proc. SPIE **2117**, 2, 12 (1994).
- [3] M. Moskovits. Rev. Mod. Phys. **57**, 783 (1985).
- [4] Е.Ф. Венгер, А.В. Гончаренко, Ю.А. Пасечник. Письма в ЖТФ **18**, 3, 63 (1992).
- [5] А.И. Татаренков, К.Л. Енишерлова, Т.Ф. Русак, В.Н. Гриднев. Методы контроля нарушенных слоев при механической обработке монокристаллов. М. (1978). 64 с.
- [6] M.F. Ashby, J. Logan. Script. Met. **7**, 513 (1973).

- [7] G.C.M. Li. *Frontiers in Materials Science*. N. Y. (1976). 314 p.
- [8] К. Судзуки, Х. Фудзимори, К. Хасимото. *Аморфные металлы*. М. (1987). 328 с.
- [9] *Принципы динамической теории решетки*. М. (1986). 392 с.
- [10] D. Veeman, R. Alben. *Adv. Phys.* **26**, 339 (1977).
- [11] Ю.И. Копилевич, Е.Г. Макарова. *Опт. и спектр.* **63**, 147 (1987).
- [12] D.K. Lynch. *Astrophys. J.* **467**, 894 (1996).
- [13] Ю.А. Концевой, Ю.М. Литвинов, Ю.А. Фаттахов. *Пластичность и прочность полупроводниковых материалов и структур*. М. (1982). 239 с.
- [14] W.G. Spitzer, D. Kleinman, D. Walsh. *Phys. Rev.* **113**, 127 (1959).
- [15] Ю.А. Пасечник, О.В. Снитко, А.Г. Бычков. *ФТТ* **16**, 719 (1974).
- [16] Х.Е. Беннет, Дж.М. Беннет. *Физика тонких пленок / Под ред. Г. Хасса, Р.Е. Туна*. М. (1970). Т. 4. 440 с.