

СПЕКТРАЛЬНАЯ ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР

*Авторы: Стаськов Николай Иванович, профессор кафедры
экспериментальной и теоретической физики;
Сотский Александр Борисович, профессор кафедры экспериментальной и
теоретической физики;
Ивашкевич Инна Викторовна, доцент кафедры экспериментальной и
теоретической физики*

Контактная информация: тел.: (+375-222) 28-39-69,
эл. почта: ni_staskov@mail.ru

Описание: Созданы и программно реализованы новые методики и алгоритмы решения обратных задач спектральной эллипсометрии структур, содержащих металлические, диэлектрические и полупроводниковые слои с учетом переходных областей. Разработка служит для определения дисперсии оптических характеристик материалов, используемых в микроэлектронике и устройствах интегральной и волоконной оптики.

Description: New techniques and algorithms are designed to solve inverse problems of the spectral ellipsometry proper to structures containing metal, dielectric and semiconductor layers with transitive areas. The results of the research serve to determine the dispersion of the optical characteristics of the materials used in microelectronics and integrated and fiber optics devices.

Область применения разработки: Промышленность: микро- и оптоэлектронная, химическая, медицинская.

Основные преимущества разработки: Разработанные методы контроля параметров многослойных структур являются более эффективными по сравнению с известными мировыми аналогами (например, комплекс программ «Optilayer»), а главное – дают возможность получить заметные технические преимущества, что позволит повысить экономическую эффективность и конкурентоспособность оптических устройств.

Исследование оптических свойств металлических, диэлектрических и полупроводниковых (МДП) структур позволяет получить информацию, которая важна для контроля параметров элементов микро- и оптоэлектроники. Одним из важнейших свойств являются дисперсионные характеристики материалов, входящих в исследуемую структуру, которые могут быть определены методом спектральной эллипсометрии. Ее основное уравнение

$$\operatorname{tg} \Psi_s(\varphi, \lambda) e^{i\delta_s(\varphi, \lambda)} = \frac{R_s(\varphi, \lambda)}{R_p(\varphi, \lambda)}$$

содержит, с одной стороны, измеряемые поляризационные углы Ψ_e и Δ_e при заданных углах падения φ , а с другой – амплитудные коэффициенты отражения r и s поляризованного излучения. Для выбранной спектральной области (λ) эти коэффициенты определяются оптической моделью комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(y, \lambda)$ (ось oy перпендикулярна поверхности образца). Известна трудность решения обратных задач спектральной эллипсометрии (ОЗСЭ) – нахождение функции $\varepsilon(y, \lambda)$ любых конденсированных сред по $\Psi_e(\lambda)$ и $\Delta_e(\lambda)$ [1]. Из-за систематической приборной погрешности измерения углов $\Psi_e(\lambda)$ и $\Delta_e(\lambda)$ и существования ложных решений функций $\varepsilon(y, \lambda)$, описанная задача является некорректно поставленной.

Эксперименты выполнены с использованием пластин из кремния марки КДБ-12, протравленных в буферном растворе после предварительной шлифовки и полировки. Эти пластины подвергались термическому окислению для получения буферного слоя SiO_2 . После этого слой титана получали на слое SiO_2 методом магнетронного распыления металлического Ti. Измерения спектров поляризационных углов $\text{tg}\Psi_e(\lambda)$ и $\cos\Delta_e(\lambda)$ чистых пластин КДБ-12 и структуры МДП ($\text{Ti} - \text{SiO}_2 - \text{Si}$) выполняли на спектральном эллипсометре ES-2 с бинарной модуляцией состояния поляризации [2] в диапазоне длин волн $380 \text{ нм} \leq \lambda \leq 1000 \text{ нм}$ при углах падения излучения 65° и 70° . Решение обратных эллипсометрических задач было получено методом наименьших квадратов. При этом минимизировался функционал невязки спектральных зависимостей – экспериментальных $\text{tg}\Psi_e(\lambda)$, $\cos\Delta_e(\lambda)$ и теоретических $\text{tg}\Psi_e(\lambda, x)$, $\cos\Delta_e(\lambda, x)$:

$$I(x_j) = \sum_{k=1}^m \left\{ \left[\text{tg}\Psi_e(\lambda_k) - \text{tg}\Psi_e(\lambda_k, x_j) \right]^2 + \left[\cos\Delta_e(\lambda_k) - \cos\Delta_e(\lambda_k, x_j) \right]^2 \right\}.$$

Здесь x_j ($j = \overline{1, n}$) – вещественные параметры электродинамической модели плоскостойкой среды, m – число точек в спектре для фиксированного угла падения излучения φ_0 . Оптимальные значения x_j определяются из условия минимума функции $I(x)$.

Как известно [3], на поверхности чистых пластин кремния всегда существуют естественные неоднородные переходные слои, которые существенно влияют на измеряемые поляризационные углы. Для учета такого слоя на поверхности пластин КДБ-12 была использована модель переходного слоя с произвольным распределением диэлектрической проницаемости $\varepsilon(y)$, для которой при $d \ll \lambda$ методом интегральных уравнений получено соотношение:

$$\frac{R_p}{R_s} = \frac{(\sigma_+ \varepsilon_- - \sigma_- \varepsilon_+)(\sigma_+ + \sigma_-)}{(\sigma_+ \varepsilon_- + \sigma_- \varepsilon_+)(\sigma_+ - \sigma_-)} + i \frac{k_0 2\sigma_+ (\varepsilon_+ - \varepsilon_-) \beta^2 \varepsilon_-}{(\sigma_+ \varepsilon_- + \sigma_- \varepsilon_+)^2 (\sigma_+ + \sigma_-)^2} J,$$

где $k_0 = 2\pi/\lambda$, ε_+ , ε_- – диэлектрические проницаемости сред под слоем и над

ним, $\beta = k_0 \sqrt{\varepsilon_+} \sin \varphi_0$, $\sigma_{\pm} = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_{\pm} - \beta^2}$, $J = k_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\varepsilon(y) - \varepsilon_+)(\varepsilon(y) - \varepsilon_-)}{\varepsilon(y)} dy$.

Для описания дисперсии кремния была выбрана модель Тока-Лоренца [4]. Таким образом, при решении ОЗСЭ для пластин КДБ-12 мы минимизировали целевую функцию $K(x)$ семи параметров (пять параметров модели Тока-Лоренца для дисперсии кремния и два дополнительных параметра для поверхностного слоя (1)). По спектрам $\text{tg}\Psi_s(\varphi_0, \lambda)$ и $\cos\Delta_s(\varphi_0, \lambda)$, измеренным при угле падения 70° , были рассчитаны оптические функции $n_2(\lambda)$ и $k_2(\lambda)$ КДБ-12 (таблица).

Дисперсионные зависимости показателей преломления
и показателей поглощения кремния марки КДБ-12

λ , нм	n_2	k_2
480	4,320	$8,036 \cdot 10^{-2}$
530	4,079	$4,804 \cdot 10^{-2}$
580	3,931	$3,098 \cdot 10^{-2}$
630	3,830	$2,073 \cdot 10^{-2}$
680	3,759	$1,406 \cdot 10^{-2}$
730	3,706	$0,952 \cdot 10^{-2}$
780	3,664	$0,633 \cdot 10^{-2}$
830	3,632	$0,407 \cdot 10^{-2}$
880	3,605	$0,247 \cdot 10^{-2}$
930	3,584	$0,136 \cdot 10^{-2}$
980	3,566	$0,063 \cdot 10^{-2}$

В исследуемой МДП структуре мы предположили наличие слоя оксида титана (TiO_2) на поверхности слоя Ti (рис. 1). Вышеуказанные трудности при решении ОЗСЭ для многослойных структур быстро усугубляются с увеличением числа определяемых параметров. Поэтому успех решения ОЗСЭ определяется выбором модели с минимальным числом неопределенных (варьируемых) параметров, корректно описывающих дисперсионные свойства сред [1].

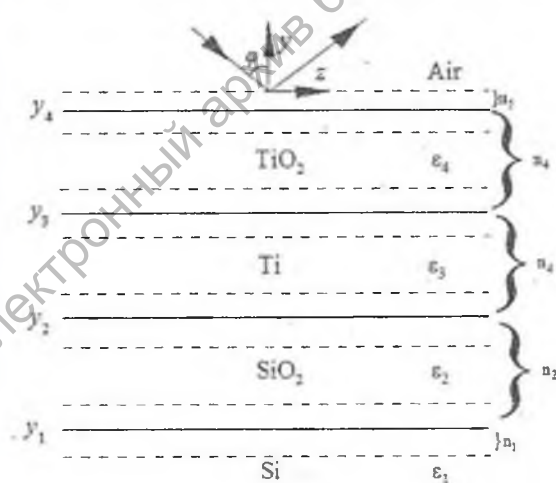


Рис. 1. Слоистая структура с переходными областями между однородными слоями (границы переходных областей обозначены штриховыми линиями)

При исследовании прозрачных диэлектриков (TiO_2) адекватной моделью дисперсии среды является формула Селлмейера [5, с. 315] с пятью параметрами. В случае металлов (Ti) должна иметь место модифицированная семипараметрическая формула Друде-Зинера [6, с. 88]. В качестве дисперсионных таблиц для кремния использовались данные таблицы 1, для оксида кремния – данные, прилагаемые к программному обеспечению эллисометра ES – 2.

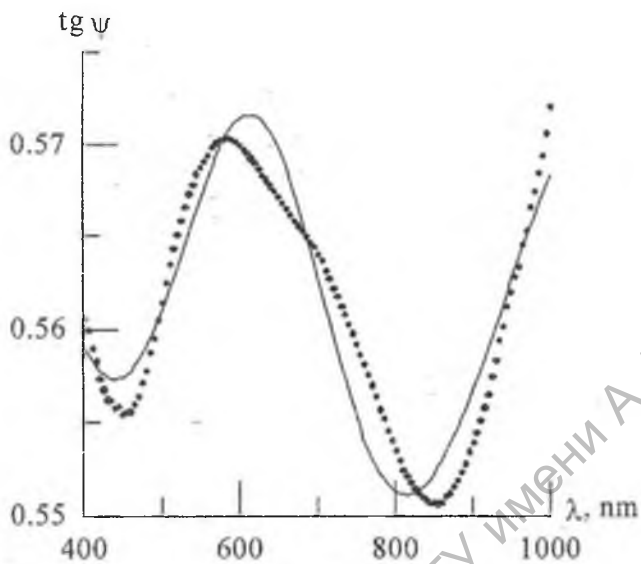
При исследовании многослойных структур с неоднородными переходными областями между слоями целесообразно использовать модель пространственного профиля диэлектрической проницаемости вида [3]

$$\varepsilon(y) = \varepsilon_1 + \sum_{j=1}^n (\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j) F[(y_j - y)/\alpha_j],$$

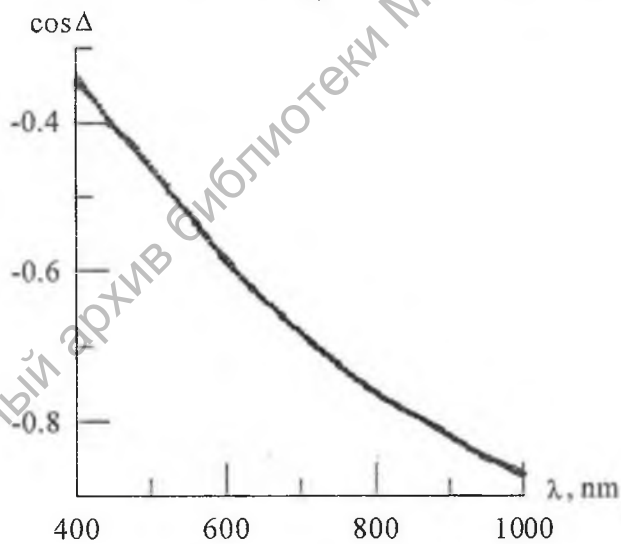
где $F(z) = 1/(\exp(z) + 1)$ – функция Ферми, ε – диэлектрическая проницаемость j -го слоя, описываемая одной из рассмотренных выше дисперсионных моделей, y – координата «середины» переходной области между j и $j + 1$ слоями, α – параметр, характеризующий геометрическую ширину переходной области (при $|y - y_j| \sim 5\alpha$, соответствующая функция Ферми с высокой точностью обращается в 0, или 1).

Решение оптимизационных задач для многопараметрических целевой функции $I(x)$ получено нами специально разработанным методом покоординатного спуска со стабилизатором в виде фиксации максимального числа шагов по каждой переменной в цикле и автоматическим выбором шага по каждой переменной.

Рис. 2-3 относятся к решению 19-параметрической обратной задачи, 7 из которых являются геометрические параметры, описывающие границы раздела между средами на рис. 1, 5 параметров из формулы Селлмейера для TiO_2 и 7 параметров дисперсионной модели для Ti. На рис. 2 сопоставлены экспериментальные (дискретные точки) и теоретические (сплошные кривые) данные для зависимостей $\text{tg} \psi(\lambda)$ и $\cos \Delta(\lambda)$ (последние соответствуют минимуму целевой функции $I(x)$). На рис. 3 приведены восстановленные профили функций $n(y)$ и $\kappa(y)$ ($n(y) + i\kappa(y) = \sqrt{\varepsilon(y)}$). Восстановленные профили соответствуют длине волны $\lambda = 700$ нм.

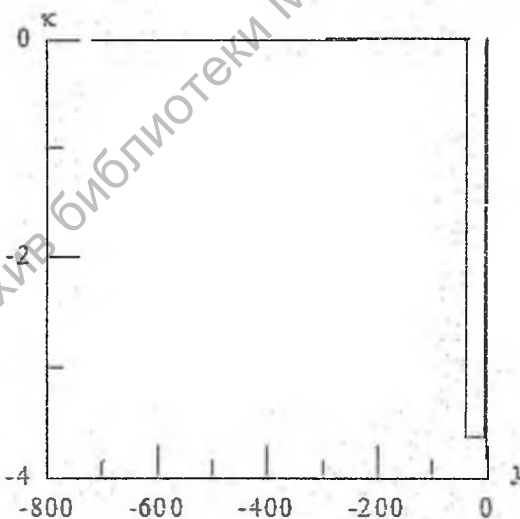
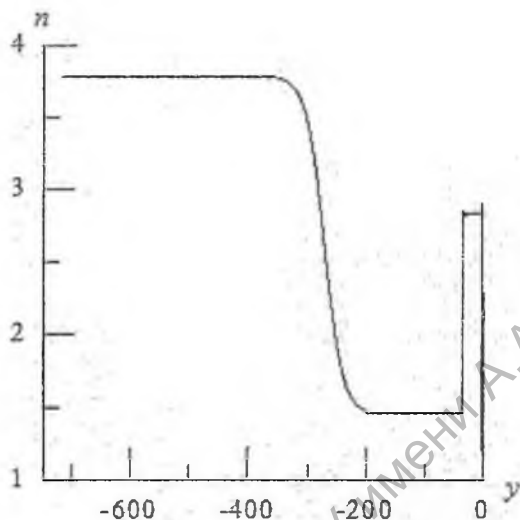


а)



б).

Рис. 2. Экспериментальные (дискретные точки) и теоретические (сплошные кривые) зависимости $\text{tg} \psi(\lambda)$ и $\cos \Delta(\lambda)$



б)

Рис. 3. Профили распределений $n(y)$ и $\kappa(y)$, соответствующие $\lambda = 700 \text{ nm}$ рассчитанные в результате решения 19-параметрической обратной задачи

Таким образом, решение ОЗСЭ для исследуемой $\text{Ti} - \text{SiO}_2 - \text{Si}$ структуры показывает, что на поверхности Ti образуется тонкий ($d_{\text{TiO}_2} \sim 1$ нм) слой TiO_2 . Между пленкой Ti ($d_{\text{Ti}} \sim 30$ нм) и слоем SiO_2 ($d_{\text{SiO}_2} \sim 100$ нм) образуется неоднородный (бинарный) слой. На основании модели эффективной среды Максвелла-Гарнетта [7] мы определили, что этот слой имеет толщину 20 нм и состоит из SiO_2 (40%) и Ti (60%). Между подложкой Si и ее оксидным слоем образуется достаточно толстый (~ 70 нм) переходный слой, состоящий на 70% из c-Si и на 30% из SiO_2 .

Список использованных источников:

1. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1979. – 285 с.
2. Спектральная эллипсометрия многослойных гетероструктур ZnS/ZnSe / В.И. Ковалев [и др.] // ЖПС. – 2002. – Т. 69. – № 2. – С. 258-263.
3. Эллипсометрия кремниевой подложки с естественным поверхностным слоем / Н.И. Стаськов [и др.] // Весник МДУ імя А.А. Куляшова. – 2007. – Т. 27. – № 2-3. – С. 154-158.
4. Jellison, G.E. Spectroscopic ellipsometry data analysis: measured versus calculated quantities / G.E. Jellison. // Thin Solid Films. – 1998. – Vol. 313-314. – P. 33-39.
5. Адамс, М. Введение в теорию оптических волноводов. – М.: Мир, 1984. – 512 с.
6. Соколов, А.В. Оптические свойства металлов / А.В. Соколов. – М.: ГИФМЛ, 1961. – 464 с.
7. Головань, Л.А. Оптические свойства нанокompозитов на основе пористых систем / Л.А. Головань, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров // УФН. – 2007. – Т. 177. – № 6. – С. 619-638.