

Si-SiO₂ 界面的粗糙度*

黄炳忠 余玉贞

(中山大学物理系)

洪国光

(香港大学)

1985年11月4日收到; 1986年12月18日收到修改稿

提 要

利用椭偏反射光谱不但验证了 Si-SiO₂ 界面是一粗糙面, 而且在恰当的模拟形貌下, 把这界面粗糙层等效为若干子层, 用有效介质理论处理, 分别得到各自的介电特性. 通过多相椭偏光反射光谱的理论计算值 ψ_{cal}, Δ_{cal} 与实验值 ψ_{exp}, Δ_{exp} 的比较, 把粗糙的高度 H 及相关长度 L 确定. 把不同条件下制备的样品的粗糙度和它们的电气性能相对比, 发现两者之间的趋势十分一致. 同时发现, 在界面上 Si 的介电常数具有轻度的各向异性.

一、引 言

在研究强反型 MOS 二维电子气的电气性能的早期工作中, Stern^[1] 就认为氧化后 Si 衬底的表面是一个粗糙面, 从而导致对沟道载流子的附加散射. 稍后, Cheng (郑)^[2] 对界面粗糙假设为高斯函数分布, 推导了它的散射几率. 他的结果是散射几率和粗糙的高度 H 及分布的相关长度 L 有关. 在 $k_F L > 1$ 和 $k_F L < 1$ 两种极端条件下 (k_F 是费密球半径), 散射几率分别与 H 及 L 有如下的比例关系: $\frac{1}{\tau} \propto H^2/L$ 及 $\frac{1}{\tau} \propto H^2 L^2$. 然而, 有关界面粗糙这一事实, 至今仍有不少争议. 原因是迄今尚未能有有力的实验足以支持上述假设, 至于散射几率与粗糙度的关系更无从验证. 最近 Hahn^[3] 等人通过 LEED 分析, 认为氧化后 Si 衬底表面出现平台结构. 但 LEED 实验必须把氧化膜腐蚀掉, 而这过程可能对界面产生影响. 本文试图用椭偏光的反射光谱验证 SiO₂ 界面是一个粗糙面. 并且在一个恰当的粗糙几何模型模拟下, 分别确定等效的 H 及 L 还得到粗糙度和氧化层厚度有关的结果. 把界面粗糙度与样品的电气性能的测量结果对比, 发现两者的趋势十分一致, 这对进一步确认界面是一个粗糙面提供一个有力的证据.

二、原 理

利用椭偏光反射研究界面结构的主要优点在于这是非破坏性的测量. 通过椭偏光测

* 中国科学院科学基金资助的课题.

量得到的两个椭圆参数 $R_P/R_S = \tan\phi(\lambda) \cdot \exp[i\Delta(\lambda)]$ 是样品折射率的函数。一块表面氧化了的 Si 片,是一个三相反射系统(空气-薄膜 SiO_2 -衬底)。这样一个系统的椭圆参数由下式给出:

$$\begin{aligned} \frac{R_P}{R_S} &= \tan\phi(\lambda) \cdot \exp[i\Delta(\lambda)] \\ &= \frac{r_{1P} + r_{2P}\exp(-i2\delta)}{1 + r_{1P}r_{2P}\exp(i2\delta)} \cdot \frac{1 + r_{1S}r_{2S}\exp(-i2\delta)}{r_{1S} + r_{2S}\exp(-i2\delta)}, \quad (1) \end{aligned}$$

式中 r_{1P} , r_{2P} , r_{1S} , r_{2S} 分别为空气-薄膜界面以及薄膜-衬底界面 P 波和 S 波的非涅耳反射系数。

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} d_2 \tilde{n}_2 \cos\phi_2$$

为光在薄膜内传播由光程差而引起的位相差。 d_2 为薄膜的厚度, \tilde{n}_2 为薄膜的复折射率, ϕ_2 为在薄膜内的折射角。于是,椭圆参数 ϕ 和 Δ 不但和衬底的折射率有关,而且又与薄膜的折射率和厚度有关。如果界面是一个粗糙面,光将会在界面上受到散射。根据 Webman^[4] 发展的有效介质理论,一个由多种介质组成的混合体内,光通过多次散射在其内传播的光学性能等效于一个由下式给出的介电函数为 $\varepsilon(\lambda)$ 的介质:

$$\left\langle \frac{\varepsilon_i(\lambda) - \varepsilon(\lambda)}{\varepsilon_i(\lambda) + 2\varepsilon(\lambda)} \right\rangle = 0, \quad (2)$$

式中 $\varepsilon_i(\lambda)$ 为 i 组份介质的介电函数。若认为在这粗糙层内只有 Si 以及填充于粗糙间隙之间的 SiO_x 两种介质,(2)式可写为

$$(1 - v_{\text{Si}}) \frac{\varepsilon_{\text{SiO}_x}(\lambda) - \varepsilon(\lambda)}{\varepsilon_{\text{SiO}_x}(\lambda) + 2\varepsilon(\lambda)} + v_{\text{Si}} \frac{\varepsilon_{\text{Si}}(\lambda) - \varepsilon(\lambda)}{\varepsilon_{\text{Si}}(\lambda) + 2\varepsilon(\lambda)} = 0. \quad (3)$$

v_{Si} 是 Si 在这层内所占的体积分数。因此,我们可以把粗糙层等效为存在于衬底和 SiO 薄膜之间的包含具有不同介电函数的若干子层的界面过渡层。从而,样品等效于一个多层膜的多相系统。对这样一个多相系统,可以利用迭代的公式^[5]进行计算。于是,不同的界面形貌结构将会在椭圆光的反射光谱中有所反映。为了从椭圆光的反射光谱的测量中获得界面结构的有关信息,可由实验测量的光谱与理论计算的光谱数据作比较中得到。作为一个比较客观的标准,采用由下式定义的偏差 E_r 作为两者符合程度的判据:

$$E_r = \frac{1}{N} \left[\sum_N (|\phi_{\text{exp}} - \phi_{\text{cal}}|^2 + |\Delta_{\text{exp}} - \Delta_{\text{cal}}|^2) \right]^{1/2}, \quad (4)$$

式中 ϕ_{exp} , Δ_{exp} 为实测数据, ϕ_{cal} , Δ_{cal} 为理论计算值。 N 为在整个光谱范围内取点的数目。我们的任务就是要找出 E_r 最小时所对应的界面粗糙度模型。

三、粗糙界面形貌的模拟

根据最近发表的有关工作,我们用两种模型来模拟 Si-SiO₂ 界面的粗糙度。一是 Hahn 等人提出的平台结构。我们可简单地用一些等距排列的平台(见图 1)来模拟。设平台的宽度为 l , 平台的间距周期为 L , 于是 Si 在此粗糙层中所占的体积分数 $b = l/L$, 按这个模型得到的是一个均匀的单一等效界面层。在利用(1)式及(4)式计算 E_r 时,可调

整的参数是 b , 台阶高度 H , SiO₂ 膜的厚度 d_2 以及 SiO_x 的 x 值。

另一模型是正方形基底的金字塔模型。这是 Smith^[6] 等人在研究 Si 氧化时提出的氧化模型 (图 2 (a))。这个模型和平台模型一个主要不同之处在于 Si 所占的体积分数随离开基底的距离增加而减少。为此我们须把界面层再分为若干子层, 逐层地分别计算各自的 $\epsilon_i(\lambda)$ 。设每子层的厚度为 a , a 的选取是要使得在 a 高度差范围内 Si 所占的体积近似为一常数。于是, 在每一子层内 Si 所占的体积分数为

$$v_{\text{Si}} = 1 - \frac{Z_1 + Z_2}{H} + \frac{Z_1^2 + Z_1 Z_2 + Z_2^2}{3H^2}, \quad (5)$$

Z_1 是塔高中任一点与基底的距离, $Z_2 = Z_1 + a$, H 是塔高。所以, 界面层本身就是一个

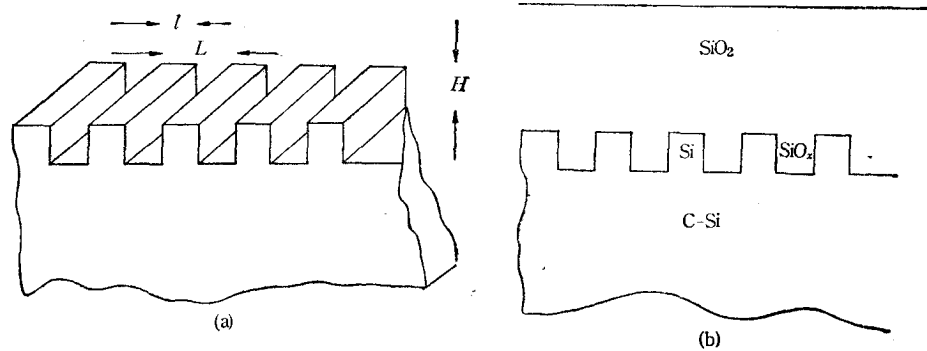


图 1 Si 衬底表面粗糙的平台台阶模型 $b = l/L$

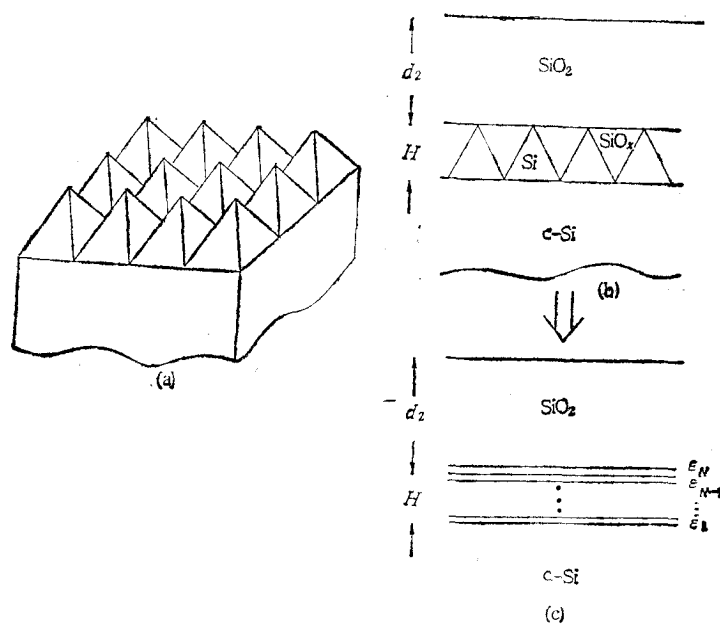


图 2 Si 衬底表面粗糙的金字塔模型及其等效的多层结构

多层结构,每层的介电函数分别为 $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_N$, 于是样品便等效为一个 $N+2$ 层系统,如图 2(c) 所示. 因为正方形基底边长的改变并不影响 Si 在每个子层中所占的体积分数,因此,在计算 E_r 时,可调整的参数是 H, d_2 以及 x . Si 以及 SiO_2 的复折射率以及其色散是根据文献[7]和[8]提供的数据. 而 SiO_x 的复折射率及其色散则由公式^[9]

$$\begin{aligned} & \epsilon_{\text{SiO}_x}^* + \epsilon_{\text{SiO}_x} [A(x)\epsilon_{\text{Si}} - B(x)\epsilon_{\text{SiO}_2}] - [A(x) - B(x) \\ & \quad + 1]\epsilon_{\text{Si}}\epsilon_{\text{SiO}_2} = 0, \\ A = & \frac{1.583x + 0.4253(2-x)(x-2.123)(x+0.968)}{0.417x - 0.4253(2-x)(x-2.123)(x+0.968)}, \\ B = & \frac{0.417x + 0.09468(2-x)}{0.417x - 0.4253(2-x)(x-2.123)(x+0.968)} \end{aligned}$$

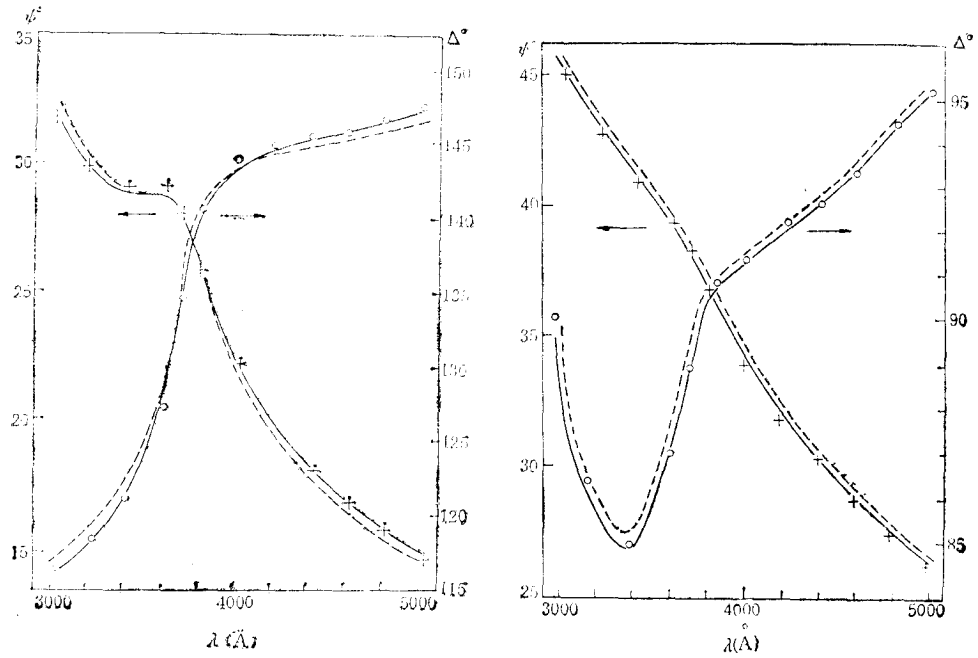
计算得到.

四、实验和模型计算的比较

测量了 8 组样品的椭偏光反射谱. 编号 M-1—M-4 是氧化时间不同因而氧化膜生长厚度各异的 4 组样品,编号 N-1—N-4 则是氧化时间相同,生长成同一氧化膜厚度,然后再用腐蚀方法把氧化膜减薄为不同厚度的 4 组样品. 氧化温度为 1050°C ,然后在 400°C 温度下在成形气氛中退火 30 min. Si 片为 $15\text{--}22 \Omega \cdot \text{cm}$ 的 P 型 Si,晶面为 (100). 测量的光谱范围为 $3000\text{--}5400 \text{ \AA}$, 图 3 为 3 个典型样品 M-1 和 M-4 和 N-4 的 $\phi(\lambda)$ 和 $\Delta(\lambda)$ 数值. 虚线是由无界面层的三相公式计算的结果. 由图 3 可见,虚线和实验点之间偏离较大. M-1 的最佳 $E_r = 1.02$, M-4 的 $E_r = 0.34$, 而 N-4 的 $E_r = 0.42$. 表明三相的结构与样品实际状况相差较远. 只有考虑界面层的影响, E_r 才有可能进一步降下来. 图 3 中实线是由金字塔模型计算的结果(取 $a = 1 \text{ \AA}$).

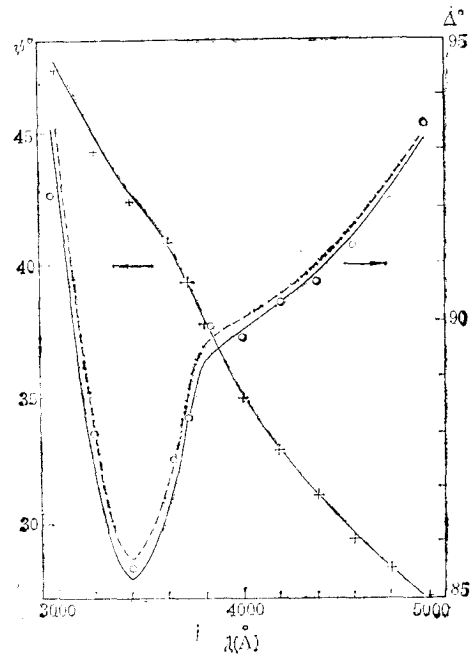
表 1 是计算得到的结果. 表 1 中最下两行相当于没有界面层存在的二层结构. 此外还对界面是平滑的但存在一层均匀的 SiO_x 过渡层的结构进行了计算. 没有界面层存在的三相公式得到的 E_r 比其它三种模型都大,金字塔模型模拟界面粗糙度的 E_r 最小,表明它是实在情形的最近似反映. 其界面的粗糙程度由塔高 H 的大小表示. 氧化时间越长,氧化膜增厚的同时粗糙度降低. 至于 N 编号样品的粗糙度则基本上不变,却和 M-4 样品接近, N-4 样品偏离较大是由测量误差较大引起(见图 3(c)). 平台模型的粗糙度则由平台的密度表示. 平台的展览与合并导致 b 数值增大,亦即 Si 所占体积分数增加而使平台密度有所降低. 因为从能量角度考虑台阶的高度变化是不容易发生的,故它们的台阶高度对所有样品应基本保持不变.

为了知道(4)式右边各项对 E_r 的贡献,我们以 $\delta\phi = \phi_{\text{exp}} - \phi_{\text{cal}}$ 作纵坐标,波长 λ 作横坐标作图(见图 4). 在长波方面 $\delta\phi$ 的贡献很小,到 3700 \AA 附近有一明显增大,这正好是 Si 的介电函数的虚部 ϵ_2 的 E_1 峰 (3.4 eV) 处,然后在短波方面又一次随波长减少而增加. 计及界面层后, $\delta\phi$ 值有所降低,但并没有完全消除. 值得注意的是 $\delta\phi$ 随样品界面粗糙度的减少而下降. M-1 最大, M-2 次之, M-3 比 M-2 又再下降,而 M-4 则在 3700 \AA 处的 $\delta\phi$ 完全消失,只留下短波方面的贡献. 而 N-1—N-4 则几乎与 M-4 完全一



(a) M-1 样品

(b) M-4 样品



(c) N-4 样品

图 3

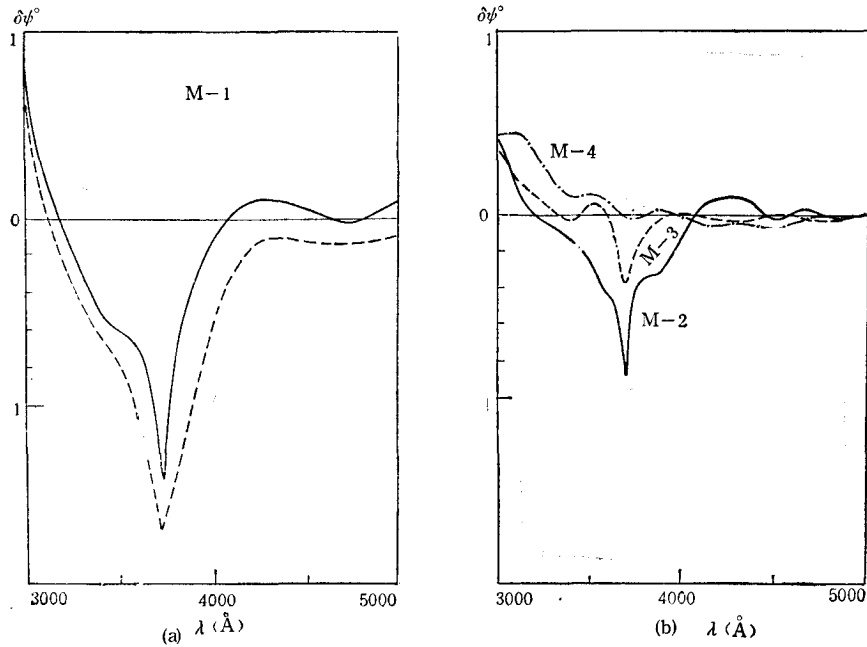
样。可以认为这是由于界面粗糙导致的另一个效应引起,我们认为一个最可能的原因是表面上对称性降低而产生的各向异性效应。Aspnes^[10]最近对有自然氧化膜覆盖的(110)

表 1

		M-1	M-2	M-3	M-4	N-1	N-2	N-3	N-4
金字塔 模型	$H(\text{\AA})$	14	11	8	6	7	6	7	5
	$d_2(\text{\AA})$	95	165	276	430	169	201	326	454
	x	0.5	0.5	0.5	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35
	E_r	0.75	0.48	0.3	0.25	0.24	0.26	0.39	0.4
平台 模型	$H(\text{\AA})$	10	7	7	7	9	7	9	6
	$d_2(\text{\AA})$	95	165	276	430	169	201	326	454
	V	0.08	0.15	0.2	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
	x	0.5	0.5	0.5	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35
	E_r	0.83	0.59	0.4	0.25	0.26	0.28	0.4	0.36
过渡层 模型	$D(\text{\AA})$	10	7	6	5	8	6	8	5
	$d_2(\text{\AA})$	95	165	276	430	169	201	326	454
	x	0.5	0.5	0.5	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35
	E_r	0.79	0.55	0.34	0.28	0.26	0.31	0.42	0.38
三相	$d_2(\text{\AA})$	105	173	283	436	178	208	335	459
	E_r	1.02	0.77	0.54	0.34	0.28	0.34	0.46	0.42

注 1. 金字塔模型每子层的厚度 $a = 1 \text{\AA}$.

2. d_2 为 SiO_2 膜厚度, x 为 SiO_x 中氧含量, V 为 Si 的体积分, D 为平滑过渡层模型的过渡层 (SiO_x) 厚度.



实线是金字塔模型;虚线是三相模型

图 4 $\delta\psi = \psi_{\text{cal}} - \psi_{\text{exp}}$ 与 λ 的关系

面的 Si 片作了反射光谱的测量,发现沿 $[1\bar{1}0]$ 及 $[001]$ 两个方向的反射谱不一样(见图 5). 利用三相公式,他得到这两个方向反射谱的差异正比于介电函数的各向异性. Smith 认

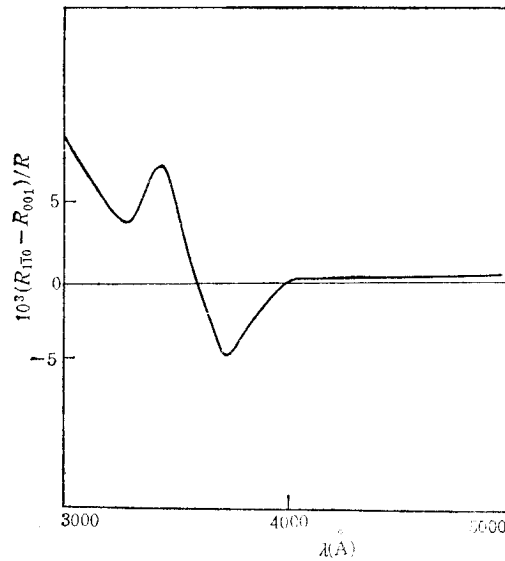


图5 覆盖有自然氧化膜的 Si(110) 面的反射谱差^[10]
 $R = (R_{110} + R_{001})/2$, R_{110} 和 R_{001} 分别是偏振光沿
 110 和 001 方向反射的反射系数

为, 金字塔正方形的底边是 (100) 面绕 [100] 转过 45° 形成, 因而正方形的底边正好是 [110], 而金字塔的斜面却与 (110) 面成一角度, 角度的大小与塔高有关, 亦即与粗糙度有关. 虽然目前我们尚缺乏足够的资料作定量计算, 但比较图 4 与图 5 两者之间的趋势, 我们认为以上的设想是可取的.

五、讨论和结论

由表 1 得到的一个重要事实是: M 编号样品的粗糙度(由 H 表征)随氧化膜厚度增加而减小, 但 N 编号样品则与氧化膜的厚度无关. 但却都与 M-4 样品十分接近. 这说明由椭圆偏光反射谱得到的不同信息是来自界面的影响而不是来自氧化膜.

对由这些样品造成的 MOS 作了一系列的电气性能测量, 他们的结果在表 2 和图 6 中给出. 其中最值得注意的是 M 编号样品的沟道载流子有效迁移率与氧化膜厚度的关系和氧化膜厚度与粗糙度关系的趋势完全一致. 这可解释为随着氧化膜增厚, 界面粗糙度降低, 对载流子的散射作用减弱, 因而迁移率增大. 而 N 编号样品则由于它们的界面粗糙度并无变化, 故虽然氧化膜厚度不同但迁移率却不因而有所变化, 而且与 M-4 样品的迁移率十分接近.

比较表 1 和表 2, 可以看到界面粗糙度和氧化层固定电荷密度 Q_f 也是平行地变化. 界面层内的氧化物不是 SiO₂ 而是 SiO_x, 对 M-1—M-3 样品 x 值为 0.5, 而 M-4 以及 N-1—N-4 样品 x 值均为 1.35. 分别对应为 SiO₂ + 3 Si 及 SiO₂ + 0.48 Si 的富 Si 氧化物. 虽然目前我们对氧化层固定电荷的确切来源尚未完全清楚, 但联系到粗糙度的增加相应

地也增加了富 Si 氧化物的体积分数这一点,对理解 Q_f 与粗糙度平行变化多少是有所启发. 至于 M-1—M-4 样品与其它样品 x 的数值不同的原因,可能是和氧化时间有关. 进一步验证应由电子能谱来测定.

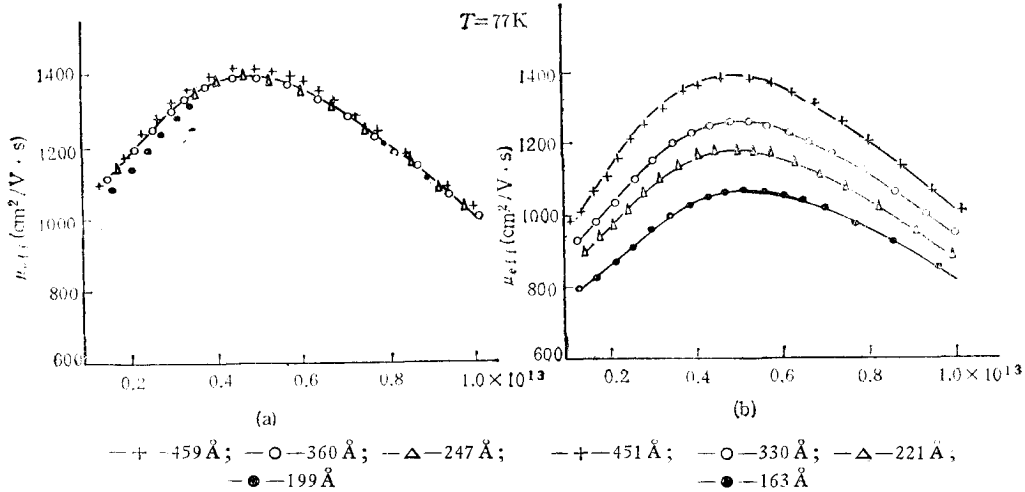


图6 样品 MOS 沟道有效迁移率和载流子密度(由外加栅压控制)的关系

表 2

No.	$d_{ox}(\text{Å})$	$Q_f(\text{cm}^{-2})$
M-1	95	5.9×10^{11}
M-2	165	5.1×10^{11}
M-3	276	4.4×10^{11}
M-4	430	3.9×10^{11}
N-1—N-4	169—454	$\sim 3.9 \times 10^{11}$

Q_f 是氧化层固定电荷密度

Hahn 对界面平台台阶密度随氧化时间变化的解释提出一个模式,他认为 O 的扩散和 Si 表面的随机氧化作用使 Si 表面出现平台,而高温效应则使台阶消灭. 按这模式,随着氧化膜增厚, O 通过扩散穿透氧化膜到达界面的含量减少,台阶密度变化的速度应加快. 然而,在低氧含量条件下, O 亦可和 Si 化合而形成 SiO 把 Si 腐蚀^[6]. 因此随着氧化膜增厚,界面含氧量降低从而减缓 Si 的腐蚀速度,因而导致粗糙度的退化. 粗糙度的高度也相应改变. 由此看,金字塔模型也更为近似.

参 考 文 献

- [1] R. Stern and W. E. Howard, *Phys. Rev.*, **163**(1967), 816.
- [2] Y. C. Cheng, *J. Jap. Soc. Appl. Phys.*, Suppl. **41**(1972), 173.
- [3] P. O. Hahn and M. Henzler, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A2**(1984), 574.
- [4] I. Webman, J. Jortner, M. H. Cohen, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 594.
- [5] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, "Ellipsometry and Polarized Light", North-Holland Publishing Company—Amsterdam New York, Oxford (1977), p. 332.
- [6] F. W. Smith and G. Ghidini, *J. Electrochem. Soc.*, **131**(1984), 2924; *ibid.*, **129**(1982), 1300.
- [7] D. E. Aspnes *et al.*, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 985.

- [8] A. J. Warneck and P. J. Lopresti, *IBM J. Res. Develop.*, **17**(1973), 256.
[9] K. Hubner, E. Rogmann and G. Zuther, *Insulating Films on Semiconductor*, Proc. Intern. Conf. on Insulation Films on Semiconductor (INFOS81), p. 30.
[10] D. E. Aspnes, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B3**(1985), 1498.

THE ROUGHNESS OF THE Si-SiO₂ INTERFACE

HUANG BING-ZHONG YU YU-ZHEN

(Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou)

HONG GUO-GUANG (K. K. HUNG)

(Hong Kong University)

ABSTRACT

The roughness at the Si-SiO₂ interface has been determined by the ellipsometric spectroscopy. Several geometric forms have been used to simulate the surface irregularities. The dielectric properties of the rough layer are modelled in the effective-medium approximation by dividing the rough layer into a number of sub-layers with equal thickness. The asperity height H (normal to surface) and the correlation length L (along the surface) can be defined by best fit of the theoretically calculated multiphase reflective ellipsometric parameters ψ_{cal} , Δ_{cal} to the measured ellipsometric parameters ψ_{exp} , Δ_{exp} . It is found that the trend of the electric properties of the sample is consistent with the variance of its roughness. It is also found that the dielectric function of Si has some anisotropic properties at the interface.