

平川誠一\* , Nataliya Nabatova GABAIN\* , 和才容子\* , 飯田 裕\*

\*愛宕物産株式会社

## 要旨

全自動分光エリプソメータUT-300は、生産ライン向けに特化した全自動膜厚計である。ここでは、そのレシピ作成の中核をなす分光エリプソメータのスペクトル解析について述べる。UT-300のターゲットである最先端の膜種は、解析手法も最新の技術が用いられるが、今回はそのベースとなる解析手順とその際考慮すべき点を中心に解説する。

## Abstract

The UT-300 spectroscopic ellipsometer is a fully-automated measuring system developed specifically for use on semiconductor production lines. In this article, the authors discuss the essential spectrum analysis steps required to perform multilayer analysis and provide pointers on the effective use of the instrument.

## 1 分光エリプソの原理

分光エリプソメータ (Spectroscopic Ellipsometer: SE) は、入射光と反射光の偏光の変化量を測定し、その結果から膜厚 ( $d$ )、複素屈折率 ( $n, k$ ) を算出する装置である<sup>1)2)</sup>。偏光変化量とは振幅と位相差であり、波長 ( $\lambda$ )、入射角度 ( $\theta$ )、膜厚、複素屈折率等のパラメータに依存するので、その関係は次のようになる。

$$(d, n, k) = f(\lambda, \theta)$$

入射角度を固定した場合、単一波長エリプソメータでは、

$$(d, n, k) = f(\lambda)$$

となり、 $d, n, k$  の三つの未知数に対し、二つの独立変数しか測定できないので、 $d, n, k$  の内のいずれか一つを既知として固定する必要がある。

単一波長でも角度を変えると測定変数は増加するが、入射角度の違いによる ( $\theta_1, \lambda_1$ ) と ( $\theta_2, \lambda_2$ ) に強い相関関係があるため、 $d, n, k$  を精度良く求めることは難しい。

一方、分光エリプソメータは多波長測定であるため、

( $d, n(\lambda), k(\lambda)$ ) =  $f(\lambda)$  の関係になる。膜厚は波長に関係なく一定であるので、三つの未知数を同時に求めることができる。

また、多層膜では ( $d_1, n_1, k_1$ )、( $d_2, n_2, k_2$ )... と未知数が増えるので、多数の波長で測定できる分光エリプソメータのみが測定可能となる。

## 2 多層膜解析の実例

図1にSIMOX基板 (Separation by Implanted Oxygen) の解析例を示す。

測定値は各波長の  $\Psi, \Delta$  で表示され、実線はモデルのスペクトルである。スペクトルは、通常、変化を見やすくするため波長はエネルギー (eV: エレクトロンボルト) で表示する。(  $E = h\nu$  から、 $1\text{eV} = 1.2398 \mu\text{m}$  )

測定される  $\Psi, \Delta$  は、基板、膜まで含んだトータルの値で、これを  $\Psi_{\text{total}}, \Delta_{\text{total}}$  とすると、

(  $\Psi_{\text{total}}, \Delta_{\text{total}}$  ) =  $f(d_1, d_2, \dots, d_n, n_0, n_1, \dots, n_n, k_0, k_1, \dots, k_n)$  と表現することができる。

したがって解析作業としては、基板の ( $n_0, k_0$ )、1層目の ( $d_1, n_1, k_1$ ) 等、各層ごとに初期値を仮定して、トータルの ( $\Psi_{\text{total}}, \Delta_{\text{total}}$ ) を算出し (モデリング・シミュレーション)、測定スペクトル ( $\Psi_{\text{meas}}, \Delta_{\text{meas}}$ ) とシミュレーション・スペクトル ( $\Psi_{\text{model}}, \Delta_{\text{model}}$ ) が近くなった所で、最終的にフィッティングをかけて合わせ込む。実際の生産ラインでは、あらかじめ合わせ込んだものをいくつかレシピとして用意しておく。

SIMOXの例では、Si基板上に界面層を設定する4層モデルにより、測定データとモデルが一致する。両者の乖離の量は最小二乗誤差の  $\chi^2$  という数値で表され、4層モデルの方が明らかに小さい。

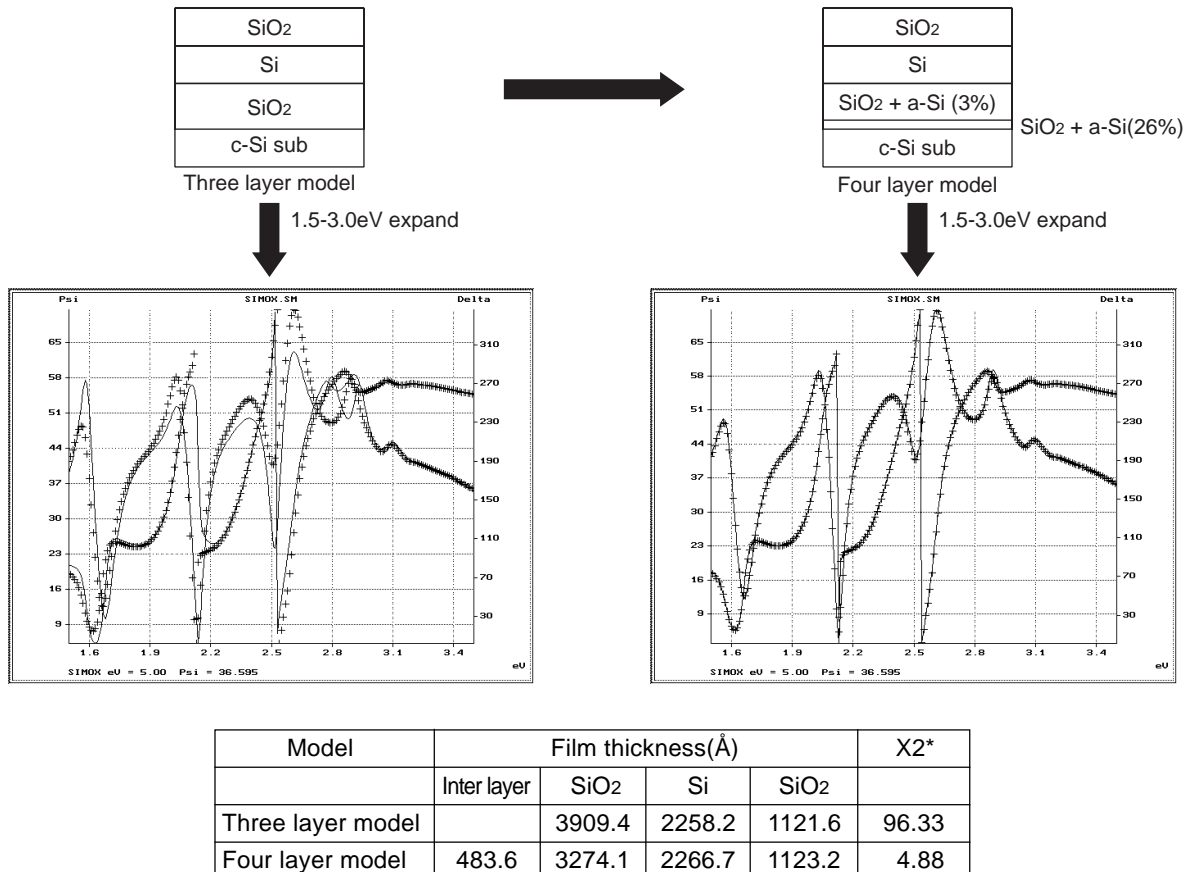


図1 多層膜解析例 (SIMOX)  
Result of analyzing of a SIMOX multilayer

一般的に、短波長(高エネルギー)は表面粗さに敏感で、長波長 低エネルギー)では透過しやすいことから界面の情報が増える。この例では表面から2層目にSi層があり、3eV以上(400nm以下)の紫外光が透過しない。したがって界面の影響もスペクトルに反映されず、3層モデル、4層モデルとも3eV以上で変化はない。

以上のように、分光エリブソ法は基本的には数学的な処理に基づいているため、ときには、理解不能な結果が出ることもある。したがって、解析には物理的知見が不可欠である。

### 3 光学定数について

バルクのSiO<sub>2</sub>(酸化膜)やSi<sub>3</sub>N<sub>4</sub>(窒化膜)では、光学定数がよく知られており、ハンドブック等で各波長の屈折率を数値で得ることができる<sup>3)</sup>。しかしながら、強誘電体やLow-k膜などの新材料、多結晶シリコン(p-Si: polycrystalline Silicon)、SiOx、SiONなどは、例外を除き数値データが存在しない。

このような場合に適用される解析法としては、大きく分けて、屈折率が既知の二つの材料を混ぜ合わせる有効媒質近似法(EMA: Effective Medium Approximation)と、屈折率を波長の関数とする分散式(Dispersion)を使用する二つの方法がある。

#### 3.1 有効媒質近似法 (EMA)

代表的な例は多結晶シリコン(p-Si)である。結晶シリコン(c-Si: crystalline Silicon)と非結晶シリコン(a-Si: amorphous Silicon)の屈折率を混ぜ合わせることで、p-Siの屈折率を得ることができ、混晶比から結晶化率も判断できる。

表面層と空気を混ぜ合わせて、表面粗さ(ラフネス)を解析するのも代表例の一つである。

応用例として、携帯電話用途で着目されているSiGeの例を見てみよう(図2)。結晶シリコン(c-Si)と結晶ゲルマニウム(c-Ge)の間に、Ge濃度が異なるSiGeのスペクトルが存在する。(なお、ここでは虚数部の誘電率スペクトルで表示されている誘電率の二乗が屈折率)いくつかの異なるGe濃度のSiGe屈折率は公開されているので、それを混ぜ合わせることによって、Ge濃度を求めることができる。現在は解析技術の進歩によって、低Ge濃度のSiGeの解析もできるようになった。

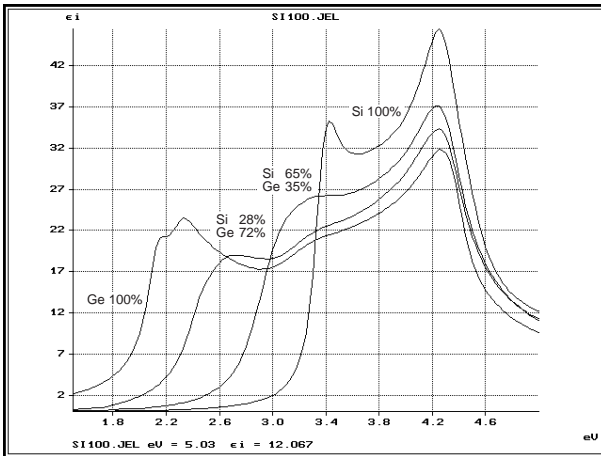


図2 SiGe 誘電率スペクトル(虚数部)  
Dielectric constant of a SiGe thin film (imaginablyt)

### 3.2 分散式 (Dispersion)

#### (1) n次方程式

屈折率が波長とともに単純に変化する領域では、波長のn次方程式が使用でき、代表的なものにコーシーの分散式 (Cauchy's dispersion formula)がある。この方法は、フィッティングが発散しやすい、ピークがあるような複雑な屈折率を表現できない、物理的な知見が得られない等の理由により、最近では使用されることは少ない。

#### (2) 振動子モデル(古典力学)

次に、振動子モデルで誘電率を表現する方法がある。虚数部がなければ透明、自由電子の項があれば導電性があるなど、直感的にわかりやすい。

フィッティングも収束しやすいが、逆に言うと、初期値のパラメータがあらかじめ絞り込まれていないといけない。誘電率の波長分散の傾向は、まず絶縁体(酸化膜等)、金属、半導体等大きなカテゴリごとに分けられる。さらにITOなどの透明電極等小さなカテゴリごとに、誘電率の傾向が細分化されていくので、新材料の場合はよく似た材料のパラメータを初期値として選ぶ。

#### (3) 振動子モデル(量子力学)

量子力学をベースとした振動子モデルで、振動子の重ね合わせによってかなりの種類の材料に応用可能である。このモデルでは、光学的バンドギャップが分散式中に内在しているといった特長を持つが、フィッティングが発散しやすいという欠点も持ち合わせる。なお、初期パラメータ値の選択方法は古典力学の場合と同様である。

#### (4) その他

その他、各々の材料ごとに分散式を作成することができる。化合物半導体がその代表例と言えよう。

ここでは高精細液晶用途の低温ポリシリコンの例をあげる<sup>4)</sup>(図3、図4、表1)誘電率の分散式にE<sub>1</sub>(eV)、Γ<sub>1</sub>(eV)というパラメータが含まれていて(ここでは紙面の関係上

割愛する)、E<sub>1</sub>のエネルギーにあるピークのスペクトル幅Γ<sub>1</sub>が小さいほど電子移動度が大きい。図からわかるように電子移動度が大きいということは、グレインサイズが大きいということ、グレインサイズが無限に大きいと結晶シリコン(c-Si)となる。

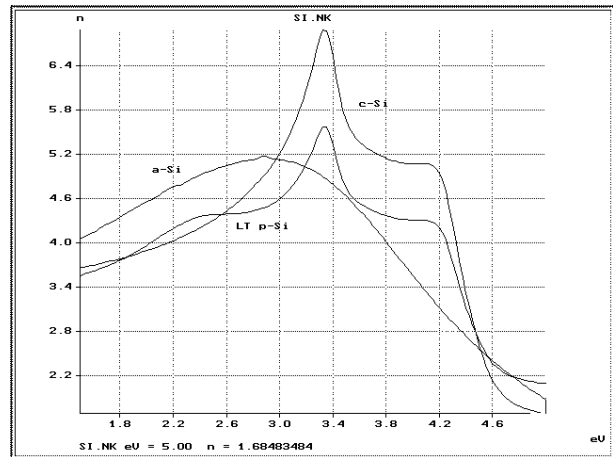


図3 低温ポリシリコン屈折率スペクトル(n)  
Refractive index of a polycrystalline silicon thin film formed at low temperature

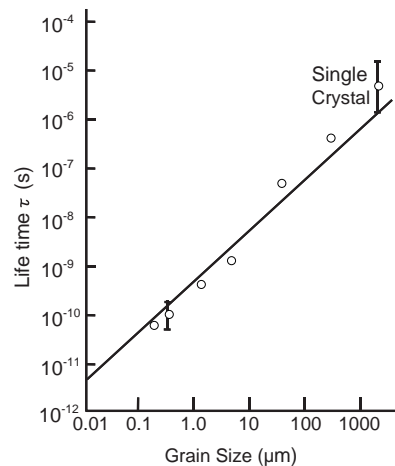


図4 τ, 移動度, ライフタイム, グレインサイズの関係  
Relations between life time and grain size of a polycrystalline silicon thin film formed at low temperature

	E <sub>1</sub> (eV)	Γ <sub>1</sub> (eV)
Crystalline silicon (c-Si)	3.37	0.069
Polycrystalline silicon (p-Si:doped)	3.36	0.098
Polycrystalline silicon (p-Si:undoped)	3.49	0.319
Low temperature polycrystalline silicon (LT p-Si)	3.37	0.069

表1 各種構造シリコンのE<sub>1</sub>, Γ<sub>1</sub>  
E<sub>1</sub>, Γ<sub>1</sub> of various a silicon monoxide thin film

## 4 薄膜解析の難しさ

偏光変化量は、屈折率と光が通る体積(膜厚xビーム径)の積に比例するので、ビーム径が一定とすると偏光変化量は次のようになる。

偏光変化量 膜厚(d)x 屈折率(n, k) 超薄膜では、測定される偏光変化量が小さく、膜厚と屈折率の相互依存性も大きいので両者を分離して解析することが困難である。

ここで、シリコン(Si)上の酸化膜(SiO<sub>2</sub>)について考えてみる。1000Å以上の膜厚であれば、膜質はバルクと同じとみなされ、バルクの屈折率が使用できる。このような厚膜では光干渉計が使用されることが多い。

1000Å以下の膜厚では、光学的波長の制限から通常の光干渉計を使用するのは難しい。100-1000Åの範囲では、SiO<sub>2</sub>膜の構造がバルクとは異なり、屈折率も変化するが、その変化はエリプソの測定波長範囲を超えた高エネルギー側に限定されるので、エリプソが使用できる。通常この膜厚範囲では、単一波長エリプソメータが使用される。

100Å以下の膜厚、特に極薄膜と言われる10-20Åの酸化膜に至っては、数分子の厚さであり、バルクの物理定数である屈折率を議論すること自体がおかしいと言う人もいる。

品質管理では、目標とする膜厚に対するズレを見る。例えば管理値が±1%といった場合、1μmの目標膜厚に対し1%は100Åであり、1000Åの膜厚では10Åとなる。これからすると、10Åの1%がいかにか大変かわかる。

さらに酸化膜(SiO<sub>2</sub>)の屈折率を見て頂きたい(図5)。

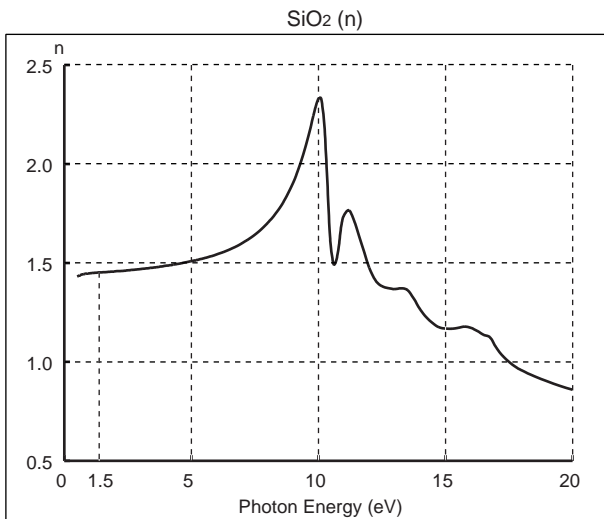


図5 SiO<sub>2</sub> 屈折率スペクトル (n)  
Refractive index of a polycrystalline silicon thin film formed at low temperature

分光エリプソといっても通常5.0-1.5eV(又は6.5-1.5eV)の波長範囲を使うが、この波長範囲で絶縁体は屈折率の変化に乏しく、それだけ測定・解析が難しいことになる。

SIMOXはそれぞれの膜厚も厚く、屈折率の差がはっきりしているため、測定データとモデルの違いが表示した時に確認できるが、上述したような超薄膜では<sup>2</sup>が解析の指針となる。

しかしながら、高精度測定と最新の解析手法を用いれば、困難とされていた超薄膜の評価も可能となる。

ここでは、酸化膜を4層で解析した例(図6)とONO膜例(図7)を記すに留めておく。酸化膜についていえば、NOガス、N<sub>2</sub>Oガスの違いによる層構造の違いも検出可能である。

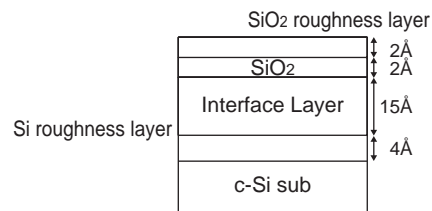


図6 酸化膜(SiO<sub>2</sub>): 4層構造  
Construction of a silicon monoxide thin film (four layer)

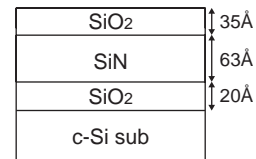


図7 ONO膜構造  
Construction of a ONO thin film

## 5 おわりに

分光エリプソメータは、測定パラメータの多さのゆえに、高精度の膜厚計として機能するほか、様々な情報を得ることが可能である。その反面、解析を確かなものにするには、サンプルの性質を把握し適切な解析手法が必要となる。スループットを最大にするためには、ユーザーと共同で最適なレシピを作成することも必要になるであろう。

## 参考文献

- 1) エミル・ウォルフ, マックス・ボルン  
光学の原理 (東海大学出版会)
- 2) R. M. A. AZZAM and N. M. BASHARA  
ELLIPSOMETRY AND POLARIZED LIGHT
- 3) Edward D. Palik  
Handbook of Optical Constants of Solids &
- 4) A. K. Ghosh, C. Fishman and T. Feng  
JOURNAL OF APPLIED PHYSICS  
Vol.51, P.446-454 ( January, 1980 )



平川 誠一

Seiichi HIRAKAWA

愛宕物産株式会社 / ホリバグループ

半導体営業部

部長



Nataliya Nabatova GABAIN, PhD.

愛宕物産株式会社 / ホリバグループ

半導体営業部

ジョブリーダー



和才 容子

Yoko WASAI

愛宕物産株式会社 / ホリバグループ

半導体営業部

アプリケーション エンジニア



飯田 裕

Hiroshi IIDA

愛宕物産株式会社 / ホリバグループ

半導体営業部

アプリケーション エンジニア