

ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ GaAs—АНОДНЫЙ ОКИСЕЛ

Макарова Т. Л., Шаронова Л. В.

Эллипсометрическим методом исследована структура арсенид галлия—анодный окисел в комплексном самосогласованном эксперименте, включающем многоугловые измерения на 6 длинах волн в диапазоне 0.4765—0.6328 мкм. Установлена оптическая модель структуры, детектирован переходный слой и определены его параметры. В указанном спектральном диапазоне измерены оптические константы и дисперсия всех слоев, входящих в систему.

По мере того как полупроводниковая электроника обращается к структурам с тонкими и сверхтонкими слоями, все большее применение для их анализа находит эллипсометрический метод. Особенно хорошо это видно на примере структур, состоящих из слоев GaAs и его твердых растворов, в том числе структур со сверхрешетками (см., например, [1-3]). Настоящая работа ограничивается анализом сравнительно простой системы — GaAs—анодный окисел.

При выборе объекта исследований мы руководствовались следующим. Во-первых, анодный окисел нередко выступает в качестве функционального элемента приборных полупроводниковых структур на GaAs, в этом случае детальная информация о компонентах (слоях) структур имеет прямой практический смысл. Во-вторых, параллельно решалась и методическая задача. Дело в том, что в обычных условиях, при измерениях в воздушной среде, абсолютно чистая полупроводниковая поверхность нереализуема, и фактически приходится иметь дело со структурой полупроводник—естественный окисел. В силу случайной природы окисла а priori невозможно учесть, какие коррективы он вносит в измеряемые эллипсометрические параметры. Поэтому нам представлялось целесообразным неконтролируемый естественный окисел заменить слоем анодного окисла с контролируемыми свойствами и оценить возможности эллипсометрического метода применительно к анализу такой, в некотором смысле модельной, структуры.

В литературе имеются данные эллипсометрических исследований, относящиеся к GaAs, например, [4, 5], к анодному окислу [6], и даже к переходному слою на границе GaAs—анодный окисел [7]. Однако во всех упомянутых и других известных нам сообщениях речь идет об изучении отдельных компонент структуры. Особенность данной работы состоит в том, что проведен анализ системы GaAs—анодный окисел в целом и всех ее компонент. Данные других работ, в том числе значения комплексного показателя преломления GaAs из [4], которые представляются достоверными и включаются разными авторами в расчеты при обработке экспериментальных результатов, нами использовались лишь для промежуточных оценок и уточнялись при анализе.

Для приготовления образцов были взяты гомоэпитаксиальные слои GaAs с зеркальной поверхностью, полученные МОС гидридным способом на подложках ориентации (100).¹ Анодный окисел выращивался на эпитаксиальной поверхности из электролита, состоящего из 3%-го раствора винной кислоты и аммиака (pH=6) в смеси с этиленгликолем в соотношении 1 : 3.² Выращива-

¹ Авторы благодарят О. В. Коваленкова и Б. С. Явича за предоставление образцов.

² Использовалась обычная технология (см., например, Hasegawa H., Hartnagel H. L. // J. Electrochem. Soc. 1976. V. 123. P. 713—722).

ние проводилось в гальваностатическом режиме при плотности тока $j=1 \text{ мА/см}^2$, постоянном перемешивании, использовании в качестве катода пластины из платины, воздействии белым светом. Зависимость толщины анодного окисла от напряжения окисления была линейной с наклоном 19.3 \AA/V , что свидетельствовало об однородности растущего слоя и облегчало получение заранее заданной его толщины $d_{\text{ок}}$.

Измерения эллипсометрических параметров (Δ , ψ) осуществлялись с помощью прибора ЛЭФ-ЗМ, рабочий диапазон углов падения составлял $50-85^\circ$. В качестве источников излучения использовались гелий-неоновый лазер (6328 \AA) и аргоновый лазер (пять длин волн в диапазоне $4765-5145 \text{ \AA}$).

Физический смысл параметров Δ , ψ обычный, он определен основным уравнением эллипсометрии [8]:

$$\rho = R_p/R_s = \text{tg } \psi \exp(i\Delta), \quad (1)$$

где R_p , R_s — комплексные коэффициенты отражения для p - и s -компонент электрического вектора соответственно, $\text{tg } \psi$ — отношение их модулей, Δ — разность фаз.

Анализ системы GaAs—анодный окисел включает в себя в первую очередь определение показателя преломления анодного окисла $n_{\text{ок}}$ (в используемом спектральном диапазоне, согласно [6], полагаем, что $k_{\text{ок}}=0$), толщины слоя окисла $d_{\text{ок}}$, комплексного показателя преломления GaAs $N=n-ik$ и во вторую очередь — описание переходного слоя на гетерофазной границе в простейшей модели — через его толщину d' и комплексный показатель преломления $N'=n'-ik'$.

Факт существования переходного слоя на границе GaAs—окисел, судя по литературным данным [7, 9], можно считать доказанным. Однако если существует неопределенность в комплексном показателе преломления подложки, то на основании обычных эллипсометрических измерений, проводимых для полупроводниковых структур, как правило, при $\lambda=6328 \text{ \AA}$ (гелий-неоновый лазер) и при углах падения света вблизи $\varphi=70^\circ$ (область главного угла), невозможно получить даже доказательств существования или отсутствия переходного слоя на границе и тем более не имеет смысла обсуждать его характеристики. Поясним высказанное утверждение с помощью рис. 1, где приведены такого рода результаты, — экспериментальная номограмма, снятая на наших структурах GaAs—окисел при [толщинах окисла $d_{\text{ок}} \leq 100 \text{ \AA}$, причем каждая точка соответствует слою окисла, выращенному заново. Здесь же (на рис. 1) кривыми a , a' представлен расчет, выполненный для модели резкой границы GaAs—окисел (без какого-либо переходного слоя), в котором для GaAs мы использовали $N=3.855-i \cdot 0.196$ из [4] и полагали, что реальное значение $n_{\text{ок}}$ находится в интервале $n_{\text{ок}}=1.6-1.8$ [6]. Расхождение кривых a , a' с экспериментом свидетельствует о несоответствии между расчетной моделью и реальной структурой. Формально из рис. 1 следует, что для достижения согласия было бы достаточно перенести кривые в плоскости $\Delta-\varphi$ до совмещения с экспериментальными точками, например, взяв за начало ($d_{\text{ок}}=0$) точку B (новые кривые обозначим b , b'). Очевидно, что, оставаясь в рамках модели резкой границы, такое преобразование можно осуществить за счет внесения поправок в комплексный показатель преломления подложки, если принять, что в координатах $\Delta-\psi$ подложка GaAs отображается точкой B , а не точкой A . Однако расчет убеждает в том, что кривые b , b' могут быть получены и в иной модели — с тонким переходным слоем, если только выполняется условие, что значения Δ , ψ в точке B есть эллипсометрические параметры структуры, состоящей из подложки и переходного слоя. Отсюда следует, что неопределенность в $N=n-ik$ приводит к множеству моделей, одинаково пригодных для описания эксперимента, расчет по которым даже неразличим в масштабе рис. 1. Для примера скажем, что кривые b , b' были получены расчетом: 1) в модели резкой границы, $N=3.823-i \cdot 0.327$; 2) в модели структуры с переходным слоем, $N=3.855-i \cdot 0.196$; $N'=2.7-i \cdot 0.05$, $d'=20 \text{ \AA}$. Из приведенных рассуждений

можно сделать вывод, что эксперимент не опровергает представлений о переходном слое на границе GaAs—окисел, хотя и не подтверждает их.

На рис. 1 помимо изложенного показан случайный разброс параметров Δ , ψ , относящихся к образцам с естественным окислом (точки, соответствующие $d_{ox} < 30 \text{ \AA}$), о котором упоминалось выше.

В дальнейшем изложении содержание и последовательность разделов 1—4 отражают основные этапы эллипсометрического анализа структур GaAs—анодный окисел: 1 — определение точных значений n_{ox} (для предварительных

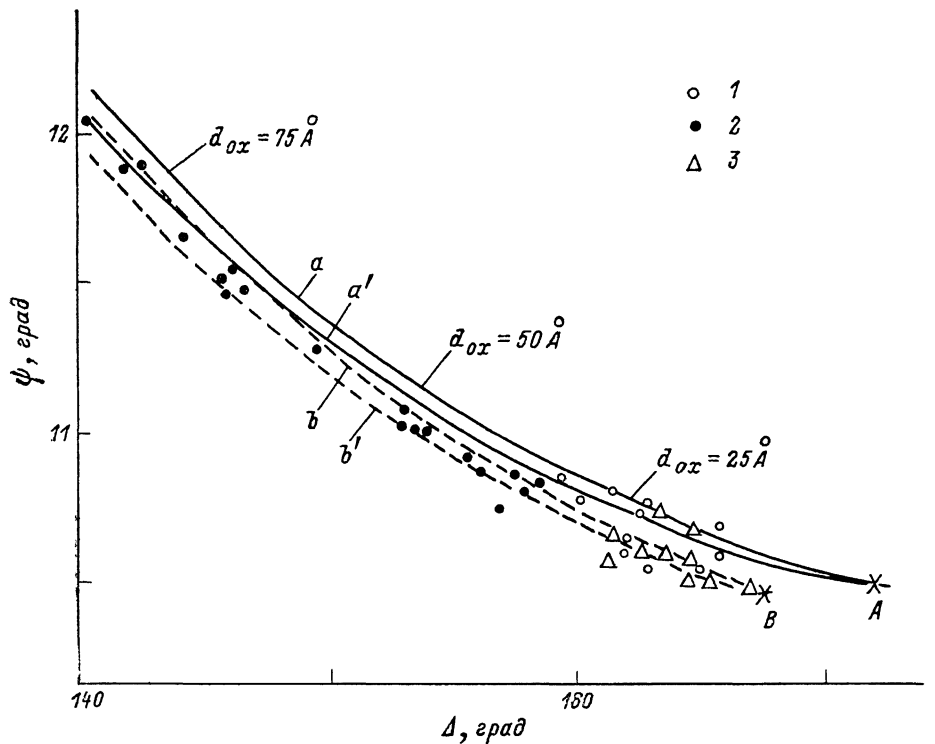


Рис. 1. Эллипсометрические параметры системы GaAs—окисел.

$\lambda = 6328 \text{ \AA}$, $\phi = 70$ град. Эксперимент: 1 — поверхность GaAs с естественным окислом после длительного хранения образцов, 2 — поверхность GaAs с анодным окислом, 3 — поверхность GaAs непосредственно после снятия окисла в HF. a , a' — расчет в модели резкой границы GaAs—окисел, $N = 3.855 - i \cdot 0.196$ [4]; b , b' получены параллельным переносом кривых a , a' . Точки A, B соответствуют $d_{ox} = 0$.

оценок использованы приближенные значения n_{ox} и $N = n - ik$); 2 — выбор модели переходного слоя при известных точных значениях n_{ox} из 1 и приближенных значениях $N = n - ik$; 3 — определение оптических постоянных подложки GaAs $N = n - ik$ и попутно толщины окисла d_{ox} при известных n_{ox} из 1 и параметрах переходного слоя d' и $N' = n' - ik'$ из 2; 4 — проверка и уточнение модели, основанные на решении обратной задачи относительно n_{ox} и d_{ox} при известных d' , $N' = n' - ik'$ из 2 и $N = n - ik$ из раздела 3.

Измерения проводились нами в воздушной среде, и соответственно во всех расчетах полагается показатель преломления среды $N_0 = 1$.

Перейдем теперь к основным этапам эллипсометрического анализа.

1. Анодный окисел

Задача по определению показателя преломления анодного окисла n_{ox} решалась в два этапа: первоначально при постановке эксперимента и анализе результатов мы исходили из модели диэлектрический слой—диэлектрическая подложка (см. п. 1.1), а впоследствии ввели поправки, связанные с наличием экстинкции в подложке GaAs (см. п. 1.2).

Прежде чем перейти к реальному эксперименту, необходимо коснуться общих положений, взятых за основу. Будем отталкиваться от гипотетической системы из слоя окисла с $n_{\text{ок}}=1.8$ на подложке с $N=3.86-i.0$, т. е. по своим свойствам близкой к структуре GaAs—окисел. Расчетная номограмма $\psi-\Delta$ изображена на рис. 2, а в виде линий постоянного угла падения (сплошные) и линий постоянной толщины (штриховые).

Для определения $n_{\text{ок}}$ существуют следующие хорошо известные факты, отражающие свойства эллипсометрической функции (см., например, [8]).

1) Коэффициенты Френеля для рассматриваемой системы содержат циклическую функцию толщины верхнего слоя (окисла), вследствие чего эллипсометрические параметры Δ , ψ изменяются периодически по мере роста $d_{\text{ок}}$.

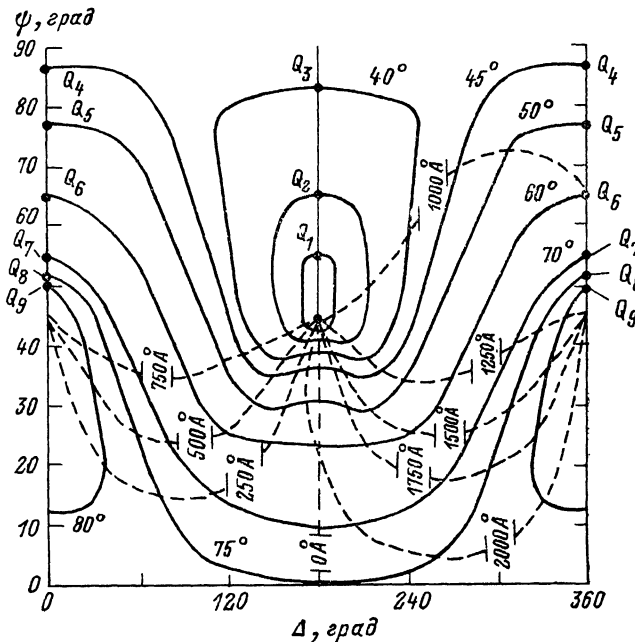


Рис. 2. $\psi-\Delta$ -Номограмма, расчет для модельной структуры диэлектрический слой—подложка ($n_{\text{ок}}=1.8$, $n=3.85$).

Сплошные кривые — линии постоянного угла падения φ , штриховые — линии постоянной толщины.

2) Период изменения Δ , ψ соответствует изменению толщины слоя на величину

$$\delta d_{\text{ок}} = T \equiv \lambda/2 (n_{\text{ок}}^2 - \sin^2 \varphi)^{1/2}. \quad (2)$$

3) Каждая линия постоянного угла φ проходит в середине эллипсометрического периода через точку с характерной величиной Δ : либо $\Delta=180^\circ$ (точки Q_1-Q_3 на рис. 2), либо $\Delta=0^\circ$ (360°) (точки Q_4-Q_9 на рис. 2); это позволяет определить величину T путем регистрации указанных характерных точек.

Высказанные соображения были положены нами в основу определения $n_{\text{ок}}$ по величине периода T . На первый взгляд, это не сильно отличается от обычного интерференционного способа определения показателя преломления, когда период T находится по экстремумам отражения в неполяризованном свете. Этот способ был, например, использован при исследовании анодного окисла на GaAs в [11]. Однако неотъемлемое от метода эллипсометрии измерение параметра Δ дает существенное преимущество, которое следует из номограммы рис. 2 и более очевидно из рис. 3, изображающего расчетные зависимости $\Delta=f(d_{\text{ок}})$ в широком диапазоне изменения переменной $d_{\text{ок}}$. Видно, что вблизи искомых характерных точек $\Delta=180^\circ$ (или $\Delta=0^\circ$) производная $\partial\Delta/\partial d_{\text{ок}}$ велика, что позволяет рассчитывать на определение величины T с малой ошибкой по $d_{\text{ок}}$. Для системы типа GaAs—окисел в рассматриваемом спектральном интер-

вале резкая зависимость $\Delta = f(d_{ox})$ вблизи характерных точек Δ реализуется в широком диапазоне углов падения, причем оптимальными являются углы, отвечающие переходу от «замкнутой» номограммы к «раскрытой» (точки Q_3, Q_4 на рис. 2). Более подробно этот вопрос обсуждается, например, в [7, 12].

Перейдем к рассмотрению реального эксперимента на структурах GaAs—анодный окисел.

1.1. *Определение n_{ox} в модели окисел—диэлектрическая подложка.* Указанные выше технологические режимы позволяли вырастить однородный анодный окисел лишь до толщин $d_{ox} < 2000 \text{ \AA}$, поэтому мы были ограничены рамками первого эллипсометрического периода. Измерения проводились при постоянной d_{ox} и фиксированных λ_i . Единственным плавно варьируемым параметром являлся угол падения φ . Режим окисления был выбран нами из расчета получе-

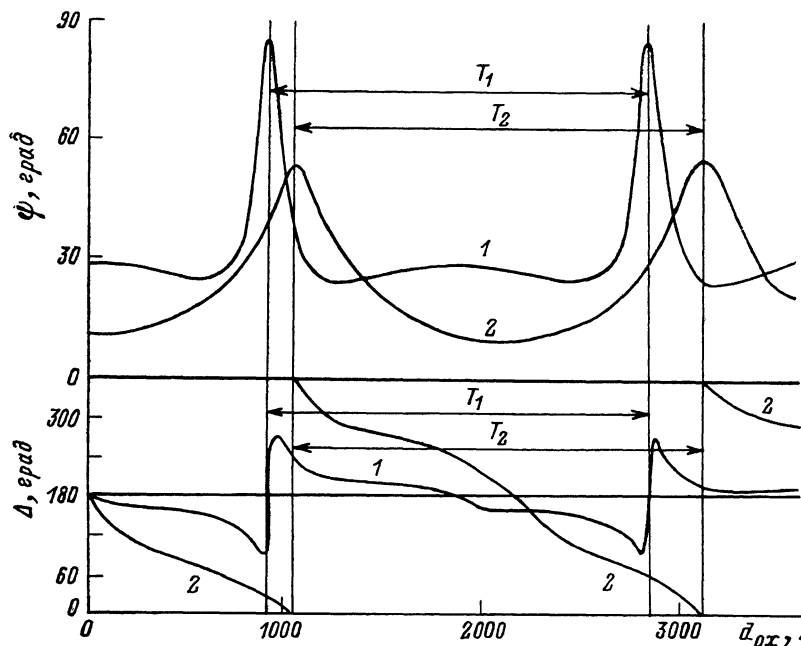


Рис. 3. Зависимость эллипсометрических параметров ψ, Δ для модельной структуры диэлектрический слой—подложка от толщины слоя диэлектрика d_{ox} .

Расчет: $n_{ox}=1.8, N=3.85 - i \cdot 0; \lambda=6328 \text{ \AA}$. φ , град: 1 — 40, 2 — 70.

ния $d_{ox} \approx T/2$, что по оценкам составляло 760—770 \AA . Приблизительный контроль толщины осуществлялся измерением Δ, ψ при $\varphi=70^\circ$ и решением обратной эллипсометрической задачи в модели пленка—подложка. Окончательно толщину окисла, близкую к $T/2$, подбирали эмпирически, путем неоднократного повторения заново процесса окисления при последующем эллипсометрическом контроле. Цель считали достигнутой, когда для каждой λ_i (в действительности, за исключением 6328 \AA) удавалось найти угол φ_i , при котором $\Delta=0^\circ$.

В результате для исследуемого образца были определены различные сочетания значений λ_i, φ_i , при которых $\Delta=0^\circ$. В предположении $k=0$, принятом ранее, должно выполняться строгое равенство $d_{ox}=T/2$ при всех парах значений λ_i, φ_i . Учитывая, что измерения проведены на одном и том же образце, т. е. $d_{ox}=\text{const}$, получаем систему уравнений

$$\lambda_m/2 (n_{oxm}^2 - \sin^2 \varphi_m^2)^{1/2} = \lambda_l/2 (n_{oxl}^2 - \sin^2 \varphi_l^2)^{1/2} \quad (3)$$

(индексы m и l относятся к различным λ_i). Определим из (3) значения n_{oxi} , задавшись линейным законом дисперсии показателя преломления для любого спектрального интервала $\delta\lambda_{mi}$:

$$n_m = n_l [1 + (\partial n/\partial \lambda) \delta\lambda_{mi}/n_l], \quad (4)$$

где $\frac{dn}{d\lambda} = \text{const}$. Это представляется допустимым, так как весь спектральный интервал $\lambda = 4765 - 6328 \text{ \AA}$ мал и к тому же лежит в области, где оптические спектры окисла GaAs не имеют резких особенностей. Уравнения (3) с учетом (4) решались относительно n_{ox} с использованием измерений на всех пяти длинах волн λ_i . Найденные значения n_{ox} нанесены на рис. 4 точками 1.

1.2. Поправки в n_{ox} , связанные с экстинкцией в подложке. Наличие экстинкции в подложке вносит начальный сдвиг фазы, т. е. при $d_{ox} = 0 \Delta \neq 180^\circ$, и, следовательно, зафиксированная в эксперименте точка $\Delta = 0^\circ$ не точно соответствует $T/2$. Поэтому в найденные значения n_{ox} , необходимо внести поправки, обусловленные $k \neq 0$. При рассмотрении поправок ограничимся областью малых

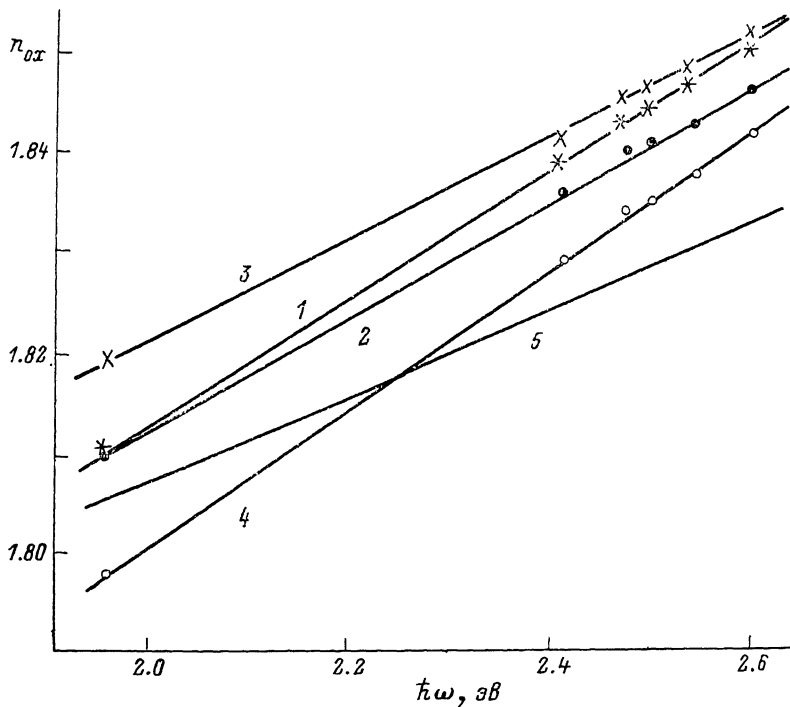


Рис. 4. Спектральная зависимость показателя преломления n_{ox} окисла в структуре GaAs—анодный окисел.

Точки — значения, полученные в результате обработки эллипсометрического эксперимента: 1 — из решения уравнений (3) с учетом (4); 2 — из решения уравнений (8); 3, 4 — из решения обратной эллипсометрической задачи в модели диэлектрический слой—подложка; 3 — с использованием констант подложки из [4], 4 — с использованием в качестве оптических констант подложки эффективных значений \tilde{n} , \tilde{k} , найденных из эллипсометрических измерений при $\varphi = 70$ град на свежеравненной поверхности образца; 5 — расчет по формуле Зеллмейера из (6); $\hbar\omega$ — энергия фотона.

k ($k \leq 1$), характерных для GaAs и ряда других полупроводников в спектральном диапазоне, реализуемом в нашем эксперименте.

Для решения задачи о поправках мы использовали численный анализ. Обратимся к рис. 5, который содержит начальный участок ($d_{ox} \leq 100 \text{ \AA}$) линий постоянного угла, рассчитанный при разных k . Он иллюстрирует как сдвиг начальной точки относительно $\Delta = 180^\circ$ с ростом k , так и то обстоятельство, что вариации в величинах k и d_{ox} приводят к сходным между собой перемещениям точки на $\Delta - \psi$ -номограмме, т. е. вклады от k и d_{ox} в величину ψ различаются слабо, а в величину Δ неразличимы вообще. Именно в указанном смысле следует говорить о корреляции параметров структуры k и d_{ox} . Неразличимость вкладов k и d_{ox} в Δ дает основание описывать их аналогичным образом. Как известно [8], в приближении Друде, справедливом при $d_{ox} \leq 100 \text{ \AA}$, с ростом толщины окисла величина Δ изменяется линейно:

$$\Delta|_{d_{ox}} - \Delta|_0 = C_d d_{ox}. \quad (5)$$

Запишем аналогично сдвиг фазы, связанный с экстинкцией в подложке:

$$\Delta|_k - \Delta|_0 = C_k k. \quad (6)$$

Величины C_d , C_k играют роль коэффициентов пропорциональности в (5) и (6) соответственно. Из (5) и (6) следует, что поправка в величине Δ , обусловленная $k \neq 0$, может быть учтена через величину d_0 , имеющую размерность толщины, именно

$$d_0 = (C_k/C_d)k = Ck, \quad (7)$$

если использовать ее в качестве начала отсчета в эллипсометрическом периоде, т. е. положить $d_{ox} = -d_0$ вместо $d_{ox} = 0$. Безусловно, значения C_d , C_k и, следовательно, $C^{-1} = C_d/C_k$, вообще говоря, зависят от заложенных в расчет параметров структуры, а также от угла падения φ и длины волны λ . Чтобы определить рамки применимости поправки, был проведен прямой численный расчет. Установлено, что в условиях проводимого нами эксперимента правомочно коэффи-

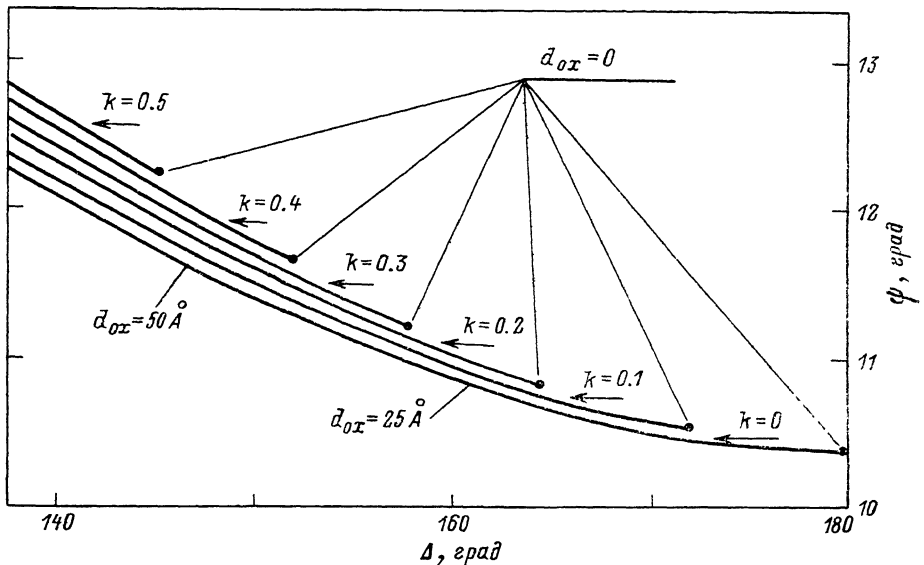


Рис. 5. Начальный участок линии постоянного угла падения $\varphi = 70$ град ψ - Δ -номограммы при разных k .

циент C считать постоянным: $C^{-1} = 0.0093 \pm 0.0001 \text{ \AA}^{-1}$. В пределах указанной ошибки величина C оказалась устойчивой к вариации расчетных параметров в интервалах: $n_{ox} = 1.7 \div 2.3$; $k = 0 \div 1$; $\varphi = 40 \div 85^\circ$.

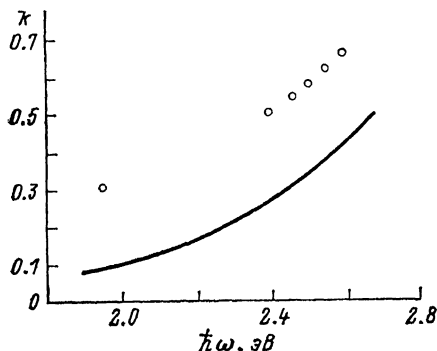
В свете изложенного уравнения (3) преобразуются к виду

$$\lambda_m/2(n_{oxm}^2 - \sin^2 \varphi_m)^{1/2} - Ck_m = \lambda_l/2(n_{oxl}^2 - \sin^2 \varphi_l)^{1/2} - Ck_l. \quad (8)$$

Для решения (8) относительно n_{ox} необходима информация о дисперсии величины k . Подчеркнем, что важно точно знать лишь разности $k_m - k_l$, а не сами абсолютные значения. Это обстоятельство существенно упрощает задачу. Значения k_i для всех λ_i мы определили из обычных прямых эллипсометрических измерений на свежетавленной пластине GaAs с последующим решением обратной задачи в модели чистой поверхности; результаты приведены на рис. 6. Понятно, что и в таком эксперименте на поверхности GaAs присутствует естественный окисел, который не учитывается в решении обратной задачи и, следовательно, вносит ошибку в абсолютные значения k_i . Однако, в силу того что толщина окисла мала, и опять же в силу соотношений (5), (6) он вряд ли может существенно повлиять на характер дисперсии $dk/d\lambda$. Значит, подстановка полученных значений k_i в систему уравнений (8) должна давать правильный окон-

нальный результат. Заметим, что наша экспериментальная зависимость $k=f(\lambda)$ (рис. 6) с точностью до сдвига по оси k повторяет аналогичную зависимость из [4], т. е. величины $dk/d\lambda$ совпадают.

Уравнения (8) были решены относительно значений n_{ox} , они представлены на рис. 4 точками 2. Видно, что учет экстинкции в подложке GaAs привел к существенным поправкам: 1) прямая $n_{ox}=f(\lambda)$ сместилась в сторону меньших значений n_{ox} ; 2) изменился ее наклон, т. е. изменилась величина дисперсии $dn/d\lambda$. Поскольку эти результаты получены из прямых эллипсометрических измерений без использования какой-либо дополнительной информации о параметрах подложки, они представляются достоверными, и логично им отдать



предпочтение перед другими данными, в частности точками 3, 4 на рис. 4, определенными для тех же образцов иначе, т. е. с использованием решения

Рис. 6. Спектральная зависимость коэффициента экстинкции GaAs.

Точки — результаты эллипсометрических измерений на свежеравнушенной поверхности образца с последующим решением обратной эллипсометрической задачи в модели атомарно гладкой поверхности. Сплошная кривая — из [4].

обратной эллипсометрической задачи (подробнее см. в подписи к рис. 4). При решении обратной эллипсометрической задачи не исключена возможность ошибки, обусловленной как неточными расчетными значениями параметров подложки, так и переходным слоем на границе, который заранее не известен и поэтому не может быть включен в расчет.

В нашем варианте ошибка в n_{ox} складывается из ошибки, с которой мы фиксируем $\Delta=0^\circ$, равной $\delta\Delta=1'$, и ошибки при регистрации φ_i , равной $\delta\varphi_i=1'$. Она оценивается величиной $\delta n_{ox} \leq \pm 0.001$.

Следует заметить, что наши экспериментальные данные несколько расходятся с расчетом (рис. 4, кривая 5) по полуэмпирической формуле Зеллмейера, выведенной в [6] в итоге подробного исследования анодного окисла в широком спектральном диапазоне. Мы полагаем, что расхождение, скорее всего, обусловлено структурным различием окислов вследствие неидентичности технологических режимов выращивания.

2. Переходный слой

Как показано на рис. 3, в тех же точках, где $\Delta=180^\circ$ (0°), зависимость $\psi=f(d_{ox})$ имеет особенности в виде экстремумов. Соображения относительно природы экстремумов и их свойств подробно изложены в [7], и мы попытались воспользоваться ими для выявления переходного слоя на границе. Суть дела в том, что для заданных n_{ox} и λ имеются углы φ , при которых s-поляризация подавляется ($\psi \rightarrow 90^\circ$). При этом максимумы превращаются в узкие пики резонансного типа, а их амплитуда сильно зависит от условий отражения на границе окисел—подложка, т. е. от свойств переходного слоя. Для структуры, номограмма которой изображена на рис. 2, резонанс может наблюдаться при углах $\varphi \cong 40-50^\circ$. Аналогичные рассуждения справедливы и для зависимости $\psi(\lambda)$, с той лишь разницей, что необходимо в рассмотрение включить дисперсию величин n_{ox} и n .

2.1. *Качественный выбор модели переходного слоя.* В нашем эксперименте углы падения $40-50^\circ$, необходимые для достижения резонанса, не попадали в рабочий диапазон эллипсометра. Измерения вблизи $\Delta=0^\circ$ при разных λ_i , за исключением 6328 \AA , нами были проведены при $\varphi=57^\circ$, т. е. не строго в условиях резонанса, но вблизи него. Существенно, что даже в этом случае максимум $\psi=f(\lambda)$ оказывается острым и потому позволяет рассчитывать на выявление

ние переходного слоя. Как это выглядит в действительности, показано на рис. 7, где экспериментальные результаты в виде $\operatorname{tg} \psi = f(\lambda)$ представлены в сравнении с расчетом по трем различным моделям структуры: резкая граница окисел—подложка (кривая 1); на границе присутствует слой свободного As (кривая 2); на границе имеется переходный слой, представляющий собой смесь материала окисла ($\text{Ga}_2\text{O}_3 + \text{As}_2\text{O}_3$) и материала подложки GaAs. Рассмотрим, в какой степени каждая модель согласуется с экспериментом.

Первая модель, т. е. представление о резкой границе, как видно, не удовлетворяет результатам измерений, и тем самым еще раз (в дополнение к рис. 1) подтверждается необходимость включения в расчет переходного слоя.

При выборе второй и третьей моделей мы опирались на две основные точки зрения, существующие в литературе [9] относительно свойств гетерофазной границы GaAs—окисел. Вполне вероятно, что вторую модель можно было бы

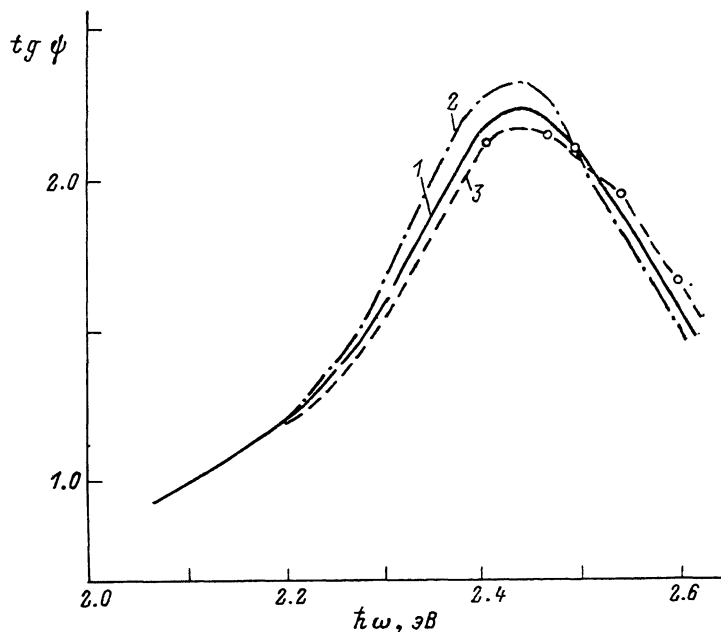


Рис. 7. Подбор модели переходного слоя в системе GaAs—окисел по спектральной зависимости $\operatorname{tg} \psi$ ($\varphi = 56$ град).

Эксперимент — точки. Расчет: 1 — резкая граница GaAs — окисел; 2 — на границе слой As, 2Å , $N_{\text{As}} = 3.7 - i \cdot 1.7$ [10]; 3 — на границе слой с $N' = 2.90 - i \cdot 0.12$ (20 Å).

вообще не рассматривать, если считать установленным [9], что появление свободного As на границе характерно для термических окислов на GaAs и не характерно для анодных. Тем не менее, допуская такую ситуацию, и в случае анодного окисла мы провели расчет, предположив на границе наличие As в виде монослоя толщиной $d' = 2 \text{Å}$ (рис. 7, кривая 2). Как и ожидалось, по сравнению с моделью резкой границы включение в расчет As лишь усугубляет расхождение с экспериментом, и, значит, вторая модель также должна быть отвергнута.

2.2. *Количественное описание переходного слоя.* Перейдем к рассмотрению третьей модели, которая в конечном счете и легла в основу интерпретации результатов. Исходно мы полагали, что переходный слой содержит равные объемы атома окисла и GaAs, и, воспользовавшись выражением для комплексного показателя преломления в методе эффективной среды [13], оценили его величину: $N' = 2.90 - i \cdot 0.12$. Вообще говоря, к обсуждаемым тонким слоям такой подход вряд ли применим, и поэтому значение N' следует воспринимать как чисто формальное. Тем не менее оказалось, что, приписав его переходному слою и подбирая толщину слоя, удастся привести расчет в соответствие с экспериментом. Наилучшее согласие достигается при $d' = 20 \text{Å}$, о чем и свидетельствует кривая 3 на рис. 7.

Как выяснилось при ближайшем рассмотрении, в большей степени реальной структуре отвечает переходный слой с уточненными параметрами: $n'=3.0$, $k'=0.15$, $d'=20 \text{ \AA}$. Убедительным доказательством того, что параметры выбраны правильно, служит рис. 8, а, на котором представлены разностные зависимости $\psi - \bar{\psi} = f(\lambda)$, полученные как результат вычитания кривой 3 (рис. 7) из экспериментальных ψ , а также для сравнения из кривых 1 и 2. Через $\bar{\psi}$ специально обозначены расчетные данные кривой 3 (рис. 7), относящиеся к основной выбранной модели переходного слоя. Аналогично далее введено обозначение $\bar{\Delta}$.

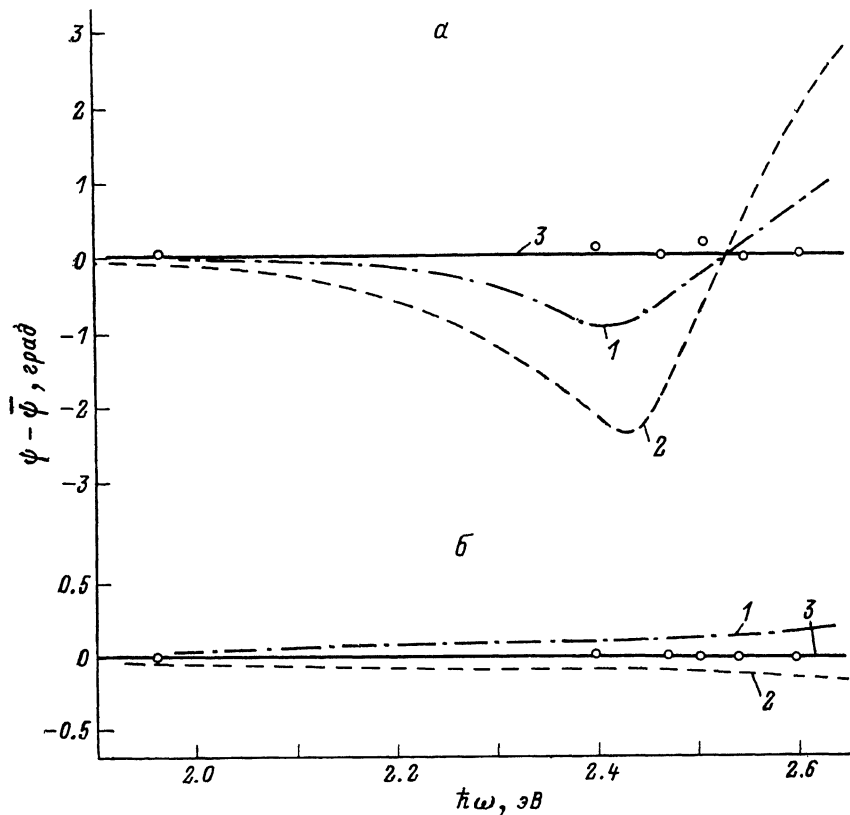


Рис. 8. Спектральная зависимость величины $\psi - \bar{\psi}$.

φ , град: а — 56, б — 70. Обозначения экспериментальных точек и расчетных кривых соответствуют обозначениям $\psi = f(\lambda)$ на рис. 6. $\psi - \bar{\psi} = 0$ отражает расчет по основной модели с переходным слоем: $N' = 3.0$ — $i \cdot 0.15$, $d' = 20 \text{ \AA}$.

Для полноты информации на рис. 8, б приведены аналогичные данные, но полученные при $\varphi = 70^\circ$, т. е. в условиях, как правило, используемых при анализе полупроводниковых структур. Рис. 8, а и б, являются наглядной иллюстрацией к следующему факту: обсуждаемые тонкие слои на границе полупроводник—окисел в обычных эллипсометрических измерениях при $\varphi = 70^\circ$ практически не обнаруживаются, и вместе с тем, если приблизиться к условиям резонанса или, что еще лучше, его достичь, появляется возможность анализа переходных слоев.

Оценим теперь, правомерно ли предложенное описание переходного слоя ($n'=3.0$, $k'=0.15$, $d'=20 \text{ \AA}$) считать единственным или имеются другие значения параметров, соответствующие эксперименту. Подчеркнем, что все три параметра — n' , k' , d' рассматривались нами как подгоночные. Численный анализ показал, что однозначное решение относительно n' и d' может быть найдено лишь при параллельном рассмотрении амплитудных (ψ) и фазовых (Δ) характеристик, а при поиске k' достаточно ограничиться рамками ψ . Качественно

поясним сказанное на примере рис. 9, *a*, *б*. Взяв за основу уже введенные ранее значения параметров переходного слоя и задавая в каждом случае приращение одному из них (n' , k' или d'), проследим за изменением $\psi - \bar{\psi}$ (рис. 9, *a*) и $\Delta - \bar{\Delta}$ (рис. 9, *б*). Расчет кривых 2—4 (рис. 9, *a* и *б*) проведен при отрицательных приращениях параметров. Очевидно, что положительные приращения и в том, и в другом случаях дадут качественно аналогичную картину, но с противоположным знаком по оси ординат.

Из того факта, что на рис. 9, *a* кривые 2 и 3 фактически симметричны относительно оси $\psi - \bar{\psi} = 0$ во всем спектральном интервале, следует, что вклады

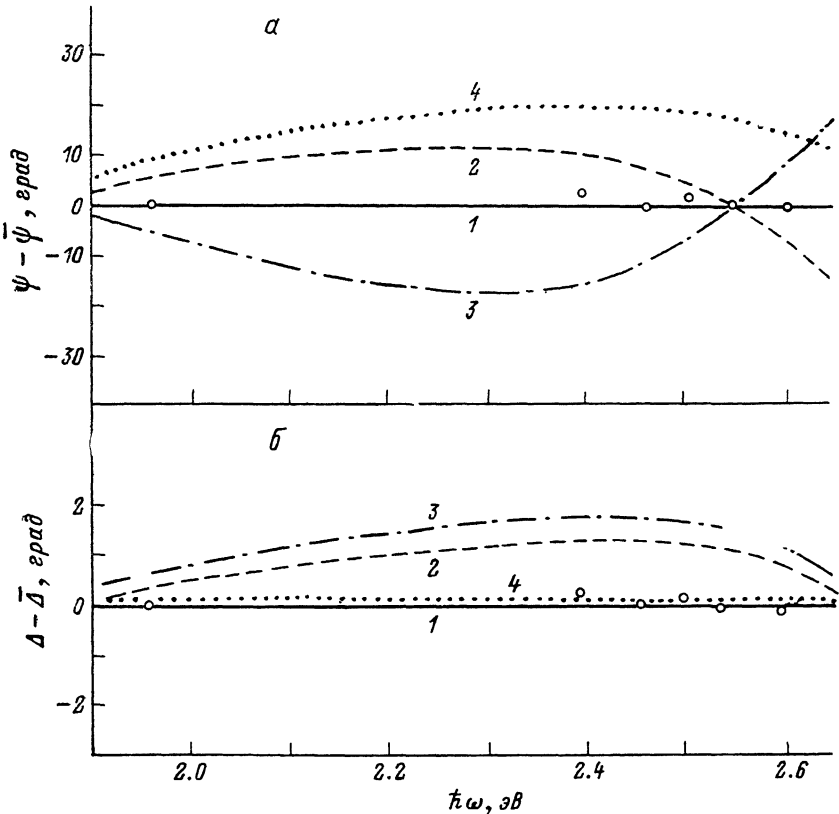


Рис. 9. Спектральные зависимости величин $\psi - \bar{\psi}$ (*a*) и $\Delta - \bar{\Delta}$ (*б*) при варьировании параметров переходного слоя.

Экспериментальные значения Δ и $\psi - \bar{\psi}$ — точки. Расчет ψ и Δ : 1 — $n' = 3.0$, $k' = 0.15$, $d' = 20 \text{ \AA}$; 2 — $n' = 2.5$, $k' = 0.15$, $d' = 20 \text{ \AA}$; 3 — $n' = 3.0$, $k' = 0.15$, $d' = 10 \text{ \AA}$; 4 — $n' = 3.0$, $k' = 0.05$, $d' = 20 \text{ \AA}$.

в величину ψ от заданных приращений $\delta n'$ и $\delta d'$ компенсируются, т. е. согласие расчета с экспериментом может быть достигнуто при различных сочетаниях подгоночных параметров n' и d' .

Чтобы ограничить себя в выборе значений n' , d' , обратимся к зависимости $\Delta - \bar{\Delta} = f(\lambda)$. Из рис. 9, *б* видно, что те же приращения $\delta n'$ и $\delta d'$, которые взаимно компенсируются в ψ , напротив, проявляются эффектами одного знака в величине Δ и, таким образом, в итоге оказываются распознаваемыми, как установлено прямым расчетом, одновременно $\psi - \bar{\psi} = 0$ и $\Delta - \bar{\Delta} = 0$ по всему спектральному интервалу достигаются только при $n' = 3.0$ и $d' = 20 \text{ \AA}$.

Вклад в $\psi - \bar{\psi}$, вносимый величиной k' , сравнительно легко удаётся отделить от эффектов, связанных с n' и d' : кривая 4 на рис. 9, *a* в отличие от кривых 2, 3 не пересекает ось $\psi - \bar{\psi} = 0$. Отсюда следует, что величина k' может быть определена независимо от n' и d' . Подгоночный расчет подтверждает значение $k' = 0.15$.

Таким образом, значения параметров n' , k' , d' считаем установленными, а вероятные ошибки мы оценили из следующих соображений. Как это можно видеть из рис. 9, a , b , основная погрешность связана не с величиной Δ , а с величиной ψ как менее чувствительной к подгоночным параметрам n' , k' , d' . При выбранных значениях параметров и с учетом инструментальной ошибки в $\psi=1'$ среднеквадратичное отклонение точек $\psi-\bar{\psi}$ относительно оси $\psi-\bar{\psi}=0$ не превышает $\pm 2'$. Это соответствует следующим величинам отклонений: $\delta n' = \pm 0.1$, $\delta k' = \pm 0.05$, $\delta d' = \pm 2 \text{ \AA}$; их и разумно принять за погрешности в подгоночных параметрах n' , k' , d' .

3. Подложка GaAs

Помимо оптических постоянных n , k подложки GaAs, неизвестным на данном этапе остается точное значение d_{ox} . Нетрудно, однако, установить пределы, в которых оно находится.

Нижний предел значений d_{ox} может быть получен из решения обратной эллипсомерической задачи в модели диэлектрический слой—подложка по измеренным Δ , ψ (например, при $\varphi=70^\circ$, $\lambda=6328 \text{ \AA}$), если в качестве оптических констант подложки использовать некие эффективные значения \tilde{n} , \tilde{k} , найденные из измерений Δ , φ (при тех же φ , λ) на свежेत्रавленной поверхности. Полученные из таких измерений значения \tilde{d}_{ox} заведомо меньше истинной толщины d_{ox} , так как эффективные константы \tilde{n} , \tilde{k} характеризуют поверхность, покрытую слоем естественного окисла, обязательно присутствующего даже на свежेत्रавленной поверхности.

Верхний предел возможных значений d_{ox} нами по существу установлен в разделе 1: реализация точки $\Delta=0^\circ$ в структуре GaAs—окисел означает, что $d_{\text{ox}} < T/2$, где T определяется уравнением (2). С помощью неравенства $\tilde{d}_{\text{ox}} < < d_{\text{ox}} < T/2$ мы получили следующую оценку толщины окисла: $d_{\text{ox}} = 770 \pm 10 \text{ \AA}$.

Перейдем к определению оптических констант подложки n , k , считая известными n_{ox} , n' , k' , d' и задавая значением толщины окисла d_{ox} в указанных границах. По существу мы решали обратную эллипсомерическую задачу в модели с семью параметрами относительно n и k . Что касается показателя преломления n , исходные данные оказываются достаточными для однозначного определения его величины. Расчет показывает, что неопределенность в толщине окисла $\pm 10 \text{ \AA}$ приводит к различию в значениях n , не превышающему $\delta n = 0.001$. Слабая зависимость n от d_{ox} отражает известный факт слабой корреляции этих параметров [8, 14]. Считая указанную ошибку допустимой, мы определили значения n на всех использовавшихся нами длинах волн; итоговые данные приведены в таблице.

Длина волны, \AA	Подложка		Переходный слой			Окисел	
	n_s	k_s	n'	k'	d' , \AA	n_{ox}	d_{ox} , \AA
	± 0.001	± 0.005	± 0.1	± 0.05	± 2	± 0.001	± 2
6328	3.850	0.200	2.7	0.02	20	1.812	776
5145	4.215	0.365	3.0	0.10	20	1.837	775
5017	4.305	0.420	3.0	0.12	20	1.839	776
4965	4.330	0.440	3.0	0.15	20	1.840	776
4880	4.415	0.480	3.1	0.17	20	1.841	775
4765	4.485	0.515	3.2	0.20	20	1.843	775

Задача по определению величины k в отсутствие точной информации о d_{ox} нетривиальна из-за корреляции вкладов от d_{ox} и k в измеряемые эллипсомерические параметры. Выше (см. раздел 1) мы уже касались этого вопроса. Корреляция вкладов от k и d_{ox} наблюдается, вообще говоря, не только при $d_{\text{ox}} < < 100 \text{ \AA}$, о чем говорилось ранее, а, как известно [8, 14], существует в широком диапазоне толщин окисла, одинаково проявляясь и в Δ , и в ψ . Результаты

решения обратной эллипсометрической задачи относительно n и k подтверждают сильную взаимосвязь k и $d_{\text{ок}}$: неопределенность в толщине окисла $\delta d_{\text{ок}} = 20 \text{ \AA}$ приводит к недопустимой ошибке в искомой величине k : $\delta k = 0.19$. Следовательно, из обычных эллипсометрических измерений, наподобие тех, что были нами проведены для определения n , одновременно найти точные значения k и $d_{\text{ок}}$ невозможно.

Однако выход был найден. Он основан на измерениях $\psi = f(\varphi)$ в широком диапазоне φ и расчете угловых зависимостей в модели подложка—переходный слой—окисел с подгоночными параметрами k и $d_{\text{ок}}$ при следующем обязательном условии: зависимость $\psi = f(\varphi)$ должна проходить через точку резонанса, где $R_s \rightarrow 0$, уже рассматривавшегося в п. 2, т. е. будет содержать максимум.

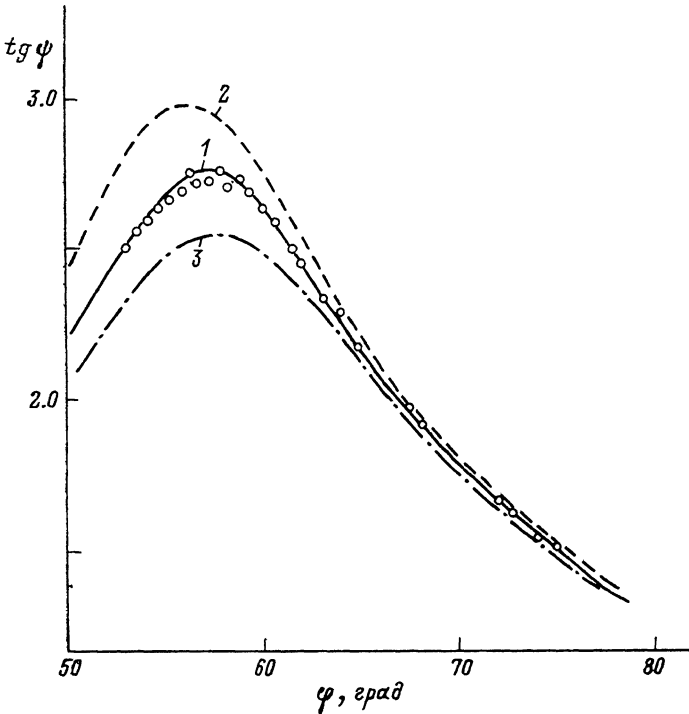


Рис. 10. Угловые зависимости $\text{tg } \psi$ при $\lambda = 5017 \text{ \AA}$, чувствительные к ошибкам в параметрах слоев.

Эксперимент — точки. Расчет: 1 — все значения параметров соответствуют таблице; 2, 3 — значения параметров взяты с отклонениями от таблицы; 2 — $\delta k = 0.1$, $\delta d_{\text{ок}} = -10 \text{ \AA}$; 3 — $\delta k = -0.1$, $\delta d_{\text{ок}} = 10 \text{ \AA}$.

В этом случае параметры k и $d_{\text{ок}}$ удастся разделить за счет того, что степень их корреляции оказывается различной в разных точках угловой зависимости (в резонансном максимуме и вне его). Для анализа точно так же могут быть использованы зависимости $\Delta = f(\varphi)$. Выше уже отмечалось, что в условиях нашего эксперимента резонанс, строго говоря, недостижим, однако может быть реализована ситуация, близкая к резонансной. При всех рабочих λ , (за исключением $\lambda = 6328 \text{ \AA}$) были сняты экспериментальные зависимости $\psi = f(\varphi)$ и подвергнуты анализу. Как проводился анализ, покажем на примере одной из них (при $\lambda = 5017 \text{ \AA}$), приведенной на рис. 10. Значения k и $d_{\text{ок}}$ мы нашли путем их одновременного подбора, приняв за критерий достоверности согласие расчета с экспериментом во всем используемом диапазоне углов. На рис. 10 такой расчет отражает кривая 1 ($k = 0.42$, $d_{\text{ок}} = 776 \text{ \AA}$). О степени достоверности позволяют судить кривые 2, 3, в расчет которых заложены отклонения от указанных выше значений k , $d_{\text{ок}}$. Величины вариаций ($\delta k = +0.1$ и $\delta d_{\text{ок}} = -10 \text{ \AA}$ для кривой 2; $\delta k = -0.1$ и $\delta d_{\text{ок}} = +10 \text{ \AA}$ для кривой 3) выбраны из тех соображений, чтобы проиллюстрировать следующий факт: несмотря на

то, что и в том, и в другом случае вклады от δk и δd_{ox} на крыле максимума, в том числе при $\varphi = 70^\circ$, взаимно компенсируются (здесь все три кривые сливаются), тем не менее они отчетливо разделены в области экстремума, и, значит, k и d_{ox} находятся однозначно. Мы приняли за ошибку в найденных параметрах k и d_{ox} такие величины вариаций k и d_{ox} , которые приводят к отклонению от кривой I в пределах ошибок эксперимента, включающих в себя ошибку $\delta\psi = 1'$ и разброс экспериментальных точек. Итоговые значения k при всех λ , а также d_{ox} с указанием величин ошибок приведены в таблице. Заметим, что наши результаты n и k (см. таблицу) хорошо согласуются с данными [4].

4. Проверка модели и уточнение характеристик переходного слоя

Адекватность полученной модели реальной структуре мы проверяли путем решения следующей обратной эллипсометрической задачи: поиск d_{ox} , n_{ox} в модели известная подложка—известный переходный слой—неизвестная диэлектрическая пленка: при этом значения n , k , n' , k' , d соответствовали полученным в разделах 2 и 3. Оказалось, что значения n_{ox} совпадают с полученными в разделе 1 (см. таблицу). Вычисленные значения d_{ox} , однако, приобретают частотную зависимость, и, следовательно, требуется корректировка модели. Вместе с тем ясно, что поправки, вероятнее всего, должны быть внесены в описание переходного слоя, так как в нем не принималась во внимание дисперсия оптических постоянных n' , k' . Дисперсионные поправки к значениям n' , k' мы подобрали итерационным методом, каждый раз осуществляя проверку решением обратной задачи относительно n_{ox} , d_{ox} . Окончательные результаты с оценками ошибок приведены в таблице.

Таким образом, в данной работе модель структуры GaAs—переходный слой—окисел установлена и характеристики слоев соответствуют данным таблицы.

Замечание 1. В разделе 1 не принимался во внимание переходный слой на межфазной границе. Однако, как показал расчет, любая из рассматриваемых выше моделей переходного слоя может внести поправку в n_{ox} , не превышающую $\delta n_{ox} = 0.0003$.

Замечание 2. Строго говоря, изложенная схема анализа несколько упрощена, так как к вопросу определения оптических постоянных подложки n , k и характеристик переходного слоя n' , k' , d' мы обращались неоднократно, уточняя их самосогласованным способом.

Авторы благодарны Ю. В. Шмарцеву за поддержку в работе и полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Snyder P. G., Rost M. C., Bu-Abbud G. H., Woollam J. A., Alterovitz S. A. // J. Appl. Phys. 1986. V. 60. N 9. P. 3293—3302.
- [2] Alterovitz S. A., Snyder P. G., Merkel K. J., Woollam J. A., Raduleson D. C., Eastman L. F. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 10. P. 5081—5084.
- [3] Erman M., Alibert C., Theeten J. B., Frijlink R., Catte B. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 2. P. 465—474.
- [4] Aspnes D. E., Studna A. A. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 2. P. 985—1009.
- [5] Burkhard H., Dinges H. V., Kuphal E. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. N 1. P. 655—662.
- [6] Aspnes D. E., Schwartz G. P., Gualtieri G. J., Studna A. A., Schwartz B. // J. Electrochem. Soc. 1981. V. 128. P. 590—597.
- [7] Theeten J. B., Aspnes D. E. // Thin sol. films. 1979. V. 60. P. 183—192.
- [8] Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М., 1981. 583 с.
- [9] Wilmsen W. // J. Vac. Sci. Techn. 1981. N 3. P. 279—289.
- [10] Greaves G. N., Davis E. A., Bordes J. // Phil. mag. 1976. V. 34. P. 265—269.
- [11] Palik E. D., Ginsburg N., Holm R. T., Gibson J. W. // J. Vac. Sci. Techn. 1978. V. 15. N 4. P. 1488—1497.
- [12] Alterovitz S. A., Bu-Abbud G. H., Woollam J. A., Liu D. C. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 3. P. 1559—1569.
- [13] Bruggeman D. A. G. // Ann. Phys. 1935. V. B24. P. 636—647.
- [14] Loeshke K. Baumgarten // J. Kryst. a. Techn. 1978. V. 13. N 10. P. 1235—1245.