

# ПРИРОДА ПОВЕРХНОСТНЫХ И НЕОДНОРОДНЫХ ПЕРЕХОДНЫХ СЛОЕВ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ Si-SiO<sub>2</sub>-Si

А.И. Беляева, А.А. Галуза

Национальный технический университет  
«Харьковский политехнический институт»

61002, Украина, г. Харьков, ул. Фрунзе 21.  
E-mail: [belyaeva@kharkov.com](mailto:belyaeva@kharkov.com); [galuza76@mail.ru](mailto:galuza76@mail.ru)

## 1. Введение

Интерес к многослойным покрытиям на базе кремния в настоящее время связан, прежде всего, с развитием нанотехнологий, которые составляют основу современной микроэлектроники. С другой стороны, необходимость совершенствования фундаментальных представлений о реальной структуре сложных многослойных систем, о природе поверхностных и переходных слоев и их влиянии на свойства системы в целом сомнений не вызывает. Кристаллический кремний (*c*-Si) – основной материал современной микроэлектроники. Многослойные тонкопленочные структуры, содержащие кремниевые слои, широко используются в интегральной электронике [1], в частности, для производства интегральных микросхем и жидкокристаллических (ЖК) мониторов.

Исследование природы переходных слоев и их влияние на оптические и прочие свойства многослойных твердотельных структур чрезвычайно нужны для совершенствования их современной технологии. Систематические данные в этой области в настоящее время отсутствуют.

Все перечисленное послужило толчком к выбору направления работы, целью которой явилось выяснение природы поверхностных и переходных слоев в сложной многослойной системе *c*-Si - SiO<sub>2</sub> - Si-пленка, которая относится к индустрии ЖК-мониторов.

## 2. Объекты исследования и экспериментальные методики

Подложки *c*-Si представляли собой коммерческие пластины монокристалла *c*-Si (100) *p*-типа с шероховатостью ~0.5 нм. Перед нанесением слоя SiO<sub>2</sub> естественный окисный слой на поверхности Si снимался кратковременным погружением в концентрированную HF.

Поликристаллические пленки Si изготовлены методом пиролиза чистого силана испарением химических паров низкого давления (0.3 Torr) при  $T = 635^{\circ}C$  в SEMATECH AND PROMETRIX, Inc. Они осаждались на пластины кремния диаметром 150 мм, покрытые термически осажденной аморфной двуокисью кремния (SiO<sub>2</sub>) толщиной 31.1 нм. Пленки не допированы. Температура осаждения выбрана из соображений получения большого размера зерен кристаллического *c*-Si и уменьшения процента фазы *a*-Si [2].

Поскольку слои, с которыми предстояло работать, имеют толщину порядка единиц или десятков нанометров, в качестве основной методики исследования нами была выбрана спектральная эллипсометрия (СЭ) [3] совместно с просвечивающей электронной микроскопией по поперечному срезу (ХТЕМ). Физической основой использования СЭ для количественного исследования многослойной кремниевой системы является сильная зависимость глубины проникновения зондирующего излучения от длины волны.

### 3. Обработка экспериментальных результатов

При создании образца была заложена структура монокристаллическая кремниевая подложка ( $c-Si$ ) – пленка двуокиси кремния ( $SiO_2$ ) – поликристаллическая кремниевая пленка ( $p-Si$ ). Однако, результаты ХТЕМ показали, что структура образца осложнена наличием существенной поверхностной шероховатости и неоднородностью по толщине слоя поликристаллического кремния.

Анализ спектров эллипсометрических углов  $\Psi$  и  $\Delta$  позволил получить добавочную количественную информацию о составе и толщинах различных слоев исследуемой системы. Оказалось, что экспериментальные и рассчитанные в рамках технологической модели спектры  $\Psi$  и  $\Delta$  отличаются не только количественно, но даже качественно.

Для определения реальной модели мы пользовались, прежде всего, физическими соображениями и результатами ХТЕМ. Все модели содержали поликристаллический слой кремния, который моделировался как смесь аморфного и/или кристаллического кремния ( $a-Si$  и/или  $c-Si$ ) и пустот. В связи с этим, для получения представления о кристаллической структуре пленки кремния при обработке экспериментальных результатов спектроскопии было взято приближение ВЕМА [4], которое позволяет оценить показатель преломления физической смеси нескольких веществ.

Для построения моделей многослойной структуры был проведен анализ спектра глубины проникновения излучения в образец, которая для поглощающих веществ весьма мала. Это обстоятельство позволяет для некоторых спектральных интервалов существенно упростить модель, вплоть до чистой поверхности, и облегчить решение задачи, поскольку в этом случае анализ может быть проведен, как бы, послойно.

В результате математической обработки экспериментальных данных были найдены параметры модели (первая колонка таблицы), которая наилучшим образом описывает экспериментальные данные спектральной эллипсометрии. Качество аппроксимации таково, что экспериментальные спектры совпали с модельными с точностью  $\sim 0.1^0$ , что близко к погрешности измерений ( $\pm 0.01^0$  для  $\Psi$  и  $\pm 0.05^0$  для  $\Delta$  [5]).

При анализе данной системы толщина слоев и объемная доля каждого вещества, составляющих смесь (параметры, не зависящие от длины волны), выступали как подгоночные параметры модели. Показатели преломления  $n_j$  и коэффициенты поглощения  $k_j$  составляющих ( $a-Si$  и  $c-Si$ ) приведены были взяты из литературных источников [6].

Таблица. Реальная структура и состав исследуемой системы

Слой	Состав	Толщина, нм
1) шероховатый окисный	$SiO_2$ 66% пустоты 34%	3.4
2) переходной	$a-Si$ 15% $c-Si$ 75% $SiO_2$ 10%	9.4
3) поликристаллического кремния	$a-Si$ 14% $c-Si$ 74% пустоты 12%	200.7
4) окисный	$SiO_2$ 100%	31.1
подложка	$c-Si$ 100%	-

#### 4. Обсуждения

Таким образом, результирующая структура (см. таблицу) отличается от номинальной, во-первых, фазовой неоднородностью состава пленки Si, во-вторых, наличием существенного сложного окисного слоя на поверхности Si пленки. Кроме того, сам окисный слой состоит из слоя поверхностной шероховатости и переходного слоя окисел - Si-пленка неоднородного состава.

Из таблицы видно, что: 1. слой естественного окисла имеет микроскопические шероховатости на поверхности, содержащие около 34% пустот; 2. имеется переходной слой между окислом и слоем кремния, толщиной около 9.4 нм, в котором пустоты отсутствуют; сравнение его состава с составом слоя Si позволяет заключить, что в случае переходного слоя пустоты (12%) заполняются SiO<sub>2</sub> (10%); 3. слой кремния содержит большое количество как кристаллической, так и аморфной фазы, а также некоторое количество дефектов (пустот) в своей микроструктуре; 4. межфазные процессы в такой композиционной среде как «кристаллический Si + поры в SiO<sub>2</sub>», возможно, подобны процессам в композите «SiO<sub>2</sub>+поры», т.е. пористому кремнезему (ПКЗ).

Как известно, содержание аморфного *a*-Si в Si-пленке существенно зависит от температуры осаждения. В этом плане полученная величина 14% *a*-Si для слоя кремния вполне разумна для нашей температуры осаждения  $T = 635^{\circ}C$  [2].

Очевидно, что результаты, полученные с помощью СЭ, качественно хорошо согласуются с прямыми измерениями ХТЕМ.

#### 5. Выводы

Совместное использование ХТЕМ, СЭ и информации о глубине проникновения излучения в образец позволило провести послойный анализ сложной структуры поликристаллического кремния. Обнаружены поверхностный и переходной слои, восстановлена их физическая природа, структура и существенная пористость. Показано, что СЭ и ВЕМА могут быть успешно использованы при моделировании и определении параметров многослойной кремниевой системы: получены составы, толщины слоев и параметры поверхностной шероховатости пленки Si и ее естественного окисла.

Используя результаты СЭ и их детальный анализ, в рамках моделирования *n*-слойной структуры оказалось возможным получить:

1. информацию о глубинном профиле многослойной структуры;
2. количественные данные о толщине каждого слоя;
3. информацию относительно структуры каждого слоя;
4. характеристику естественного окисного слоя и его шероховатости.

Все эти результаты хорошо согласуются с измерениями на электронном микроскопе.

#### Литература

1. T.I. Kamins. Polycrystalline Silicon for Integrated Circuit Applications. Academic Publishers, Boston (1988).
2. A. Borghesi, M.E. Giardini, M. Marazzi et al. Appl. Phys. Lett 70, 892 (1997).
3. Р. Аззам, Н. Башара. Эллипсометрия и поляризованный свет. Мир, М. (1981).
4. D.A.G. Bruggeman, Annalen der Physik 5, 636 (1935).
5. A.I. Belyaeva, A.A. Galuza. Advances in Cryogenic Engineering (Materials). 46A, 435 (2000).
6. G.E. Jellison, M.F. Chisholm, S.M. Gorbalkin. Appl. Phys. Lett. 62, 3348 (1993).