

# $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 外延层结构参数的 椭圆光谱表征技术研究

张瑞智 罗晋生

(西安交通大学电信学院 西安 710049)

**摘要** 本文测量并分析了不同组分的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金的椭圆光谱,得到了能量范围为 2.0~5.0eV 内的主要临界点的能量与 Ge 的组分的关系,给出用椭圆光谱分析  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金厚度和 Ge 组分的方法.

**PACC:** 6865, 7360F, 0760F

## 1 引言

在 Si 基能带工程及高速电子器件研究领域,在 Si 衬底上生长的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  应变薄层有十分广阔的应用前景. 材料的结构参数对器件的性能具有决定性的作用.  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金材料的结构参数包括材料的厚度、组分、结构的完整性、应变的大小及弛豫的情况. 目前,作为结构参数的检测与评估方法主要有 X 射线双晶衍射、透射电镜(XTEM)和卢瑟福背散射(RBS)等. 然而,对于材料的基础研究和器件的开发来说,具有实际意义的是材料结构参数的无损检测方法.

近十几年来椭圆光谱的应用取得了长足的发展,已逐渐发展成为研究材料结构参数和性质的一种有力的工具. 与其它方法相比,椭圆光谱法具有快速准确和完全无损的优点. 本文以  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金材料为对象,应用带间跃迁的介电函数理论,通过对不同组分不同结构的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金样品的介电函数谱的分析,研究了半导体材料的结构参数的椭圆光谱表征理论及实验技术,给出了椭圆光谱非破坏性确定  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金 Ge 组分的大小及外延层厚度的基本方法.

## 2 理论

当一束偏振光入射到样品表面后,反射的偏振光中就包含了样品表面的电子和几何的

---

张瑞智 男, 1962 年生, 讲师, 从事半导体光学性质和椭圆光谱研究  
罗晋生 男, 1924 年生, 教授, 从事半导体器件与微电子学教学和科研工作  
1996 年 6 月 17 日收到初稿, 1996 年 9 月 7 日收到修改稿

结构信息,这种信息通过偏振光与样品相互作用前后产生的偏振状态的改变反映出来.在椭圆偏光谱测量中,实验主要是测量反射光的偏振态.它通过分析光在样品表面反射前后 P 波和 S 波偏振状态的变化(振幅和相位)来揭示材料的光学性质<sup>[1]</sup>:

$$\rho = \operatorname{tg}\Psi e^{i\Delta} = R_p/R_s \quad (1)$$

式中  $R_p$  和  $R_s$  分别为 P 波与 S 波的振幅反射率; $\Psi$  和  $\Delta$  表示椭圆偏角,其数值可以由实验测量得到.

在线性响应范围内,半导体宏观光学性质可以用复介电函数  $\epsilon(\omega)$  来概括:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (2)$$

对于最简单的由空气和固体介质组成的两相体系,当入射光的波长及入射角  $\varphi$  已知时,则由椭圆偏测量可以很方便地得到材料的复介电函数:

$$\epsilon(\omega) = \sin^2\varphi + \sin^2\varphi \operatorname{tg}^2\varphi \left(\frac{1-\rho}{1+\rho}\right)^2 \quad (3)$$

根据固体的能带理论和光学原理,半导体的光学性质由其能带结构所决定, $k$  空间中满足  $\nabla_k[E_c(k) - E_v(k)] = 0$  的哪些点对于带间跃迁的贡献特别大  $k$  它们被称为临界点(简称 CP 点).临界点可以在反射光谱中引进特征结构,半导体能带结构的临界点的特性很大程度上决定了其介电函数的虚部,从而决定了  $\epsilon(\omega)$  谱的特征,因此可以将  $\epsilon(\omega)$  谱上的特征结构和联合态密度的解析奇异性一临界点联系起来,达到研究材料结构参数的目的.这是因为:材料的结构参数的变化将影响半导体的能带结构,从而影响半导体的光学特性,反过来,分析半导体带间跃迁和光吸收边的变化,又可以确定引起这些变化的诸因素(如应力、组分等)的大小和性质.这是半导体材料结构参数的椭圆光谱技术的表征理论基础.

在临界点附近的介电函数由下式给出<sup>[2]</sup>:

$$\epsilon(E) = C - Ae^{i\theta}(E - E_g + i\Gamma)^n \quad (4a)$$

式中  $C$  为常数; $A$  称为振幅; $E_g$  为跃迁能量; $\Gamma$  为展宽因子; $n$  表示临界点的维数; $\theta$  称为激子相移,它唯象地反映了激子效应对跃迁的贡献及临界点的类型(最大、最小、鞍点).若不考虑激子效应则  $\theta = 0$ .

$n$  的值为  $-1/2$ 、 $0$ 、 $1/2$  和  $-1$ ,分别对应 1 维、2 维、3 维和 0 维 CP 点.2 维 CP 点附近的介电函数由下式给出:

$$\epsilon(E) = C - Ae^{i\theta}\ln(E - E_g + i\Gamma) \quad (4b)$$

由介电函数  $\epsilon(E)$  曲线的形状及(4)式,可以确定临界点的特征.事实上这不大可能,因为(1)纯粹的带间跃迁谱线形状总是被散射和多体效应(如激子效应)模糊掉;(2)介电函数谱上特征如峰值,反映了布里渊区中能量简并的不同临界点附近跃迁的贡献的总和,无法将光谱图上的主要光谱结构的数目和临界点数目直接联系起来; $\epsilon(E)$  谱上的许多临界点的结构是微弱的,含糊不清的和低灵敏度的.但是,临界点附近的二级、三级导数谱有尖锐的结构,这种尖锐的结构有可能不必经能带计算即可决定某些临界点的性质,确定其能量位置.

取(4)式的二阶导数,并计及所有的临界点可以得到如下表达式:

$$\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial E^2} = \sum_{j=1}^M n(n-1)A_j e^{i\theta_j} (E - E_j + i\Gamma_j) \quad n \neq 0 \quad (5a)$$

$$\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial E^2} = \sum_{j=1}^M A_j e^{i\theta_j} (E - E_j + i\Gamma_j) \quad n = 0 \quad (5b)$$

如果  $A_r$  与能量无关, 则临界点  $E_J$  处的奇异性就更突出, 临界点附近的导数谱有尖锐的结构, 从而方便了临界点位置的确定. 对于 0 维和 2 维  $CP$  点, 介电函数虚部的二阶导数谱在  $CP$  点附近取极小值, 极小值对应的能量并不完全等于  $CP$  点能量, 因为它还取决于激子相移, 然而, 在给定能量范围内, 极小值点数目有助于决定  $CP$  的数目及能值. 有时一个极小值可能对应于几个  $CP$  点, 这可以通过拟合二阶导数谱来区分. 由于临界点附近联合态密度的不连续性, 能带结构的变化所引起的光谱的变化在临界点附近最为显著. 利用椭偏光谱来研究材料结构参数, 要害在于光谱峰值或特征的判别和指认, 并通过这种判别和指认的讨论将这些特征与材料结构参数联系起来, 进而找出它们之间的关系, 然后应用这种关系确定材料结构参数. 因此, 椭偏光谱法测量材料结构参数方法如下: (1) 测量样品的椭偏光谱; (2) 由椭偏光谱抽象出介电函数谱; (3) 用数值微分法求出介电函数对能量的二阶导数谱; (4) 应用(5)式拟合实验所得的二阶导数谱以确定光谱结构所属的临界点的数目和性质. (5) 由临界点确定材料的结构参数.

### 3 样品及椭偏光谱测量

我们用分子束外延(MBE)方法制备了几种不同组分的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金外延材料. 外延层是弛豫的, 衬底为(100)P型Si.

椭偏光谱是用旋转检偏器式自动椭偏光谱仪测量的, 测量的能量范围为 2.0~5.0eV, 扫描间隔为 0.05~0.1eV, 测量时入射角为  $70^\circ$ .

图 1 给出了实验测得的样品 JP25 的椭偏光谱, 其余样品的结果与此类似.

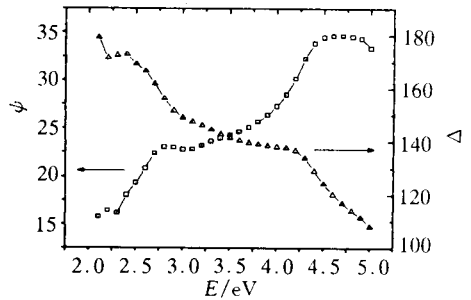


图 1 样品 JP25 的椭偏光谱

### 4 结果讨论

由椭偏光谱抽象为介电函数谱, 最简单的方法是采用空气-外延层二相模型, 但是对于实际的样品, 必须考虑衬底效应以及表面天然生长的氧化层的影响, 因此, 我们采用空气-氧化层- $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -Si 衬底四相模型处理椭偏测量数据, 有关计算公式参考文献[3], 在计算时, 氧化层假设为  $\text{SiO}_2$ , 其厚度为 1~1.5nm. 氧化层和 Si 衬底的介电函数分别取自文献[4]和文献[5]. 图 2 为由椭偏光谱计算得到的各个样品的介电函数谱.

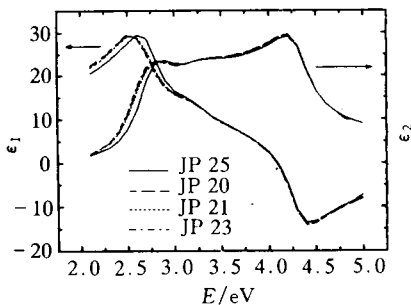


图 2 实验测得的各个样品的介电函数谱

为了得到介电函数谱所属的临界点, 我们数值计算了各个样品的介电函数对能量的二阶导数谱, 并根据下式用最小二乘法拟合了二阶导数曲线, 以得到各个临界点的振幅  $A_J$ 、相移  $\theta_J$ 、能量  $E_J$  及展宽

因子  $\Gamma_J$ .

$$\sum_{L=1}^N \left| \sum_{J=1}^M A_J e^{i\theta_J} (E - E_J + i\Gamma_J)^{-2} - \left( \frac{\partial^2 \epsilon(E)}{\partial E^2} \right)_L \right|^2 = 0 \quad (6)$$

式中  $N$  为实验点的总数,  $M$  为临界点的个数.

对于  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金, 在 2.0~5.0eV 范围内介电函数谱所属的主要临界点有  $E_1(\Lambda_{4+5}^+ \rightarrow V_6^+)$ 、 $E_1 + \Delta_1(\Lambda_6^+ \rightarrow \Lambda_6^+)$ 、 $E_0'(\Gamma_8^+ \rightarrow \Gamma_6^+)$  和  $E_2$  (布里渊区  $X$  点附近的跃迁), 表 1 给出实验测得的各个样品的临界点的能量(95%的可靠度).

表 1 实验测得的各个临界点的能量

样品号	$E_1$	$E_1 + \Delta_1$	$E_0'$	$E_2$
JP23	2.61	2.81	3.22	4.21 4.387
JP21	2.63	2.82	3.23	4.21 4.387
JP20	2.63	2.84	3.22	4.21 4.387
JP25	2.68	2.86	3.24	4.21 4.386

图 3 给出了样品 JP25 介电函数谱对能量的二阶导数曲线及理论计算结果; 表 2 给出了模拟计算得到的样品 JP25 各临界点的参数. 其余样品的与此类似.

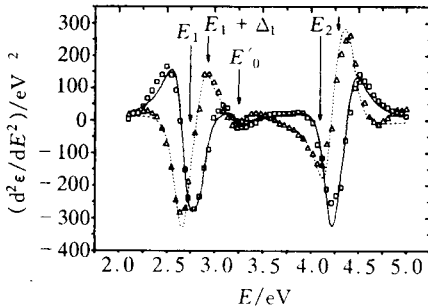


图 3 样品 JP25 的介电函数谱的二阶导数曲线及理论计算结果  
实线和虚线分别对应介电函数虚部  $\epsilon_2$  谱和实部  $\epsilon_1$  谱的二阶导数理论计算结果;  
 $\square$  和  $\Delta$  为其实验测量结果.

在拟合二阶导数时, 介电函数的实部和虚部同时计算. 所有的临界点都假设为二维.  $E_1$  和  $E_1 + \Delta_1$  是沿布里渊区  $\Lambda$  方向的直接跃迁,  $\Delta_1$  为自旋轨道分裂的能量.  $E_1$  在 Si 中通常认为是一个激子点(即 0 维临界点), 但是在我们的计算中假设 0 维点拟合结果不令人满意. 虽然  $E_1 + \Delta_1$  强度远小于  $E_1$ , 然而在  $E_1$  峰附近假设双峰结构( $E_1, E_1 + \Delta_1$ )取得了最好的拟合效果. 从图 3 中可以明显的看到  $E_1 + \Delta_1$  跃迁. 虽然它们对应于同一方向的跃迁, 但其相移角  $\theta$  并不一样.  $E_1$  是  $2DM_0$ (最小)型临界点, 而  $E_1 + \Delta_1$  是  $2DM_1$ (鞍点)型 CP 点.  $E_2$  峰是最强的峰. 联合态密度分析表明, 若  $M_1$  和  $M_2$  型 CP 点正好在能量上简

并, 就可导致  $\epsilon(\omega)$  谱上十分强烈的峰. 同样  $E_2$  峰也具有双峰结构, 其能量分别为 4.21eV 和 4.387eV, 对应于  $X(M_1)$  和  $\Sigma$  点 ( $M_2$ ) 竖直跃迁.  $E_0'$  对应于布里渊区中心  $\Gamma$  点的竖直跃迁, 其强度较小. 从表 1 可看出,  $E_2$  跃迁能量几乎不随组分变化, 近乎一个常数.  $E_0'$  随组分变比较小, 这与理论计算结果一致.  $E_1$  随组分变化较大. 为了得到跃迁能

表 2 模拟计算得到的样品 JP25 各个临界点的参数

	$E/\text{eV}$	$A$	$\theta/(\circ)$	$\Gamma/\text{eV}$
$E_1$	2.68	9.0	25	0.17
$E_1 + \Delta_1$	2.86	1.5	115	0.13
$E_0$	3.24	0.5	30	0.125
$E_2(1)$	4.21	6.3	85	0.16
$E_2(2)$	4.386	5.0	188	0.18

量与组分的关系,我们用上述方法分析了文献[6]给出的不同组分  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金( $x=0.218 \sim 0.91$ )的介电函数  $\epsilon(\omega)$ ,结果如图 4 和图 5 所示.

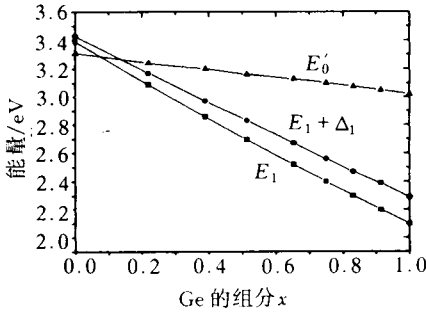


图 4  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金跃迁能量与  $x$  的关系

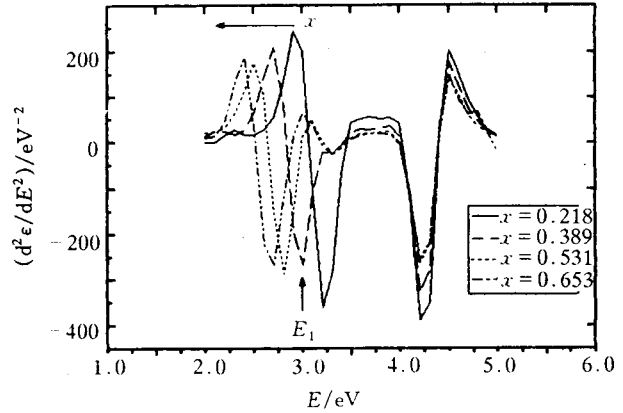


图 5  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金介电函数的虚部对能量的二阶导数曲线

$E_1$ 、 $E_1 + \Delta_1$  和  $E_0'$  与组分  $x$  的关系为:

$$\begin{aligned} E_0'(x) &= 3.30 - 0.27x - 0.012x^2 \\ E_1(x) &= 3.39 - 1.414x + 0.125x^2 \\ E_1 + \Delta_1(x) &= 3.43 - 1.206x + 0.066x^2 \end{aligned} \tag{7}$$

由于  $E_1 + \Delta_1$  与  $E_0'$  振幅比较小,其能量精确确定十分困难,误差较大,由图 5 可以看出,  $E_1$  跃迁随组分  $x$  的增大,其能量向低能方向移动. 由于在  $E_1$  附近介电函数二阶导数有非常尖锐的结构,所以即使当组分  $x$  较小时,仍可以十分精确的确定  $E_1$  的大小. 进一步模拟计算分析表明,表面氧化层主要影响  $\theta_1$  和  $A_1$ ,而对  $E_1$  和  $\Gamma_1$  的影响可以忽略不计,因此可以用下式确定  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金外延层 Ge 的组分  $x$ :

$$x = 5.66 - (4.896 + 8E_1)^{1/2} \tag{8}$$

表 3 实验得到的各样品的组分及厚度

样品号	Ge 的组分 $x$	外延层的厚度/nm
JP20	0.567(0.59)	119(110)
JP21	0.567(0.58)	76.8(80)
JP23	0.582(0.60)	43(50)
JP25	0.530(0.52)	221(230)

括号中的数值为 RBS 的测量结果

根据上式和实验测量得到的  $E_1$  临界点的能量(如表 1 所示)计算得到的各个样品的组分如表 3 所示. 为了比较,表中同时列出了同一样品背散射技术的测量结果. 比较可以看出,二者之间的差别不大.

由于本文样品 Ge 组分  $x$  变化较窄,因此我们应用上述方法分析了文献[7]所给的 Ge 组分  $x$

为 0.135 和 0.195 的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金的介电函数谱(其组分是由 X 射线双晶衍射法测量的),以检验本文方法对其它 Ge 组分样品分析的准确性和有效性. 表 4 给出了分析的结果. 可以看出其结果与 X 射线双晶衍射法(DCXR)测量结果是一致的. 因此,椭圆光谱法完全可以做为一种有效的测量方法,在较大的范围内精确的

表 4 本文方法与 DCXR 法分析结果的比较

样品号	$E_1/\text{eV}$	Ge 的组分 $x$	
		本文方法	DCXR
1	$3.1 \pm 0.01$	0.21	0.195
2	$3.2 \pm 0.01$	0.137	0.135

确定  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金材料的 Ge 组分  $x$ . 利用(8)式确定组分,主要的误差来源于  $E_1$ .

对于应变  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金,应变将影响材料的能带结构从而影响带间跃迁过程. 我们根

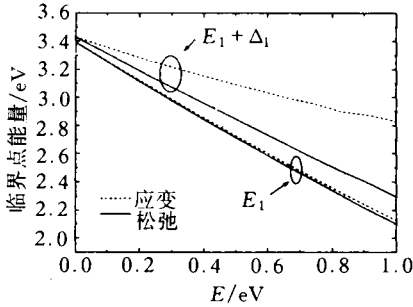


图 6 应变对临界点能量的影响

据形变势理论<sup>[8]</sup>计算了应变对  $E_1$  和  $E_1 + \Delta_1$  的跃迁的影响,结果如图 6 所示. 可以看出,应变对  $E_1$  的影响可忽略不计,它主要影响  $E_1 + \Delta_1$  跃迁, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金材料的光子反射(PR 光谱)研究也得到同样的结果<sup>[9]</sup>,所以(8)式也适用于分析应变  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金材料.

## 5 结论

本文测量并分析了不同组分的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  外延层的椭圆光谱,得到了能量范围为 2.0~5.0eV 内的主要临界点的能量与 Ge 组分  $x$  的关系,给出用椭圆光谱分析  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金厚度和 Ge 的组分的方法,并与 RBS 及 DCXRD 测量结果进行了比较. 我们的研究表明椭圆光谱测量可以同时确定  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金的厚度和组分. 椭圆测量的优点在于测量简单,对样品的非破坏性和其测量的高灵敏度,在测量结构参数的同时,还可以得到材料的光学特性.

## 参 考 文 献

- [1] R. M. A. Azzam, N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light*, North-Holland Publishing Company, 1977, 3.
- [2] P. Lautenschlager, M. Garriga, L. Vina and M. Cardon, *Phys. Rev.*, 1987, **B36**: 4821.
- [3] 张瑞智, 罗晋生, 陈敏麒, *光学学报*, 1989, **9**: 75.
- [4] F. L. McCrackin, E. Passaglia, R. R. Strombege *et al.*, *J. Res. National Bureau Stand.*, 1963, **67A**: 363.
- [5] D. E. Aspnes, A. A. Studna, *Phys. Rev.*, 1983, **B27**: 985.
- [6] J. Humlicek, M. Garriga, M. I. Alonso, M. Cardon, *J. Appl. Phys.*, 1990, **68**: 5925.
- [7] C. Pickering, R. T. Carline, *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**: 4642.
- [8] F. H. Pollak, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by P. Pearsall, Academic, London, 1990, **32**: 17.
- [9] Yichun Yin, Fred H. Pollak, *Thin Solid Films*, 1992, **222**: 85.

# Spectroscopic Ellipsometric Characterization of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Epilayer Structure Parameters

Zhang Ruizhi and Luo Jinsheng

(Department of Microelectronic Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

Received 17 June 1996, revised manuscript received 7 September 1996

**Abstract** Ellipsometric spectra of a series of  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  epilayers have been measured and analyzed in the 2.0~5.0eV photon-energy range. The main critical point parameters as the function of  $x$  are obtained. The methods for determination of the layer thickness and composition of the  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  epilayer are presented.

**PACC:** 6865, 7360F, 0760F