

玻璃基底和表面粗糙度在氮化硅薄膜椭圆偏测量中的影响

刘文德¹ 陈 赤¹ 张 航² 郭 炜² 于 靖¹ 樊其明¹ 徐英莹¹

(¹中国计量科学研究院, 北京 100013
²京东方科技集团股份有限公司技术研发中心, 北京 100015)

摘要 在光谱椭圆偏测量中,玻璃基底的背反射会给测量结果造成较大影响。针对平板显示器件玻璃基底表面氮化硅镀膜进行了椭圆偏测量和模型计算。采用相干背反射模型“空气-基底-空气”计算并拟合得到与厂商数据符合较好的玻璃基底折射率。对氮化硅薄膜采用 Tauc Lorentz 色散模型进行了分析拟合,讨论了薄膜与基底界面层、表面粗糙度对光学常数及模型拟合的影响,表明在薄膜与基底间晶格失配的情况下,界面层的引入对改善拟合度是必要的。给出了薄膜体系的光学常数、薄膜结构的分析结果。

关键词 薄膜;氮化硅薄膜;光谱椭圆偏法;玻璃基底;粗糙度;背反射

中图分类号 O484 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL201239.s107002

Effect of Glass Substrate and Surface Roughness on Ellipsometric Measurement of Silicon Nitride Films

Liu Wende¹ Chen Chi¹ Zhang Hang² Guo Wei² Yu Jing¹ Fan Qiming¹ Xu Yingying¹

(¹National Institute of Metrology, Beijing 100013, China
²Technology R & D Center, BOE Technology Group Co., Ltd, Beijing 100015, China)

Abstract In spectroscopic ellipsometric measurement, the backside reflection of the glass substrate has great influence on the tested results. Ellipsometric measurement and model calculation are carried out for the silicon nitride film deposited on glass substrate of flat panel displays. The coherent model of the backside reflection, i. e. "air-substrate-air" is used to calculate and obtain the refractive index of the glass substrate which agrees well with the data provided by manufacturer. Tauc Lorentz model is used in data analysis for the silicon nitride film to discuss the effect of the interface layer between the film and substrate, the surface roughness on the optical constants and model fitting. The results suggest that the inclusion of the interface is necessary for improving the degree of fitting in the case of lattice mismatch between the film and substrate. The optical constants and film structure of the film system are presented.

Key words thin films; silicon nitride films; spectroscopic ellipsometry; glass substrate; roughness; backside reflection

OCIS codes 310.3840; 310.6860; 120.2130

1 引言

氮化硅薄膜在当今光电子、微电子器件领域应用广泛,例如作为氧化掩模、施主扩散阻挡层、波导、场效应和薄膜晶体管中的绝缘层、非易失性存储器以及器件封装的最终钝化层等。特别是在显示器领

域,主要采用等离子体辅助化学气相沉积(PECVD)法在玻璃基底上沉积氮化硅薄膜用于制备薄膜晶体管的栅极绝缘层,而所沉积薄膜的光学性质极大地影响了显示器件的质量^[1~3],本文通过椭圆偏法研究了其薄膜结构和光学性质。

收稿日期: 2011-07-16; 收到修改稿日期: 2011-08-30

基金项目: 国家自然科学基金(10774143)及中国计量科学研究院基本科研业务费(23-AKY1112)资助课题。

作者简介: 刘文德(1981—),男,博士,助理研究员,主要从事辐射色度及材料光学等方面的研究。

E-mail: wendeliu@nim.ac.cn

椭圆法测量薄膜样品反射光中两正交偏振分量即 s 和 p 偏振光复振幅的比值。在进行数据分析时通常将薄膜体系处理为相干传播层,即光在任意两界面间无穷多次反射并且振幅迭加^[4]。当基底在入射光波长处表现为吸收介质时,进入基底而反射回来的光可忽略,以上模型是成立的;但当基底相对入射光透明时,基底背面未粗糙化,进入基底的光被反射回来,并被探测器接收,从而对椭圆测量产生影响。例如,硅基底在近红外波段透明,玻璃在可见光波段透明。由于硅基底背面常常经过粗糙化处理,所以降低了背反射光的影响;但是,玻璃基底背面常常是抛光的,并且很多场合必须抛光,比如平板显示器玻璃基板上的镀膜。这种情况下必须考虑有背反

射影响下的椭圆测量,需先对玻璃基底做一椭圆测量^[5]。相比于单波长椭圆法需要利用一些反演技巧来处理透明基底、透明薄膜的问题^[6],光谱椭圆法常利用非线性拟合进行参数反演,这也是本文采用的方法。

2 实验原理

实验样品制备在北京京东方 TFT-LCD 工艺技术国家工程实验室进行,采用射频(RF)平行电极式 PECVD(型号 AKT1600B)。玻璃基板为康宁(Corning[®])公司生产(EAGLE XG[™],名义厚度 0.5 mm),温度为 370 ℃,其他条件如表 1 所示(sccm 表示标准状态下 mL/min)。

表 1 玻璃基底氮化硅薄膜制备条件

Table 1 Preparation condition of silicon nitride on glass substrate

Power /W	Pressure /Pa	Time /s	SiH ₄ /sccm	NH ₃ /sccm	N ₂ /sccm	H ₂ /sccm	PH ₃ /sccm
2100	200	160	160	800	2000	/	/

采用基于光弹晶体相位调制原理的光谱椭圆仪(型号 UVISEL[™] NIR),光谱范围为 0.6~4.8 eV,相调制器为调制频率 50 kHz 的光弹晶体,可对反射光相位、偏振态进行调制。其原理示意图见图 1,光源为 75 W 氙灯,通过光纤耦合到椭圆仪入射臂,经起偏器入射样品表面,反射光依次经过相调制器和检偏器,再由光纤引入单色仪,通过光栅运动扫描探测信号。在所使用的仪器上,检偏器和调制器的主光轴相对方向固定为 45°,常令调制器角度等于 0°,起偏器角度等于 45°,这时 $I_s = \sin 2\Psi \sin \Delta$ 和 $I_c = \sin 2\Psi \cos \Delta$ 。建立适当的薄膜材料和结构模型,对 I_s 和 I_c 进行非线性拟合就可以求得薄膜厚度、光学常数 n 和 k 等参数值。用于衡量拟合程度好坏的拟合度参数定义为

式中上标 Exp 和 Cal 分别表示实验和计算值; N 为测量数据点数; P 为模型参数个数(模型自由度)。非线性拟合的目的就是使(1)式中函数最小化。

3 分析与讨论

从图 2(a)透射谱实验值,可以看出玻璃基底在 0.6~3.0 eV 段基本透明,而在之后透射率下降,这可认为是受到一定吸收的影响。实验数据来自透射率和椭圆测量,后者在入射角等于 55°情况下得到。要求所建立的模型能够同时拟合两组数据,这给参数模型施加了更强的条件,此外,玻璃厚度按名义厚度,即 0.5 mm,考虑光在玻璃背面(抛光面)的背反射形成的相干叠加对玻璃反射光的影响,模型为“空气-玻璃-薄膜-空气”。在 0.6~3.0 eV 柯西(Cauchy)模型可表示为

$$n(\lambda) = A + B \times 10^4 / \lambda^2 + C \times 10^9 / \lambda^4, \quad (2)$$

但为了得到 3.0~4.8 eV 波段的玻璃光学常数,采用色散模型,可表示为

$$k(\omega) = \frac{f_j (\omega - \omega_g)^2}{(\omega - \omega_j)^2 + \Gamma_j^2} \Theta(\omega - \omega_g), \quad (3)$$

式中 Heaviside 分布 $\Theta(\omega - \omega_g)$ 当 $\omega - \omega_g > 0$ 时为 1,反之为 0; ω_g 为带隙能量对应的圆频率。折射率可用 Hilbert 变换得到^[7]

$$n(\omega) = n^\infty + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{k(\omega') - k(\infty)}{\omega' - \omega}, \quad (4)$$

式中 P 为 Cauchy 主值。 n^∞ 为常数,考虑了高能跃迁的贡献。

$$\chi^2 = \frac{1}{(2N - P)} \sum_{i=1}^N [(I_{s,i}^{\text{Exp}} - I_{s,i}^{\text{Cal}})^2 + (I_{c,i}^{\text{Exp}} - I_{c,i}^{\text{Cal}})^2], \quad (1)$$

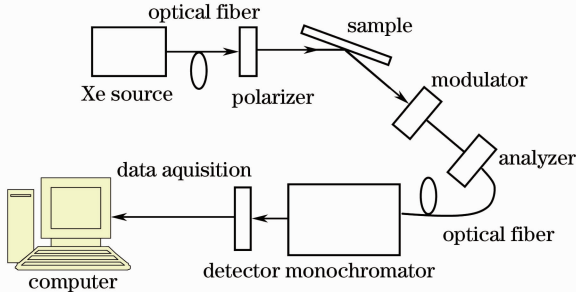


图 1 相调制光谱椭圆仪示意图

Fig. 1 Schematic of the phase-modulated spectroscopic ellipsometer

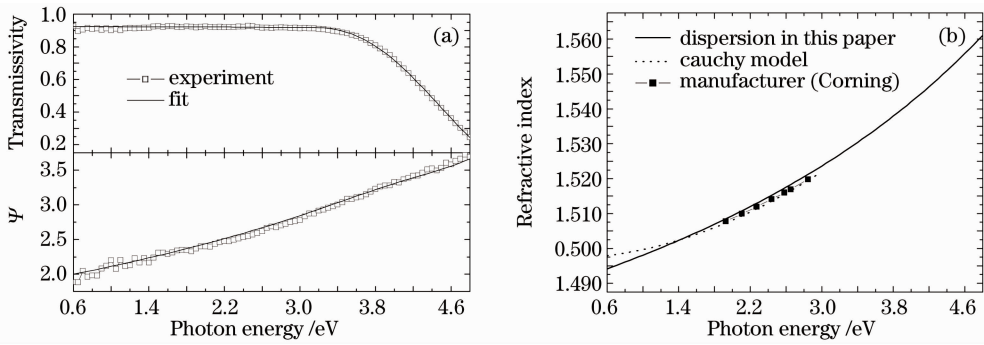


图 2 (a)测量和拟合的玻璃基底透射率和椭偏角 ψ ; (b)利用色散模型拟合得到的玻璃折射率以及厂商数据比较
Fig.2 Measured and fitted transmissivity and ellipsometric angle ψ ; (b) comparison of fitted refractive index of glass by using dispersion model and manufacturer data

图 2(b)是用椭偏法测定以及 Cauchy 模型拟合出的玻璃折射率,其中也将 Corning[®]公司公布的折射率数据^[8]画出以便对比。可见它们接近程度较好,也说明利用椭偏法结合透射数据测定玻璃及其色散模型是合理的。

在拟合氮化硅薄膜数据时,采用 Tauc Lorentz 色散参数模型,其介电函数虚部形式为

$$\begin{cases} \epsilon_2 = \frac{1}{E} \frac{AE_0C(E - E_g)^2}{(E^2 - E_0^2)^2 + C^2E^2}, & E > E_g \\ \epsilon_2 = 0, & E \leq E_g \end{cases} \quad (5)$$

(5)式有 4 个参数,即 A 、 C 、 E_0 和 E_g , 介电函数的实部由 Kramers-Kronig 关系给出^[9],并包含拟合参数 ϵ_∞ (高频介电常熟)拟合中令 $\epsilon_\infty = 1$ 。表面、界面层采用 Bruggeman 等效介质模型,即表面粗糙度层由氮化硅材料和空气,而薄膜和基底之间界面层由氮化硅和玻璃均按 1:1 构成。表 2 给出了 4 种模型的拟合结果,它们的区别在于是否考虑表面、界面层。注意到,表面粗糙度极大地影响了拟合结果,甚至在拟合 2 中看到,不考虑表面粗糙层而单独考虑界面层时得不到合理的界面层结构,通常在非晶薄膜和

玻璃基底界面处,由于物质结构差异(例如晶格失配)以及玻璃表面固有粗糙度的缘故,会造成过渡界面层的出现^[5],因此表 2 的结果是合理的。最后,将拟合 2、3、4 得到的光学常数绘制在图 3 中,可看出模型对折射率影响小于对消光系数的影响。Tauc Lorentz 参数见表 3,和文献相比可知,其处在合理范围内^[10,11]。

表 2 表面、界面层对玻璃基底氮化硅薄膜结构测量的影响

Table 2 Effect of surface, interface on structure measurement of silicon nitride on glass

	Fitting 1	Fitting 2	Fitting 3	Fitting 4
Surface roughness	/	/	5.6	5.7
Silicon nitride	968.1	967.7	963.7	955.3
Interface layer	/	0.01	/	12.4
χ^2	10.5	10.6	0.84	0.74

表 3 氮化硅 Tauc Lorentz 模型拟合参数

Table 3 Fitting parameters of Tauc Lorentz model for silicon nitride

E_g	A	E_0	C
4.13	78.96	9.70	1.43

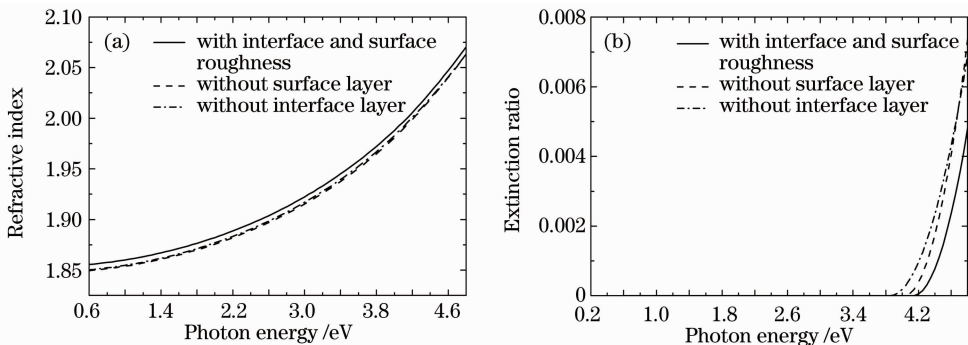


图 3 拟合得到的氮化硅光学常数。(a)折射率;(b)消光系数

Fig.3 Fitted optical constants of silicon nitride. (a) Refractive index; (b) extinction ratio

4 结 论

研究了作为平板显示特别是液晶显示器件中常用的玻璃基底氮化硅薄膜的表征,主要困难在于基底本身的性质对薄膜测量影响较大,对玻璃基底的性质进行了椭圆分析,得到了可信的数据,减少了薄膜测量的不确定因素。在进行薄膜体系数据分析时,比较了不同薄膜结构下拟合的效果,结果表明表面微粗糙度对拟合的影响很大,不考虑表面粗糙层而单独考虑界面层时甚至得不到有意义的界面层结构;不同薄膜结构模型也对得到的光学常数带来影响,尽管折射率相差略小,但消光系数差别则显得较大。该研究希望对透明基底表面单层或多层薄膜的椭圆测量分析有一定的参考价值。

参 考 文 献

- 1 G. Lavareda, C. Nunes de Carvalho, A. Amaral *et al.*. Dependence of TFT performance on the dielectric characteristics [J]. *Thin Solid Films*, 2003, **427**(1-2): 71~76
- 2 Wang Ying, Shen Dezhen, Zhang Jiying. Influence of thermal annealing on the structural and optical properties of si-rich silicon nitride films [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2005, **20**(1): 18~21
王 颖, 申德振, 张吉英. 退火对富硅氮化硅薄膜的结构和发光的影响[J]. *液晶与显示*, 2005, **20**(1): 18~21
- 3 Xie Zhenyu, Long Chungping, Deng Chaoyong *et al.*. Effect of

- high deposition rate on chemical bonds and properties of SiN film [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2007, **22**(1): 26~31
谢振宇, 龙春平, 邓朝勇等. 高速沉积氮化硅薄膜对其化学键及性能的影响[J]. *液晶与显示*, 2007, **22**(1): 26~31
- 4 M. Born, E. Wolf. Principles of Optics [M]. New York: Pergamon Press, 1989
 - 5 A. Ahmad, S. Saq' an, B. Lahlouh *et al.*. Ellipsometric characterization of PbI₂ thin film on glass[J]. *Physica B*, 2009, **404**(1): 1~6
 - 6 Xiao Guohui, Huang Zuohua, Liu Changning *et al.*. Analysis of ellipsometric data processing about transparent film on the transparent substrate [J]. *Laser Technology*, 2010, **34**(2): 247~249
肖国辉, 黄佐华, 刘昌宁等. 透明基底透明膜椭圆数据处理分析[J]. *激光技术*, 2010, **34**(2): 247~249
 - 7 A. R. Forouhi, I. Bloomer. Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics[J]. *Phys. Rev. B*, 1986, **34**(2): 7018~7026
 - 8 Corning Incorporated. Corning[®] EAGLE XG[™] AMLCD Glass Substrates-Material Information [OL]. [2012-02-07]. <http://www.delta-technologies.com/downloads/Eagle%20XG.pdf>
 - 9 Harland G. Tompkins, Engene A. Irene. Handbook of Ellipsometry[M]. New York: William Andrew, 2005. 93~180
 - 10 S. V. Deshpande, E. Gulari, S. W. Brown *et al.*. Optical properties of silicon nitride films deposited by hot filament chemical vapor deposition[J]. *J. Appl. Phys.*, 1995, **77**(12): 6534~6541
 - 11 G. E. Jellison, F. A. Modine, P. Doshi *et al.*. Spectroscopic ellipsometry characterization of thin-film silicon nitride[J]. *Thin Solid Films*, 1998, **313-314**(1-2): 193~197

栏目编辑:何卓铭