

利用多项式拟合规范化方法实现范德堡函数的高精度反演*

王 静 孙以材 刘新福

(河北工业大学信息学院微电子所, 天津 300130)

摘要: 薄层电阻是 IC 生产过程中在线工艺监控测试的项目之一, 其中经常使用范德堡法和 Rymaszewski 法作为普通四探针法的补充方法。应用这两种测试方法时必须要用到范德堡函数, 而已知的范德堡公式是隐函数, 只见报道其显函数的近似表达式, 精度低, 未见到有精确的多项式拟合公式。为此, 本文利用非线性反演和规范化拟合的办法给出了范德堡函数的多项式形式, 其精度可达到 $\pm 0.19\%$, 并给出该公式在实际薄层电阻测试中的应用。

关键词: 范德堡函数; 非线性反演; 规范化多项式拟合

PACC: 0750; 0270; 0660

中图分类号: TN307

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2003)08-0817-05

1 引言

集成电路的生产要经过许多工艺步骤, 任何一步的错误, 都可能导致器件失效, 因此在整个 IC 生产过程中测试越来越重要, 其中薄层电阻测试是一种常见的在线工艺监控测试项目, 用于判定杂质浓度及其分布的均匀度等。范德堡法^[1]和 Rymaszewski 法^[2,3]经常被作为普通直线四探针法的补充方法。应用这些方法的共同点是必须用范德堡函数 f , 如利用 Rymaszewski 法测定薄层电阻时,

$$R_s = \frac{\pi}{\ln 2} \left(\frac{V_1 + V_2}{I} \right) f \left(\frac{V_2}{V_1} \right) \quad (1)$$

用改进的范德堡法^[4~6]测量薄层电阻时,

$$R_s = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^4 \frac{\pi}{2 \ln 2} \left(\frac{V_n + V_{n+1}}{I} \right) f \left(\frac{V_{n+1}}{V_n} \right) \quad (2)$$

其中的范德堡函数为:

$$\frac{\frac{V_{n+1}}{V_n} - 1}{\frac{V_{n+1}}{V_n} + 1} = \frac{\operatorname{arcosh} \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{\ln 2}{f} \right) \right]}{\ln 2} \quad (3)$$

可以看出, f 与两次测量的探针间电压比 $\frac{V_{n+1}}{V_n}$ 直接

相关, 是一个由 f 值正演得到 $\frac{V_{n+1}}{V_n}$ 的非线性函数, 而实际测量时只能测得 $\frac{V_{n+1}}{V_n}$, 为此必须解决由 $\frac{V_{n+1}}{V_n}$ 到 f 的高精度反演问题。

文献[1]中曾涉及范德堡公式的反演, 但它的应用范围很小, 只有在 V_{n+1} 与 V_n 近似相等时才和 ASTM 标准^[7]中的范德堡函数值较为接近, 但仍有一定偏差。且不满足这个条件时, 两者偏离甚远。

我们首先解决由 $\frac{V_{n+1}}{V_n}$ 到 f 的局部点反演问题, 并利用我们提出的非线性函数的规范化拟合方法实现全局反演, 得到一条与 ASTM 标准中^[7]基本一致的曲线。这为范德堡法和 Rymaszewski 法测量薄层电阻时计算 f 函数带来极大的方便。

2 范德堡函数的局域反演和全局反演

规范化多项式拟合方法可以把任意非线性函数表示成(4)式。

$$f = f_0 + \alpha_1 t + \alpha_2 t^2 + \alpha_3 t^3 + \alpha_4 t^4 + \alpha_5 t^5 + \varepsilon \quad (4)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 69272001, 69672015), 河北省自然科学基金(批准号: 602076) 和天津市自然科学基金(批准号: 013602011) 资助项目

其中 ε 是一小量.

但由于范德堡函数 f 的定义域起始值为 $t=1$, 不是 $t=0$, 所以我们取 f_0 为 $t=1$ 时的值, 由(3)式可知 $f_0=1$, 此时(4)式变为:

$$\begin{aligned} f &= f_0 + \alpha_1(t-1) + \alpha_2(t-1)^2 + \alpha_3(t-1)^3 \\ &\quad + \alpha_4(t-1)^4 + \alpha_5(t-1)^5 + \varepsilon \\ &= f_0 + \alpha_1x + \alpha_2x^2 + \alpha_3x^3 + \alpha_4x^4 + \alpha_5x^5 + \varepsilon \end{aligned}$$

其中 $t = \frac{V_{n+1}}{V_n}$, $x = t-1$ 可取全局值, 即 $x \in [0, 10]$. 而实现我们所提出的全局反演的前提是必须知道横坐标的等分点(如 $x=2, 4, 6, 8, 10$)上对应的 f 的真值或者接近值, 即首先必须实现等分点上的局部反演.

如何进行局部反演呢? 这一过程可用图1来表示. 我们选取其中一点说明局部反演的实现. 设与 $x=2$ 相对应的范德堡函数的真值为 f_2 . 按先验知识(ASTM^[7]上有此曲线), f_2 大致在 0.98 和 0.95 之间. 于是便可以确定 f_2 的初始搜索空间, 如图1中点 a 的外圈所示. 对横坐标的等分点也提出严格的要求. 例如, 规定 2 ± 0.00001 才算精确, 相应地有 $f_2 \pm \Delta f_2$, $\Delta f_2 = \tan \alpha_2 \Delta(x) = \tan \alpha_2 (\pm 0.00001)$, 其中 $\tan \alpha_2$ 为 $x=2$ 处的斜率. 据先验知识^[7], $\tan \alpha_2 \approx -0.5714$. 因此, 可以规定 $\Delta f = 0.000001 < \Delta f_2$ 为

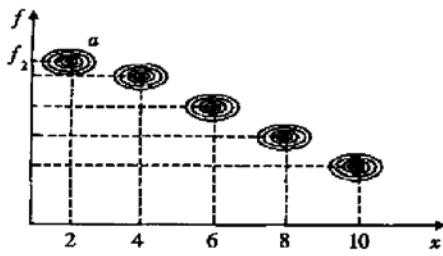


图1 在等分点上实现局域反演的示意图

Fig. 1 Sketch diagram to realize local reversal development on some equidistance points

正演操作时 f 的搜索步长. 图1中点 a 的黑点便是在局域搜索空间中搜索时最终所要达到的目标. 即 $f = f_2 \pm 0.000001$, $x = 2 \pm 0.00001$. 若采用系统顺序搜索和蒙特卡洛随机搜索, 需 3 万次给定 f 才能命中目标, 这是不可取的. 我们的方法是初始搜索空间($f_2=0.98 \sim 0.95$)采用 $\Delta f=0.01$ 步长进行正演搜索, 然后确定 $x=2 \pm 0.00001$ 所对应的 f_2 的范围, 即图1中点 a 的外数第二个圈. 接着采用 $\Delta f=0.001$ 步长进行正演搜索, 再确定 $x=2 \pm 0.00001$

所对应的 f_2 的范围, 即图1中点 a 的外数第三个圈. 如此进行下去直至达到目标黑圈为止. 这样搜索次数为 $\sum \frac{\text{搜索范围}}{\text{步长}} = \frac{0.98-0.95}{10^{-2}} + \frac{10^{-2}}{10^{-3}} + \frac{10^{-3}}{10^{-4}} + \frac{10^{-4}}{10^{-5}} + \frac{10^{-5}}{10^{-6}} = 43$ 次, 也就是说, 不到 100 次正演操作搜索便可以得到 $f_2 \pm 1 \times 10^{-6}$ 的接近值. 对于全局上的 10 个分点, 进行 1000 次正演操作便可完成全部局域操作. 表1所列出的为我们得到的部分局域反演搜索结果.

表1 范德堡函数部分局域反演搜索结果

Table 1 Some results of the local reversal development of Van der Pauw function

x	2 ± 0.00001	4 ± 0.00001	6 ± 0.00001	8 ± 0.00001	10 ± 0.00001
f	0.96028	0.860292	0.789283	0.738118	0.699259
$f-f_0$	-0.03972	-0.139708	-0.210717	-0.261882	-0.300741

通过上述反演过程得到范德堡曲线上的一系列 $\frac{V_{n+1}}{V_n}$ 的等分点上的 f 值以后, 便可以用非线性函数标准化拟合的方法实现全局反演.

将(5)式移项后得:

$$\begin{aligned} f-f_0 &= \alpha_1x + \alpha_2x^2 + \alpha_3x^3 + \alpha_4x^4 + \alpha_5x^5 + \varepsilon \quad (6) \\ &= \alpha_1x^1 \frac{x}{x_1} + \alpha_2x^2 \frac{x^2}{x_1^2} + \alpha_3x^3 \frac{x^3}{x_1^3} + \alpha_4x^4 \frac{x^4}{x_1^4} \\ &\quad + \alpha_5x^5 \frac{x^5}{x_1^5} + \varepsilon \\ &= \alpha_1x_1n + \alpha_2x_1^2n^2 + \alpha_3x_1^3n^3 + \alpha_4x_1^4n^4 + \\ &\quad \alpha_5x_1^5n^5 + \varepsilon \end{aligned}$$

$$f-f_0 = an + bn^2 + cn^3 + dn^4 + en^5 + \varepsilon \quad (7)$$

其中 $n = \frac{x}{x_1}$; $a = \alpha_1x_1$; $b = \alpha_2x_1^2$; $c = \alpha_3x_1^3$; $d = \alpha_4x_1^4$; $e = \alpha_5x_1^5$.

这样便可把范德堡非线性函数转化为一个标准的规范化多项式(7).

取 5 次局域反演值 $(x_1, f_1), (x_2, f_2), (x_3, f_3), (x_4, f_4), (x_5, f_5)$, 且 $x_2=2x_1, x_3=3x_1, x_4=4x_1, x_5=5x_1, x_1$ 为横坐标的比例缩尺, 此时 $n=1, 2, 3, 4, 5$, (6)式的向量形式为

$$\begin{vmatrix} f_1-f_0 \\ f_2-f_0 \\ f_3-f_0 \\ f_4-f_0 \\ f_5-f_0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2^2 & 2^3 & 2^4 & 2^5 \\ 3 & 3^2 & 3^3 & 3^4 & 3^5 \\ 4 & 4^2 & 4^3 & 4^4 & 4^5 \\ 5 & 5^2 & 5^3 & 5^4 & 5^5 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{vmatrix} = (n_{ij}^j)_{5 \times 5} \begin{vmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{vmatrix}$$

其中 $(n_{ij}^j)_{5 \times 5}$ 是一规范化的矩阵.

于是可以得到下式:

$$\begin{aligned} & \begin{array}{l|l|l} a & \Delta f_1 & -0.03972 \\ b & \Delta f_2 & -0.139708 \\ c = (n_{ij}^j)^{-1}_{5 \times 5} & \Delta f_3 = (n_{ij}^j)^{-1}_{5 \times 5} & -0.210717 \\ d & \Delta f_4 & -0.261882 \\ e & \Delta f_5 & -0.300741 \end{array} \\ & = \begin{bmatrix} 0.06475430000000 \\ -0.16150716666667 \\ 0.06863054166667 \\ -0.01243083333333 \\ 0.00083315833333 \end{bmatrix} \quad (8) \end{aligned}$$

其中 $(n_{ij}^j)^{-1}_{5 \times 5}$ 是 $(n_{ij}^j)_{5 \times 5}$ 的逆矩阵, 两者满足正交关系; Δf_i 由前面局域反演求得(见表 1).

又因为

$$\alpha_1 = a/x_1, \alpha_2 = b/x_1^2, \alpha_3 = c/x_1^3, \alpha_4 = d/x_1^4, \alpha_5 = e/x_1^5$$

于是得到(6)式的各项系数:

$$\begin{array}{l|l} \alpha_1 = \begin{bmatrix} a \times 2^{-1} \\ b \times 2^{-2} \\ c \times 2^{-3} \\ d \times 2^{-4} \\ e \times 2^{-5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.03237715000000 \\ -0.04037679166667 \\ 0.00857881770833 \\ -0.00077692708333 \\ 0.00002603619792 \end{bmatrix} \end{array}$$

所以, 范德堡函数可以表示为

$$\begin{aligned} f = & 1 + 0.03237715000000x - 0.04037679166667x^2 \\ & + 0.00857881770833x^3 - 0.00077692708333x^4 \\ & + 0.00002603619792x^5 + 0.00017171 \quad (9) \end{aligned}$$

为应用方便起见, 将(9)式简化为:

$$\begin{aligned} f = & 1 + 0.03237715x - 0.04037679x^2 \\ & + 0.00857882x^3 - 0.00077693x^4 \\ & + 0.00002604x^5 + 0.00017171 \quad (10) \end{aligned}$$

其中 $x = V_{n+1}/V_n$

(8)式的曲线如图 2 所示, 与 ASTM^[7] 中的曲线十

分吻合.

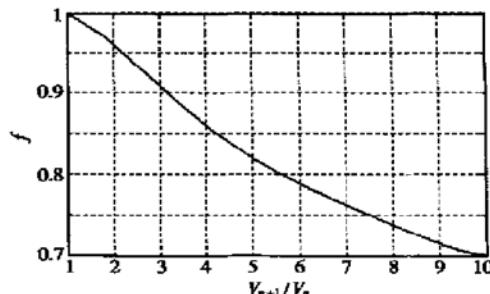


图 2 范德堡函数全局反演的多项式拟合曲线

Fig. 2 Polynomial match curve of Van der Pauw function with global reversal development

3 范德堡函数非线性多项式在硅单晶圆片测试中的应用

因为只要采用范德堡法和 Rymaszewski 法测量薄层电阻, 就必须用到范德堡函数, 所以它的精度直接影响着最终的测量结果. 我们把其高精度拟合多项式编入相应的计算程序中, 可得到更为精确的薄层电阻值. 在测量过程中四根探针分别需四次轮换供给恒流和测量电压, 即每一次让相邻两根探针如 1.4 经样品流过恒流, 从另两根探针 2.3 便测量出与样品接触点之间的电势差, 即范德堡公式中的 V_x .

测量过程中我们采用单片机控制, 用计算机处理数据. 单片机部分选用 3 片 4052 做成模拟通道, 对其控制端进行操作以选通不同的通道, 来完成四次轮换. 然后将输出端的微弱电压信号放大, 接入 A/D 转换器 7135 进行模数转换, 7135 输出端即为公式(9)中所需的 V_x , 通过串行口送给计算机, 用 c51 语言将拟合的多项式公式编到主程序中, 最后在计算机相应界面上显示测量结果.

表 2 对同一样品采取两种测试方法的结果

Table 2 Measurement results of a same sample by using two methods

测量次数	范德堡法(测量电流 160μA)				R_s/Ω	直线四探针法	
	V_1	V_2	V_3	V_4		不同测量区域	R/Ω
1	21.357618	37.615349	12.886143	29.638693	686.75616	a	662.5
2	23.086053	29.297726	13.610287	32.017804	673.61285	b	660.8
3	20.133531	36.676559	11.043522	27.373889	639.26971	c	657.5
4	22.538717	35.686349	11.746589	29.163549	671.17456	d	695.2
5	21.656397	34.273636	12.563481	30.164924	670.39606	e	682.9
6	20.686512	35.779531	11.945619	28.435697	654.54504	f	664.7
薄层电阻平均值/ Ω				665.95906			670.6

测试所用样品为 n-Si 片, 直径为 40mm, 厚度为 400μm, 表面经金刚砂研磨以减小少子注入。表 2 中所给出的是为用直线四探针法和可移动倾斜四探针范德堡法的测量结果, 前者不涉及范德堡函数但需经过厚度和边缘效应修正^[8], 表中所列数据已经过几何效应修正。用范德堡法测量时, 四根探针分别置于样品的正面边缘附近, 6 次测量中探针接触位置都做了改变。二者所测样品的薄层电阻基本一致。

4 范德堡函数非线性拟合多项式的误差分析

在函数进行局域反演和全局反演拟合的整个过程中不可避免地存在误差, 对高精度反演误差分析就显得尤为重要了。

首先讨论拟合公式(9)的误差情况:

在全局 $f \in [0.7, 1]$ 区间取步长为 0.001, 记为 f_i , 其中 $i = 1, 2, 3, \dots, 300$. 根据公式(3)可以得到一组正演结果, 分别用 x_i 表示, 然后将 x_i 代入公式

$$\begin{aligned} f &\approx 1 - \frac{\ln 2}{2} \left[\frac{R_{AB, CD} - R_{BC, DA}}{R_{AB, CD} + R_{BC, DA}} \right]^2 - \left[\frac{R_{AB, CD} - R_{BC, DA}}{R_{AB, CD} + R_{BC, DA}} \right]^4 \left[\frac{(\ln 2)^2}{4} - \frac{(\ln 2)^3}{12} \right] \\ &= 1 - \frac{\ln 2}{2} \left[\frac{R_{AB, CD}/R_{BC, DA} - 1}{R_{AB, CD}/R_{BC, DA} + 1} \right]^2 - \left[\frac{R_{AB, CD}/R_{BC, DA} - 1}{R_{AB, CD}/R_{BC, DA} + 1} \right]^4 \left[\frac{(\ln 2)^2}{4} - \frac{(\ln 2)^3}{12} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

由于采用恒流源, $R_{AB, CD}/R_{BC, DA}$ 等价于式(10)中 x . 但它只有在 $R_{AB, CD}$ 和 $R_{BC, DA}$ 近似相等时才能应用^[1], 而(10)式中 x 只要在 $[1, 10]$ 间均可应用。

5 结论

本文利用非线性反演和规范化拟合的办法得出的范德堡函数的多项式形式, 将它由隐函数表示为显函数, 经过严格的误差分析, 并在实际的薄层电阻测量中应用, 发现它的精度在误差允许范围内。这为使用范德堡法和 Rymaszewski 法测量薄层电阻带来很大方便。

参考文献

- [1] Van der Pauw L J. Philips Research Reports, 1958, 13: 1
- [2] Rymaszewski R. Electron Lett, 1967, 3: 57
- [3] Sun Yicai, Shi Junsheng. A study of the valid conditions for applying Rymaszewski formulas to rectangular samples. Acta Phys-

(9) 即可得到另一组反演结果(f_{ri})。实际上, 我们可以看到, x_i 为由原始范德堡函数正演得到的一组精确值, f_{ri} 为拟合公式得到的一组反演值, 讨论 f_{ri} 偏离 f_i 的程度就可以代表拟合公式(9)的精确度。正反演结果的差用 $\Delta f_i = f_{ri} - f_i$ 表示, 相对误差为 $\frac{\Delta f_i}{f_i}$, 其中 $i = 1, 2, 3, \dots, 300$.

最大偏差 $\text{Max } \frac{\Delta f_i}{f_i} = 0.00416$, 相对标准偏差

$$o_1 = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta f_i}{f_i} \right)^2} = 0.001900 \approx 0.19\%, \text{ 其中 } n = 300, i = 1, 2, 3, \dots, 300.$$

对简化的拟合公式(10)做同样的分析, 误差结果为:

最大偏差 $\text{Max } \frac{\Delta f_i}{f_i} = 0.00402$, 相对标准偏差

$$o_2 = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta f_i}{f_i} \right)^2} = 0.001867 \approx 0.187\%, \text{ 其中 } n = 300, i = 1, 2, 3, \dots, 300.$$

文献[1]中提到的范德堡近似公式为

ca Sinica, 1995, 44(12): 1869 (in Chinese) [孙以材, 石俊生. 在矩形样品中 Rymaszewski 公式的适用条件的分析. 物理学报, 1995, 44(12): 1869]

- [4] Sun Yicai, Zhang Linzai. Measurement of sheet resistance for microareas by using a modified Van der Pauw's method. Acta Physica Sinica, 1994, 43(4): 532 (in Chinese) [孙以材, 张林在. 用改进的 Van der Pauw 法测定方形微区的方块电阻. 物理学报, 1994, 43(4): 530]
- [5] Meng Qinghao, Sun Xinyu, Sun Yicai, et al. Mapping technique for measurement of sheet resistance distribution. Chinese Journal of Semiconductors, 1997, 18(9): 701 (in Chinese) [孟庆浩, 孙新宇, 孙以材, 等. 薄层电阻测试 Mapping 技术. 半导体学报, 1997, 18(9): 710]
- [6] Sun Yicai, Shi Junsheng, Meng Qinghao. Measurement of sheet resistance of cross microareas using a modified Van der Pauw method. Semicond Sci Technol, 1996, 11: 805
- [7] ASTM F76-68, 1971 Annual book, part 8, 1971: 652
- [8] Sun Yicai, Fan Zhaoshu, Sun Xinyu, et al. Relationship between geometric effect correction on resistivity measurement methods. Semicond Technol, 2000, 25(5): 38 (in Chinese) [孙以材, 范兆书, 孙新宇, 等. 电阻率两种测试方法间几何效应修正的相关性. 半导体技术, 2000, 25(5): 38]

Realization of Van der Pauw Function's Reversal Development with High Accuracy Using a Normalized Method of Polynomial Match^{*}

Wang Jing, Sun Yicai and Liu Xinfu

(Microelectronics Institute, Information College, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

Abstract: The sheet resistance is one of the testing items for monitoring IC production process, in which the Van der Pauw and Ry-maszewski methods are usually taken as the supplement of the routine four-point probe method. In the former measurement process of the sheet resistance, we must use Van der Pauw function; however, it is in implicit form. Only an approximate explicit expression with a lower accuracy is known for us. It has not been reported about the explicit function with a high accuracy. Therefore, this paper presents a polynomial form of Van der Pauw function by using a local reversal development and the global reversal method of normalized polynomial match. Its accuracy is $\pm 0.19\%$. And its application in the measurement of sheet resistance is presented.

Key words: Van der Pauw function; unlinear reversal development; normalized polynomial match

PACC: 0750; 0270; 0660

Article ID: 0253-4177(2003)08-0817-05

* Project supported by National Natural Science Foundation of China(Nos. 69272001, 69672015), Natural Science Foundation of Hebei Province(No. 602076), and Natural Science Foundation of Tianjin(No. 013602011)