

Оптическая неоднородность легированных кремниевых подложек

А. В. Шилов¹⁾, Н. И. Стаськов¹⁾, А. Б. Сотский¹⁾, В. А. Пилипенко²⁾,
А. Н. Петлицкий²⁾, С. А. Мельников²⁾

¹⁾ Могилевский государственный университет им. А. А. Кулешова,
Могилев, Беларусь, e-mail: ni_staskov@mail.ru,

²⁾ ГЦ «Белмикрoанализ» научно-технического центра ОАО «Интеграл» - управляющая компания холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь, e-mail: apetlitsky@integral.by

В работе представлены результаты исследования оптических характеристик легированных кремниевых пластин КДБ-12 и КЭС-0.015 после быстрого термического отжига. На основе данных спектральной эллипсометрии и фотометрии определены ширина запрещенной зоны и энергия Урбаха. Установлено, что ширина запрещенной зоны для чистого кремния в обоих образцах одинакова, однако энергия Урбаха для КДБ-12 превышает значение для КЭС-0.015 из-за более высокой концентрации бора по сравнению с концентрацией сурьмы.

Ключевые слова: кремниевые пластины, легированные бором, быстрый термический отжиг, спектральная эллипсометрия, фотометрия, ширина запрещенной зоны, энергия Урбаха.

Optical inhomogeneity of doped silicon substrates

A. V. Shilov¹⁾, N. I. Staskov¹⁾, A. B. Sotsky¹⁾, V. A. Pilipenko²⁾,
A. N. Petlitsky²⁾, S. A. Melnikov²⁾

¹⁾ Mogilev State A. Kuleshov University, Mogilev, Belarus,
e-mail: ni_staskov@mail.ru

²⁾ Scientific Development of the «Belmicroanalysis». State Center of the JSC «INTEGRAL» –
«INTEGRAL» Holding Managing, Minsk, Belarus, e-mail: apetlitsky@integral.by

This paper presents the results of a study of the optical characteristics of doped KDB-12 and KES-0.015 silicon wafers after rapid thermal annealing. Using spectral ellipsometry and photometry, the band gap and Urbach energy were determined. It was found that the band gap for pure silicon is the same in both samples; however, the Urbach energy for KDB-12 exceeds that of KES-0.015 due to the higher boron concentration compared to the antimony concentration.

Keywords: boron-doped silicon wafers, rapid thermal annealing, spectral ellipsometry, photometry, band gap, Urbach energy.

Введение

Кремниевые пластины, легированные бором, используются в качестве подложек для нанесения планарных структур при создании элементов современной электроники. В связи с этим большое внимание уделяется развитию методов определения оптических характеристик пластин – ширины запрещенной зоны E_g и энергии Урбаха E_u . Эти характеристики определяют методами спектрофотометрии и эллипсометрии по показателю поглощения $k(\lambda)$ и коэффициенту поглощения $\alpha(\lambda) = 4\pi \cdot 10^7 k(\lambda) \lambda^{-1}$ ($\alpha(\lambda)$ измеряется в см^{-1}). Один из таких способов основан на экстраполяции Тауца [1] экспериментальной функции

$$[\alpha(\lambda)E]^m \quad (1)$$

где E – спектр энергии фотонов. Второй предусматривает экстраполяцию эмпирической зависимости $\ln[\alpha(E)]$ функцией [2] вида

$$f(E) = \ln \left[\alpha(1240 / E_g) \exp \left[(E - E_g) / E_u \right] \right] . \quad (2)$$

Параметр m в (1) принимает значения 0.5, 2, 1.5 в зависимости от вида электронного перехода и обеспечивает линейный участок функции $B(E - E_g)$. Формула (2) получается из представления экспериментального коэффициента поглощения в виде $\alpha(E) = \alpha_0 \exp \left[E - E_g / E_u \right]$. Если измерения проводят на крае полосы собственного поглощения (λ_g) полупроводника, например, применяют спектрофотометрию пропускания, то для определения E_g и E_u используют упрощенные формулы $E_g = 1240\lambda_g^{-1}$ и $\alpha(E) = \alpha_0 \exp \left[E / E_u \right]$. Экстраполяция Тауца используется для определения E_g аморфных и кристаллических полупроводников с совершенной структурой. Величина E_u характеризует несовершенство кристаллической структуры полупроводника, которая происходит при внедрении трех- (бор, КДБ) или пяти- (сурьма, КЭС) валентного атома в решетку кремня. В данном сообщении обсуждаются оптические характеристики E_g и E_u для промышленных пластин КДБ-12 и КЭС-0.015.

1. Материалы и методы исследования

В качестве образцов использовались пластины кремния КДБ-12 ($N = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $\rho = 1.2 \text{ } \Omega \text{ см}$) и КЭС-0.015 ориентации $\langle 100 \rangle$ диаметром 100 мм, полученные по методу Чохральского. Одну поверхность пластин подвергали механической обработке и в течение (3 ± 1) мин протравливали в растворе плавиковой кислоты. После этого на данных образцах проводилась БТО путем облучения световым импульсом с нерабочей (матированной) стороны пластины в течение 7 с в среде Ag при температуре отжига для пластин КДБ-12 1025 °С и для КЭС-0.015 при 1075 °С. В результате такой подготовки образцов информативность спектров эллипсометрических углов $\Delta(\lambda)$ и $\psi(\lambda)$ обеспечивает приповерхностный слой пластин толщиной порядка глубины проникновения света. Для измерений спектров пропускания и отражения обрабатывалась вторая матированная поверхность пластины КДБ-12 до толщины 0.047 мм. Установлено [3], что толщина поверхностного слоя диоксида кремния (SiO_2) на пластинах КДБ-12 и КЭС-0.015 после БТО $\sim 1 \text{ нм}$. Спектры $\Delta(\lambda)$ и $\psi(\lambda)$ пластин, подвергнутых БТО, измерялись на эллипсометре HORIBA UVISEL 2 при угле падения 70° в спектральной области от 200 нм до 2000 нм. На спектрофотометре PHOTON RT (EssentOptics, Belarus) измеряли их отражательные и пропускательные способности в поляризованном свете при угле падения 10° в спектральной области от 200 нм (6.2 эВ) до 1600 нм (0.78 эВ). Эта область включала полосу собственного поглощения полупроводника с точками сингулярности Ван Хофа и область Урбаха, в которой содержатся переходы электронов на уровни бора и сурьмы.

2. Результаты и обсуждение

На рис. 1, *а* представлены экспериментальные спектры отражательных и пропускательных способностей пластины КДБ-12 для s-поляризованного света, измеренные при угле падения 10° . Край полос собственного поглощения полупроводника приходится на длину волны 1116 нм. Тогда $E_g = 1.11$ эВ. При $E \geq E_g$ начинается поглощение света. Это приводит к уменьшению пропускательной способности и увеличению отражательной способности пластины. Для более точного определения ширины запрещенной зоны по (1) использовали формулы для отражательных и пропускательных способностей из [4], с помощью которых рассчитывали спектры $k(\lambda)$, $n(\lambda)$ и $\alpha(\lambda)$. На рис. 1, *б* приведена функция Тауца для $m = 0.5$. В таком случае учитывается, что поглощение света приводит к непрямым электронным переходам из валентной зоны в зону проводимости и $E_g = 1.12$ эВ. Эта величина близка к вышеопределенной ширине запрещенной зоны.

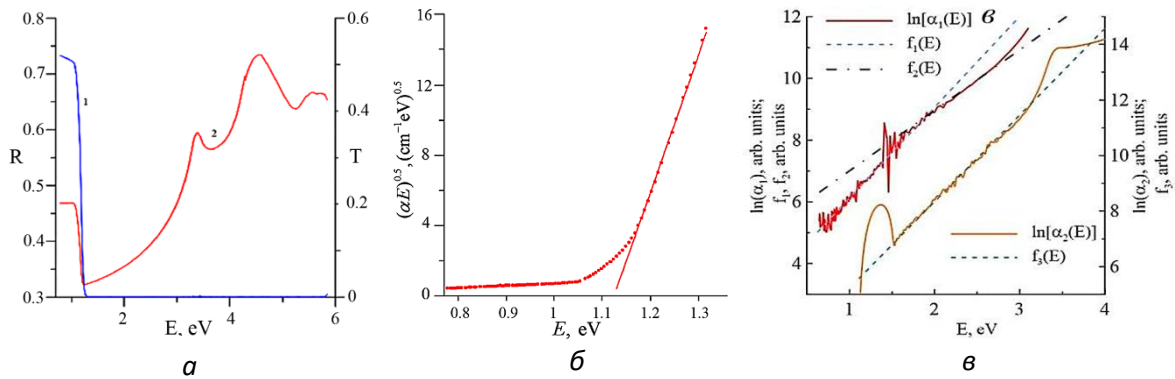


Рис. 1. Пропускательные (1) и отражательные (2) способности пластины КДБ-12 (*а*); определение величины E_g с помощью интерполяции Тауца (*б*); определение величин E_g и E_u с помощью функций (2) (*в*)

Мы предприняли попытку исключить [5] плоскопараллельные слои SiO_2 известной толщины ($d = 1.1$ нм) и с известным показателем преломления в алгоритме расчетов спектров $n(\lambda)$ и $k(\lambda)$ подложек КДБ-12 и КЭС-0.015, комплексная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_s(\lambda)$, которых находится численно без использования какой-либо дисперсионной модели. Она является корнем уравнения $f(\epsilon_s) = \tan \psi \exp(i\Delta)$. На экспериментальной зависимости $\ln[\alpha_1(E)]$ (рис. 1, *в*) видны два линейных участка, интерполяция которых прямыми (2) на интервале $0.62 \text{ эВ} \leq E \leq 1.88 \text{ эВ}$ позволяет получить $E_{g1} = 1.06 \text{ эВ}$ и $E_{u1} = 0.32 \text{ эВ}$ и на интервале $1.88 \text{ эВ} \leq E \leq 2.8 \text{ эВ}$ интерполяция дает $E_{g2} = 1.98 \text{ эВ}$ и $E_{u2} = 0.51 \text{ эВ}$. На этом рисунке приведены подобные расчеты для cSi, $k(\lambda)$ которого взято из [6], В данном случае край полосы поглощения приходится на $E = 1.06 \text{ эВ}$ и на зависимости $\ln[\alpha_2(E)]$ имеем один линейный участок, интерполяция которого прямой (2) дает $E_g = 1.04 \text{ эВ}$ и $E_u = 0.32 \text{ эВ}$. Равенство в пределах погрешности ($\pm 0.01 \text{ эВ}$) ширины запрещенной зоны для cSi указывает на возможность использования функции (2) для определения оптических характеристик E_g и E_u .

полупроводников. Следует учесть, что спектрофотометрия пропускания дает информацию обо всей подложке, спектроэллипсометрия – о приповерхностном слое этой подложки. Возможно, наличие двух линейных участков на экспериментальной зависимости $\ln[\alpha(\lambda)]$ от E вызвано тем, что под слоем SiO_2 находится неоднородный слой КДБ-12, в котором доля cSi в направлении к рабочей поверхности пластины изменяется [7].

На экспериментальной зависимости $\ln[\alpha(\lambda)]$ от E (рис. 2) для КЭС-0.015 также можно выделить два линейных участка, которые можно интерполировать прямыми $f_1(E)$ и $f_2(E)$.

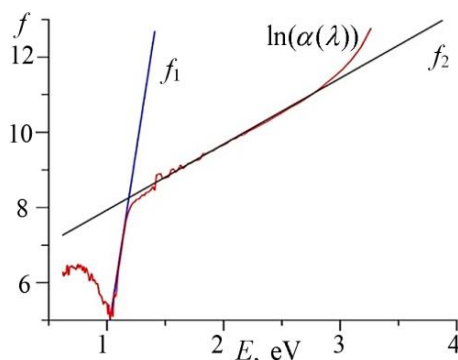


Рис.2. Определение ширины запрещенной зоны КЭС-0.015

Согласно рис. 2, первый линейный участок расположен на интервале $0.62 \text{ эВ} \leq E \leq 1.88 \text{ эВ}$ (длинноволновая область) $E_{g1} = 1.06 \text{ эВ}$ и $E_{u1} = 0.05 \text{ эВ}$, а второй находится на интервале $1.88 \text{ эВ} \leq E \leq 2.8 \text{ эВ}$ (коротковолновая область) $E_{g2} = 1.51 \text{ эВ}$ и $E_{u2} = 0.52 \text{ эВ}$. Величины E_{g1} и E_{u1} характеризуют чистый cSi , а величины E_{g2} и E_{u2} характеризуют КЭС-0.015. Край полосы поглощения для КЭС-0.015 приходится на длину волны 1116 нм (1.11 эВ) как и для КДБ-12. В то же время, ширина запрещенных зон для cSi в КДБ-12 и КЭС-0.015 одинаковая. Однако, энергия Урбаха для КДБ-12 большая, чем для КЭС-0.015. Это можно объяснить тем, что концентрация бора значительно больше концентрации сурьмы в одном и том полупроводнике. Это подтверждается неравенством величин E_{g2} и равенством в пределах погрешности величин E_{u2} для этих полупроводников. Уменьшение величины запрещенной зоны для прямых электронных переходов при легировании бором или сурьмой обусловлено расположением акцепторных или донорных уровней примеси в запрещенной зоне кремния около потолка этой зоны или ее дна.

На рис. 3 приведены спектры $\epsilon_1(\lambda)$ и $\epsilon_2(\lambda)$, рассчитанные по формуле $\epsilon(\lambda) = \epsilon_1(\lambda) - i\epsilon_2(\lambda) = (n(\lambda) - ik(\lambda))^2$, полупроводников cSi , КДБ-12 (а, б) и КЭС-0.015 (в). Как следует из рисунка 3, максимумы функций $\epsilon_2(\lambda)$ для КДБ-12 приходятся на длины волн 289.7 нм (4.28 эВ) и 360.5 нм (3.44 эВ), а для КЭС-0.015 эти максимумы приходятся на длины волн 291.8 нм (4.25 эВ) и 361.5 нм (3.43 эВ), соответствующие точкам сингулярности Ван Хова. Для cSi в области точек сингулярности Ван Хова соответствующие параметры равны $\lambda_1 = 291.8 \text{ нм}$, $E_1 = 4.25 \text{ эВ}$; $\lambda_2 = 361.4 \text{ нм}$, $E_2 = 3.43 \text{ эВ}$ [8].

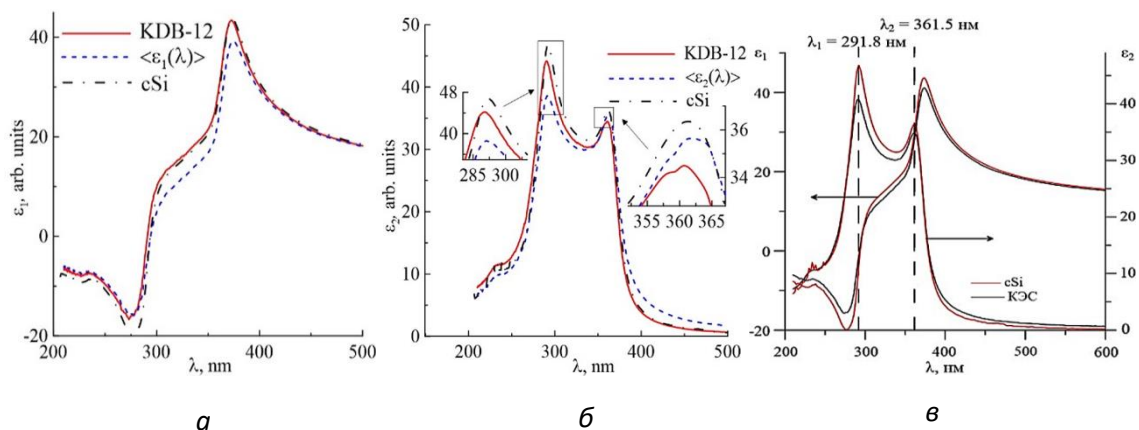


Рис. 3. Диэлектрические функции полупроводников cSi, КДБ-12 (а, б) и КЭС-0.015 (в)

Заключение

Ширина запрещенных зон для cSi в КДБ-12 и КЭС-0.015 одинаковая. Уменьшение величины запрещенной зоны для прямых электронных переходов при легировании бором или сурьмой обусловлено расположением акцепторных или донорных уровней примеси в запрещенной зоне кремния около потолка этой зоны или ее дна. Из-за того, что концентрация бора значительно больше концентрации сурьмы в одном и том полупроводнике энергия Урбаха для КДБ-12 большая, чем для КЭС-0.015.

Благодарности

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований РБ «1.15 Фотоника и электроника для инноваций»

Библиографические ссылки

1. Tauc J. Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium / J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu // Phys. Status Solidi B. 1966. Vol. 15. P. 627.
2. Upconversion Luminescence from Sol-Gel-Derived Erbium- and Ytterbium-Doped BaTiO₃ Film Structures and the Target Form / N. V. Gaponenko [et al.] // Photonics. 2023. Vol. 10, № 4. P. 359.
3. Изменение оптических параметров кремния после быстрой термической обработки / В. М. Анищик [и др.] // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2021. Т. 3, № 81. С. 81–85
4. Spectrophotometry of Layers on Plane Parallel Substrates / A. B. Sotsky [et al.] // Optics and Spectroscopy. 2020. Vol. 128. P. 1155–1166.
5. Эллипсометрия подложки с наноразмерным поверхностным слоем / Д. В. Понкратов [и др.], // Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-математических наук. 2025. Т. 61, № 2. С. 128–138.
6. Palik E. D. Handbook of Optical Constants of Solids. Orlando: Academic press, 1985.
7. Оптические характеристики легированных бором кремниевых пластин после быстрого термического отжига / Н. И. Стаськов [и др.] // Оптика и спектроскопия. 2025. Т. 133, № 8. С. 874–880.
8. Fujiwara H. Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd, 2007.