

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОЕВ,
ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ИОНАМИ КРЕМНИЯ,
С ПОМОЩЬЮ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ*****В. А. Швец, В. Ю. Прокопьев, С. И. Чикичев, Н. А. Аульченко***Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск**E-mail: shvets@isp.nsc.ru*

Путем численного моделирования рассмотрена задача определения дозы облучения и энергии ионов при исследовании диэлектрических слоев SiO_2 , имплантированных ионами Si^+ , методом спектральной эллипсометрии. Для решения поставленной задачи использовались одно-, двух- и трехслойные модели. Установлено, что для определения указанных характеристик имплантированных слоев, а также толщины диэлектрического слоя достаточно использовать двух- или трехслойное приближение. Дальнейшее усложнение модели не приводит к повышению точности, но усложняет процедуру поиска минимума целевой функции.

Введение. Диэлектрические слои с внедренными ионами полупроводников – типичный объект современной полупроводниковой наноэлектроники. Они используются при создании полупроводниковых структур различного функционального назначения. Спектральная эллипсометрия является наиболее подходящим методом для характеристики таких слоев, поскольку свет видимого диапазона проникает на всю глубину исследуемых структур. Интерпретация результатов эллипсометрических измерений представляет собой довольно сложную задачу, которая в общей постановке является некорректной. Под общей постановкой понимается определение профилей оптических постоянных по толщине слоя как некоторых произвольных функций. Однако в большинстве случаев нет необходимости определять профили оптических постоянных как независимые функции. Например, при ионной имплантации распределение ионов, а следовательно, и распределение оптических постоянных описывается гауссовой зависимостью, поэтому достаточно найти только параметры этого гауссиана и на основании полученных данных характеризовать глубину имплантированных ионов и их дозу.

В данной работе предлагается упрощенный подход к решению такой задачи, который иллюстрируется численным моделированием на примере сло-

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 06-02-17340-а).

ев SiO_2 , имплантированных ионами Si^+ . Такой подход позволяет достаточно просто интерпретировать эллипсометрические измерения рассматриваемых структур и определять их характерные параметры.

Оптическая модель. Пусть слой диэлектрика толщиной d_0 на подложке облучен ионами Si^+ с энергией E и дозой D . Считаем показатель преломления исходного слоя $n_f(\lambda)$, а также показатели преломления и поглощения подложки $n_s(\lambda)$, $k_s(\lambda)$ соответственно известными функциями от длины волны. Распределение ионов по толщине с хорошей точностью описывается законом Гаусса [1]

$$v(z) = v_0 \exp[-((z - R_i)/\sigma)^2]. \quad (1)$$

Здесь $v(z)$ – функция объемной плотности ионов от координаты z , которая рассчитывается от поверхности пленки; R_i – проекционная длина пробега ионов; σ – дисперсия пробега. В результате получается структура с неоднородным распределением оптических постоянных по толщине слоя за счет внедренных ионов. Зависимость оптических постоянных от координаты z можно рассчитать, используя модель эффективной среды [2] для смеси из двух компонентов (зависимость от длины волны в обозначениях опускаем):

$$(1 - q(z)) \frac{n_f^2 - N(z)^2}{n_f^2 + 2N(z)^2} + q(z) \frac{N_i^2 - N(z)^2}{N_i^2 + 2N(z)^2} = 0, \quad (2)$$

где $N(z) = n(z) - ik(z)$ – комплексный показатель преломления структуры в точке с координатой z ; $N_i = n_i - ik_i$ – комплексный показатель преломления внедренных ионов; $q(z)$ – объемная доля ионов, пропорциональная их плотности. В качестве N_i можно использовать оптические постоянные полностью аморфизованного полупроводника – в данном случае кремния [3]. Зависимость $q(z)$ дается тем же гауссовым распределением (1), только необходимо определить q_0 – значение в максимуме. Величина q_0 выражается из условия нормировки: интегральное по толщине количество ионов на единицу площади должно быть равно дозе облучения, поэтому

$$q_0 = \frac{D}{5 \cdot 10^{15} \sigma \sqrt{\pi}}, \quad (3)$$

где D имеет размерность ион/см²; σ берется в нанометрах.

Соотношения (1)–(3) позволяют найти зависимость $N(z)$ в слое и полностью определить оптическую модель. Параметры этой модели выражаются через физические характеристики имплантации: дозу D и энергию ионов E , поскольку величины R_i и σ зависят только от E [1].

Для решения прямой задачи и нахождения эллипсометрических параметров Ψ и Δ в рассмотренной выше модели проводилось разбиение неоднородного слоя на $M = 100$ однородных подслоев и рассчитывались искомые зависимости $\Psi(\lambda)$ и $\Delta(\lambda)$ с использованием рекуррентных соотношений для коэффициентов отражения [4]. При этом учитывалось изменение толщины d по сравнению с исходным значением d_0 для необлученной структуры за счет внедрения в пленку избыточного материала. Реализация такого алгоритма позволила получить «как бы измеренные» спектры эллипсометрических па-

раметров при заданных значениях D , E и d_0 . Рассчитанные таким образом спектры $\Psi(\lambda)$ и $\Delta(\lambda)$ при облучении слоя SiO_2 на кремниевой подложке ионами Si^+ с различной дозой показаны на рис. 1, a , b . Как видно из рисунка, чувствительность эллипсометрических спектров к дозе чрезвычайно велика. Это позволяет надеяться на возможность решения обратной задачи и определение параметров, характеризующих процесс имплантации, и толщины слоя с приемлемой точностью.

Для корректного решения обратной задачи необходимо провести разбиение неоднородного слоя на подслои (как это изложено выше) и, используя какой-либо стандартный алгоритм поиска, найти искомые параметры. Данный подход, будучи корректным с математической точки зрения, имеет ряд чисто практических возражений. Во-первых, итерационные алгоритмы поиска для такой модели потребуют слишком много времени из-за большого числа подслоев разбиения, во-вторых, рассматриваемая задача весьма специфична и не включена в базовые пакеты программного обеспечения коммерческой эллипсометрической аппаратуры.

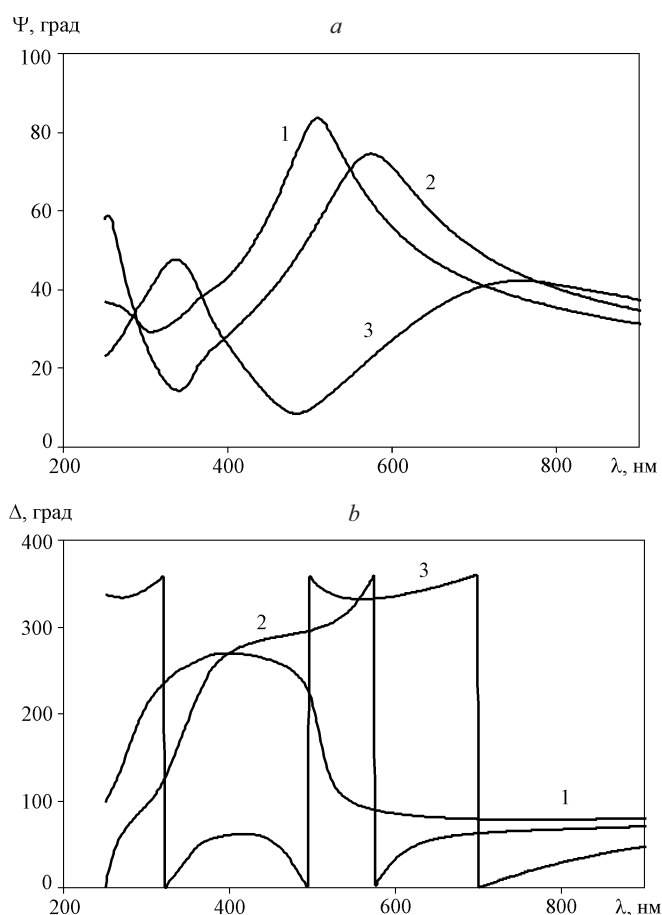


Рис. 1. Рассчитанные спектры эллипсометрических параметров: Ψ от λ (a) и Δ от λ (b) (кривые 1 – для исходной структуры Si/SiO_2 ($d = 113$ нм), кривые 2, 3 – для той же структуры, имплантированной ионами Si^+ с энергией 60 кэВ и дозами $4 \cdot 10^{16}$ и 10^{17} ион/ см^2 соответственно)

Наиболее оптимальным решением поставленной проблемы было бы использование для этих целей стандартных моделей с небольшим числом слоев. В данной работе проанализирована с применением численных методов точность решения обратной задачи для имплантированных слоев при использовании одно-, двух- и трехслойных моделей.

Однослойная модель. Исходные спектры эллипсометрических параметров в диапазоне 250–900 нм рассчитывались для структуры: слой SiO_2 толщиной 113 нм на Si, облученный ионами Si^+ с энергией 60 кэВ и дозой облучения от $2 \cdot 10^{16}$ до 10^{17} ион/см² (см. рис. 1). Для решения обратной задачи использовалась модель однородного слоя с неизвестными толщиной d и объемной долей имплантированного материала q . Поиск осуществлялся по методу Левенберга – Маркуардта [5, 6] с минимизируемой целевой функцией вида

$$S = \frac{1}{m} \sum_{i=1, m} \left(\left| \Psi_i^{\text{cal}} - \Psi_i^{\text{ex}} \right| + \left| \Delta_i^{\text{cal}} - \Delta_i^{\text{ex}} \right| \right). \quad (4)$$

Здесь индексы “cal” и “ex” соответствуют измеренным и экспериментальным значениям, а суммирование ведется по всем длинам волн. Найденное значение q пересчитывалось затем в дозу по формуле $D_c = \beta dq$, где β – численный коэффициент, который находился из предположения, что включения кремния в слое SiO_2 имеют ту же плотность, что и в объемном аморфном кремнии.

Зависимости относительных погрешностей определения толщины $(d_c - d)/d$ и дозы $(D_c - D)/D$ от исходной дозы имплантированного Si показаны на рис. 2 и 3 (кривые 1) (индекс c относится к величинам, найденным в результате решения обратной задачи). Следует подчеркнуть, что представленные здесь и далее погрешности определения искомых параметров характеризуются только степенью адекватности модели, используемой при решении обратной задачи, и практически не зависят от вида целевой функции и

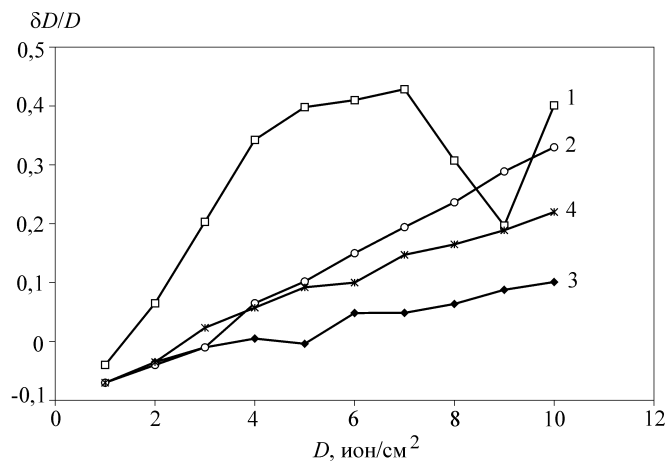


Рис. 2. Относительная погрешность определения дозы имплантации: для однослойной модели (кривая 1), двухслойной модели (четыре параметра) (2), двухслойной модели (три параметра) (3), трехслойной модели (4); $E = 60$ кэВ

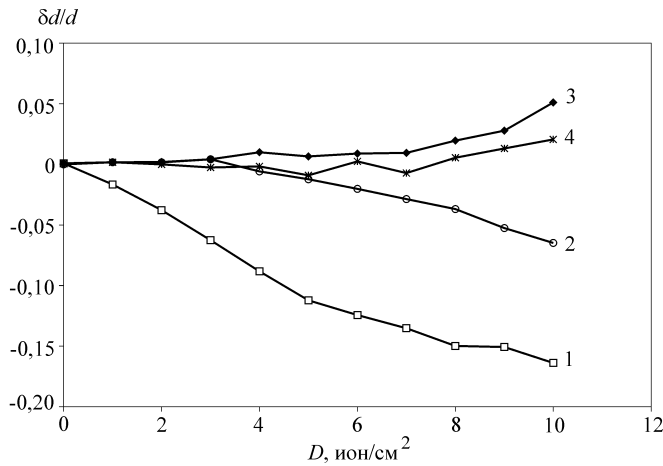


Рис. 3. Относительная погрешность определения толщины слоя: для однослойной модели (кривая 1), двухслойной модели (четыре параметра) (2), двухслойной модели (три параметра) (3), трехслойной модели (4); $E = 60$ кэВ

численного метода решения. Из приведенных результатов видно, что уже однослойная модель дает удовлетворительную точность определения толщины слоя (не хуже 16 %) и качественно, с точностью до 40 %, характеризует дозу имплантированного кремния. К сожалению, в рамках рассматриваемой модели в принципе нельзя найти глубину проникновения кремния и энергию ионов, так как в данном случае весь внедренный кремний предполагается равномерно распределенным по слою. Целевая функция (4), определяющая сходимость решения обратной задачи, достаточно быстро растет с увеличением дозы и при $D = 10^{17}$ ион/см² достигает значения $S \sim 60$ (рис. 4), что соответствует плохой сходимости, поэтому использовать однослойную модель при высоких дозах облучения нецелесообразно.

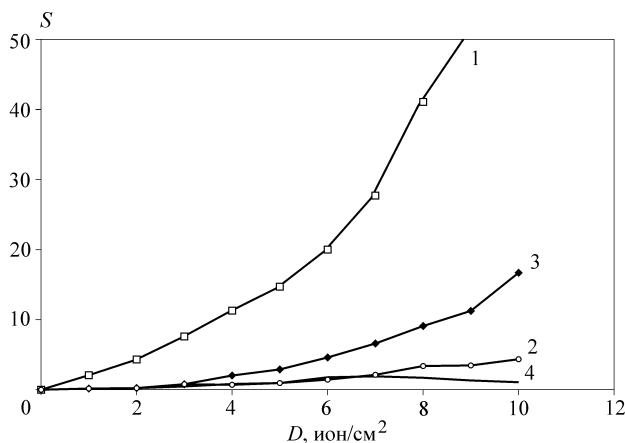


Рис. 4. Зависимости целевой функции в точке решения от дозы: для однослойной модели (кривая 1), двухслойной модели (четыре параметра) (2), двухслойной модели (три параметра) (3), трехслойной модели (4)

Двухслойная модель. Неизвестными параметрами здесь являются толщины слоев d_1, d_2 и объемные доли имплантированного материала в них q_1, q_2 (нумерация слоев начинается от подложки). Аналогично однослойной модели доза ионов и толщина слоя для двухслойной модели определялись через параметры искомого слоя:

$$D_c = \beta(d_1 q_1 + d_2 q_2); \quad d_c = d_1 + d_2. \quad (5)$$

Результаты анализа с использованием двухслойной модели представлены на рис. 2 и 3 кривыми 2. Точность определения как дозы, так и толщины заметно выше в данном случае. При этом по-прежнему наблюдается рост погрешностей с увеличением дозы. Сходимость решения для двухслойной модели существенно лучше: значения целевой функции в области решений на порядок меньше соответствующих значений в случае однослойной модели. Однако этот вывод не носит универсального характера и обусловлен следующим обстоятельством. При рассматриваемых значениях энергии имплантации и толщины пленки основная доля внедренных ионов находится в той половине слоя, которая ближе к подложке, в то время как оставшаяся его часть почти не содержит ионов. Поэтому двухслойная модель более точно описывает такое распределение. Ситуация совершенно меняется, если максимум распределения ионов располагается посередине пленки. В этом случае, как показывают расчеты, для обеих моделей реализуется примерно одинаковый критерий сходимости и точность определения дозы тоже получается одинаковой.

Если мы знаем *a priori*, в какой области пленки располагается внедренный материал, то можно уменьшить число параметров поиска. Для рассматриваемого выше примера ($E = 60$ кэВ, $d = 113$ нм) можно положить объемную долю ионов во втором слое равной нулю и искать только три параметра: d_1, q_1 и d_2 . Хотя критерий сходимости решения в этом случае оказывается хуже по сравнению с четырехпараметрическим поиском (кривая 3 на рис. 4), но погрешности определения дозы и толщины слоя оказываются меньше (кривые 3 на рис. 2 и 3). Очевидно, выбор количества параметров, подлежащих поиску, должен определяться в каждом конкретном случае наличием априорной информации.

В рамках двухслойной модели характеризуется не только суммарное количество внедренных ионов, но и их распределение по глубине слоя. Положение максимума в распределении находилось как координата центра тяжести гистограммы $q(z)$:

$$R_c = \frac{q_1 d_1 (d_2 + (d_1/2)) + q_2 (d_2^2/2)}{q_1 d_1 + q_2 d_2}. \quad (6)$$

Энергию ионов можно найти из сравнения рассчитанного по формуле (6) положения максимума с проекционной длиной пробега ионов R_i . Зависимость последней от энергии известна и определяется типом ионов и мишени [1]. Результаты такого анализа представлены на рис. 5. Кривая 1 показывает относительную погрешность нахождения энергии ионов $(E_c - E)/E$ в зависимости от исходного значения энергии для дозы внедренных ионов $2 \cdot 10^{16}$ ион/см². Удовлетворительные результаты получаются только для энергий $E \geq 30$ кэВ. Попытки получить аналогичную зависимость для дозы

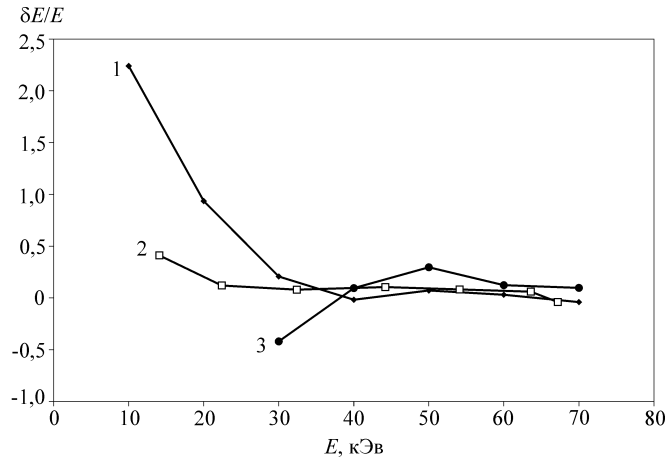


Рис. 5. Относительная погрешность определения энергии имплантации: кривая 1 – для двухслойной модели, $D = 2 \cdot 10^{16}$ ион/см²; 2 – трехслойной модели, $D = 2 \cdot 10^{16}$ ион/см²; 3 – трехслойной модели, $D = 10^{17}$ ион/см²

$D = 10^{17}$ ион/см² оказались безрезультатными: только для больших значений энергии ($E \geq 60$ кэВ) удавалось найти решение с приемлемым критерием сходимости. Причина этого имеет глубоко физический характер. При формировании отраженной волны от неоднородного слоя существенное значение имеет безразмерный параметр $\xi = \frac{\lambda}{\pi|N|} \left| \frac{dN}{dz} \right|$, который характеризует вклад

парциальных волн в результирующую отраженную волну [7]. При $\xi \ll 1$ можно вообще пренебречь отражением от неоднородного слоя. Чем выше значение ξ , тем более мелкое разбиение неоднородного слоя требуется, чтобы точно рассчитать параметры отраженной волны. В таблице представлены максимальные (по толщине слоя) значения ξ для различных энергий и доз имплантации. Таблица позволяет оценить пригодность двухслойной модели в зависимости от различных значений доз и энергий имплантации. Эмпирически установлено, что для рассматриваемых структур двухслойная модель дает удовлетворительный результат поиска при $\xi \lesssim 2$. Для $E = 60$ кэВ почти весь диапазон доз находится в области удовлетворительной сходимости решения, в то время как для $E = 10$ кэВ для всех доз $\xi > 8$, поэтому сходимость оказывается плохой. Возрастание ξ с уменьшением энергии связано с тем, что пропорционально энергии уменьшается дисперсия пробега ионов и, следовательно, увеличивается градиент оптических параметров. По этой же причине наблюдается возрастание ξ с увеличением дозы. Именно этим объясняется отмеченный выше рост погрешностей определения искомым параметров с дозой, зависимости для которых представлены на рис. 2 и 3, а также монотонное возрастание целевой функции для найденных решений (см. рис. 4).

Трехслойная модель. В общем случае количество параметров поиска составляет шесть: объемные доли внедренного материала и толщины для каждого слоя. Однако разумно уменьшить количество неизвестных, задавая, например, внешний слой в виде чистого диэлектрика ($q_3 = 0$). Целесообраз-

**Параметр ξ , характеризующий степень неоднородности структуры,
для различных значений дозы и энергии**

$E, \text{кэВ}$	$D/10^{16} \text{ ион/см}^2$				
	2	4	6	8	10
10	8,10	17,60	24,8	30,0	33,1
20	2,60	5,80	9,0	11,9	14,2
30	1,30	2,90	4,6	6,3	7,8
40	0,80	1,70	2,8	3,8	4,9
50	0,55	1,20	1,9	2,6	2,9
60	0,41	0,86	1,4	1,9	2,5
70	0,32	0,67	1,1	1,5	1,9

Пр и м е ч а н и е. Выделены значения, при которых допустимо применение двухслойной модели.

ность такого ограничения вызвана рядом причин. Во-первых, это соответствует реальной ситуации для энергий больше 10 кэВ (для меньших энергий в рамках такой модели получается просто $d_3 \approx 0$). Во-вторых, чем меньше искомых параметров, тем более уверенно работают поисковые методы. Главная же причина состоит в том, что для многопараметрических поисковых задач в эллипсометрии проявляется взаимная корреляция параметров [4], что вызывает резкое возрастание ошибок определения искомых величин.

Соотношения (5) и (6), использованные для расчета дозы и энергии, нетрудно обобщить на случай трех слоев. Весь остальной алгоритм сохраняется: находятся параметры слоев q_i, d_i , а затем рассчитываются доза, энергия и толщина. Значения ошибок определения соответствующих параметров приведены на рис. 2, 3 и 5. Несколько неожиданным оказался результат определения дозы: трехслойная модель дает точность хуже, чем двухслойная трехпараметрическая. По-видимому, это обусловлено большим количеством параметров поиска в трехслойной модели и их взаимной корреляцией, которая и является причиной ошибок.

Что касается точности определения энергии, то она оказывается сопоставимой для обеих моделей при $E > 30$ кэВ, но при меньших энергиях трехслойная модель дает наиболее правильные результаты. Более того, в рамках трехслойной модели удастся также рассчитать энергию и для дозы $D = 10^{17}$ ион/см², что не удавалось сделать с использованием двухслойной модели. Таким образом, трехслойная модель позволяет несколько расширить доступный для поиска диапазон параметров E и D . Критерием применимости трехслойной модели для рассматриваемых структур по-прежнему служит безразмерный параметр ξ , но его допустимое значение увеличивается до 4–5.

Сравнение моделей и выбор оптимального числа слоев. Из рассмотренных выше примеров можно сделать некоторые обобщения. Однослойная

модель служит довольно грубым приближением для анализируемых структур и, кроме того, не позволяет вычислить энергию ионов. Двухслойная модель дает заметно лучшие результаты определения всех параметров и в отличие от однослойной позволяет находить энергию. С увеличением числа слоев модели удастся более правильно отобразить неоднородный профиль распределения оптических постоянных. Критерием степени соответствия служит целевая функция, значения которой неуклонно уменьшаются по мере увеличения числа слоев (см. рис. 4). Поэтому логично ожидать, что трехслойная модель должна дать еще большую точность определения параметров. Однако результаты, полученные для трехслойной модели, сопоставимы с результатами для двухслойной модели, и выигрыш проявляется только в расширении диапазона. В связи с этим возникает вопрос о целесообразности дальнейшего усложнения модели путем увеличения числа слоев разбиения.

Проанализированы решения для случая $D = 10^{17}$ ион/см² и $E = 60$ кэВ, полученные с использованием моделей с разным числом слоев (до шести включительно). Установлено, что добавление слоев дает возможность более правильно описать профиль распределения ионов (рис. 6), но заметного повышения точности определения искомых параметров по сравнению с трехслойной моделью не наблюдается. Более того, с увеличением числа слоев процедура поиска заметно удлиняется и становится менее воспроизводимой из-за большого числа локальных минимумов. Главная же проблема, сопутствующая таким многопараметрическим задачам, как уже отмечалось, заключается во взаимной корреляции параметров. Поэтому область решений, имеющих одно и то же значение целевой функции вблизи ее минимума, становится слишком большой. Суммируя все изложенное, можно утверждать, что трехслойная модель наиболее оптимальна для исследования диэлектрических слоев с имплантированными ионами полупроводника и решения сформулированной выше задачи. При этом сокращение числа искомых параметров модели за счет привлечения априорной информации может заметно повысить точность определения параметров имплантации и толщины диэлектрической пленки.

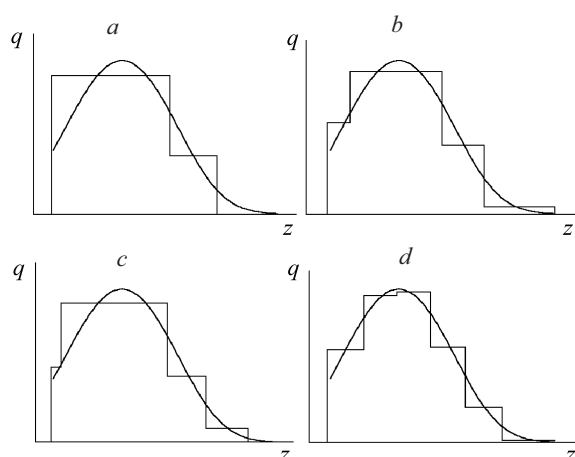


Рис. 6. Распределение объемной доли ионов $q(z)$ по толщине слоя SiO_2 и гистограммы распределения $q(z)$, найденные с использованием: трех- (а), четырех- (b), пяти- (c) и шестислойных (d) моделей

Заключение. В данной работе численным моделированием показано, что методом спектральной эллипсометрии можно определять характерные параметры имплантированных диэлектрических слоев: энергию имплантированных ионов, дозу облучения и толщину диэлектрического слоя. Установлено, что наилучшие результаты получаются с использованием трехслойной модели. Сформулирован критерий, который позволяет оценить область применимости данной методики для решения поставленной задачи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Буренков А. Ф., Комаров Ф. Ф., Кумаков М. А., Телегин М. М.** Пространственные распределения энергии, выделяемой в каскаде атомных столкновений в твердых телах. М.: Энергоиздат, 1985.
2. **Aspnes D. E.** Optical properties of thin films // Thin Solid Films. 1982. **89**. P. 249.
3. **Adachi S., Mori H.** Optical properties of fully amorphous silicon // Phys. Rev. B. 2000. **62**. P. 10158.
4. **Аззам Р., Башара Н.** Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981.
5. **<http://www.nr.com>**
6. **Химмельблау Д.** Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975.
7. **Швец В. А.** Определение профилей оптических постоянных неоднородных слоев из эллипсометрических измерений in situ // Автометрия. 1993. № 6. С. 25.

Поступила в редакцию 10 октября 2006 г.
