

硅片抛光工艺质量微细差别的 椭偏光谱法鉴别*

陈 哉 钱 佑 华

(复旦大学现代物理所, 上海)

1986年12月22日收到

用椭偏光谱研究了硅片抛光的表面质量。假设一个四相模型, 对测量数据进行分析处理。结果表明, (i) 用带间光谱的 E_1 结构, 可以分辨表层质量的稍优或稍劣, 而不一定要用 E_2 结构。(ii) 在 E_1 结构附近, 用介电函数的实部 $\epsilon'(\hbar\nu)$ 区分表层质量的微细差异, 似乎比用其虚部 $\epsilon''(\hbar\nu)$ 效果更佳。

主题词: 硅, 抛光损伤, 椭偏光谱术

一、引言

随着半导体器件集成度的提高, 对原始材料表面抛光工艺质量的要求, 也越来越严格。应该说, 现代抛光工艺已是相当成熟, 用一般的方法很不容易鉴别孰略优孰稍次。然而制管的成品率往往隐含着表面质量微细差别的影响。因此, 发展无接触的抛光表面质量鉴别技术, 仍然人们所关心的课题。

最近, 国内有单位发展了 HP 系列高纯优质硅片抛光剂工艺(以下简称 HP)。据称, 与国内原来普遍采用的烘制型白炭黑配制抛光剂工艺(简称 CB)相比, 制管成品率有所提高。常规检测也发现, 光洁度、微缺陷及杂质沾污等指标, HP 较 CB 的抛光片有明显改善^[1]。但对两种工艺质量的光谱学定量检测, 则尚未见报道。

从原理上说, 椭偏反射光谱法可反映表面原子层量级的特征。对晶体硅, E_1 光谱结构在样品表面的采样深度低达 10^2 \AA 量级^[2,3]。因此从椭偏谱上 E_1 结构的强度, 可灵敏地暴露表面状况的细微差异。

我们用椭偏光谱成功地鉴别了 CB 和 HP 两种抛光工艺的优劣, 并提出了一些新的看法, 从而补充了国外曾报道的硅表面质量(包括抛光质量)鉴定的光谱学技术^[4,5,6]。

二、原 理

光强式 PSA 型椭偏光谱仪接收到的偏振光强度为^[7]:

* 本工作得到中国科学院科学基金的资助

$$I(P, A) = GR_s \sec^2 \phi [1 - \cos 2\phi (\cos 2P + \cos 2A) + \cos 2A \cos 2P + \sin 2\phi \cos \Delta \sin 2P \sin 2A]. \quad (1)$$

其中 P 、 A 分别表示起偏器和检偏器的方位角, G 是光谱仪的灵敏度常数, R_s 是光的反射系数。固定 $P = P_0$, (1) 式可写为:

$$I(A) = c_1 + c_2 \sin 2A + c_3 \cos 2A \quad (2)$$

其中 c_1 、 c_2 、 c_3 是 Δ 、 ϕ 的函数。测量不同 A_i ($i = 1, 2, \dots, M$) 下的光强 $I'_i(A_i)$, 并定义:

$$F(c_1, c_2, c_3) \equiv \sum_{i=1}^M [I_i(A_i) - I'_i(A_i)]^2, \quad (3)$$

其中 $I_i(A_i)$ 由(2)决定。则由:

$$\frac{\partial F}{\partial c_1} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial c_2} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial c_3} = 0 \quad (4)$$

可解得 c_1 、 c_2 、 c_3 , 进而得到实测的椭偏参数 Δ 、 ϕ 。

用椭偏法测定介电函数(或光学常数), 一般要求合理地设定样品的模型。一块实际的抛光硅片可看成为一个四相样品, 分别以 I、II、III、IV 表之, 如图 1 所示。其中经抛

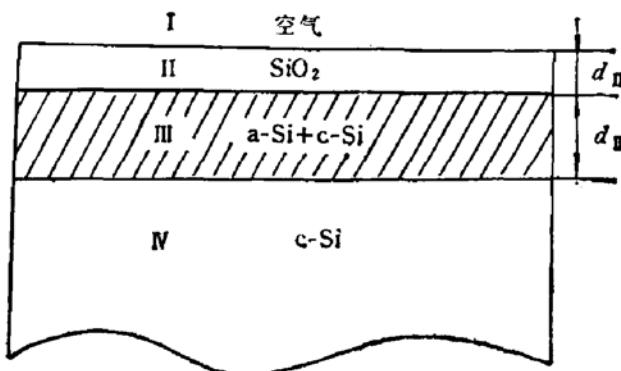


图 1 抛光硅片的四相模型

光和常规清洗工艺处理后尚存的非理想表面层, 其有效厚度为 d_{III} 。以及难以避免的表面自然氧化膜, 厚度为 d_{II} 。假设自然氧化膜 II 与空气 I 界面是平整的, 那么问题就集中到硅的非理想表层 III。不妨设想此第 III 相为在抛光过程中, 一部分硅原子发生无规位移, 以致局部形成类似于无定形硅那样的无规网络结构。在实验光斑覆盖的面积内, 存在着大量这样的局部无规网络微区。所以, 从统计的观点看可以认为该相是由四面体键单晶硅和无定形硅按某种比例混合而成。设 $x = V_e/V$ 为无定形结构在整个第 III 相中所占的体积比。那么, 有效介质公式^[4]:

$$\frac{3(1-x)}{2 + \epsilon_c/\epsilon_{III}(x)} + \frac{3x}{2 + \epsilon_a/\epsilon_{III}(x)} = 1. \quad (5)$$

将 x 与 ϵ_c 、 ϵ_a 和 ϵ_{III} 联系在一起。其中 ϵ_c 和 ϵ_a 分别为晶态和无定形硅的复介电函数, 它们均有较可靠的数据可资引用^[4]; $\epsilon_{III}(x)$ 就是第 III 相作为一层宏观介质的有效复介电函数。可见, x 与 d_{III} 是二个可用以表征抛光引起表面层非理想化程度的参数。此外, 按四相模型, 抛光硅片椭偏参数的计算值 Δ_{cal} 和 ϕ_{cal} 满足:^[5]

$$\operatorname{tg} \phi_{cal}(h\nu_i) e^{i\Delta_{cal}(h\nu_i)} = f(\varepsilon_1, \varepsilon_{11}, \varepsilon_{111}(x), \varepsilon_{1V}, d_{11}, d_{111}, \phi, h\nu_i) \quad (6)$$

在 E_1 结构附近按(1)~(4)式得到不同光子能量下 $\Delta(h\nu_i)$ 和 $\phi(h\nu_i)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) 的实测值后, 取目标函数:

$$s = \frac{1}{2N} \left\{ \sum_{i=1}^N [(\Delta(h\nu_i)/\Delta_{cal}(h\nu_i) - 1)^2 + (\phi(h\nu_i)/\phi_{cal}(h\nu_i) - 1)^2] \right\}^{1/2} \quad (7)$$

用(6)式进行拟合。当 s 达到测量精度的极限以下时, 便认为得到了 x 和 d_{111} 的解(以及 d_{11} 和整个波段的 $\varepsilon_{111}(h\nu)$)。这样, 我们便得以比较二种抛光表面的微细差异和各自的特征。

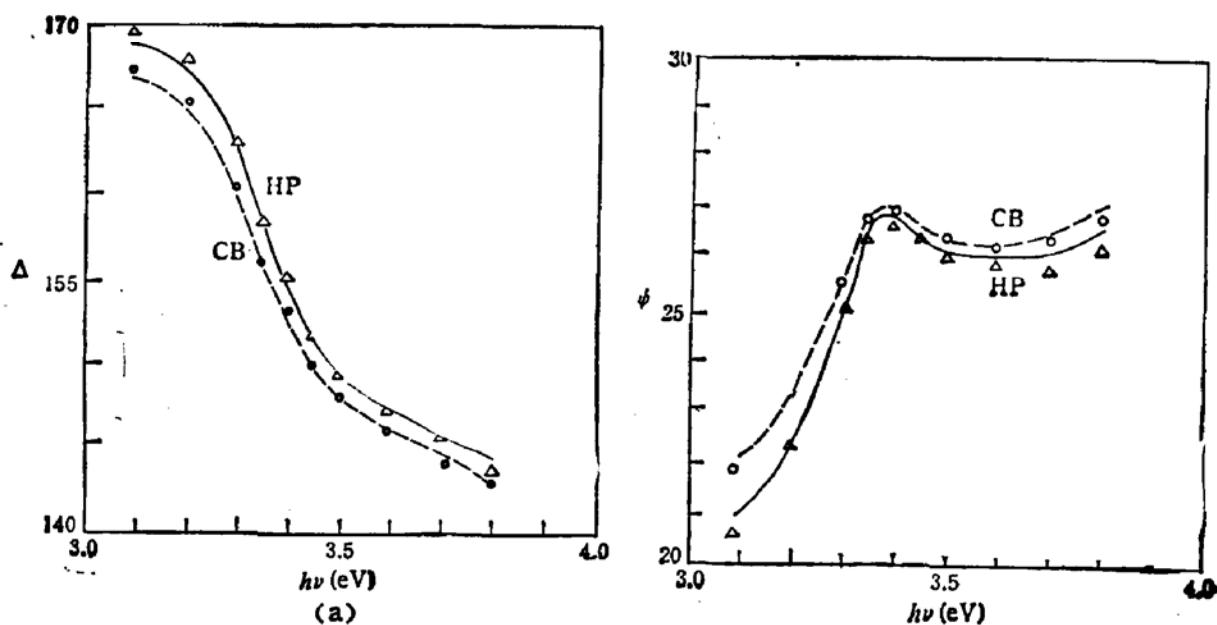
三、 实 验

测量所采用的光度式 PSA 型椭偏光谱仪由实验室自己建立。光源为 150W 钨灯, 光强稳定性优于 1%。照射在样品上的光斑直径约为 2mm。所配用的单色仪和光电倍增管, 使光谱仪的有效工作区域在光子能量 2eV 至 4eV 之间。信号用锁相放大, 经 A-D 变换进行数据采集和处理。取入射角 $\phi = 70^\circ$, 固定 $P = 45^\circ$ 。为了消除光源 1% 不稳定所引进的误差, 对每个检偏器方位角 A , 光强都采集 100 次求平均。

抛光前的硅片是完全一样的高阻 n型硅, $\langle 100 \rangle$ 晶向, 厚度约 $400\mu\text{m}$ 。其中一组用 CB 抛光工艺, 另一组则用 HP。用 HF 酸漂去原有自然氧化膜后, 立即进行测量。两组样品的清洗过程及测量条件完全相同。

四、 结 果

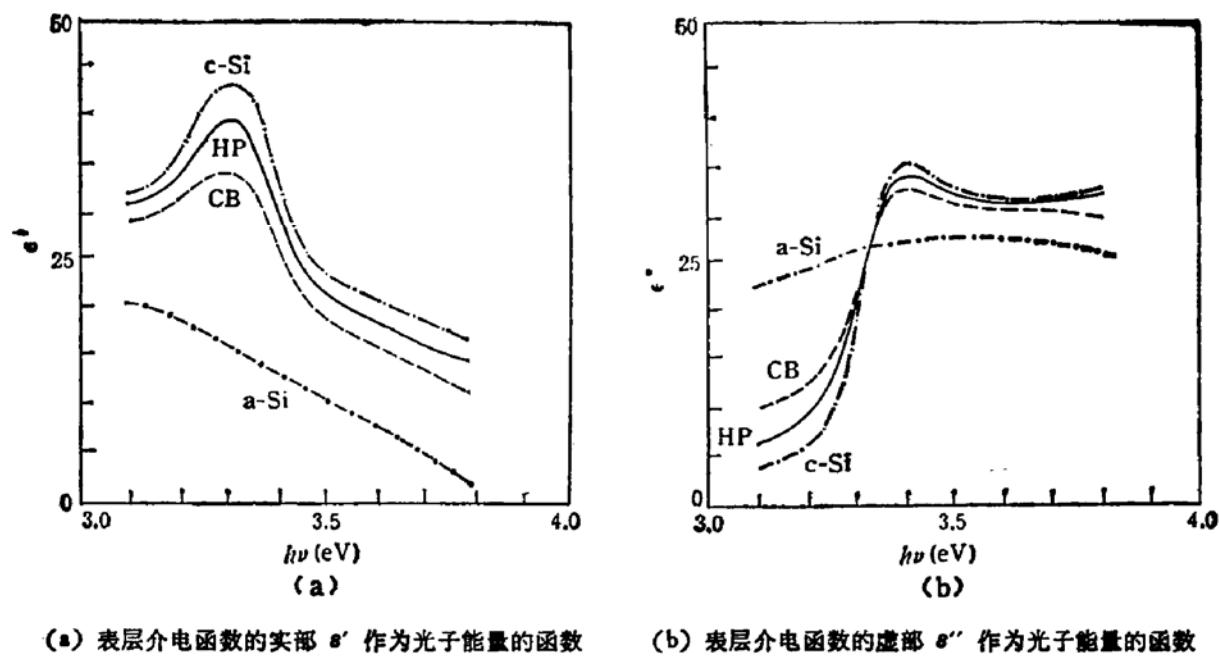
不同光子能量下的 10 组 Δ 、 ϕ 实测结果以图 2 中的△和○标出。图中的曲线是选



(a) Δ 作为光子能量的函数

(b) ϕ 作为光子能量的函数

取了靠近 E_1 峰的七组数据得出的,计算时取氧化膜的 $\epsilon_{II} = 2.176^{[10]}$, ϵ_s 和 ϵ_a 的数值取自 Aspnes 等的结果^[4]。由此得到的 d_{II} 、 d_{III} 和 x ,列于表 1。可见计算与实验符合甚好。按照所得 x 值及有效介质理论公式,进而可得非理想层 III 的复介电函数谱线 ($\epsilon_{III} = \epsilon' + i\epsilon''$),示于图 3。



(a) 表层介电函数的实部 ϵ' 作为光子能量的函数 (b) 表层介电函数的虚部 ϵ'' 作为光子能量的函数

图 3

表 1 两种不同抛光工艺的有关参数值

组 别	d_{II} (\AA)	d_{III} (\AA)	$x = V_d/V$	ϵ
HP	15	68	0.114	0.001
CB	14	62	0.306	0.007

五、讨 论

Archer 等曾对硅在室温下的表面自然氧化速率作过研究^[11]。我们测量的实际情况与之相符。这就是说,作为第 II 相的氧化膜,表 1 所给厚度可以认为是合理的。

CB 的 x 值明显大于 HP,表明该量对表面状况极为灵敏,反映了 HP 工艺在这一点上确实优于 CB。从非理想层的厚度 d_{III} 看,则 HP 略大于 CB。我们认为,改进抛光操作有可能解决这个问题,而不宜将此看作为新型抛光剂 HP 的缺点。并且,制管的结论表明^[12],非理想层的微量增厚,对成品率的不利影响,似乎是次要的。

Aspnes 等^[4,5]在研究不同化学处理的优劣时,用的是硅的 E_1 光谱结构 ($\sim 4.3 \text{ eV}$)。从原理上说, E_1 结构所表征的临界点跃迁,光波透入深度更浅 ($\sim 50 \text{ \AA}$), 可认为无须考虑表面下完整晶格的影响。在模型上,简单地取为二相近似,大体上就能符合实际。但是对于光子能量更高的紫外光谱,在测量系统上将提出一系列较为复杂的要求。我们利

用 E_1 结构, 同样鉴别了二种成熟的抛光工艺的细微优劣, 这是有实际价值的。

从图 3(b) 的 $\epsilon''(h\nu)$ 图线上可以看到, 复介电函数的虚部确实可以反映表面状况。然而在我们所用的能量范围, 采用介电函数的实部来鉴别抛光表面, 似乎比用其虚部具有更佳的分辨能力。在图 3(a) 中两种工艺的 $\epsilon'(h\nu)$ 峰高, 差异尤为显著。

本文方法就其实质来说, 便是用四相模型, 认真地考虑了偏振光束中来源于第 IV 相(衬底 c-Si) 的附加影响, 从而突出了表面约 65 Å 一层的不完整状态。根据简单的估算, 我们的结果与用反射光谱法^[6]测量的结论也是一致的。

顺便指出, 在对离子注入损伤的研究中, 常发现有一特殊的浅表面损伤层存在^[2, 12, 13]。我们认为, 至少其中的一部分, 可能在衬底抛光加工后, 即已存在。

六、结 论

用椭偏光谱方法鉴别了两种现行抛光工艺加工后硅片表面质量的微细差别。提出了对抛光硅片表面的质量进行判别时, 应以四相模型为基础。利用有效介质理论, 通过计算机拟合测量数据, 求出了非理想结构层的厚度及其中非晶成份所占的有效体积比。有效复介电函数 $\epsilon_{III}(h\nu)$ 的结果是合理的。本文还首次指出: (i) 从目前抛光工艺的水平看, 用硅的带间跃迁光谱的 E_1 结构, 照样可以分辨表层质量的微小优劣差异, 不一定要用 E_2 结构; (ii) 用介电函数的实部 $\epsilon'(h\nu)$ 来描述表层质量, 似乎比用其虚部 $\epsilon''(h\nu)$, 效果更佳。

值得一提的是, 在实际应用中, 为方便起见, 可根据椭偏参数谱 $\Delta(\lambda)$ 、 $\phi(\lambda)$ 的差异, 直接确定硅表面抛光质量的微细优劣。

上海电子材料一厂的张海明同志为本工作提供了样品及有关资料, 在此谨致谢意。

参 考 文 献

- [1] 集成电路等半导体器件用 HP 系列新型高纯优质硅片抛光剂(上海市经济委员会技术开发处, 上海有色金属研究所, 鉴定资料, 1985 年)。
- [2] 钱佑华, 陈良尧, 物理学报, 31, 646(1982)。
- [3] Mott and Davis, Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Clarendon Press, Oxford, p. 385, Fig 7. 55(1979)。
- [4] D. E. Aspnes and A. A. Studna, SPIE Optical Characterization Tech. for Semicond. Technol. 276, 227(1981).
- [5] D. E. Aspnes and A. A. Studna, Appl. Phys. Lett., 39, 316(1981).
- [6] P. J. Zanzucchi and M. T. Duffy, Appl. Optics, 17, 3477(1978).
- [7] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, Ellipsometry and Polarized Light, North-Holland Publishing Company, 256(1977).
- [8] I. Webman, J. Jortner and M. H. Cohen, Phys. Rev., B15, 5712(1977).
- [9] 同 [7] p.288
- [10] I. H. Malitson, J. Opt. Soc. Am., 55, 1205(1965).
- [11] R. J. Archer, J. Electrochem. Soc., 104, 619(1957).
- [12] 洪英, 黄觉, 半导体学报, 7, 661(1986)。
- [13] 许振嘉, 江德生, 孙伯康, 刘继光, 张泽华, 刘江夏, 半导体学报, 5, 257(1984)。

Characterization of Small Differences in Surface Polishing Quality of Silicon wafers by Spectroscopic Ellipsometry

Chen Zai and Qian Youhua

(Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai)

Abstract

The surface trace imperfection of silicon wafers resulting from different polishing technologies has been quantitatively characterized by use of spectroscopic ellipsometry. The dielectric function $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ for the residual damaged thin layer at the surface was calculated from the ellipsometric parameters φ, ψ on the basis of a four-phase model. Results show that (i) A diagnosis for very small differences between various conventionally adopted polishing processes can be feasibly realized in the E_1 spectroscopic structure of the silicon interband transition region, rejecting the necessity of E_2 -structure which emerges from a more shorter UV range. (ii) It seems that for silicon, a higher sensitivity for the surface imperfection may be obtained with the real part ϵ' of the dielectric function than its imaginary ϵ'' in the wavelength range of E_1 .

KEY WORDS: Silicon, Polishing damage, Spectroscopic ellipsometry