基于红外干涉模型的碳化硅与硅外延层厚度测量研究

丁　勇，李佳悦，邸鹏宇

（武汉工程大学邮电与信息工程学院，武汉　430073）

摘　要： 为提高红外干涉法测量半导体外延层厚度的准确性，以碳化硅（SiC）与硅（Si）外延片的实测红外反射谱为基础，开展外延层厚度反演研究。首先对反射谱进行滤波去噪、样条插值与极值解析，并考虑折射率色散特性以建立双光束干涉厚度反演模型；其次针对界面多次反射效应，构建多光束干涉修正模型，并采用非线性最小二乘法进行厚度拟合。结果表明，SiC 样品的多次反射效应较弱，采用双光束模型即可获得较为稳定的厚度反演结果；Si 样品受多次反射影响较明显，引入多光束干涉模型后可对厚度反演结果进行修正。

关键词： 红外干涉；外延层厚度；双光束模型；多光束干涉

中图分类号： O484　　**文献标识码：** A

Research on thickness measurement of silicon carbide and silicon epitaxial layers based on infrared interference model

DING Yong，LI Jiayue，DI Pengyu

（College of Post and Telecommunication of WIT，Wuhan 430073，China）

Abstract：To improve the accuracy of semiconductor epitaxial layer thickness measurement using infrared interference，this study investigates epitaxial layer thickness inversion based on measured infrared reflectance spectra of Silicon Carbide（SiC）and Silicon（Si）epitaxial wafers. First，the reflectance spectra are processed by filtering and denoising，spline interpolation，and extremum analysis. A two-beam interference thickness inversion model is then established considering refractive index dispersion. Subsequently，a multi-beam interference correction model is constructed to account for multiple reflections at the interface，and nonlinear least squares is employed for thickness fitting. The results show that the multiple-reflection effect in SiC samples is relatively weak，and the two-beam model can provide relatively stable thickness inversion results. In contrast，Si samples are more significantly affected by multiple reflections，and the introduction of the multi-beam interference model can correct the thickness inversion results.

Key words：infrared interference，epitaxial layer thickness，two-beam model，multi-beam interference

1　引言

SiC 与 Si 等半导体外延层厚度是影响器件性能的重要参数，其测量精度直接关系到材料质量评价与器件性能控制。作为一种常用的非接触式薄膜测厚技术，红外干涉法的基本原理是利用入射光在外延层上下界面反射后形成干涉，通过分析反射光谱中的干涉条纹特征反演外延层厚度[1]。

传统厚度反演通常采用理想双光束干涉模型，但该模型仅考虑光在上下界面的单次反射，未考虑光束在外延层内部的多次往复反射。当材料界面反射率较高时，多光束干涉会改变反射谱的条纹特征，从而影响基于双光束模型的厚度反演结果。因此，有必要结合不同材料的界面光学特性，分析双光束模型的适用性，并进一步考虑多光束干涉效应对厚度测量结果的影响。

本文研究的问题来源于 2025 年“高教社杯”全国大学生数学建模竞赛 B 题[2]：以 SiC 和 Si 外延片的实测红外反射谱为研究对象，对光谱进行滤波平滑、样条插值与极值点识别，并在考虑折射率色散特性的基础上建立双光束干涉厚度反演模型；进一步针对多次反射效应构建多光束干涉修正模型，通过对比不同模型的计算结果，分析其在不同材料外延层厚度测量中的适用性。

2　理想双光束干涉数学模型

为建立红外光在外延层中的干涉模型（见图 1），作如下基本假设：外延层材料均匀、表面平整且厚度一致，不考虑局部形貌波动对光程差的影响；入射光近似为单色平行光，具有良好的相干性；仅考虑光束在“空气-外延层”界面和“外延层-衬底”界面发生的一次反射与透射，暂不考虑外延层内部的多次反射效应。

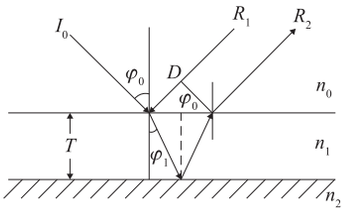

图1 外延层红外反射

在双光束干涉近似条件下，设入射光波长为λ，波数为$\nu=1/\lambda$，外延层折射率为n_1，厚度为T，入射角为φ_0，折射角为φ_1。两束反射光的光程差$\Delta=2n_1T\cos\varphi_1$。考虑到反射过程中的半波损失，即附加$\pi$的相位突变，总相位差$\delta=4\pi n_1T\nu\cos\varphi_1+\pi$，当$\delta=2m\pi$时产生干涉极大值。选取反射谱中相隔$N$个干涉周期的同类极值点（对应波数$\nu_1$和$\nu_2$），在不考虑折射率色散的情况下，可得外延层厚度反演公式：

$$T=\frac{N}{2n_1\cos\varphi_1(\nu_2-\nu_1)} \tag{1}$$

实际情况下，外延层折射率会随波数发生变化，因此需考虑折射率色散特性。采用色散模型$n_1(\nu)=a+b\nu^2+c\nu^4$描述折射率与波数之间的关系，此时厚度计算修正为：

$$T=\frac{N}{2\cos\varphi_1(n_1(\nu_2)\nu_2-n_1(\nu_1)\nu_1)} \tag{2}$$

3 光谱预处理与厚度反演算法

3.1 反射谱去噪与平滑

实测红外反射谱易受高频噪声和异常波段干扰，从而影响干涉极值点的识别精度。为降低噪声对后续厚度反演的影响，应先剔除无效波段，再采用Savitzky-Golay（S-G）滤波对反射谱进行平滑处理，以抑制高频噪声，同时尽可能保留干涉条纹的幅值与相位特征。在此基础上，采用三次样条插值重构连续光谱曲线，使其一阶、二阶导数连续，为后续极值点识别奠定基础。

3.2 极值解析与折射率初始反演

准确提取干涉极值点是双光束模型厚度反演的重要基础。对重构后的样条函数求导，当$R'(\nu)=0$时，可确定候选极值点，并结合二阶导数$R''(\nu)$的符号判断其为极大值或极小值，从而获得干涉峰、谷对应的波数序列。

考虑到外延层折射率随波数变化，需进一步确定折射率的色散关系$n_1(\nu)$。本文采用包络线法估计折射率初值，通过提取实测反射谱的上包络线并拟合得到局部极大值连续函数$R_{\max}(\nu)$。在单界面法向反射近似条件下，空气折射率取$n_0\approx1$，则外延层折射率初值可表示为：

$$n_1(\nu)=\frac{1+\sqrt{R_{\max}(\nu)}}{1-\sqrt{R_{\max}(\nu)}} \tag{3}$$

将所得折射率序列用于色散模型拟合，并结合双光束干涉极值条件，可完成外延层厚度的初步反演。对于多次反射效应较明显的Si样品，该折射率初值可作为后续非线性最小二乘优化的初始参数，以提高多光束模型拟合的稳定性。

3.3 厚度计算与可靠性分析

根据识别得到的极值波数及折射率色散函数，利用式（2）计算SiC外延层厚度[3]。为减小单组极值带来的偶然误差，选取2 000~3 800 cm^{-1}稳定波段内多组同类极值组合进行厚度计算，并以计算结果的均值和标准差表征最终测量结果及其离散程度。

对于附件1和附件2，分别对应不同入射角条件下的SiC反射谱数据。根据厚度反演结果，可计算其平均厚度及标准差，并结合不同入射角下结果的一致性对模型可靠性进行检验。若两组厚度结果分别记为T_1和T_2，则相对偏差表示为$\Delta T=\frac{|T_1-T_2|}{(T_1+T_2)/2}\times100\%$，相对偏差越小，说明不同入射角下的厚度反演结果越一致。

此外，根据反演得到的厚度和折射率，可进一步计算理论反射谱，并与实测反射谱进行对比。双光束条件下，理论反射率表示为：

$$R(\bar{\nu})=R_{\min}+\frac{R_{\max}-R_{\min}}{2}\left(1+\cos\left(\frac{4\pi n_1(\bar{\nu})T\cos\varphi_1}{\lambda}+\pi\right)\right) \tag{4}$$

通过计算理论反射谱与实测反射谱之间的决定系数R^2，可进一步评价模型的拟合效果。

4 多光束干涉修正模型

当外延层与相邻介质之间的折射率差异较大时，界面反射增强，光束在外延层内部发生多次往复反射，多光束干涉效应随之增强[4]。此时，仅考虑两束反射光的双光束模型难以完整描述实际反射过程，需进一步考虑高阶反射光的叠加影响。

设空气、外延层和衬底的折射率分别为n_0，n_1及n_2，“空气-外延层”界面和“外延层-衬底”界面的振幅反射系数分别为r_{01}与r_{12}。在忽略吸收损耗的情况下，各级反射光在外延层内形成等比级数叠加，其总振幅反射系数可表示为：

$$r(v)=\frac{r_{01}+r_{12}\exp(-i\delta)}{1+r_{01}r_{12}\exp(-i\delta)} \tag{5}$$

其中，i为虚数单位；δ为光束在外延层中传播产生的相位差。由此可得多光束干涉条件下的理论反射率$R_{\text{theo}}(v;\ T)=|r(v)|^2$。当高阶反射光的影响不可忽略时，多束反射光的叠加会改变反射谱的条纹形态，使基于双光束干涉极值条件得到的厚度反演结果产生偏差。因此，以多光束干涉模型计算得到的理论反射率$R_{\text{theo}}(\nu;\ T)$与实测反射率$R_{\text{meas}}(\nu)$之间的残差平方和为目标函数，采用非线性最小二乘法对外延层厚度T进行优化：

$$\min_{T}\sum_{i=1}^{N}\left[R_{\text{meas}}(\nu_i)-R_{\text{theo}}(\nu_i;T)\right]^2,\ \text{s.t}\begin{cases}0<T<20\\ n_1(\nu)>1\\ N\geqslant N_0\end{cases}\quad(5)$$

其中，$R_{\text{meas}}(\nu_i)$为波数ν_i处的实测反射率；$R_{\text{theo}}(\nu_i;T)$为多光束干涉模型计算得到的理论反射率；N为参与拟合的数据点数；N_0为满足稳定拟合要求的最小数据点数。

针对多光束干涉效应较明显的Si样品，首先提取反射谱的上下包络线，并结合界面反射关系获得折射率初值；其次利用折射率色散关系和厚度初值，对多光束干涉模型进行非线性最小二乘拟合，得到修正后的外延层厚度。具体反演结果将在后文与双光束模型的计算结果进行对比，以分析多光束干涉修正对厚度测量结果的影响。

5　结果与分析

5.1　不同模型的厚度计算结果对比

不同样品采用双光束模型与多光束干涉模型得到的厚度反演结果如表1所列。对于SiC样品（附件1、附件2），双光束模型计算结果能够较好反映外延层厚度，说明其多次反射效应相对较弱，无需进一步采用多光束干涉模型进行修正。对于Si样品（附件3、附件4），双光束模型计算结果的离散程度较大，表明多次反射对厚度反演产生了较明显的影响。引入多光束干涉模型后，可对厚度结果进行进一步修正。

表1　不同样品在双光束与多光束模型下的厚度结果

附件	材料	入射角/(°)	双光束厚度/μm	多光束厚度/μm	模型评价指标
附件1	SiC	10	7.670 074±0.128 679	—	—
附件2	SiC	15	8.238 587±1.116 347	—	—
附件3	Si	10	5.176 057±1.518 781	5.326 407	$RMSE$=0.022 555，R^2=0.359 875
附件4	Si	15	4.290 780±0.995 411	4.137 461	$RMSE$=0.026 577，R^2=0.307 343

由表1可知，SiC样品在双光束模型下即可获得较稳定的厚度反演结果，而Si样品在双光束模型下的标准差相对较大。采用多光束干涉模型后，附件3和附件4分别得到5.326 407 μm与4.137 461 μm的厚度结果，说明考虑多次反射效应后，Si外延层厚度反演结果得到了一定修正。

5.2　误差分析

外延层厚度反演误差主要来自光谱数据、折射率估计和模型假设3个方面。

（1）光谱噪声会影响干涉极值点的定位精度，从而造成厚度计算偏差。本文通过S-G滤波和三次样条插值对反射谱进行处理，以减弱高频噪声和局部异常波动的影响。

（2）折射率反演结果直接影响厚度计算精度。采用包络线法估计折射率时，包络线提取和拟合误差会进一步传递至色散模型与厚度反演结果，因此折射率估计仍是影响测量精度的重要因素。

（3）模型本身具有一定理想化假设。双光束模型未考虑外延层内部的多次反射，在Si等界面反射较强的样品中易产生偏差；多光束干涉模型虽然考虑了高阶反射光的影响，但仍假设外延层材料均匀、表面平整，并未进一步考虑表面粗糙度、吸收损耗和厚度非均匀性等因素。

综合不同模型的厚度反演结果可知，材料界面光学特性的差异会影响红外干涉测厚模型的适用性。SiC样品可采用双光束模型进行厚度反演，而Si样品则需进一步考虑多光束干涉效应，以减轻多次反射对厚度计算结果的影响。

6　结束语

本文围绕SiC与Si外延层厚度测量问题，基于红外干涉原理建立双光束与多光束干涉模型，并结合实测反射谱开展厚度反演分析。结果表明，不同材料的界面反射特性会对模型适用性产生明显影响，其中SiC样品的多次反射效应较弱，双光束模型能够满足厚度反演需求；Si样品受多次反射影响较明显，引入多光束干涉模型后可对厚度结果进行修正。由此可知，在红外干涉测厚过程中，应根据材料界面光学特性合理选择厚度反演模型。后续可进一步考虑外延层厚度非均匀性、表面粗糙度及吸收损耗等因素，以提升模型在复杂实际条件下的适用性与稳定性。

参考文献：

[1] 吴昌敏，阮丽浓．用红外干涉法测量薄膜厚度[J]．光学技术，1985(2)：28-29.

[2] 全国大学生数学建模组委会．2025高教社杯全国大学生数学建模竞赛赛题[EB/OL]．https：//www.mcm.edu.cn/html_cn/node/03c91a444e62eee81a3740fa97a461a6.html?utm_source=chatgpt.com.

[3] 贺德春，韩振海．多光束干涉的研究[J]．河西学院学报，2006，22(2)：42-44.

[4] 郭小花．张明霞．多光束干涉的扩展研究[J]．天水师范学院学报，2016，36(5)：13-14.

作者简介：

丁勇(1978—)，硕士，副教授，研究方向：计算数学。

李佳悦(2005—)，本科，研究方向：计算机科学与技术。

邸鹏宇(2005—)，本科，研究方向：电气工程及其自动化，E-mail：2878369716@qq.com(通信作者)。