

离子注入 Si 损伤分布的光谱法多层分析

何 星 飞 莫 党

(中山大学微电子研究所)

1985 年 12 月 11 日收到

提 要

应用多层模型和最优化方法,由实验测得的离子注入 Si 的椭圆光谱以及单晶 Si 和离子注入非晶 Si 的光学常数,能分析离子注入 Si 的损伤分布.我们测量了 2.1—4.6eV 能量范围的椭圆光谱和光学常数,建立了多层计算模型和最优化方法.在模拟分析的基础上,计算了能量为 40keV,剂量分别为 4×10^{13} 和 $1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 的 As^+ 注入 Si 的损伤分布,并与背散射测量的结果比较.用多层模型和最优化方法也能从光谱分析其它物理量的分布,只要这些物理量对光学性质有显著的影响,并且在测量过程中不随光子能量而改变.

一、引 言

由于理论上和技术上的重要性,离子注入引起的损伤的研究成为当前活跃的领域.各种实验技术被应用于测量损伤分布,如背散射^[1]、放射性示踪^[2]、电子显微术^[3]、电子自旋共振^[4]、X 射线衍射^[5]、电子衍射^[6]以及各种光学手段如光的反射与透射^[7]、椭圆光谱^[8]和 Raman 光谱法^[9]等.这些方法可归成两类:一类是剥层法,把损伤层逐次剥去并测量,得到损伤随深度的分布;另一类是利用从外部测得的损伤信息无损地计算出损伤分布.

椭圆光谱法是研究离子注入损伤分布的一种灵敏、无损和方便的方法.莫党和叶贤京^[10]用椭圆光谱法研究了离子注入 Si 的损伤分布.计算时,他们把注入层看成是一均匀损伤层,这种近似适应于高剂量注入情况.随后,Erman 和 Theeten^[11]用多层模型和线性回归方法分析了离子注入 GaAs 的损伤分布,并与化学浸蚀法的结果比较.

单晶 Si(c-Si) 和离子注入非晶 Si(a-Si) 的光学常数的显著差别是椭圆光谱法用于研究离子注入 Si 损伤分布的根据^[12].本工作表明,应用多层模型和最优化方法,由实验测得的离子注入 Si 的椭圆光谱以及 c-Si 和离子注入 a-Si 的光学常数,不用剥层,能够分析离子注入 Si 的损伤分布.我们测量了 2.1—4.6eV 光子能量范围样品的椭圆光谱和光学常数,并用复折射率的变化量定义注入层的损伤度(无序度).在模拟分析的基础上,我们用最优化方法计算了 40keV, 4×10^{13} 和 $1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 的 As^+ 注入 Si 的损伤分布,并与背散射测量的结果比较,两者相符合.

二、实 验

样品是〈111〉晶向的 P 型 Si 单晶片,电阻率为 $9-12\Omega\text{cm}$, 用常规方法抛光. 在室温下注入 As^+ , 束流与〈111〉晶向成 $7-8^\circ$ 倾角, 能量为 40keV 时使用 4×10^{13} 和 $1.4\times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ 两种剂量, 能量为 150keV 时用剂量 $1\times 10^{16}\text{cm}^{-2}$. 每块样品均注入一半面积, 另一半在注入时掩盖起来, 测量时作为比较基点, 并作估算表面自然氧化层厚度之用.

测量前样品分别用甲苯-丙酮-乙醇和 1:10 的 HF 溶液作清洁处理. 用 TP-77 型椭圆偏振仪测量样品未注入区, 算出样品表面自然氧化层的厚度. 该仪器光源为 He-Ne 激光器, 波长为 $6328\text{\AA}$, c-Si 的光学常数^[13]取 $n=3.85$, $k=0.018$, 表面自然氧化层的折射率^[14]取 $n=1.46$. 在测椭圆光谱前后各测量一次, 取平均值算出表面氧化层厚度. 椭圆光谱由我们实验室研制的 TPP-1 型椭圆偏振光谱仪测量, 光子能量为 $2.1-4.6\text{eV}$ (波长为 $2600-6000\text{\AA}$), 入射角为 70° , 起偏器方位角为 45° . 能量为 40keV , 剂量为 4×10^{13} 和 $1.4\times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ 的 As^+ 注入 Si 的椭圆光谱如图 1 所示. 另外, 我们测量了未注入 Si 单晶和能量为 150keV , 剂量为 $1\times 10^{16}\text{cm}^{-2}$ 的 As^+ 注入 Si 的椭圆光谱, 由它们分别算出了 c-Si 和离子注入 a-Si 的光学常数, 结果见图 2. 由于注入剂量 $1\times 10^{16}\text{cm}^{-2}$ 大大超过 As^+ 的临界剂量 ($2\times 10^{14}\text{cm}^{-2}$), 计算时把注入层视为均匀非晶层.

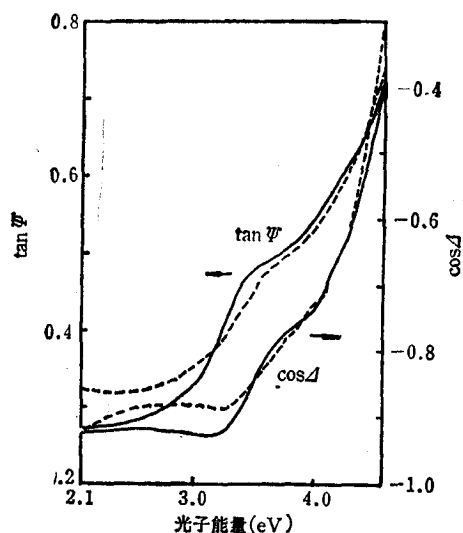


图 1 能量为 40keV , 剂量分别为 4×10^{13} (—) 和 $1.4\times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ (----) 的 As^+ 注入 Si 的椭圆光谱

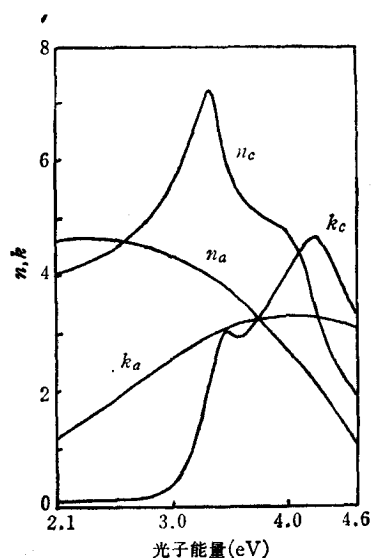


图 2 c-Si 和离子注入 a-Si 的折射率和消光系数

为了与椭圆光谱法比较, 能量为 40keV , 剂量为 4×10^{13} 和 $1.4\times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ 的 As^+ 注入 Si 样品分别用 He^+ 做了背散射测量. 散射角为 165° , 入射能量为 2.2MeV , 道宽为 2.95keV . 由于样品注入层较薄, 应用表面近似^[15], 由背散射谱可算出损伤分布.

三、多层模型计算原理

离子注入损伤层一般是非均匀的, 其光学常数随深度而变化. 但只要把注入层分成许多足够薄的薄层, 每一薄层总可看成是均匀的. 因此, 注入层可用许多均匀薄层组成的多层模型描述.

1. 离子注入层损伤度与光学常数

有效介质理论 (EMT) 被一些作者^[11]用来计算注入层的光学常数. 当注入离子的能量较低时, 离子主要与晶体中的原子核发生弹性碰撞, 引起晶格原子位移而形成损伤. 对于轻离子注入, 主要是点缺陷, 随着剂量增加, 点缺陷数目不断增多, 以致交迭构成连续非晶层. 对于重离子, 由于被碰撞原子的反冲动能远大于移位阈能而发生级联碰撞, 使在注入离子路径附近形成损伤团. 这时, 晶体发生的变化是从分立损伤团到连续非晶层^[6]. 在 EMT 中, 损伤度表征晶体中离子注入损伤区域与整体的体积比例关系.

鉴于晶格损伤引起的光学性质的变化, 一些作者用反射率^[17]、消光系数^[18]等光学量的变化量来标定损伤度, 他们都使用单波长测量. 对于广泛的波长范围, 单由一个光学量的变化量未能很好地反映晶体的损伤, 因为在某些波长单晶态和离子注入非晶态的光学常数的值相等 (见图 2). 我们同时考虑了折射率和消光系数, 用复折射率 $N = n - ik$ 的变化量定义注入层的损伤度 $D (0 \leq D \leq 1)$ ^[19]

$$N = DN_a + (1 - D)N_c. \quad (1)$$

式中 N_c , N_a 和 N 分别是 c-Si, 离子注入 a-Si 和注入层的复折射率. 在此定义下, D 不象 EMT 中直观地反映非晶相与单晶相的体积关系, 而表征注入层光学响应介于单晶态与非晶态光学响应之间的比例. 给出 c-Si, 离子注入 a-Si 的光学常数和损伤度, 由 (1) 式可算出注入层的光学常数. 在 2.1—4.6 eV 的光谱范围内, 我们分别用 (1) 式和 EMT 计算了离子注入 Si 的光学常数, 其结果相差小于 2%. 使用 (1) 式, 除计算简便外, 物理意义也明确.

2. 多层模型的计算方法

把离子注入层分成 p 层均匀的薄层, 若知第 i 层损伤度 $D_i (i = 1, 2, \dots, p)$, 由 (1) 式可算出第 i 层复折射率 N_i , 从而求得该薄层的特征矩阵^[20] $M_i(\Delta h, \phi, N_a, N_c, D_i)$, 再由下式求出注入层的特征矩阵:

$$M(h, \phi, N_a, N_c, \mathbf{D}) = \prod_i M_i(\Delta h, \phi, N_a, N_c, D_i). \quad (2)$$

式中 Δh 和 h 分别为薄层和注入层的厚度, ϕ 为入射角, $\mathbf{D}$ 为损伤分布向量. 由注入层的特征矩阵、空气、衬底和表面自然氧化层的光学常数可求出系统对应光子能量为 $\hbar\omega$ 的椭圆偏参数 ψ 和 Δ ^[21]

$$\tan \phi e^{i\Delta} = f(\hbar\omega, \mathbf{D}, \phi, h, d). \quad (3)$$

式中 d 为表面自然氧化层的厚度. 对应不同光子能量, 由 (3) 式便可求得对应某一离子注

入损伤分布的椭偏光谱。

图3为假设的6种不同 Gauss 损伤分布由(3)式计算出的椭偏光谱,计算时用20层模型。从图3可见,程度从小到大的不同损伤分布所对应的椭偏光谱从单晶特性逐渐变化为非晶特性。随离子注入剂量的增加,晶体经历了从单晶态到非晶态的相变过程,这种过程在椭偏光谱中充分地反映出来。

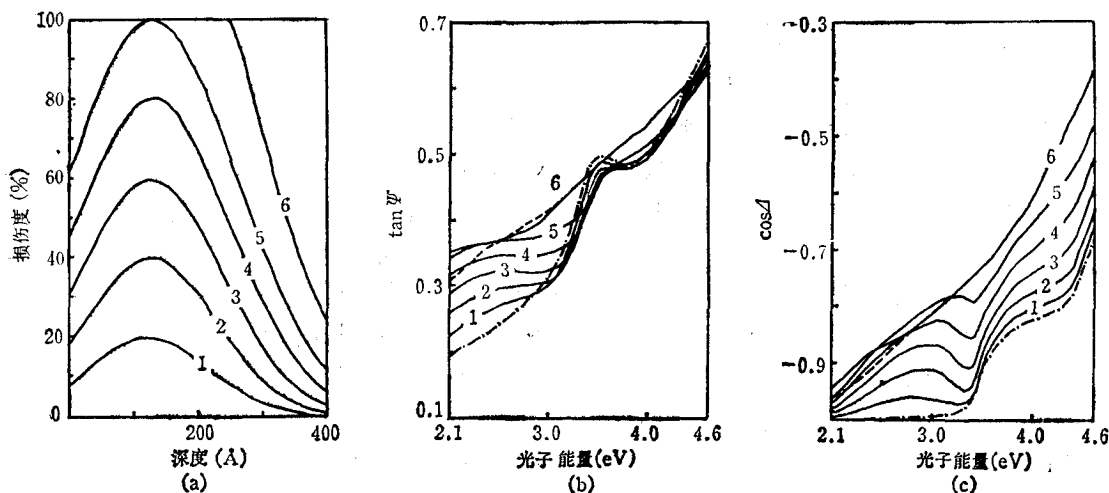


图3 6种不同的 Gauss 损伤分布 (a) 计算出的椭偏光谱 $\tan\psi-\hbar\omega$ (b) 和 $\cos\Delta-\hbar\omega$ (c)

— · — · — 为 c-Si 的椭偏光谱; - - - - 为离子注入 a-Si 的椭偏光谱

四、最优化方法

从(3)式可知,对应某一离子注入损伤分布,有一椭偏光谱;反过来,一椭偏光谱对应某一损伤分布。一般地,它们之间的函数关系不能解析表出。由于损伤分布不随光子能量变化,从椭偏光谱求损伤分布可借助最优化方法。

应用最小二乘原理,取目标函数为

$$\delta = (m - p)^{-\frac{1}{2}} \left[\sum_{\hbar\omega} (\tan\phi_e - \tan\psi)^2 + \sum_{\hbar\omega} (\cos\Delta_e - \cos\Delta)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4)$$

式中 $\tan\phi_e$, $\cos\Delta_e$ 为实验值, $\tan\psi$, $\cos\Delta$ 为计算值, m 为测量点数目, p 为多层模型层数。最优化过程可表为: 求出损伤分布 D , 使

$$\delta(D) = \min. \quad (5)$$

即通过求目标函数的最小值求出损伤分布,使由多层模型算出的椭偏参量与实验值在最小二乘意义下误差最小。本文应用 Levenberg-Marquardt 最优化方法, Jacobi 矩阵由两点序列割线法求出^[21]。我们在文献[21]中详细讨论了多层模型最优化计算方法,模拟分析了各种数学过程以及各种因素(系统误差、噪声和表面氧化层等)的影响。

图4为模拟线性损伤分布的最优化计算结果和多层模型中各层损伤度与目标函数的关系,从图4可见,表面层对目标函数的响应最灵敏,愈深入体内的层,灵敏度愈低;从不

同层数的多层模型计算结果来看,模型层数越多,损伤度的可确定性越大,即各层损伤度对目标函数的影响越灵敏.图4中小图斜线为模拟线性损伤分布的最优化计算结果.由(5)式求得的损伤分布即为图4中曲线的极小值所对应的横坐标的值.

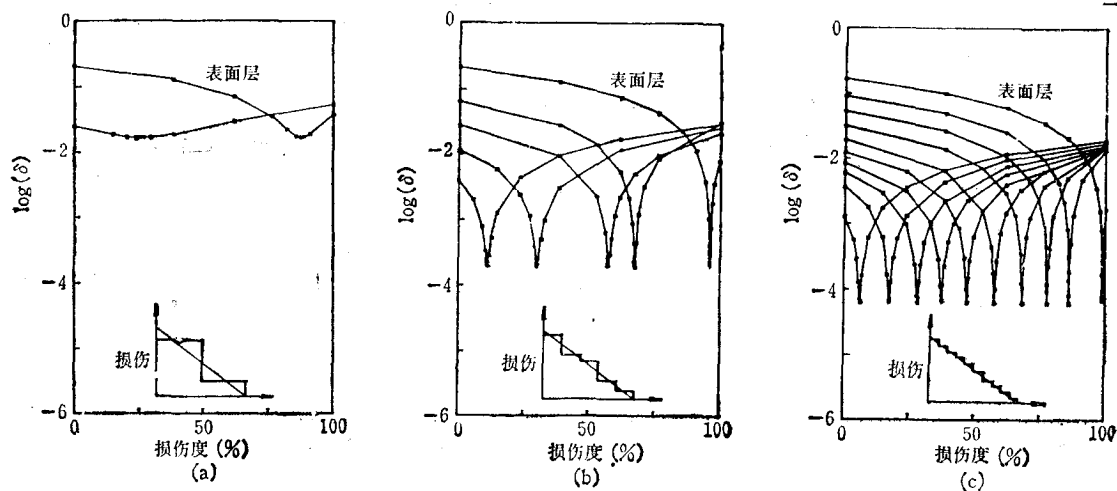


图4 模拟线性损伤分布用2层(a),5层(b)和10层模型(c)的计算结果以及模型中各层损伤度与目标函数的关系

五、结果及讨论

由测得的椭圆光谱(图1)以及c-Si和离子注入a-Si的光学常数(图2),我们用10层模型分别算出了40keV, 4×10^{13} 和 $1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 的 As^+ 注入Si的损伤分布,结果见图5.10层模型除两层描述表面氧化层和衬底,实际描述损伤层为8层.计算时表面氧化层的光学常数取自文献[14], $m = 26$.

从图5(a)可见,椭圆光谱法与背散射的结果符合得很好;图5(b)中由两种方法算出的损伤峰位置吻合很好,整个分布则两种结果稍有偏离,其原因可能是由于样品注入时不均匀引起的,因为椭圆光谱和背散射分别在样品的不同地方测量.由LSS理论和损伤理

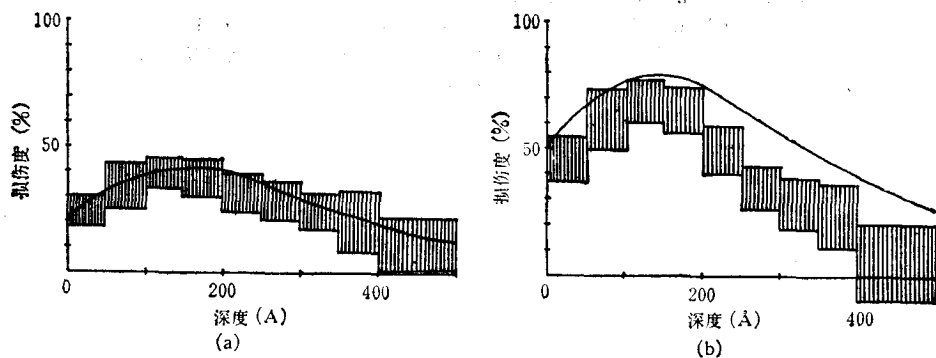


图5 由椭圆光谱法(阴影区域)和背散射方法(实线)得到的剂量为40keV,剂量分别为 $4 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ (a)和 $1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ (b)的 As^+ 注入Si的损伤分布

论算出的损伤峰位置约离表面 150 Å 处,与椭圆光谱法的结果相一致。

总之,利用多层模型和最优化方法,由椭圆光谱和 c-Si, 离子注入 a-Si 的光学常数,能有效地分析离子注入 Si 的损伤分布。此方法比其它方法,如剥层法、背散射方法等方便而且容易实现。但是,与其它光学方法相似,由于 Si 在可见和紫外波段的光吸收,该方法只能分析近表面的薄层。此外,实验误差、表面氧化层的估算精度对结果的影响也较大^[21]。顺便指出,利用多层模型和最优化方法,也能从光谱分析其它物理量分布(如界面成份、合金组份和载流子浓度分布等),只要这些量对光学性质有显著的影响,并且在测量过程中不随光子能量而变化。

本工作中样品的离子注入和背散射测量分别是在清华大学微电子学研究所和工程物理系做的,作者在此谨表谢意。

参 考 文 献

- [1] J. A. Davies, J. Denhartog, L. Eriksson and J. W. Mayer, *Can. J. Phys.*, **45**(1967), 4053.
- [2] B. J. Masters, J. M. Fairfield and B. L. Crowder, *Ion Implantation* (Gordon and Breach, London, 1971), p. 81.
- [3] J. R. Parsons, *Phil. Mag.*, **12**(1965), 1159.
- [4] S. Hasegawa, R. Kontani and T. Shimizu, *Jap. J. Appl. Phys.*, **10**(1971), 655.
- [5] S. Kishino and A. Noda, *J. Jap. Soc. Appl. Phys.*, **42**(1973), suppl. 118.
- [6] R. L. Jacobsen and G. K. Wehner, *J. Appl. Phys.*, **36**(1965), 2674.
- [7] E. T. Yen, B. T. Masters and R. Kastl, *Proc. 4th Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors and Other Materials* (Plenum, New York and London, 1974), p. 501.
- [8] 莫党、卢因诚、李旦晖、刘尚合、卢武星, *半导体学报*, **1**(1980), 198.
- [9] J. C. Bourgoin, J. F. Morhange and R. Beserman, *Radiat. Effe.*, **22**(1974), 205.
- [10] 莫党、叶贤京, *物理学报*, **30**(1981), 1287.
- [11] M. Erman and J. B. Theeten, *Surf. Sci.*, **135**(1983), 353.
- [12] 莫党、何星飞、江任荣、项颂光, *红外研究*, **3**(1984), 338.
- [13] G. E. Jellison, Jr. and P. A. Modine, *J. Appl. Phys.*, **53**(1982), 3745.
- [14] I. H. Malitson, *J. Opt. Soc. Am.*, **55**(1965), 1205.
- [15] Wei-Kan Chu, in *New Uses of Ion Accelerators*, ed. J. F. Ziegler (Plenum, New York and London, 1975), p. 135.
- [16] E. C. Baranova, V. M. Gusev, Yu. V. Martynenko, C. V. Starinin and I. B. Hailbullin, *Ion Implantation in Semiconductors and Other Materials* (Plenum, New York and London, 1973), p. 59.
- [17] M. Miyao, T. Miyazaki and T. Tokuyama, *Jap. J. Appl. Phys.*, **17**(1978), 955.
- [18] K. Watanabe, M. Miyao, I. Takemoto and N. Hashimoto, *Appl. Phys. Lett.*, **34**(1979), 518.
- [19] MO Dang (莫党) and HE Xingfei (何星飞), *Chin. Phys. Lett.*, to be published.
- [20] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, 5th ed. (Pergamon, Oxford, 1975), ch. 1.
- [21] 何星飞、莫党, *中山大学学报(自然科学版)*, 待发表.

MULTILAYER ANALYSIS OF DAMAGE PROFILE IN ION IMPLANTED SILICON BY OPTICAL SPECTROMETRY

HE XING-FEI MO DANG

(Institute of Microelectronics, Zhongshan University, Guangzhou)

ABSTRACT

The damage profile of ion implanted silicon can be calculated from the spectroscopic ellipsometric data as well as the optical constants of crystalline and ion implanted amorphous state of silicon by means of optimization with a multilayer model. We measured the ellipsometric spectra and optical constants of ion implanted samples in the spectral range from 2.1 to 4.6 eV. In the sense of optical characteristics, the degree of damage is defined using complex refractive index. We performed the calculation of damage profiles of 40 keV As⁺ implanted Si (111) at dosage of 4×10^{13} and 1.4×10^{14} ion cm⁻², respectively, on the basis of simulated tests. The depth profiles of damage were obtained and compared with the experimental results of He⁺ back-scattering. The method of multilayer analysis can also be used to determine the profiles of other parameters of interest from optical spectra as long as the parameters markedly influence the optical response and do not depend upon the photon energy.