

椭偏光谱法研究离子注入Si损伤分布

——多层模型的最优化方法

何星飞 莫 党

(微电子研究所)

摘 要

应用多层模型和最优化方法,由实验测得的离子注入Si的椭偏光谱,以及c-Si和离子注入a-Si的光学常数,不用剥层测量,能分析离子注入Si的损伤分布。本文讨论了多层模型计算原理和椭偏光谱法的灵敏度,模拟分析了Levenberg-Marquardt最优化方法的数学过程、模型误差与计算误差、实验误差(随机误差和系统误差)以及Si表面自然氧化层对最优化数学过程的影响。

离子注入Si损伤研究不论对离子注入理论或应用都具有重要的意义。自六十年代末以来,人们把各种实验技术应用到这一领域,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]以及各种光学方法,如光的反射与透射^[7]、椭偏光谱^[8-9]、Raman光谱法^[10]等。这些实验方法可分成两类:一是剥层法,把损伤层逐次剥去并测量,得到损伤随深度分布;另一是非剥层法,利用测得的损伤层信息直接计算出损伤分布。

利用椭偏光谱法研究离子注入Si损伤分布是一种方便和灵敏的方法。过去,计算时多用单层模型,把注入层看成一均匀损伤层。这只适用于高剂量注入,对一般情况,要结合剥层法才能求出损伤分布。

本文证明,应用多层模型和最优化方法,由实验测得的离子注入Si的椭偏光谱,以及c-Si和离子注入a-Si的光学常数,不用剥层测量,能分析离子注入Si的损伤分布。本文讨论了多层模型计算原理和椭偏光谱法灵敏度,模拟分析了Levenberg-Marquardt最优化方法的数学过程、模型误差与计算误差、实验误差(随机误差和系统误差)以及Si表面自然氧化层对最优化数学过程的影响。与Erman和Theeten^[11]的方法不同,本工作用两点序列割线法并逐次迭代,每次迭代同时计算多层模型中各层的损伤度,减少了计算费

本文于1985年10月收到

微电子研究所王晓阳为本工作提供TASC软件。

用。c-Si和离子注入a-Si的光学常数选用我们过去的结果^[12]，SiO₂的光学常数取自文献^[13]。计算程序采用编译BASIC语言，图由DXY-800绘图仪画出。

一、多层模型计算原理^[14]

我们在复折射率的意义上定义注入层的损伤度(无序度) $D(0 \leq D \leq 1)$ ：

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

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 不再象有效介质理论^[15]中的损伤度，反映非晶相与单晶相的体积比例关系，而表征注入层复折射率介于单晶态与非晶态复折射率之间的比例。在2.1~4.6eV能量范围内，我们分别用(1)式和有效介质理论计算了As⁺注入Si的光学常数，其结果相差 $\leq 2\%$ 。由于(1)式较简单，而且物理意义明确，我们用它计算注入层的光学常数。

若有一厚度为 Δh 的均匀介质薄层，其光学性质可由所谓特征矩阵描述：

$$\mathbf{M}(\Delta h) = \begin{pmatrix} \cos(k_0 N \Delta h \cos\theta) & -ip^{-1} \sin(k_0 N \Delta h \cos\theta) \\ -ip \sin(k_0 N \Delta h \cos\theta) & \cos(k_0 N \Delta h \cos\theta) \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中 θ 为波矢与薄层法线的夹角， k_0 为真空中波矢长度， N 为介质薄层的复折射率；对s波， $p = (\epsilon\epsilon_0)^{\frac{1}{2}}(\mu\mu_0)^{-\frac{1}{2}} \cos\theta$ ，对p波， $p = (\mu\mu_0)^{\frac{1}{2}}(\epsilon\epsilon_0)^{-\frac{1}{2}} \cos\theta$ 。

离子注入损伤层一般是非均匀的，其光学常数随深度变化。但只要把注入层分成一些足够薄的薄层，各薄层总可看成均匀的。由这些均匀介质膜层的特征矩阵 $\mathbf{M}_i(\Delta h)$ ($i = 1, 2, \dots$)可求出注入层的特征矩阵：

$$\mathbf{M}(h) = \prod_i \mathbf{M}_i(\Delta h) \quad (3)$$

式中 h 为各薄层厚度之和，即注入层厚度。由注入层的特征矩阵便可求出系统的椭圆参数 ϕ 和 Δ ：

$$\tan\phi e^{i\Delta} = f(h\nu, \mathbf{D}, h, \theta_0) \quad (4)$$

式中 $h\nu$ 为光子能量， \mathbf{D} 为损伤分布向量， θ_0 为入射角。

表1列出用Motooka和Watanabe^[6]的实验数值在我们的多层模型上计算的结果(圆括号内的数字)。光学常数为： $\lambda = 5461 \text{ \AA}$ ， $n_c = 4.080$ ， $k_c = 0.028$ ， $n_a = 4.797$ ， $k_a = 0.770$ 。SiO₂层的折射率 $n = 1.470$ 。从表1可见，计算结果与Motooka和Watanabe的结果(圆括号外的数字)相比较，符合得很好。

表1 计算结果与Motooka和Watanabe^[6]的结果比较(°)

样品	能量 (keV)	SiO ₂ 厚 (Å)	非晶层厚 (Å)	有SiO ₂ 层		无SiO ₂ 层	
				ψ	Δ	ψ	Δ
1	100	225	1800	22.1(21.9)	120.8(121.1)	17.2(17.1)	165.9(166.6)
2	50	225	880	23.0(23.0)	119.1(120.2)	18.3(18.2)	163.5(164.0)
3	30	8	800	18.5(18.5)	163.6(165.5)	18.4(18.4)	166.6(167.4)
平均相对偏差(%)				0.3	0.7	0.4	0.4

图1是用层厚为400Å的单层模型计算出的椭圆参数与光子能量和损伤度的关系曲面。Re和Im分别是(4)式的实部和虚部。从图可见，tanφ、cosΔ与损伤度的关系比较接近线性。

半导体的光吸收使光学测量方法在深度上受到限制，因此光学方法只能研究近表面薄层的性质。为分析Si的椭圆光谱法对于深度的灵敏度，考虑这样的系统：

在Si衬底某一深度处有一层

100Å厚的薄层，其n和k分别与衬底相差5%，设此系统和衬底的椭圆参数分别为(φ, Δ)和(φ_s, Δ_s)则量

$$S = [(\phi - \phi_s)^2 + (\Delta - \Delta_s)^2]^{-\frac{1}{2}} \quad (5)$$

反映椭圆光谱法的灵敏度^[11]。S越大，灵敏度越高，当薄层深度超过透入深度时，由于光被吸收使探测器无法接收到反射光，这时S趋于零，这就是极限深度。

图2分别画出了c-Si(a)和离子注入a-Si(b)衬底的S⁻¹与光子能量和深度的关系。从图可见，在2.1~4.6eV范围内，有效深度约有400~500Å。

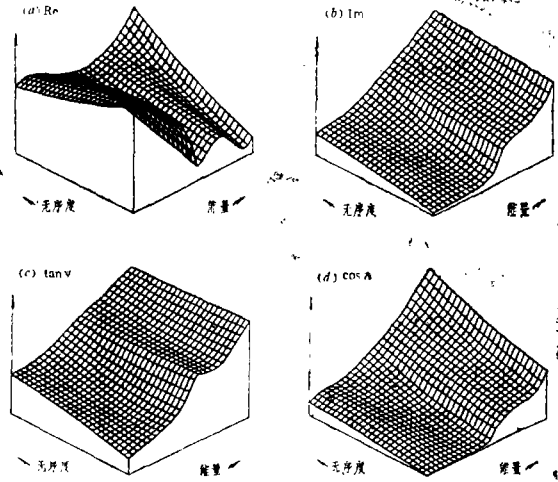


图1 由单层模型(厚400Å)算出的椭圆参数

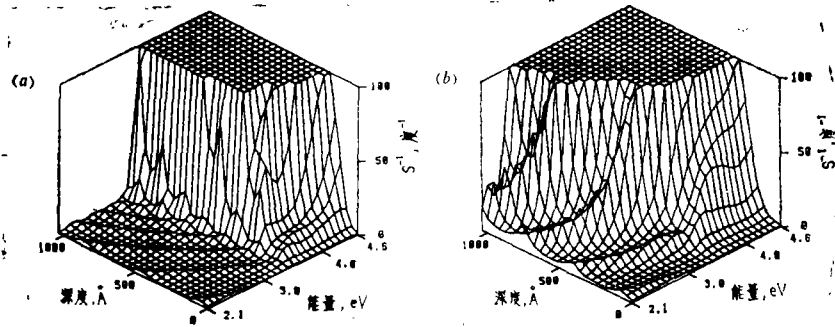


图2 c-Si(a)和离子注入a-Si(b)衬底的椭圆光谱法灵敏度分析

二、最优化方法

对应某一离子注入Si损伤分布，有一椭圆光谱，反之亦然。但它们之间的函数关系一般不能解析表示。由于损伤分布与波长无关，从椭圆光谱求损伤分布可采用最优化方法。

应用最小二乘原理,取标准偏差为目标函数:

$$\delta = (M - p)^{-\frac{1}{2}} \left[\sum_{h\nu} (\tan\phi_e - \tan\phi)^2 + \sum_{h\nu} (\cos\Delta_e - \cos\Delta)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

式中 $\tan\phi_e$ 、 $\cos\Delta_e$ 为实验值, $\tan\phi$ 、 $\cos\Delta$ 为计算值, M 为实验点数目, p 为多层模型的层数。本工作采用 Levenberg-Marquardt 最优化方法, Jacobi 矩阵由两点序列割线法求出^[17],适当选择阻尼因子,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圆参量与实验值在最小二乘意义下误差最小。即求出损伤分布 \mathbf{D} 使

$$\delta(\mathbf{D}) = \min. \quad (7)$$

计算机以给定的初值为出发点,按目标函数下降方向寻找最佳路径,迭代达到要求精度时,打印出损伤分布及其误差估计值。误差可由协方差矩阵求出^[18]:

$$\mathbf{V}_D = \langle (\mathbf{D} - \langle \mathbf{D} \rangle) (\mathbf{D} - \langle \mathbf{D} \rangle)^T \rangle \quad (8)$$

式中 $\langle \mathbf{D} \rangle$ 为损伤分布向量 \mathbf{D} 的数学期望, T 表示转置。初值的选择好坏直接影响计算费用和结果。计算时可取几组初值计算后求平均。

三、模拟分析

用20层,每层厚20 Å的多层模型模拟了一线性损伤分布(见图3)。计算了该分布对应的椭圆光谱,视为实验值。由多层模型(总厚度均为400 Å)和最优化方法计算了损伤分布,分析了理想情况下的数学过程和各种因素对目标函数的影响。

1. 理想情况的最优化数学过程

理想情况下,没有实验误差。最优化计算结果列于表2。表中数值为不同层数的多层模型算出的损伤度,括号中为模拟分布的线性插值结果。计算时,衬底均视为 $c\text{-Si}$ 。从表中可见,层数 p 较小时,结果与线性插值的数值相差甚大;随着 p 增加,计算结果渐接近线性插值结果,即模型误差变小,标准偏差也随之减小。

为分析多层模型中各层损伤度对目标函数的影响,这里用0.618法求出多层模型中各层损伤度与目标函数的关系曲线,结果见图4。图中(a)、(b)、(c)分别为2层、5层和10层模型的结果。计算某一层时,其它各层损伤度的值取表2中对应值。从图可见,表面层 δ 曲线形状最“瘦”,该层对目标函数的影响最灵敏,愈深入体内的层, δ 曲线形状愈“肥”,对目标函数的影响愈不灵敏。从不同层数的多层模型结果可知,模型层数愈多,损伤度的可确定性愈大,各层损伤度对目标函数的影响愈灵敏。

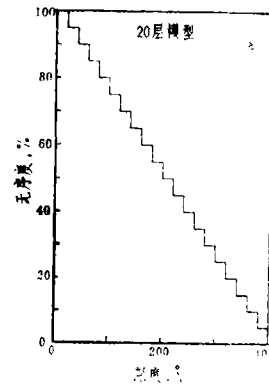


图3 模拟线性损伤分布

表2 理想情况下多层模型的损伤度计算结果(%)

层数p	2	3	4	5	6	10
每层厚度(Å)	200	133.3	100	80	66.7	40
第1层	87.8(77.5)	91.3(85.8)	94.6(90)	96.2(92.5)	97.4(94.2)	98.9(97.5)
第2层	25.3(27.5)	47.2(52.5)	58.2(65)	67.4(72.5)	72.3(77.5)	86.2(87.5)
第3层		23.3(19.2)	47.1(40)	57.4(52.5)	68.4(60.8)	77.8(77.5)
第4层			8.4(15)	30.2(32.5)	35.9(44.2)	68.0(67.5)
第5层				11.2(12.5)	33.6(27.5)	57.4(57.5)
第6层					7.2(10.8)	46.9(47.5)
第7层						37.3(37.5)
第8层						28.3(27.5)
第9层						17.7(17.5)
第10层						6.4(7.5)
标准偏差	1.7×10^{-2}	4.8×10^{-3}	6.2×10^{-4}	1.9×10^{-4}	3.8×10^{-5}	8.7×10^{-6}

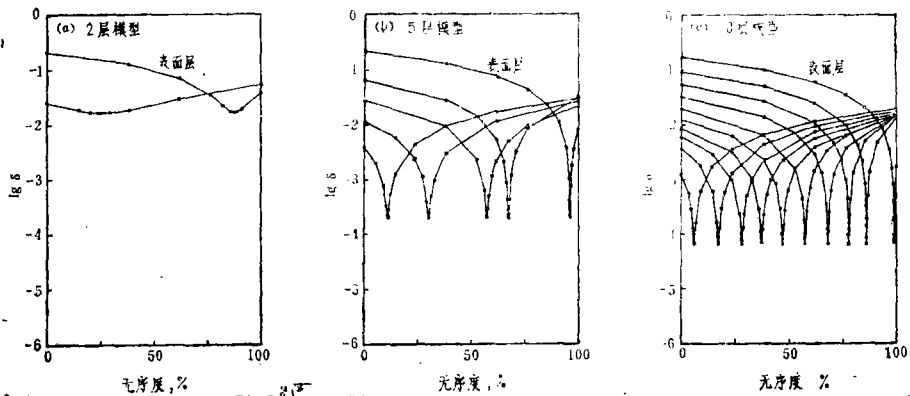


图4 目标函数与多层模型中各层损伤度的关系

2. 误差分析

(1) 模型误差与计算误差 用量 $E(p)$ 表示模型误差, 定义为:

$$E(p) = \frac{1}{h} \int_0^h |D_p - D_s| dh \quad (9)$$

式中 D_p 为 p 层模型算出的损伤分布, D_s 为模拟线性损伤分布(图3), h 为注入层厚度(400 Å)。计算结果见图5。图中用虚线标出表2中线性插值的模型误差, 还画出了存在随机误差 $\sigma = 2 \times 10^{-3}$ 和 8×10^{-3} 两种情况时的结果(详见下面)。

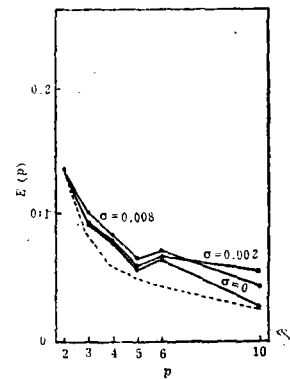


图5 模型误差与层数关系

总的看来, p 增加, $E(p)$ 减小, 但 $p=6$ 是一例外。由于计算机每次运算总取舍位长以后的数值, 增加模型层数虽能减小 $E(p)$, 但计算误差可能增大。

(2) 随机误差 设随机误差服从正态分布。这里分析了中噪声($\sigma = 2 \times 10^{-3}$)和高噪声($\sigma = 8 \times 10^{-3}$)情况下噪声对目标函数的影响。图 6 是标准偏差的变化, 从图易见, 噪声越大, 目标函数 δ 的极值随之增大。图 7 是目标函数的变化, 图中(a)和(b)分别为中噪声和高噪声两种情况下 5 层模型中各层损伤度对 δ 的影响。很明显, 随机误差愈大, δ 的形状愈“肥”, 不确定性增加, 在高噪声情况下, δ 的极值位置还发生移动。因此, 测量时要尽量减小随机误差。

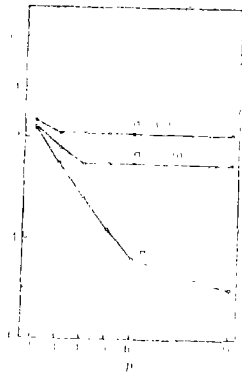


图 6 标准偏差与层数关系

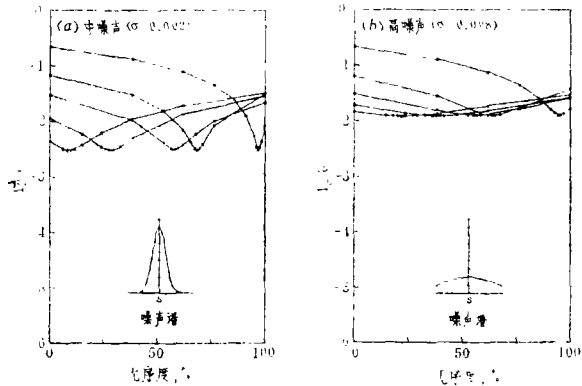


图 7 存在随机误差 $\sigma = 2 \times 10^{-3}$ (a)和 8×10^{-3} (b)时目标函数与各层损伤度的关系

(3) 系统误差 图 8 画出了 0.3° 入射角误差引起的目标函数的变化。其影响相当于高噪声情况。图中小图是改变入射角的值时目标函数的变化, 在 69.7° 位置 δ 有一极小值, 对应于入射角的准确值。从图可见, δ 对入射角的响应很灵敏, 因此测量时应校正仪器, 减小系统误差。Erman和Theeten^[11]用增加一层附加 SiO_2 层的办法来补偿由于入射角精度引起的误差。这一人为的 SiO_2 层虽能使目标函数得到改善, 但引起了 δ 极值位置的变化, 从而使求出的损伤分布偏离了原来的值而发生畸变。

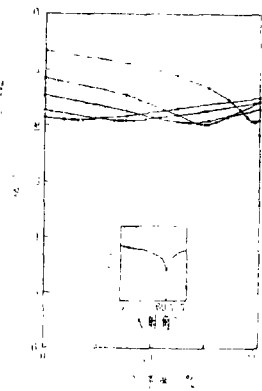


图 8 0.3° 入射角误差对目标函数的影响

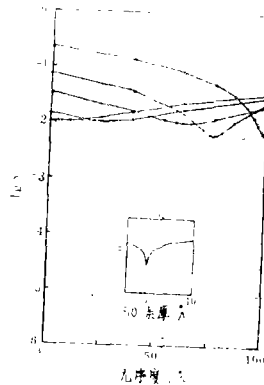


图 9 3\AA 厚自然氧化层对目标函数的影响

3. Si表面自然氧化层的影响

由于表面层对 δ 的贡献权重最大,从而Si表面自然氧化层厚度的估算准确与否对结果影响甚大。设Si表面存在3 Å厚的SiO₂层而计算时没有考虑,这时 δ 如图9所示。小图为改变SiO₂层厚度时 δ 的变化。3 Å处的极值对应SiO₂层厚度的准确值。

四、结 论

由离子注入Si的椭偏光谱及c-Si、离子注入a-Si的光学常数,利用多层模型和最优化方法,不用剥层测量,能有效地分析离子注入Si的损伤分布。此方法比剥层法、背散射等方便且容易实现。随着计算技术的不断提高,相信该方法会有效地被应用于Si以及其它半导体材料的离子注入损伤研究、集成电路工艺分析等领域。另一方面,与其它光学方法一样,由于光的吸收作用,其局限性是只能分析近表面的薄层。另外,实验误差、表面自然氧化层厚度估算的准确性对结果的影响也较大。

作为应用例子,我们计算了40keV、 4×10^{13} 和 $1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 的As⁺注入Si的损伤分布,与背散射方法测得的损伤分布相符合,其结果已另撰文或尚待发表^[19]。

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] 莫党, 叶贤京, *物理学报*, 30 (1981), 1287.
- [10] J. C. Bourgoin, J. F. Morhange and R. Beserman, *Radiat. Effe.*, 22(1974), 205.
- [11] M. Erman and J. B. Theeten, *Surface and Interface Analysis*, 4(1982), 98.
- [12] 莫党, 何星飞, 江任荣, 项颂光, *红外研究*, 3 (1984), 338.
- [13] I. H. Malitson, *J. Opt. Soc. Am.*, 55 (1965), 1205.
- [14] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, 5th ed. (Pergamon, Oxford, 1975), ch.1

- [15] I. Webman, J. Jortner and M. H. Cohen, *Phys. Rev.*, B 15 (1977) 5712.
[16] T. Motooka and K. Watanabe, *J. Appl. Phys.*, 51 (1980), 4125.
[17] 王德人, 非线性方程组解法与最优化方法, 高等教育出版社, 1979.
[18] 李惕碚, 实验的数学处理, 科学出版社, 1980.
[19] Mo Dang (莫党) and He Xingfei (何星飞), *Chin. Phys. Lett.*, 3(1986), 229.

Studies of Damage Profile in Ion Implanted Si by Spectroscopic Ellipsometry: An Optimization Method of Multilayer Model

He Xingfei Mo Dang

Abstract

By means of optimization with a multilayer model, the damage profile of ion implanted Si can be obtained from a number of independent data measured by spectroscopic ellipsometry as well as optical constants of crystalline and ion implanted amorphous state of Si. We discussed the calculation principle of multilayer models and, using a simulated test, analysed the mathematical procedure of Levenberg-Marquardt optimization method with special attention to the influence of model errors, calculating errors, random errors, systematic errors and native oxide layer on the surface of Si.