10

Оптические характеристики легированных бором кремниевых пластин после быстрого термического отжига

© Н.И. Стаськов[1], А.А. Сергейчик[2], А.Б. Сотский[1], А.Н. Петлицкий[2], В.А. Пилипенко[2], Л.И. Сотская[3], Д.В. Понкратов[1], Е.А. Чудаков[1], А.В. Шилов[1]

[1] Могилевский государственный университет имени А.А. Кулешова,
Могилев, Республика Беларусь
[2] ГЦ „Белмикроанализ“ НТЦ, ОАО „ИНТЕГРАЛ“,
Минск, Республика Беларусь
[3] Белорусско-Российский университет,
Могилев, Республика Беларусь

e-mail: ni_staskov@mail.ru

Поступила в редакцию 04.09.2024 г.
В окончательной редакции 07.05.2025 г.
Принята к публикации 05.06.2025 г.

Методом спектральной эллипсометрии исследованы оптические свойства легированных бором кремниевых пластин КДБ-12 с одной матированной поверхностью, подвергнутых быстрому термическому отжигу. В алгоритме расчетов диэлектрической проницаемости полупроводниковой подложки исключено влияние известного поверхностного оксидного слоя. Рассчитаны ширина запрещенных зон и энергия Урбаха. Спектры действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости сдвинуты относительно соответствующих спектров c-Si в коротковолновую область. Полоса мнимой части диэлектрической проницаемости в области второй точки сингулярности состоит из нескольких полос.

Ключевые слова: спектры диэлектрической проницаемости, показатели преломления и поглощения, ширина запрещенной зоны, энергия Урбаха, легированный бором кремний.

DOI: 10.61011/OS.2025.08.61514.7045-25

Введение

Пластины КДБ-12 (кремний, легированный бором, *p*-полупроводник) используются на ОАО „ИНТЕГРАЛ“ (Минск, Республика Беларусь) в качестве подложек для нанесения планарных структур и являются основным компонентом множества электронных и оптоэлектронных устройств. Моделирование и производство таких структур с ультратонкими слоями требуют знания оптических характеристик пластин: ширины запрещенной зоны, спектров диэлектрической проницаемости, показателей преломления и поглощения. Технология получения пластин КДБ-12 не исключает появление на рабочей поверхности слоя SiO_2, параметры которого влияют на определяемые оптические характеристики. В связи с этим большое внимание уделяется развитию оптических методов контроля процесса подготовки поверхности пластин перед формированием планарных структур. Важным этапом этой подготовки является пассивирование поверхности полупроводников, поскольку в воздушной среде на поверхности большинства материалов образуются пленки естественного окисла. Одним из возможных путей улучшения поверхностных свойств КДБ является быстрая термическая обработка (БТО) оптическими импульсами секундной длительности. Технология БТО перспективна для создания ультратонких слоев подзатворных диэлектриков [1].

Для интерпретации физических свойств полупроводников используют большое число оптических характеристик [2,3], которые определяют методами спектрофотометрии и эллипсометрии — методами электродинамических моделей. Поскольку число таких моделей не ограничено, то и оптические характеристики, например, c-Si могут не совпадать [4,5]. Основной характеристикой полупроводника является диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon(\lambda) = \varepsilon_1(\lambda) - i\varepsilon_2(\lambda) = [n(\lambda) - ik(\lambda)]^2, \qquad (1)$$

которая в материальных уравнениях Максвелла не магнитных сред ($\mu = 1$) определяет уравнения прикладных оптических методов. Более того, изменение оптических свойств кремниевых структур принято интерпретировать по изменению $\varepsilon_1(\lambda)$ и $\varepsilon_2(\lambda)$ в области точек сингулярности Ван Хова ($\lambda_1 = 291.8\,\text{mm}$, $E_1 = 4.25\,\text{eV}$), $\lambda_2 = 361.5\,\text{mm}$, $E_2 = 3.43\,\text{eV}$ [6–9]. Кроме $\varepsilon(\lambda)$ интерес представляют спектры показателей преломления $n(\lambda)$ и поглощения $k(\lambda)$, входящие в (1), и важные в зонной теории характеристики полупроводника — ширина запрещенной зоны E_g и энергия Урбаха E_u. Их величины определяют по коэффициенту поглощения

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \qquad (2)$$

на основании экстраполяции Тауца [10] или экстраполяции эмпирической зависимости $\ln[\alpha(E)]$ функцией [11]

$$f(E) = \ln\{\alpha(1240/E_g)\exp[(E - E_g)/E_u]\}, \qquad (3)$$

в которой $E = 1240\lambda^{-1}$ — энергия фотона в eV (λ в nm). Величина E_u характеризует степень несовершенства кристаллической структуры полупроводника. Примем во внимание, что c-Si имеет ширину запрещенной зоны 1.10 eV [12] — 1.16 eV [13] для непрямых межзонных переходов и 3.4 eV [12] — 4.19 eV [13] для прямых межзонных переходов.

В [14–17] разными физическими методами установлено, что толщина поверхностного слоя SiO_2 на пластинах КДБ-12 после физико-химической обработки ~ 1.75 nm, а после БТО ~ 1 nm. Влияние ультратонких поверхностных слоев SiO_2, которыми можно покрыть поверхности c-Si-пластин, на эллипсометрические углы $\Delta(\lambda)$, $\psi(\lambda)$ и на оптические характеристики обстоятельно изучено [6–8]. Установлено, что спектральные особенности в области точек сингулярности c-Si ослабляются с увеличением толщины слоя. Так как при определении оптических констант подложек учесть такие слои можно, а исключить их влияние затруднительно, на практике иногда рассматривают упрощенную электродинамическую модель, в которой подложка считается однородной, а ее $\varepsilon(\lambda)$ называется псевдо-диэлектрической функцией $\langle\varepsilon(\lambda)\rangle$. В этом частном случае существует аналитическое определение функции $\langle\varepsilon(\lambda)\rangle$. Наблюдаемые [14–17] методом спектральной эллипсометрии изменения $\langle k(\lambda)\rangle$ и $\langle n(\lambda)\rangle$ в УФ области, содержащей точки сингулярности Ван Хова, позволили считать, что БТО приводит к увеличению структурного совершенства поверхностного слоя пластин в результате твердофазной рекристаллизации. Уменьшение толщины слоя SiO_2 менее 3 nm [18] сопровождается исчезновением кристаллической структуры кремния и появлением аморфной фазы. В то же время эти изменения происходят за счет кристаллизации нарушенного кремния вблизи границы раздела Si-SiO_2, а также благодаря отжигу радиационных дефектов, образовавшихся в слое SiO_2. При температуре вблизи 950° начинается процесс образования нанокристаллов Si в диэлектрическом слое.

Проблема экспериментального определения параметров подложки при наличии на ее поверхности ультратонкого слоя с неизвестными заранее характеристиками до сих пор не решена. Этим объясняется наличие нескольких альтернативных подходов к ее исследованию. К ним относятся: i) модель плоскопараллельного слоя эффективной среды [6–9]; ii) модель Ферми для представления изменения диэлектрической проницаемости по толщине слоя [19]; iii) интегральная модель слоя [20]; iv) модель слоя поляризованных диполей [21].

Неоднозначность решения обратной оптической задачи об определении параметров структур с поверхностными слоями имеет место и в когерентной многоугловой эллипсометрии. При определении толщины и показателя преломления наноразмерных пленок, нанесенных на подложки с неизвестными тонкими переходными слоями реальными и численными экспериментами монохроматической эллипсометрии (ЛЭФ3М, $\lambda = 632.8$ nm), показана [22] целесообразность замены структуры подложка–переходный слой подложкой с $\langle n\rangle$ и $\langle k\rangle$. В работе [23] приведены измеренные на ЛЭФ3М зависимости $\Delta(\theta)$ и $\psi(\theta)$ кремниевой пластины ориентации $\langle 100\rangle$ (дырочная проводимость, $\rho = 1.5\Omega$S). При определении показателя преломления и толщины поверхностного слоя допускалось, что подложка имеет $n = 3.865$ и $k = 0.018$ или $n = 3.85$ и $k = 0.023$. Установлено, что рассчитываемые параметры для разных подложек различны и зависят от угла падения. Расчеты пяти параметров отражающей структуры показали, что для термически выращенного слоя $d = 8.6$ nm, $n = 1.46$, $k = 0.00014$, а характеристики подложки в этом случае $n = 3.81$, $k = 0.021$. В работе [21] по угловым зависимостям $\Delta(\theta)$ и $\psi(\theta)$, измеренным на ЛЭФ3М, для пластины КДБ-12 получено $n = 3.83$, $k = 0.0001$, а для термически выращенных слоев SiO_2 толщиной 10 nm и 933 nm, $n = 1.46$ и $k = 0.0001$.

В [24] для c-Si ($\lambda = 546.1$ nm, $n = 4.05$, $k = 0.028$) приведены зависимости $\Delta(\theta)$, $\psi(\theta)$ и указан угол падения $\theta = 76.13°$, для которого $\Delta = 90°$, а ψ достигает минимального значения ($\psi_{\min}$). По закону Брюстера

$$n = \tan(\theta) \tag{4}$$

находим $n = 4.05$. Расчет спектров кварцевых стекол на основании данных спектральной эллипсометрии по (4) выполнены в [25]. Возможно, брюстеровскую спектральную эллипсометрию можно использовать в качестве независимого способа оценки спектра показателя преломления полупроводников.

В настоящем сообщении разработана методика исключения влияния поверхностного оксидного слоя, находящегося на пластинах КДБ-12 после БТО, на определяемые методами эллипсометрии оптические характеристики. Это позволило сравнить основные оптические характеристики чистого и легированного бором кремния.

Методика и техника эксперимента

В качестве образцов использовались пластины КДБ-12 ($N = 10^{15}\,\mathrm{cm}^{-3}$, $\rho = 12\Omega$ S) ориентации $\langle 100\rangle$ диаметром 100 mm, полученные по методу Чохральского. Одну поверхность пластин подвергали механической обработке и в течение (3 ± 1) min протравливали в растворе плавиковой кислоты. После этого на данных образцах проводилась БТО путем облучения световым импульсом с нерабочей (матированной) стороны пластины в течение 7 s в среде Ar при температуре отжига 1025°. В результате такой подготовки образцов информативность оптических методов обеспечивает приповерхностный слой пластины толщиной порядка глубины проникновения света. При решении обратных задач эллипсометрии для c-Si-подложки со слоем SiO_2 толщиной до 2 nm с помощью ПО Deltapsi2, установленном на эллипсометре Horiba UVISEL 2, требуется, чтобы величина несоответствия χ^2 измеренных и рассчитанных спектров $\Delta(\lambda)$, $\psi(\lambda)$ не превышала 0.2.

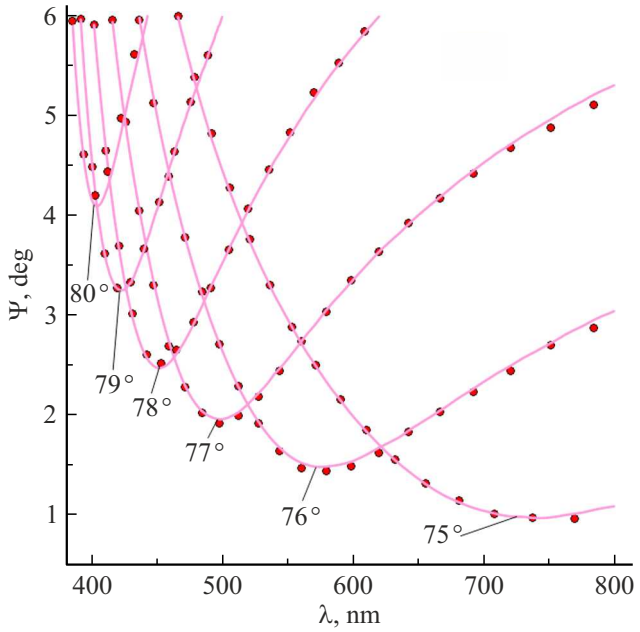

Рис. 1. Измеренные (точки) и рассчитанные (линии) спектры пластины КДБ-12.

Спектры $\Delta(\lambda)$ и $\psi(\lambda)$ пластин КДБ-12, подвергнутых БТО, измеряли при комнатной температуре на эллипсометре Horiba UVISEL 2 при углах падения (θ) 70° (200 nm$\leq \lambda \leq$ 2000 nm), 73°–80°, (300 nm$\leq \lambda \leq$ 800 nm) и на ЛЭФ3М при углах падения от 72° до 78° ($\Delta\theta = 2°$). На спектрофотометре PHOTON RT (EssentOptics, Беларусь) измеряли отражательные способности s- и p-поляризованного света (R_s, R_p) этих пластин при углах падения 30° и 60° (220 nm$\leq \lambda \leq$ 700 nm). Выбор углов падения и спектральных границ при использовании метода эллипсометрии основан на рекомендации ПО DeltaPsi2.

Результаты и обсуждение

Применим (4) для оценки показателей преломления пластин КДБ-12. На спектрах эллипсометрических углов $\psi(\lambda)$, измеренных при θ от 0.75° до 80°, четко выделяются брюстеровские интервалы (рис. 1). На таких интервалах можно определить длины волн, для которых угол паления равен псевдо-брюстеровскому углу ($\psi = \psi_{\min}$). С увеличением θ длины волн, соответствующие главному и псевдо-брюстеровскому углам паления, смещаются в УФ область. Причем разность между этими длинами волн увеличивается из-за увеличения показателя поглощения полупроводника.

В табл. 1 приведены углы падения, длины волн, соответствующие $\psi_{\min}$ и брюстеровские n_{Br} показатели преломления пластины КДБ-12, рассчитанные по (4). Оптические характеристики на длине волны 632.8 nm определены численно по эллипсометрическим углам, измеренным на ЛЭФ3М.

Предположим (задача A), что плоскопараллельный слой SiO_2, $n(\lambda)$ которого задается аналитически [26], находится на однородной подложке. Ее $\varepsilon(\lambda)$ зададим 4-х осцилляторной моделью аморфных материалов [27] с неизвестными параметрами ε_∞, E_g, A_ξ, B_ξ, C_ξ, где $\xi \in 1 \div 4$. Эти подгоночные параметры подбираются ПО DeltaPsi2 для расчета толщины слоя, его материального состава и спектров $k(\lambda)$, $n(\lambda)$ подложки. Для расчетов всех неизвестных параметров (табл. 2, строка A) использовали измеренные спектры $\Delta(\lambda)$ и $\psi(\lambda)$ при углах падения 73° – 80°. В качестве первых приближений ε_∞, E_g, A_ξ, B_ξ, C_ξ 4-осцилляторной модели использовали параметры, рекомендованные в ПО DeltaPsi2 для c-Si. В табл. 1 для рассматриваемой обратной задачи эллипсометрии приведены показатели преломления и поглощения подложки КДБ-12. Рассмотрим результаты расчетов (табл. 2, строка A): i) $\chi^2 > 0.2$; ii) величина подгоночного параметра $E_g = 2.73$ eV показывает, что при легировании бором край полосы поглощения должен сдвигаться в видимую область и при $\lambda > 454.2$ nm пластина КДБ-12 должна быть прозрачной. iii) толщина слоя SiO_2 в 2.4 раза больше величины, определенной не оптическими методами в работах [14–17]. Все эти факторы указывают на необходимость использования более сложной электродинамической модели подложки КДБ-12.

Допустим (задача B), что на подложке, $\varepsilon(\lambda)$ которой задается 4-х осцилляторной моделью аморфных материалов, находится пять слоев Бруггемана. Параметры слоев, начиная с первого на подложке, имеют индексы $j \in 1 \div 5$. Двухкомпонентные эффективные слои Бруггемана включают c-Si (f%) и КДБ-12 ((100 – f)%), а поверхностный слой ($j = 5$) содержит SiO_2 (f%) и c-Si (100 – f)%) или SiO_2 (f%) и аморфный кремний (α-Si, (100 – f)%). Толщины и материальный состав этих слоев определили с помощью ПО DeltaPsi2. Такая электродинамическая модель подложки в определенной мере обусловлена выводами из работы [18]. Результаты решения задачи B приведены в табл. 2. Их анализ показывает: i) на поверхности пластин КДБ-12 после БТО находится слой SiO_2, толщина которого ($d_s = 1.1$ nm) хорошо согласуется с величиной, определенной в работах [14–17]; ii) под слоем SiO_2 находится неоднородный слой толщиной 71.4 nm, в котором содержание c-Si в направлении к рабочей поверхности пластины увеличивается от 24.2% до 100% (соответствующее содержание КДБ-12 уменьшается); iii) показатели преломления, рассчитанные для этой модели, близки к n_{Br} (табл. 1); iv) величина подгоночного параметра $E_g = 2.92$ eV показывает, что при легировании бором край полосы поглощения должен сдвигаться в видимую область и при $\lambda > 424.7$ nm пластина КДБ-12 должна быть прозрачной.

Мы предприняли попытку (задача C) исключить плоскопараллельный слой SiO_2 известной толщины ($d = 1.1$ nm) и с известным показателем преломления [26] в алгоритме расчетов спектров $n(\lambda)$ и $k(\lambda)$ под-

Таблица 1. Оптические характеристики пластин КДБ-12

θ°	λ, nm	n_{Br}	Задача A		Задача B		Задача C	
			n	k	n	k	n	k
80	403.8	5.671	5.475	0.110	5.567	0.042	5.392	0.316
79	422.4	5.147	5.036	0.026	5.102	0.00005	4.998	0.209
78	457.7	4.705	4.561	0	4.599	0	4.551	0.120
77	497.9	4.332	4.266	0	4.291	0	4.276	0.080
76	573.9	4.011	3.975	0	3.992	0	3.982	0.048
–	632.8	3.853	3.848	0.028	3.865	0.028	3.852	0.033
75	742.4	3.732	3.705	0	3.727	0	3.711	0.023

Таблица 2. Результаты решений обратных задач A и B спектральной эллипсометрии

Задача	E_g, eV	ε_∞	A_ξ, eV	B_ξ, eV	C_ξ, eV^2	f, %	d_j, nm
A	2.73	6.366	0.068 0.165 0.546 -0.582	6.863 7.329 8.665 7.673	11.793 13.520 18.525 17.263	100	$d_1 = 2.42$
B	2.92	8.047	0.122 0.545 0.027 0.197	6.871 7.190 11.578 8.910	11.819 13.092 33.806 20.010	$f_1 = 24.2$ $f_2 = 61.9$ $f_3 = 84.0$ $f_4 = 100$ $f_5 = 100$	$d_1 = 22.2$ $d_2 = 25.2$ $d_3 = 23.6$ $d_4 = 0.4$ $d_5 = 1.1$

ложки КДБ-12 (табл. 1), комплексная диэлектрическая проницаемость которой $\varepsilon(\lambda)$ находится без использования какой-либо дисперсионной модели. В алгоритме ε является корнем уравнения

$$f(\varepsilon) = \tan\psi \exp(i\Delta), \tag{5}$$

где ψ и Δ — экспериментальные поляризационные углы,

$$f(\varepsilon) = \frac{r_p}{r_s} = \frac{(\psi_p i n_a \cos\theta - \psi'_p n_a^2)(\psi_s i n_a \cos\theta + \psi'_s)}{(\psi_p i n_a \cos\theta + \psi'_p n_a^2)(\psi_s i n_a \cos\theta - \psi'_s)},$$

r_p и r_s — амплитудные коэффициенты отражения волн p- и s-поляризации от структуры слой SiO_2 — подложка КДБ-12,

$$\psi_p = \left(z^2 + n_a^2 \sin^2\theta\right)\cos(\sigma k_0 d) + iz\varepsilon_f \sigma^{-1}\sin(\sigma k_0 d),$$

$$\psi'_p = iz\cos(\sigma k_0 d) - (z^2 + n_a^2\sin^2\theta)\sigma\varepsilon_f^{-1}\sin(\sigma k_0 d),$$

$$\psi_s = \cos(\sigma k_0 d) + iz\sigma^{-1}\sin(\sigma k_0 d),$$

$$\psi'_s = iz\cos(\sigma k_0 d) - \sin(\sigma k_0 d),$$

$k_0 = 2\pi/\lambda$, $z = \sqrt{\varepsilon - n_a^2\sin^2\theta}$, $\sigma = \sqrt{\varepsilon_f - n_a^2\sin^2\theta}$, $n_a = 1.0003$ — показатель преломления воздуха. Чтобы избежать проблем, связанных с вычислением комплексных радикалов, в качестве неизвестной величины в уравнении (5) целесообразно выбрать не ε, а z. В этом случае уравнение (5) сводится к кубическому уравнению относительно z, решение которого методом контурного интегрирования [28] не вызывает затруднений. Значение $\varepsilon = z^2 + n_a^2\sin^2\theta$ находится после вычисления z. При расчетах использовались спектры $\Delta(\lambda)$ и $\psi(\lambda)$, измеренные при $\theta = 70^\circ$. В качестве первых приближений $\varepsilon_1(\lambda)$ и $\varepsilon_2(\lambda)$ выбрали диэлектрические функции c-Si. Данные табл. 2 подтверждают известное заключение о том, что результаты решения обратных оптических задач зависят от выбранных моделей исследуемого образца. На рис. 2 приведены спектры $\langle n(\lambda)\rangle$, $n(\lambda)$ (a), и спектры $\langle k(\lambda)\rangle$, $k(\lambda)$ (b). Спектры оптических характеристик c-Si на этом рисунке взяты из [4].

В видимой области ($380\,\mathrm{nm} \le \lambda \le 800\,\mathrm{nm}$) для показателей преломления и поглощения выполняются неравенства $n_{\mathrm{Br}} > n_{c\,\mathrm{Si}} > n_{\text{КДБ}} > \langle n\rangle$ и $\langle k\rangle > k_{\text{КДБ}} > k_{c\,\mathrm{Si}}$. Показатели преломления n_{Br} являются максимально возможными для КДБ-12. Максимумы спектров $\langle k(\lambda)\rangle$, $k_{c\mathrm{Si}}(\lambda)$ и $k_{\text{КДБ}}(\lambda)$ сдвинуты в коротковолновую область ($\Delta\lambda > \Delta\lambda_{\text{КДБ}} > \Delta\lambda_{c\mathrm{Si}}$) относительно соответствующих точек сингулярности 291.8 nm и 361.5 nm.

Для определения ширины запрещенной зоны исследуемого полупроводника использовали методику, предложенную в работе [11]. На экспериментальной зависимости $\ln[\alpha_1(E)]$ (рис. 3) видны два линейных участка, интерполяция которых прямыми (3) в интервале $0.62\,\mathrm{eV} \le E \le 1.88\,\mathrm{eV}$ позволяет получить $E_{g1} = 1.04\,\mathrm{eV}$, $E_{u1} = 0.32\,\mathrm{eV}$ и в интервале $1.88\,\mathrm{eV} \le E \le 2.8\,\mathrm{eV}$ интерполяция дает $E_{g2} = 1.98\,\mathrm{eV}$ и $E_{u2} = 0.51\,\mathrm{eV}$.

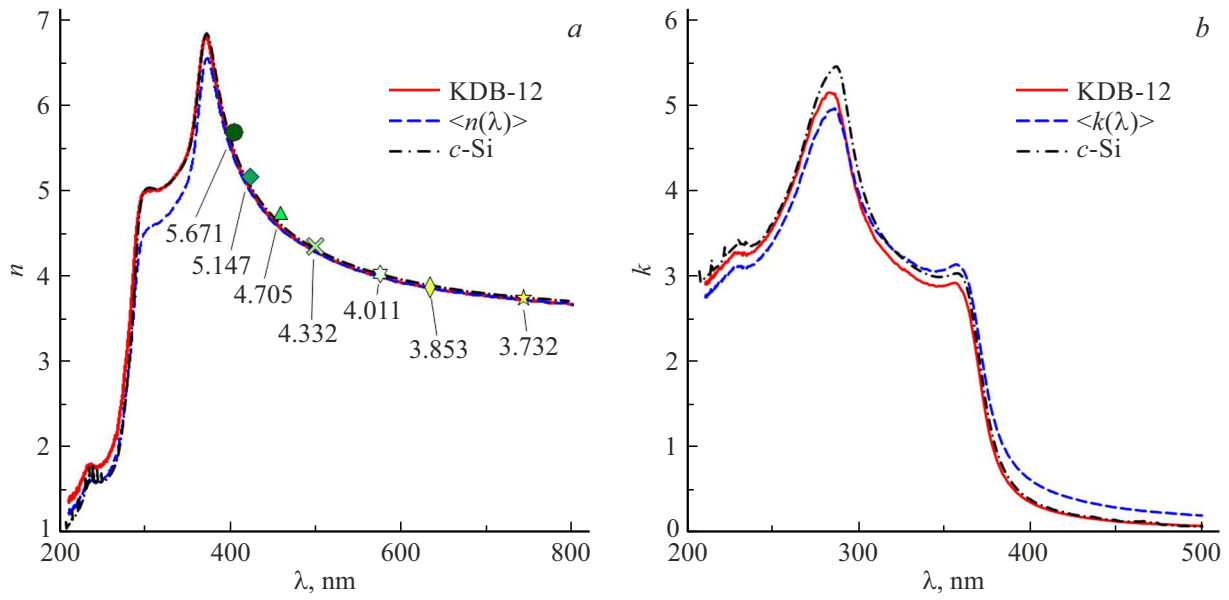

Рис. 2. Оптические характеристики пластины КДБ-12 и cSi.

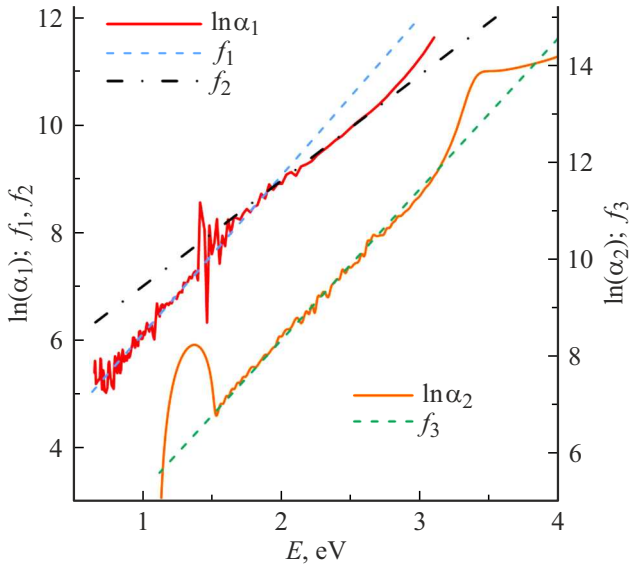

Рис. 3. Расчет ширины запрещенной зоны КДБ-12 и c-Si.

На рис. 3 приведены подобные расчеты для c-Si. Для определения $\ln[\alpha_w(E)]$ использовали из [4]. В данном случае имеем один линейный участок, интерполяция которого прямой (3) дает характерную для кристаллического кремния $E_g = 1.14$. На зависимости можно также выделить два линейных участка, интерполяция которых прямыми (3) на интервале $0.61 \leq E \leq 1.39$ eV позволяет получить $\langle E_{g1} \rangle = 1.08$ eV и $\langle E_{u1} \rangle = 0.43$ eV, а на интервале $1.39\,\text{eV} \leq E \leq 2.8$ eV имеем $\langle E_{g2} \rangle = 1.81$ eV и $\langle E_{u2} \rangle = 0.63$ eV. Близкие значения E_{g1} и $\langle E_{g1} \rangle$ для пластин КДБ-12 обусловлены малой толщиной приповерхностного слоя SiO_2.

В работе [29] приведены графики Тауца для определения оптической ширины запрещенной зоны пленок нанокомпозита Si@O@Al на кварцевых подложках. На графиках также имеются два участка. Один короткий линейный участок в области $E < 2.0$ eV относят к вкладу в поглощение нанокристаллического кремния ($E_g = 1.15$ eV), а второй протяженный практически линейный участок ($E > 2.0$ eV) обусловлен вкладом в поглощение нанокомпозита.

Представленные данные (рис. 3) показывают уменьшение величины запрещенной зоны кремния при легировании бором для непрямозонных и прямозонных переходов. Это уменьшение обусловлено расположением акцепторных уровней примеси в запрещенной зоне около потолка валентной зоны.

Определенными критериями проверки решений обратных задач эллипсометрии A–C являются: i) наименьшая величина χ^2, равная 0.07, измеренных и рассчитанных при двух углах падения отражательных способностей R_s, R_p получается при толщине слоя SiO_2 1.1 nm и использовании спектров $k(\lambda)$, $n(\lambda)$ пластины КДБ-12 из решения задачи C; ii) показатели преломления пластины КДБ-12 для $\lambda = 632.8$ nm (табл. 1), определенные методами спектральной (задача C) и монохроматической эллипсометрии, практически совпадают; iii) удовлетворительная корреляция величин для c-Si на рис. 3; iv) величины $k(\lambda)$, $n(\lambda)$ для $\lambda = 632.8$ nm (табл. 1) хорошо согласуются с данными из [23].

В работе [30] по фото-акустическим спектрам для КДБ с содержанием бора ($N = 4. \cdot 10^{18}\,\text{cm}^{-3}$) определено $E_g = 1.06$ eV. С увеличением концентрации примеси бора $N = 4 \cdot 10^{20}\,\text{cm}^{-3}$ наблюдалось увеличение смещения $\langle \varepsilon_1(\lambda) \rangle$ и $\langle \varepsilon_2(\lambda) \rangle$ в сторону больших длин волн

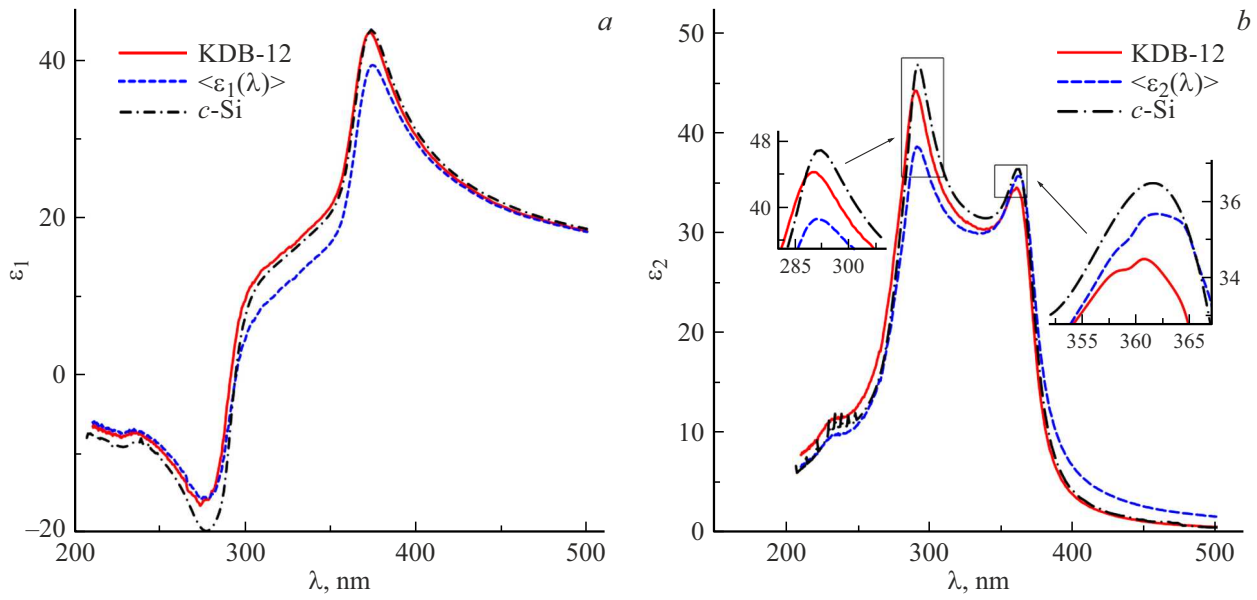

Рис. 4. Диэлектрические проницаемости КДБ-12 и c-Si.

(красное смещение) и увеличение времени жизни в двух сингулярностях E_1 и E_2.

На рис. 4 приведены спектры диэлектрических проницаемостей пластины КДБ-12 и c-Si. Первая точка сингулярности Ван Хова ($\lambda_1 = 291.8\,\text{nm}$) для c-Si характеризуется $\varepsilon_1 = -4.24$, для КДБ-12 $\varepsilon_1 = 1.08$ и $\langle\varepsilon_1\rangle = -3.36$. Вторая точка сингулярности Ван Хова ($\lambda_2 = 361.5\,\text{nm}$) характеризуется для c-Si, $\varepsilon_1 = 29.69$ для КДБ-12 — $\varepsilon_1 = 31.17$ и $\langle\varepsilon_1\rangle = 25.19$. Длины волн, характеризующие максимумы ε_2 двух точек сингулярности Ван Хова для c-Si и КДБ-12, не совпадают. В области первой точки для c-Si $\varepsilon_2(291.8) = 46.82$, для КДБ-12 $\varepsilon_2(290.2) = 44.16$ и $\langle\varepsilon_2(291.1)\rangle = 38.58$. Максимумы функции $\varepsilon_2(\lambda)$ для КДБ-12 относительно соответствующих максимумов c-Si сдвинуты в направлении меньших длин волн или больших энергий (фиолетовое смещение). В области второй точки для c-Si $\varepsilon_2(361.5) = 36.43$, для КДБ-12 $\varepsilon_2(360.3) = 34.47$ и $\langle\varepsilon_2(362.2)\rangle = 35.64$. Максимум функции $\varepsilon_2(\lambda_2)$ для КДБ-12 относительно соответствующего максимума c-Si сдвинут в направлении меньших длин волн или больших энергий (фиолетовое смещение). Однако максимум функции $\langle\varepsilon_2(\lambda_2)\rangle$ для КДБ-12 относительно соответствующего максимума $\varepsilon_2(\lambda_2)$ c-Si сдвинут в направлении больших длин волн или меньших энергий (красное смещение), как и в работе [31].

Заключение

Путем исключения известного поверхностного плоскопараллельного слоя в алгоритме расчетов основных оптических спектров полупроводниковой подложки методом спектральной эллипсометрии без использования какой-либо дисперсионной модели пластин КДБ-12 после БТО определены следующие функции и характеристические параметры: $\varepsilon_1(\lambda)$ и $\varepsilon_2(\lambda)$; $n(\lambda)$ и $k(\lambda)$; ширина запрещенных зон $E_g^{indir} = 1.04\,\text{eV}$ и $E_g^{dir} = 1.98\,\text{eV}$; энергии Урбаха $E_u^{indir} = 0.32\,\text{eV}$ и $E_u^{dir} = 0.51\,\text{eV}$. Технологический процесс получения пластин КДБ-12, включающий легирование бором кремния в процессе роста пластин, их физико-химическую обработку и быстрый термический отжиг для пассивирования поверхности, приводит к появлению под слоем SiO_2 неоднородного по толщине слоя с неравномерно внедренным бором в кристаллическую решетку c-Si. Основной причиной неоднородности является быстрый термический отжиг пластин КДБ-12. Отличие КДБ-12 от c-Si: i) в видимой области ($380\,\text{nm} \le \lambda \le 800\,\text{nm}$) для показателей преломления и поглощения выполняются неравенства $n_{\text{Br}} > n_{c\text{Si}} > n_{\text{КДБ}} > \langle n\rangle$ и $\langle k\rangle > k_{\text{КДБ}} > k_{i\text{Si}}$; ii) максимумы спектров $\langle\Delta\lambda\rangle$, $k_{c\text{Si}}(\lambda)$ и $k_{\text{КДБ}}(\lambda)$ сдвинуты в коротковолновую область ($\langle\Delta\lambda\rangle > \Delta\lambda_{\text{КДБ}} > \Delta\lambda_{c\text{Si}}$) относительно соответствующих точек сингулярности 291.8 nm и 361.5 nm; iii) при легировании бором уменьшаются величины запрещенных зон кремния для непрямозонных и прямозонных переходов; iv) спектры $\varepsilon_1(\lambda)$ и $\varepsilon_2(\lambda)$ КДБ-12 сдвинуты относительно соответствующих спектров c-Si в коротковолновую область; v) для КДБ-12 функция $\varepsilon_2(\lambda)$ в области второй точки сингулярности имеет сложную структуру.

Брюстеровская спектральная эллипсометрия может использоваться для экспресс-оценки дисперсии показателей преломления пластин в видимой области спектра.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований Республики Беларусь „1.15 Фотоника и электроника для инноваций“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] А.М. Светличный, О.А. Агеев, Д.А. Шляховой. Технология и конструирование в электронной аппаратуре, **4–5**, 38 (2001).

[2] Ю.И. Уханов. *Оптические свойства полупроводников* (Наука, М., 1977).

[3] Н.С. Ковальчук, А.А. Омельченко, В.А. Пилипенко, В.А. Солодуха, Д.В. Шестовский. Доклады БГУИР, **19** (4), 103 (2021). DOI: 10.35596/1729-7648-2021-19-4-103-112

[4] E.D. Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids* (Academic press, Orlando, 1985).

[5] Martin A. Green, Mark J. Keevers. Progress in Photovoltaics: Research and Applications, **3**, 189 (1995).

[6] H.G. Tompkins, E.A. Irene. *Handbook of Ellipsometry* (Inc. Springer, USA, 2005).

[7] H. Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications* (John Wiley & Sons, Ltd, 2007).

[8] D.E. Aspnes, A.A. Studna. Phys. Rev. B, **27** (2), 985 (1983).

[9] G.E. Jellison. Thin Solid Films, **313–314**, 33 (1998).

[10] J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu. Phys. Status Solidi B, **15**, 627 (1966).

[11] N.V. Gaponenko, N.I. Staskov, L.V. Sudnik, P.A. Vityaz, A.R. Luchanok, Yu.D. Karnilava, E.I. Lashkovskaya, M.V. Stepikhova, A.N. Yablonskiy, V.D. Zhivulko, A.V. Mudryi, I.L. Martynov, A.A. Chistyakov, N.I. Kargin, V.A. Labunov, Yu.V. Radyush, E.B. Chubenko, V.Yu. Timoshenko. Photonics, **10**(4), 359 (2023). DOI: 10.3390/photonics10040359

[12] J. Noffsinger, E. Kioupakis, C.G. Van de Walle, S.G. Louie, M.L. Cohen. Phys. Rev. Lett., **108**, 167402 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.167402

[13] K.W. Böer, U.W. Pohl. *Semiconductor* Physics (Springer. Library of Congress Control Number: 2017957993). DOI: 10.1007/978-3-319-69150-3

[14] V.A. Solodukha, U.A. Pilipenko, A.A. Omelchenko, D.V. Shestovski. Devices and Methods of Measurements, **13**(3), 199 (2022). DOI: 10.21122/2220-9506-2022-13-3-199-207

[15] В.А. Пилипенко, В.А. Солодуха, В.А. Горушко, А.А. Омельченко. Докл. Нац. акад. наук Беларуси, **62**(3), 347 (2018). DOI: 10.29235/1561-8323-2018-62-3-347-352

[16] В.М. Анищик, В.А. Горушко, В.А. Пилипенко, В.В. Понарядов, В.А. Солодуха, А.А. Омельченко. Журнал Белорусского государственного университета. Физика, **3** (81), (2021).

[17] В.А. Солодуха, А.И. Белоус, Г.Г. Чигирь. Наука и техника, **15**(4), 329 (2016). DOI: 10.21122/2227-1031-2016-15-4-329-334

[18] В.А. Швец, Е.В. Спесивцев, С.В. Рыхлицкий, Н.Н. Михайлов. Российские нанотехнологии, **4**(3), 72 (2009).

[19] И.В. Ивашкевич, Н.И. Стаськов, А.Б. Сотский, Л.И. Сотская, Н.А. Крекотень, Л.Д. Буйко. Известия ГГУ, **39** (6, ч. 2), 60 (2006).

[20] Н.И. Стаськов, И.В. Ивашкевич, А.Б. Сотский, Л.И. Сотская. Проблемы физики, математики и техники, **1**(10), 26 (2012).

[21] N.I. Staskov, L.I. Sotskaya. J. Appl. Spectrosc., **84**(5), 764 (2017). DOI:10.1007/s10812-017-0542-z

[22] Д.И. Биленко, В.П. Полянская, М.А. Гецьман, Д.А. Горин, А.А. Невешкин, А.М. Ященок. ЖТФ, **75** (6), 69 (2005).

[23] B.M. Ayupov, V.A. Gritsenko, Hei Wong, C. W. Kimd. J. Electrochemical Society, **153**(12), F277 (2006).

[24] Р. Азам, Н. Башара. *Эллипсометрия и поляризованный свет* (Мир, М., 1981).

[25] Н.И. Стаськов, А.А. Мухаммедмурадов, Н.А.Крекотень, С.О. Парашков. Журнал прикладной спектроскопии, **87**(1), 122 (2020).

[26] I.H. Malitson. J. Opt. Soc. Am., **55**(10), 1205 (1965).

[27] A.R. Forouhi, I. Bloomer. Phys. Rev. B, **38**(3), 1865 (1988).

[28] А.Б. Сотский. *Теория оптических волноводных элементов* (УО МГУ им. А.А. Кулешова, Могилев, 2011).

[29] А.С. Рудый, А.Б. Чурилов, С.В. Курбатов, А.А. Мироненко, В.В. Наумов, Е.А. Козлов. ЖТФ, **93**(10), 1447 (2023). DOI: 10.61011/JTF.2023.10.56283.93-23

[30] J.C. de Souza, A.F. da Silva, H. Vargas. J. Physique, **IV**(4(C7)), C7-129 (1994).

[31] L. Vina, & M. Cardona. Phys. Rev. B, **29**(12), 6739 (1984).