

用反射光谱鉴定蓝宝石(或尖晶石) 衬底上外延硅膜*

半导体光学性质小组**
(中国科学院半导体研究所)

提 要

本文提出了一种鉴定蓝宝石(或尖晶石)衬底上外延硅膜质量的方法。用一个 F 因子表征硅膜特性。该因子以吸收系数为表式并从反射光谱算出。对实验结果进行了讨论。

蓝宝石(或尖晶石)衬底上外延硅薄膜的结晶质量对本征吸收边附近的吸收系数的影响较大。因此,近年来广泛采用在该波段范围内定义的、与吸收系数有关的 F 因子来表征蓝宝石(或尖晶石)衬底上外延硅膜的质量。 F 因子的定义是:

$$F = (\alpha_{22} - \alpha_{16}) \times \alpha_{17} \quad (\text{cm}^{-2})$$

其中 α_{22} , α_{16} , α_{17} 分别为在波数 22×10^3 , 16×10^3 , $17 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ 时外延硅膜的吸收系数^[1]。如为了表征外延硅膜质量,把以蓝宝石为衬底生长的硅膜的 F 因子限定为 $120 \sim 140 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$, 把以尖晶石为衬底生长的硅膜的 F 因子限定为 $150 \sim 170 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$ ^[2]。

我们测量样品的反射光谱来计算外延硅膜厚度 d , 折射率 n , 吸收系数 α 和 F 因子。因为用透射光谱很难消除衬底的影响,而在反射测量中,由于多次反射,在反射谱中带有较强的外延硅膜吸收的信息。

一、原 理

设硅膜均匀、两面平行且各向同性,光线在硅膜中以指数规律衰减, $e^{-\alpha x}$. x 是光线在硅膜中穿过的距离。在自然光垂直入射条件下,界面费涅耳系数是:

$$\begin{aligned}\bar{r}_{01} &= \frac{n_0 - \bar{n}_1}{n_0 + \bar{n}_1}, & \bar{r}_{10} &= \frac{\bar{n}_1 - n_0}{\bar{n}_1 + n_0}, & \bar{r}_{12} &= \frac{\bar{n}_1 - \bar{n}_2}{\bar{n}_1 + \bar{n}_2}, \\ \bar{t}_{01} &= \frac{2n_0}{n_0 + \bar{n}_1}, & \bar{t}_{10} &= \frac{2\bar{n}_1}{n_0 + \bar{n}_1}, & \bar{t}_{12} &= \frac{2\bar{n}_1}{\bar{n}_1 + \bar{n}_2}.\end{aligned}$$

此处 \bar{n}_i 是复数折射率, \bar{r}_{ij} 是反射系数, \bar{t}_{ij} 是透射系数。光线在样品表面和界面反射情况见图 1。运用复数费涅耳系数,薄膜的复数振幅反射比是

$$\bar{r} = \bar{r}_{01} + \bar{t}_{01}\bar{r}_{12}\bar{t}_{10}e^{-\alpha d - 2i\delta} + \bar{t}_{01}\bar{r}_{12}^2\bar{t}_{10}\bar{t}_{10}e^{-2\alpha d - 4i\delta} + \dots$$

* 1980年1月29日收到。

** 本文由张泽华执笔。

$$\begin{aligned}
 &= \bar{r}_{01} + \bar{r}_{01}\bar{r}_{10}\bar{r}_{12}e^{-\alpha d-2i\delta}[1 + \bar{r}_{12}\bar{r}_{10}e^{-\alpha d-2i\delta} + \dots + (\bar{r}_{12}\bar{r}_{10}e^{-\alpha d-2i\delta})^n] \\
 &= \bar{r}_{01} + \frac{\bar{r}_{01}\bar{r}_{10}\bar{r}_{12}e^{-\alpha d-2i\delta}}{1 - \bar{r}_{12}\bar{r}_{10}e^{-\alpha d-2i\delta}}
 \end{aligned} \quad (1)$$

反射率 R 为

$$R = |\bar{r}|^2 = \frac{r_{01}^2 e^{\alpha d} + r_{12}^2 e^{-\alpha d} + 2r_{01}r_{12} \cos 2\delta}{e^{\alpha d} + r_{01}^2 r_{12}^2 e^{-\alpha d} + 2r_{01}r_{12} \cos 2\delta}. \quad (2)$$

式中 r_{ij} 是费涅耳系数的实数部分, $\delta = 2\pi n_1 d / \lambda$, 代表光线由膜的一面到另一面的相位差, d 是膜厚。

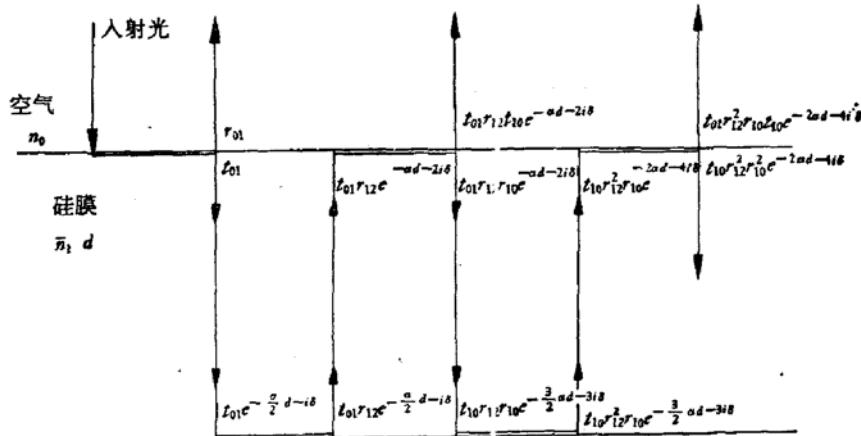


图1 垂直入射时硅膜对光线的吸收与反射。为简单清楚, 将多次反射作横向展开

若用 $Q = R_{\max}/R_{\min}$ 代替反射率 R , 此处 R_{\max} 和 R_{\min} 是同一波长干涉条纹包络线上的极大值和极小值(见图2). 则方程(2)的一个有物理意义的解是^[3]

$$\begin{aligned}
 e^{\alpha d} &= \frac{r_{01}r_{12} - r_{12}/r_{01}}{Q - 1} \left(\frac{Q + 1}{2} + \sqrt{Q} \right) \\
 &\quad + \sqrt{\left(\frac{r_{01}r_{12} - r_{12}/r_{01}}{Q - 1} \right)^2 \left(\frac{Q + 1}{2} + \sqrt{Q} \right)^2 + r_{12}^2}
 \end{aligned} \quad (3)$$

由(3)式可知, 只要测得膜厚和折射率, α 即可求得。

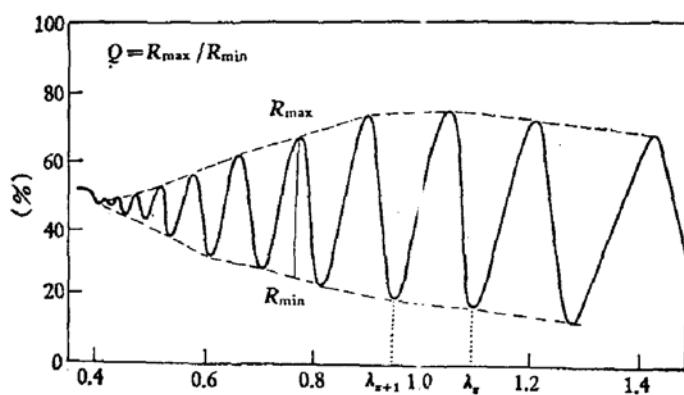


图2 蓝宝石衬底上外延硅膜的反射光谱

二、方 法

我们用 MPS-5000 型分光光度计和 H-800 型红外光谱仪测量了蓝宝石(或尖晶石)衬底上外延硅样品在 0.34~15 微米波长的反射光谱。入射角分别为 45° 和 30°。然后用此反射光谱分别计算膜厚 d (cm), 折射率 n , 吸收系数 $\alpha(\text{cm}^{-1})$ 和 F 因子(cm^{-2})。

1. 计算膜厚

先计算干涉条纹的级数 Z 。在斜入射情况下(图 3), 反射光 1 和 2 的光程差为 $\Delta = 2dn_1 \cos \phi_2$, 若 Z 代表在波长 λ_z 时产生的干涉条纹极值的级数, 当 n_1 为常数时,

$$\Delta = 2dn_1 \cos \phi_2 = z\lambda_z = (z + 1)\lambda_{z+1},$$

$$z = \frac{\lambda_{z+1}}{\lambda_z - \lambda_{z+1}}.$$

z 取最接近的整数或半整数。

由于 $r_{01} < 0$, $r_{12} > 0$, 所以方程(2)在 $\cos 2\delta = +1$ 时, R 有极小值; 当 $\cos 2\delta = -1$ 时, R 有极大值。而 $\delta = z\pi$ 时 ($z = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$), $\cos 2\delta = \pm 1$, 即当 z 为半整数时, R 有极大值; 当 z 为整数时, R 有极小值。此处 z 即是干涉条纹之级数。

图 3 斜入射时光线在硅膜表面和介面的反射。 ϕ_1 为人射角, ϕ_2 为折射角

因为在波长大于 2 微米时, 硅膜的折射率随波长变化不大, 可近似看作常数, 所以我们用大于 2 微米波长的反射光谱计算出各干涉条纹的级数, 并用红外干涉法计算外延硅膜的厚度。

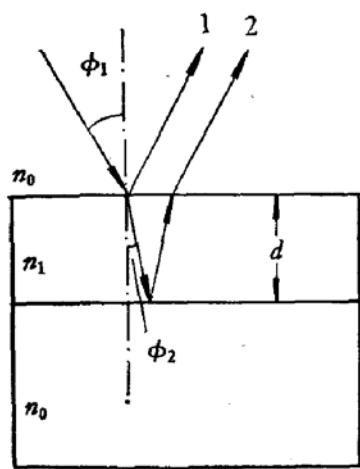
2. 计算折射率

垂直入射时, 光线在硅膜两面的相位差 $\delta = 2\pi n_1 d / \lambda$, 在各极值点 $\delta = 2\pi n_1 d / \lambda_z = z\pi$, 所以在各极值波长时, 硅膜的折射率为 $n_1 = \frac{z\lambda_z}{2d}$ 。对于斜入射, 用公式 $n'_1 = \sqrt{n_1^2 - \sin^2 \phi_1}$ 对 n_1 作修正, ϕ_1 为人射角。用计算出的 n'_1 值作出 $n'_1 \sim \lambda$ 曲线(见图 4)。

3. 计算吸收系数和 F 因子

用光谱图中的干涉条纹极值包络线计算各波长的 Q 值, 再取相应波长的折射率和硅膜厚度, 用公式(3)计算出各波长的吸收系数 α , 作出 $\alpha \sim \lambda$ 曲线(见图 5)。

最后, 取波数为 16×10^3 , 17×10^3 , $22 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ 时的吸收系数, 根据公式 $F = (\alpha_{17} - \alpha_{16}) \times \alpha_{16}$ 计算 F 因子。



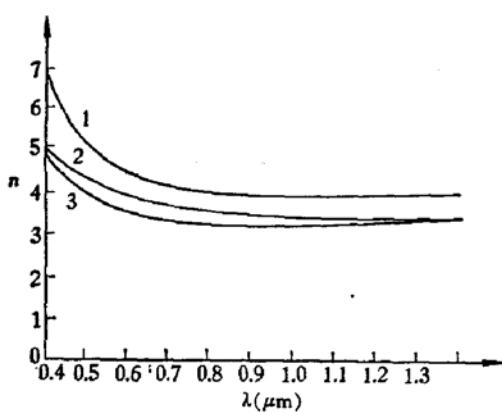


图4 不同F因子样品的折射率比较

1.747-3-1 $F = 987 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$,
2.747-4-1 $F = 303 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$,
3.704-1-3 $F = 128 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$

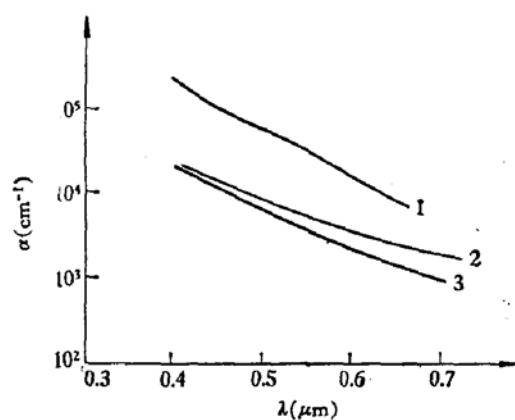


图5 不同F因子样品的吸收系数比较

1.747-3-1 $F = 987 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$,
2.710-2-2 $F = 179 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$,
3.704-1-3 $F = 128 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$

三、结 果

测量结果见表1、表2。

表 1

样品编号	衬底材料	样品情况	$F(\times 10^6 \text{cm}^{-2})$
710-2-2	蓝宝石	表面有白雾	179
707-2-3	蓝宝石	舟中间生长	154
707-2-5	蓝宝石	舟边上生长	175
704-1-3	蓝宝石	新舟生长	128
706-1-3	蓝宝石		156
709-3-1	蓝宝石	960° 生长	129
727-1-2	蓝宝石		126
721-2-1	蓝宝石	表面有白雾花纹	308
727-1-3	蓝宝石	表面有白雾	258

表 2

样品编号	衬底材料	样品情况	$F(\times 10^6 \text{cm}^{-2})$
680-2-2	尖晶石		173
680-2-4	尖晶石		154
709-1-3	尖晶石		174
722-1-1	尖晶石	表面有白雾	392
729-1-3	尖晶石		162
729-1-1	尖晶石		242

根据测试结果,我所研制的部分样品的F因子,以蓝宝石为衬底生长的硅膜已达到 $120 \sim 140 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$,以尖晶石为衬底生长的硅膜已达到 $150 \sim 170 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$ 。

四、讨 论

1. 从图4、图5可以看出, F 因子小的, 吸收系数和折射率都小, 而吸收系数和折射率的大小是由硅膜的结晶质量决定的, 因此, 用 F 因子的大小完全可以鉴定硅膜的结晶质量。

2. 用极值之商计算比用极值之差计算优越。因为我们所使用的光谱仪器无法测得绝对反射率, 用极值之商 Q 计算可以避免反射率测不准而引起的误差。

3. 从表3看出, 生长温度对硅膜的 F 因子有很大影响。温度过低, 虽然表面乌黑光亮, 但可能结晶质量不好, 甚至会生长出多晶或无定形硅膜; 温度过高, 又容易引起严重的自掺杂, 两者都使 F 因子增大。因此, 通过测量不同生长温度样品的 F 因子, 可以选择出最佳生长温度。

表3 F 因子与生长温度的关系

样品编号	衬底材料	生长温度(°C)	$F(\times 10^6 \text{cm}^{-1})$
697-1-1	蓝宝石	960	133
697-2-1	蓝宝石	960	139
695-2-1	蓝宝石	1010	115
695-3-1	蓝宝石	1030	134
695-4-1	蓝宝石	1050	168

4. 本方法是非破坏性的无接触测量, 且不受表面空间电荷区存在的影响, 因而比电学方法测量优越。

5. 表面有白雾的样品的 F 因子普遍较大, 达不到质量指标。产生白雾的原因较复杂, 与衬底质量、抛光情况、生长条件等因素有关。

6. 如图6所示, 样品表面沾污和氧化层的存在严重影响反射率测量。因此, 测量前应清洗样品, 保证清洁。

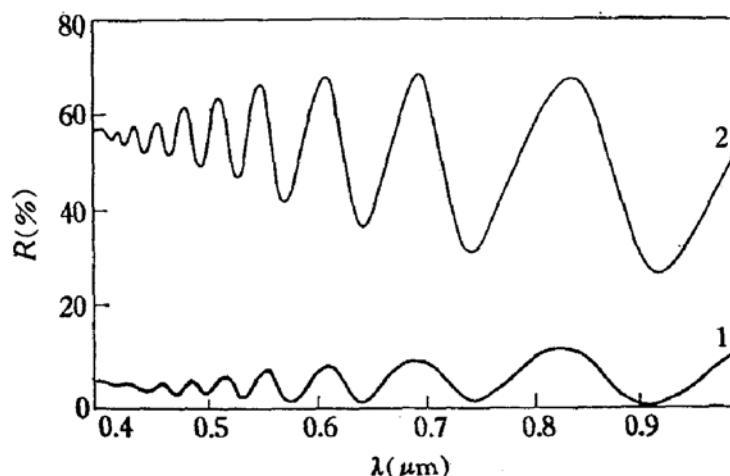


图6 表面沾污对反射率的影响
样品 727-1-2 1. 清洗前 2. 清洗后

本工作得到许振嘉、江德生、郁元桓等同志指导和帮助,特此致谢。

参 考 文 献

- [1] Kühl, Ch. et al., Proceeding of the 7th Conference on Solid State Devices (1975).
- [2] Drumiuski, M. et al., *Sieman Forschungs und Entwicklungsberichte* 5, 139 (1976).
- [3] Kühl, Ch. et al., *Journal of the Electrochemical Society*, 121, 1496 (1974).

ASSESSMENT OF EPITAXIAL SILICON FILM ON SAPPHIRE (OR SPINEL) BY REFLECTION SPECTRUM

Research Group for Optical Properties of Semiconductors*

(Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences)

Abstract

A method for the assessment of epitaxial silicon film on sapphire (or spinel) is described. The silicon film is characterized by an F factor calculated from reflection spectrum and expressed in terms of absorption coefficients. The results of the experiment are also discussed.

*This paper is written by Zhang Zehua.