

УДК 535.5.511: 531.7

© А. И. Семенов, И. А. Семенов

**О НОВЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ,
ОБУСЛОВЛЕННЫХ "НУЛЕВОЙ" ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМОЙ.
ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ РЕАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР.
4. ИССЛЕДОВАНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНО ТОЛСТЫХ ПРОЗРАЧНЫХ
ПЛЕНОК И НАРУШЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ
НА ПРОЗРАЧНЫХ МАТЕРИАЛАХ**

Разработан новый эллипсометрический подход к исследованию толстых (относительно периода по толщине поляризационных углов Ψ и Δ) прозрачных пленок. Метод опробован на образцах кремний—полимер, а также на нарушенных поверхностных слоях на сапфире и оптических стеклах К-8. Получены принципиально новые результаты.

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Наиболее простыми моделями, используемыми в эллипсометрии при исследовании поверхности твердых тел, являются модель однородного образца и однослойная модель подложка—однородная прозрачная пленка. Модель однородного образца с резкой (геометрической) границей игнорирует реальную структуру отражающей поверхности, поэтому ее использование приводит к тому, что в этом случае определяются некоторые эффективные оптические постоянные подложки, отличающиеся часто значительно от истинных. В частности, для прозрачного образца в рамках такой модели приходится вводить заметный коэффициент поглощения, объясняющий отклонение экспериментальных значений поляризационного угла Δ от 180° . По этой причине при исследовании оптических свойств различных материалов необходимо считаться с наличием на отражающих поверхностях естественных окисных пленок, шероховатостей, переходных слоев и т. д. При этом нельзя забывать о наличии нарушенных поверхностных слоев, отличающихся большой (по толщине) протяженностью. Нарушенный поверхностный слой остается и тогда, когда сводится к минимуму или практически удаляется шероховатость поверхности. Его роль очень велика в определении качества рабочей поверхности образца, поэтому определение параметров нарушенных поверхностных слоев является весьма актуальной и сложной задачей.

Определение параметров однородного прозрачного слоя в рамках простой модели подложка—однородная прозрачная пленка является относительно простой задачей, если толщина пленки меньше величины периода поляризацион-

ных углов Ψ и Δ по толщине прозрачной пленки на всех используемых в эксперименте углах падения светового луча. Если же толщина прозрачной пленки произвольна и может превышать, причем заметно, величину периода углов Ψ и Δ по толщине, то задача по определению параметров такой пленки становится сложной даже в том случае, когда известны оптические постоянные подложки.

Целью данной работы является исследование толстых (относительно периода углов Ψ и Δ по толщине) однородных прозрачных пленок и нарушенных поверхностных слоев на прозрачных материалах. При этом простая модель подложка—однородная прозрачная пленка будет использоваться лишь на первом этапе исследования конкретных образцов. Отметим также, что основной целью является разработка самого подхода к исследованию таких систем, т. е. рассмотренные в данной работе конкретные примеры, несмотря на их важность, выполняют в основном вспомогательную роль. В то же время полученные в работе благодаря использованию нового подхода результаты по нарушенным поверхностным слоям имеют принципиальное значение.

**1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРА ЗАВИСИМОСТИ
ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ УГЛОВ Ψ И Δ ОТ УГЛА
ПАДЕНИЯ СВЕТОВОГО ПУЧКА ДЛЯ СЛУЧАЯ
ОДНОРОДНОЙ ПРОЗРАЧНОЙ ПЛЕНКИ
ПРОИЗВОЛЬНОЙ ТОЛЩИНЫ
НА ОДНОРОДНОЙ ПОДЛОЖКЕ**

В работе [1] подробно рассмотрено влияние толщины d_1 прозрачной пленки на характер зависимости поляризационных углов Ψ и Δ от угла па-

дения φ_0 светового пучка для случая, когда d_1 изменяется (от нуля) в пределах первого периода углов Ψ и Δ по толщине и затем переходит через границу первого и второго периодов. При этом отмечено, что картина заметно усложняется при толщинах, значительно превышающих величину одного периода. В этом случае полный интервал углов падения распадается на последовательность интервалов, в каждом из которых остаток полного значения толщины, меньшей величины периода, изменяется в широких пределах, что и обуславливает значительное усложнение общей картины. Остановимся на этом подробнее.

Рассмотрим простую модель (подложка—однородная прозрачная пленка произвольной толщины). Произвольность толщины означает, что при определении параметров прозрачной пленки необходимо иметь в виду периодичность поляризационных углов Ψ и Δ по толщине d_1 с периодом D_0 [1, 2]. В обозначениях однослойной модели, изображенной на рис. 1, а, период D_0 запишется

$$D_0 = \frac{\lambda}{2\sqrt{n_1^2 - n_2^2 \sin^2 \varphi_0}}, \quad (1)$$

где λ и φ_0 — длина волны и угол падения света; n_1 и n_2 — показатели преломления пленки и внешней среды.

Если однослойная модель идеальна и толщина d_1 меньше периода D_0 на каждом угле падения из рассматриваемого набора этих углов

$$d_1 < D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (2)$$

то обратная задача эллипсометрии, решаемая для случая, когда известны оптические постоянные подложки, для каждого угла падения даст одинаковые значения d_1 и n_1 .

Если же толщина d_1 хотя бы на некоторых углах падения превышает величину соответствующего периода, то обратная задача, решаемая для каждого угла падения $\varphi_0^{(i)}$ в пределах отвечающего ему первого периода, даст уже набор значений $d_1^{(i)}$ с определенным разбросом, но одно и то же для каждого угла падения значение n_1 . В этом случае истинное значение толщины пленки d_1 , являющееся вместе с n_1 решением обратной задачи для любого угла падения, может быть найдено с помощью формулы

$$d_1 = d_1^{(i)} + m_i D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (3)$$

где $d_1^{(i)}$ — начальная толщина (или остаток полного значения d_1 после выделения целых перио-

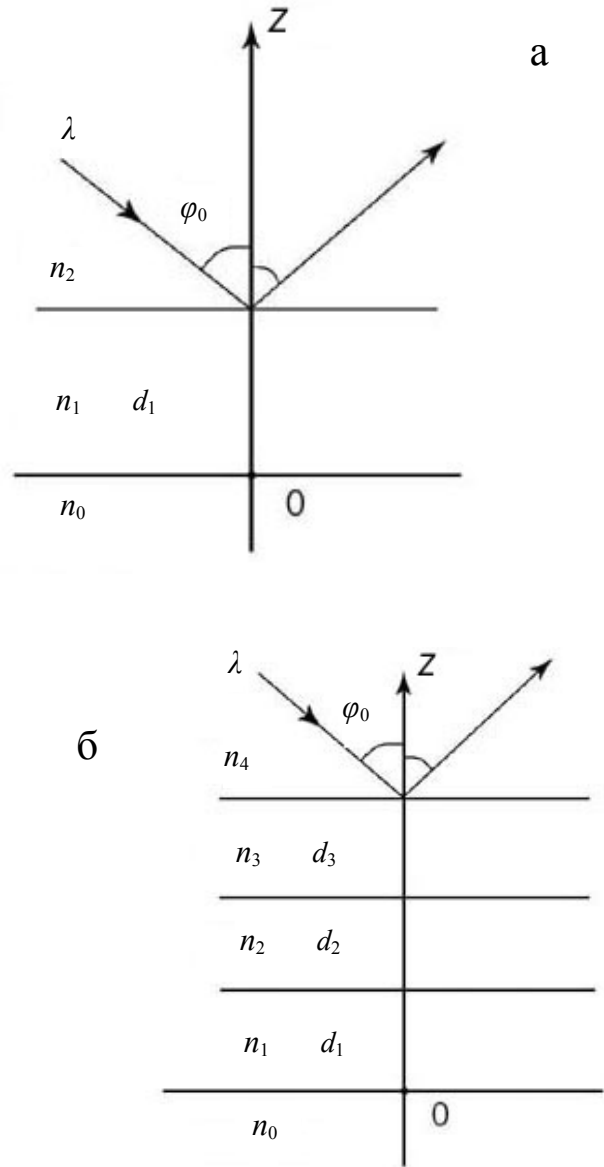


Рис. 1. Схематическое изображение однослойной (а) и трехслойной (б) отражающих систем

дов), отвечающая углу падения $\varphi_0^{(i)}$ и удовлетворяющая условию

$$d_1^{(i)} < D_0(\varphi_0^{(i)}); \quad (4)$$

m_i — число полных периодов в толщине d_1 на угле $\varphi_0^{(i)}$; N — число использованных углов падения.

Придавая целым числам m_i в формуле (3) значения, сводящие разброс толщин по углам падения к минимуму (в идеальном случае к нулю), мы

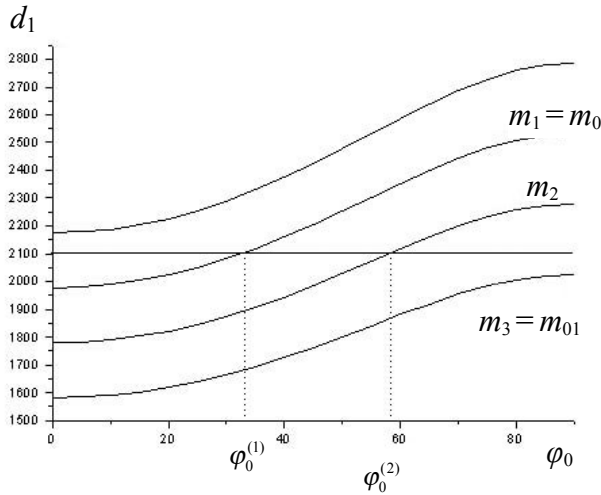


Рис. 2. К разбиению полного интервала углов падения на последовательность интервалов. Толщина пленки $d_1 = 2100$ нм. Кратности периодов: $m_1 = m_0 = 10$, $m_2 = 9$, $m_3 = m_{01} = 8$

найдем истинное значение толщины. В простейшем случае, когда на каждом угле падения истинная толщина находится в одном и том же (по номеру) периоде, имеем

$$d_1 = d_1^{(i)} + m_0 D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (5)$$

т.е. подбирается только одно целое число m_0 .

В общем же случае ситуация гораздо сложнее, т.к. приходится иметь дело с набором целых чисел m_i . И все же можно указать некоторые закономерности, существенно упрощающие задачу. Исходя из приведенных формул, отметим следующее. С увеличением угла падения период $D_0(\varphi_0)$ увеличивается:

$$D_0(\varphi_0^{(1)}) < D_0(\varphi_0^{(2)}) < \dots < D_0(\varphi_0^{(i)}) < \dots \quad (6)$$

Это означает, что в простейшем случае, определяемом формулой (5), последовательность соответствующих начальных толщин $d_1^{(i)}$ является убывающей:

$$d_1^{(1)} > d_1^{(2)} > \dots > d_1^{(i)} > \dots \quad (7)$$

В общем случае последовательность начальных толщин убывает лишь в пределах каждого отдельного интервала, на которые разбивается полный интервал углов падения $(0, 90^\circ)$. Этот процесс описан в работе [1], но без явного обоснования. Приведем простое и наглядное обоснование, используя графический материал. На рис. 2 в координатной плоскости (φ_0, d_1) изображены кривые

(для показателя преломления пленки $n_1 = 1.6$), описывающие зависимость от угла падения величин, m -кратных периоду $D_0(\varphi_0)$, т.е. величин $mD_0(\varphi_0)$. С увеличением (от единицы) целого числа m , очевидно, кривая последовательно поднимается вверх, при этом увеличивается ее наклон. На этом же рисунке изображена горизонтальная прямая $d_1 = \text{const}$ (конкретно $d_1 = 2100$ нм), пересекающая указанные кривые. Точки пересечения образуют последовательность, в которой первой (левой) точке отвечает максимальное целое число m_1 , определяющее кратность периода в первой (самой верхней) пересекаемой кривой, а последней (I_0 -й) — минимальное целое число m_{I_0} , определяющее кратность периода в последней (нижней) пересекаемой кривой. При переходе от первой точки к последней целое число m_i , очевидно, последовательно уменьшается от m_1 к m_{I_0} . Каждой точке пересечения отвечает угол падения, определяемый из условия

$$d_1 = m_i D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, I_0). \quad (8)$$

Используя формулу (1) для периода D_0 , легко найдем из (8)

$$\varphi_0^{(i)} = \arcsin \left(\frac{1}{2n_2} \sqrt{4n_1^2 - m_i^2 \frac{\lambda^2}{d_1^2}} \right), \quad (9)$$

$(i = 1, 2, \dots, I_0).$

Обозначим через m_0 и m_{01} число полных периодов в толщине пленки d_1 на минимальном ($\varphi_0 = 0$) и максимальном ($\varphi_0 = 90^\circ$) углах падения. Эти числа записываются следующим образом:

$$m_0 = \text{trunc} \left(\frac{d_1}{D_0(0)} \right), \quad m_{01} = \text{trunc} \left(\frac{d_1}{D_0(90^\circ)} \right), \quad (10)$$

$$m_{01} \leq m_0,$$

где $\text{trunc}(x)$ — функция, определяющая целую часть аргумента x . Из рис. 2 легко понять, что

$$m_1 = m_0. \quad (11)$$

Если целые числа m_0 и m_{01} имеют одинаковые значения

$$m_0 = m_{01}, \quad (12)$$

то это означает, что при любом угле падения толщина пленки d_1 находится в одном и том же периоде (см. формулу (5), в которой m_0 имеет, очевидно, тот же смысл).

Если

$$m_{01} = m_0 - 1, \tag{13}$$

т. е. имеется только одна точка пересечения горизонтальной прямой $d_1 = \text{const}$ с кривой $m_0 D_0(\varphi_0)$, то в этом случае интервал $(0, 90^\circ)$ разбивается на два интервала:

$$(0, \varphi_0^{(1)}), \quad (\varphi_0^{(1)}, 90^\circ), \tag{14}$$

где $\varphi_0^{(1)}$ — угол падения, отвечающий точке пересечения и определяемый из формулы (9) при $i = 1$. Учитывая (11), перепишем формулу (9) для этого случая:

$$\varphi_0^{(1)} = \arcsin\left(\frac{1}{2n_2} \sqrt{4n_1^2 - m_0^2 \frac{\lambda^2}{d_1^2}}\right). \tag{15}$$

Если же

$$m_{01} < m_0 - 1, \tag{16}$$

то интервал $(0, 90^\circ)$ разбивается на последовательность интервалов

$$(\varphi_0^{(i-1)}, \varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, I_0, I_0 + 1), \tag{17}$$

где

$$\varphi_0^{(0)} = 0, \quad \varphi_0^{(I_0+1)} = 90^\circ, \tag{18}$$

а остальные углы $\varphi_0^{(1)}, \dots, \varphi_0^{(I_0)}$ определяются формулой (9). При $i = 1$ и $i = I_0 + 1$ мы получаем крайние интервалы

$$(0, \varphi_0^{(1)}), \quad (\varphi_0^{(I_0)}, 90^\circ). \tag{19}$$

В пределах i -го интервала толщина d_1 может быть представлена в виде

$$d_1 = d_1^{(i)}(\varphi_0) + m_i D_0(\varphi_0), \tag{20}$$

где $\varphi_0 \in (\varphi_0^{(i-1)}, \varphi_0^{(i)})$, m_i — целое число, последовательно уменьшающееся начиная от значения m_0 :

$$m_i = m_0 - (i - 1), \quad (i = 1, 2, \dots, I_0, I_0 + 1). \tag{21}$$

Учитывая, что для правого крайнего интервала ($i = I_0 + 1$)

$$m_{I_0+1} = m_{01}, \tag{22}$$

легко находим

$$I_0 = m_0 - m_{01}. \tag{23}$$

С ростом полной толщины d_1 число I_0 увеличивается и, следовательно, увеличивается число интервалов (17).

Величина $d_1^{(i)}(\varphi_0)$, представляющая собой остаток полного значения d_1 , меньший величины периода $D_0(\varphi_0)$, изменяется в пределах i -го внутреннего интервала (определяемого формулой (17) при $i = 2, 3, \dots, I_0$) от $D_0(\varphi_0^{(i-1)})$ до 0. В первом же интервале $d_1^{(1)}$ изменяется от любого в общем случае значения, меньшего $D_0(0)$, до 0, а в последнем $d_1^{(I_0+1)}$ изменяется от $D_0(\varphi_0^{(I_0)})$ до любого значения, меньшего $D_0(90^\circ)$. Такой широкий диапазон изменения остатка $d_1^{(i)}(\varphi_0)$ в пределах каждого

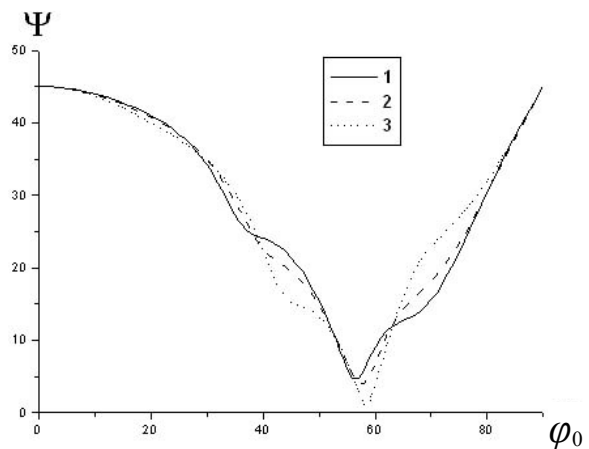


Рис. 3. Теоретические зависимости $\Psi(\varphi_0)$ для однослойной (1), двухслойной (2) и трехслойной (3) отражающих систем

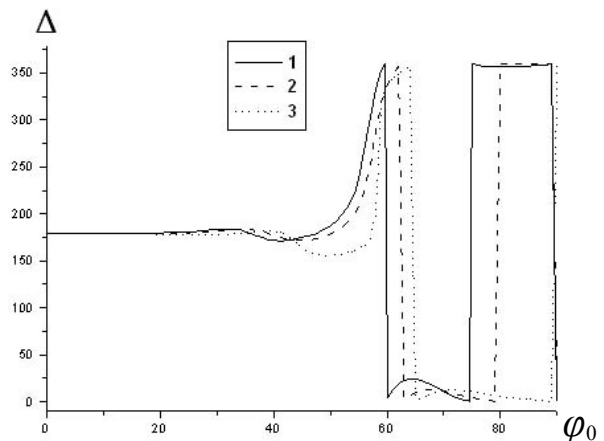


Рис. 4. Теоретические зависимости $\Delta(\varphi_0)$ для однослойной (1), двухслойной (2) и трехслойной (3) отражающих систем

i -го интервала (прежде всего внутреннего) позволяет, используя результаты работы [1], представить характер зависимости поляризационных углов Ψ и Δ от угла падения φ_0 светового пучка.

Для проведения численного расчета с целью определения зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, отвечающих большим значениям толщины d_1 прозрачной пленки, необходимо использовать набор углов падения φ_0 , который обязательно включает в себя углы $\varphi_0^{(i)}$ ($i=1,2,\dots,I_0$), определяемые формулой (9). На этих углах поляризационный угол Δ принимает одно из трех значений: 0 , 180° или 360° . В полный набор углов падения должны быть включены также углы, отвечающие точкам пересечения прямой $d_1 = \text{const}$ с кривыми $(m+1/2)D_0(\varphi_0)$, расположенными посередине между соответствующими кривыми $mD_0(\varphi_0)$, изображенными на рис. 2. Кроме того, в полный набор необходимо включить углы полной поляризации, проявляющиеся на исследуемой отражающей системе (см. [1]).

Для примера рассмотрим прозрачную однослойную систему со следующими параметрами (показатель преломления внешней среды всюду полагаем равным единице):

$$d_1 = 2230 \text{ нм}, \quad n_1 = 1.6, \quad n_0 = 1.8. \quad (24)$$

Указанной в (24) толщине d_1 отвечает $I_0 = 3$, т. е. полный интервал углов падения разбивается на 4 интервала (17). Численный расчет для данной однослойной системы дает для $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ ожидаемые результаты, представленные на рис. 3 и 4 кривыми 1. Зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ (особенно $\Delta(\varphi_0)$) оказываются очень сложными, с резкими колебаниями углов Ψ и Δ .

2. РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ СЛУЧАЯ ОДНОРОДНОЙ ПРОЗРАЧНОЙ ПЛЕНКИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ТОЛЩИНЫ

Обратную задачу эллипсометрии для случая однородной прозрачной пленки произвольной толщины целесообразно решать, используя измерения поляризационных углов Ψ и Δ на многих углах падения. Целевая функция S в этом случае представляет собой среднеквадратичную невязку следующего вида:

$$S = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N [(\Delta_i^{(t)} - \Delta_i^{(e)})^2 + (\Psi_i^{(t)} - \Psi_i^{(e)})^2]. \quad (25)$$

Суммирование в выражении (25) производится по набору измерительных ситуаций, определяе-

мому набором углов падения светового пучка, т. е. величины $\Delta_i^{(t)}$, $\Psi_i^{(t)}$ и $\Delta_i^{(e)}$, $\Psi_i^{(e)}$ из данного выражения — это соответственно теоретические и экспериментальные значения поляризационных углов, отвечающие i -му углу падения. Набор углов падения должен охватывать достаточно широкий интервал, в пределах которого проявляются наиболее характерные особенности в поведении углов Ψ и Δ , непосредственно связанные с углами полной поляризации (см. [1]).

В идеальной ситуации, когда однослойная модель строго соответствует исследуемому образцу и отсутствуют экспериментальные ошибки и, кроме того, известен показатель преломления прозрачной подложки, обратную задачу можно решать отдельно для каждого угла падения из используемого набора. Тогда целевая функция (25) содержит только одно слагаемое, отвечающее данному углу падения. В этом случае проблема, как уже указывалось в предыдущем разделе, заключается в том, чтобы подобрать в формуле (3) такие значения для целых чисел m_i , которые сводят разброс толщин d_1 по углам падения к минимуму.

Подбор целых чисел m_i в формуле (3) не является для однослойной системы чисто механической процедурой. В идеальной ситуации экспериментальные кривые

$$\Psi^{(e)}(\varphi_0) \quad \text{и} \quad \Delta^{(e)}(\varphi_0) \quad (26)$$

воспроизводят закономерности, установленные в предыдущем разделе (см. кривые 1 на рис. 3 и 4). Эти закономерности связаны с разбиением полного интервала углов падения на последовательность интервалов (17) и проявляются в явной форме в зависимостях (26). Они позволяют выбрать в качестве основного, например, целое число m_1 , отвечающее минимальному углу падения из набора, и выразить через него остальные числа m_i , удовлетворяющие очевидному условию

$$m_i \leq m_1, \quad (i = 2, 3, \dots, N). \quad (27)$$

Здесь надо иметь в виду, что набор углов падения, используемый для решения обратной задачи, является частью полного набора, принятого для построения зависимостей (26).

Таким образом, для идеальной ситуации подбор целых чисел m_i можно свести к подбору всего лишь одного числа. Однако такая процедура требует очень кропотливой и трудоемкой работы, связанной не только с объемом эксперимента, но и с анализом зависимостей (26). Поэтому даже в случае, очень близком к идеальному, обратную задачу целесообразно решать, используя целевую функцию, построенную на всем выбранном наборе

углов падения. При этом нет никакой необходимости рассматривать весь комплекс целых чисел m_i и начальных толщин $d_1^{(i)}$. Возможна очень простая процедура, позволяющая ограничиться одним начальным значением толщины d_1 и одним целым числом m . Рассмотрим эту процедуру.

В качестве основного угла падения выберем минимальный угол $\varphi_0^{(1)}$ из используемого набора и представим полную толщину прозрачной пленки, обозначив ее через D_1 , в виде

$$D_1 = d_1 + m_1 D_0(\varphi_0^{(1)}), \quad (28)$$

где d_1 — начальное значение полной толщины D_1 , удовлетворяющее условию

$$d_1 < D_0(\varphi_0^{(1)}). \quad (29)$$

Покажем, что выражение (28) приводится к виду, отвечающему любому (i -му) углу падения из набора. Используя элементарное преобразование, получим

$$D_1 = d_1^{(i)} + m_1 D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (30)$$

где

$$d_1^{(i)} = d_1 + m_1 [D_0(\varphi_0^{(1)}) - D_0(\varphi_0^{(i)})]. \quad (31)$$

Относительно формулы (31) надо иметь в виду, что

$$[D_0(\varphi_0^{(1)}) - D_0(\varphi_0^{(i)})] < 0, \quad (i = 2, 3, \dots, N), \quad (32)$$

причем это неравенство усиливается с возрастанием $\varphi_0^{(i)}$ (возрастанием индекса i), что связано с соответствующим возрастанием периода $D_0(\varphi_0^{(i)})$ (см. (6)). По этой причине начальные значения $d_1^{(i)}$, определяемые формулой (31), начиная с некоторого $i = i_0 > 1$, зависящего также и от m_1 , могут стать отрицательными. Чтобы вернуться к положительным $d_1^{(i)}$, надо прибавить к выражению (31) столько периодов $D_0(\varphi_0^{(i)})$ (и столько же отнять от выражения (30)), чтобы величина $d_1^{(i)}$, став положительной, не вышла за пределы первого периода (см. (4)). В результате формула (28) приводится к известному виду (3) (см. также (20)):

$$D_1 = d_1^{(i)} + m_1 D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (33)$$

где

$$d_1^{(i)} = d_1 + m_1 [D_0(\varphi_0^{(1)}) - D_0(\varphi_0^{(i)})] + k_i D_0(\varphi_0^{(i)}), \quad (34)$$

$$m_i = m_1 - k_i; \quad (35)$$

$$\begin{aligned} k_i &= 0, & \text{если } i = 1, 2, \dots, i_0 - 1; \\ k_i &> 0, & \text{если } i = i_0, \dots, N. \end{aligned} \quad (36)$$

Поскольку с ростом индекса i целое число m_i может только уменьшиться, то целое число k_i может только увеличиться. Отметим также, что последовательность начальных значений $d_1^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, N$), как следует из выражения (34), а также из рис. 2, может быть совершенно неупорядоченной. В общем случае характер неупорядоченности зависит от значения полной толщины D_1 (от значения целого числа m_1) и выбора используемого для решения обратной задачи набора углов падения.

Таким образом, формула (28) описывает самую общую ситуацию. А это означает, что при решении обратной задачи для случая прозрачной пленки произвольной толщины (при известной подложке) определению подлежат только три параметра пленки: начальная толщина d_1 , номер периода m_1 и показатель преломления n_1 . В этом случае при расчете теоретических значений углов Ψ и Δ в основное уравнение эллипсометрии (см. [1, 2]) вместо полной толщины D_1 подставляется выражение (28).

Для реальных образцов однослойная модель всегда является приближенной. Если же рассматривать многослойную модель, то все рассуждения, касающиеся однородной прозрачной пленки произвольной толщины в составе данной модели, очевидно, сохраняют свою силу. Однако в этом случае увеличивается общее число неизвестных параметров. Определенным образом изменяется также и характер зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$. Рассмотрим это на конкретных примерах.

Усложним отражающую систему (24), введя достаточно тонкий (меньше периода) слой между пленкой и подложкой. В получившейся двухслойной системе слой 2 имеет те же параметры, что и слой в (24):

$$\begin{aligned} d_2 &= 2230 \text{ нм}, & n_2 &= 1.6; \\ d_1 &= 50 \text{ нм}, & n_1 &= 1.7; \\ n_0 &= 1.8. \end{aligned} \quad (37)$$

Численный расчет для $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ дает в этом случае (см. кривые 2 на рис. 3 и 4) такие же качественные результаты, как и для однослойной системы (24) (кривые 1 на тех же рисунках). Наблюдается только заметный сдвиг ступенек для Δ , характеризующихся скачком в 360° , в сторону больших значений φ_0 .

Добавим теперь к двухслойной системе (37) сверху еще один тонкий слой. В получившейся трехслойной системе средний (второй) слой по значениям своих параметров, совпадает со слоем в (24):

$$\begin{aligned} d_3 &= 50 \text{ нм}, & n_3 &= 1.5; \\ d_2 &= 2230 \text{ нм}, & n_2 &= 1.6; \\ d_1 &= 50 \text{ нм}, & n_1 &= 1.7; \\ & & n_0 &= 1.8. \end{aligned} \quad (38)$$

Численный расчет для системы (38) показывает, что у кривой $\Delta(\varphi_0)$ исчезает вторая ступенька, а характер кривой $\Psi(\varphi_0)$, практически, не меняется (см. кривые 3 на рис. 3 и 4).

Рассмотренные частные примеры, как и другие, более сложные, примеры, показывают, что наличие слоев, окаймляющих основной (по толщине) слой отражающей системы, может сильно изменять зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, особенно $\Delta(\varphi_0)$.

На основе комплексного метода Бокса [3] для многослойной модели с прозрачным слоем произвольной толщины нами разработана математическая программа для решения обратной задачи. В данной программе использована процедура пошаговой минимизации функционала обратной задачи. Поиск минимума на первом этапе осуществляется в пределах сферы сравнительно небольшого радиуса с центром в начальной точке, выбираемой случайным образом. Найденная точка промежуточного минимума затем становится центром новой сферы и т.д. В пределах каждой сферы используется метод Бокса, причем точки комплекса Бокса задаются случайным образом. В программе предусмотрены специальные приемы, позволяющие успешно избегать локальных минимумов. Благодаря этим приемам ни в какой мере не понадобилось сужать область ограничений для неизвестных параметров. В пределах основной области ограничений выделяются для каждого неизвестного параметра интервалы для выбора начальной точки, причем эти интервалы подбираются таким образом, чтобы случайный выбор начальной точки обладал определенной свободой.

При решении обратной задачи минимум функционала находится для достаточно большого набора значений номера периода. Сравнивая значения минимума функционала на разных номерах, изучая характер соответствующей кривой и выделяя на ней точки экстремума (точки минимума), можно сделать выводы относительно полного числа периодов, содержащихся в толщине однородного слоя, и значений остальных параметров. Важно отметить, что далеко не все точки минимума на кривой зависимости функционала характе-

ризуют приближение к реальной ситуации. Целый ряд точек минимума являются ложными. Для соответствующего отбора точек минимума и выбора из них точки глобального минимума разработана специальная процедура.

Выше отмечено заметное влияние на $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ слоев, окаймляющих основной (по толщине) слой. При этом возможны ситуации, когда существует широкий интервал углов падения φ_0 , используемый при проведении эксперимента, в пределах которого кривая $\Delta(\varphi_0)$ имеет вид, характерный для однослойной системы с пленкой, толщина которой не выходит за пределы первого периода. Например, кривая 3 для $\Delta(\varphi_0)$ на рис. 4, соответствующая трехслойной системе (38), в интервале углов падения ($50, 64^\circ$) по виду совпадает с кривой $\Delta(\varphi_0)$ для однослойной системы, у которой пленка оптически более плотна по сравнению с подложкой. А ее толщина приходится на середину одного из периодов $D_0(\varphi_0)$, т. е. находится в промежуточной области толщин, отвечающей переходу от верхней ступеньки для Δ к нижней (см. [1]). В подобных случаях при решении обратной задачи возможно ошибочное ориентирование на однослойную систему. При таком подходе даже учет номера периода по толщине пленки редко спасает положение — получаются ошибочные результаты. В то же время если окаймляющие слои слабо отличаются по показателю преломления от основного слоя, то использование однослойной модели при учете номера периода может дать качественно неплохой результат. Ввиду такой сложности, связанной с выбором модели, экспериментальные измерения углов Ψ и Δ необходимо выполнять в максимально широком интервале углов падения. Это позволит более надежно ориентироваться в вопросах выбора модели исследуемой системы. Кроме того, появляется возможность выбора наиболее подходящих для решения обратной задачи углов падения.

В следующих разделах данная математическая программа будет использована для экспериментального изучения реальных, протяженных по толщине поверхностных структур.

3. ИССЛЕДОВАНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНО ТОЛСТОЙ ПЛЕНКИ ПОЛИМЕРА НА КРЕМНИИ

В качестве примера относительно толстой прозрачной пленки рассмотрим пленку полимера на кремниевой подложке. Окаймляющим нижним слоем, очевидно, является естественная пленка двуокиси кремния (SiO_2). Окаймляющий верхний слой должен совпадать с полимером, отличаться от него несколько измененной структурой.

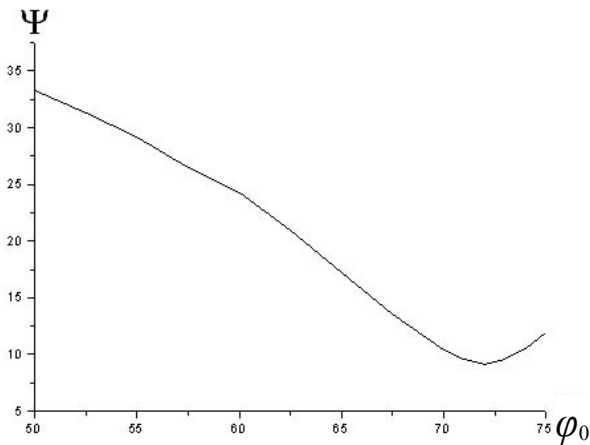


Рис. 5. Экспериментальные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ для образца кремний—полимер

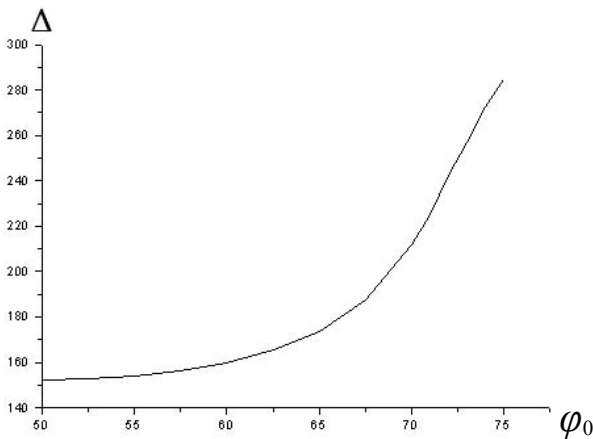


Рис. 6. Экспериментальные зависимости $\Delta(\varphi_0)$ для образца кремний—полимер

На используемой длине световой волны $\lambda = 632.8$ нм пленка двуокиси кремния по показателю преломления заметно не отличается от полимера, то же самое относится и к верхнему окаймляющему слою. Поэтому на первом этапе можно попробовать использовать однослойную модель (кремниевая подложка—пленка полимера). Экспериментальные результаты представлены на рис. 5 и 6. Показатель преломления и коэффициент поглощения кремния известны и составляют соответственно 3.865 и 0.023 (см. [2]). Однако мы зафиксируем только коэффициент поглощения, оставив показатель преломления свободным и подлежащим определению, т. е. всего надо будет оп-

ределить 3 неизвестных параметра: d_1 , n_1 и n_0 (см. рис. 1, а). Решая обратную задачу, получаем следующие результаты:

$$\begin{aligned} d_1 = 579.4 \text{ нм}, & & n_1 = 1.425; \\ & & n_0 = 3.656. \end{aligned} \quad (39)$$

Полное число периодов m_0 в толщине d_1 составляет

$$m_0 = 2. \quad (40)$$

Как видим, однослойная модель дает несколько заниженные результаты для показателей преломления пленки и подложки. Если же зафиксировать еще и показатель преломления подложки, то это приведет в рамках той же однослойной модели к резкому увеличению толщины d_1 (почти в 2 раза) и показателя преломления n_1 пленки:

$$d_1 = 989.5 \text{ нм}, \quad m_0 = 5, \quad n_1 = 1.84. \quad (41)$$

Оба результата указывают на недостаточность модели, хотя, как увидим ниже, и тот и другой в какой-то степени отражают реальную ситуацию.

Результат улучшается, если перейти к двухслойной модели (см. рис. 1, б, мысленно убрав на нем 3-й слой). Если основным по толщине считать верхний слой и не фиксировать показатель преломления подложки, то придем к следующим результатам:

$$\begin{aligned} d_2 = 571.4 \text{ нм}, \quad m_0 = 2, \quad n_2 = 1.494; \\ d_1 = 145.9 \text{ нм}, & & n_1 = 2.026; \\ & & n_0 = 4.021. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь обращает на себя внимание то, что практически совпадают толщины пленки в однослойной модели, не фиксирующей показатель преломления подложки (см. (39)), и верхней (основной) пленки в двухслойной модели (см. (42)). В двухслойной модели увеличивается также (почти до реальной величины) и показатель преломления основной пленки. Что касается нижнего (первого слоя) в двухслойной модели, то величина его показателя преломления такова, что это наводит на мысль о соответствии его некоторому переходному слою на поверхности кремния. При переходе в двухслойной модели к фиксированной по обеим оптическим постоянным кремниевой подложке результаты изменяются мало (немного уменьшается n_2 и слегка увеличивается n_1 , толщины же практически не меняются).

В (42) обращает на себя внимание объединение слоев полимера и двуокиси кремния, близких по показателю преломления. Чтобы разделить эти слои, рассмотрим трехслойную модель (см. рис. 1, б), в которой показатель преломления кремниевой

подложки не фиксируется. Основным слоем является третий (верхний). Приходим к следующим результатам:

$$\begin{aligned} d_3 &= 425.2 \text{ нм}, & m_0 &= 1, & n_3 &= 1.498; \\ d_2 &= 148.2 \text{ нм}, & & & n_2 &= 1.465; \\ d_1 &= 150.1 \text{ нм}, & & & n_1 &= 1.989; \\ & & & & n_0 &= 3.965. \end{aligned} \quad (43)$$

Таким образом, результаты таковы, что можно говорить о разделении основного слоя на слои полимера (слой 3) и двуокиси кремния (слой 2). При этом существенно, что суммарная толщина этих слоев почти совпадает с толщиной объединенного верхнего (2-го) слоя в двухслойной модели (см. (42)). Сравнивая (42) и (43), видим, что характер нижнего слоя подтверждается, но не хватает только ожидаемого для переходного слоя на кремнии некоторого коэффициента. Важно еще наблюдаемое для трехслойной модели приближение показателя преломления кремния к его истинному значению.

Проведенный эксперимент охватывает большое количество точек на образце (кремний—пленка полимера), но для наших целей достаточно было рассмотреть только одну точку. Полный анализ образцов — это уже другая задача.

4. ИССЛЕДОВАНИЕ НАРУШЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ НА САПФИРЕ

Благодаря своим уникальным физическим, механическим, химическим свойствам монокристаллы сапфира находят широкое применение в различных областях науки и техники, например в оптике, оптоэлектронике, микроэлектронике, медицине и т. д. В последние годы безусловным приоритетом в области оптоэлектроники является создание светодиодов белого цвета. Базовым элементом таких светодиодов являются ориентированные по плоскости $\langle 001 \rangle$ сапфировые подложки, на которые эпитаксиально наносят электролюминесцентные структуры. Точно так же и в микроэлектронике при создании больших интегральных схем используются сапфировые подложки для эпитаксии кремния. А в этих случаях предъявляются особые требования к рабочей поверхности сапфировых подложек, которая должна иметь минимальную шероховатость и слабовыраженный нарушенный слой. Это связано с тем, что в процессах эпитаксиального осаждения материалов на подложки нарушенный слой, включающий в себя и шероховатости, играет отрицательную роль. Особенно сильно это сказывается на качестве светодиодов.

Для разработки новых технологий обработки поверхностей сапфира необходимо провести ис-

следование нарушенного приповерхностного слоя, а также разработать методы контроля нарушенных слоев.

Таким образом, исследование нарушенных слоев на поверхности сапфира, организация неразрушающего контроля поверхности сапфира представляют собой весьма актуальную задачу. В данной работе для решения этой задачи мы используем новый эллипсометрический подход к исследованию относительно толстых прозрачных слоев.

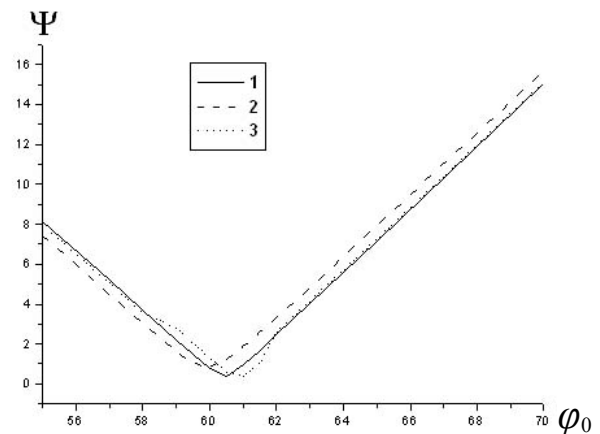


Рис. 7. Экспериментальные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ для образцов сапфира. Кривая 1 — поверхность скола; кривая 2 — поверхность после механической обработки; кривая 3 — поверхность после химико-механической обработки

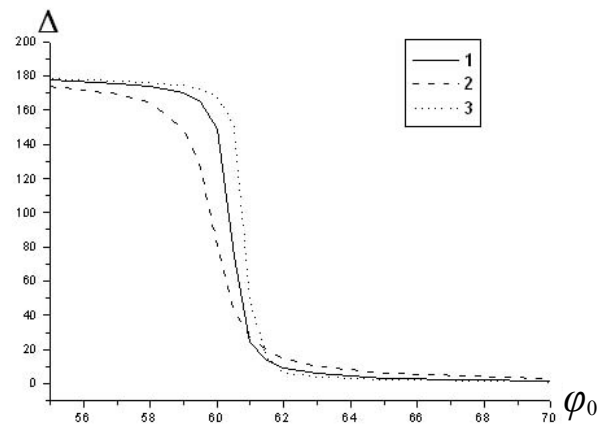


Рис. 8. Экспериментальные зависимости $\Delta(\varphi_0)$ для образцов сапфира. Кривая 1 — поверхность скола; кривая 2 — поверхность после механической обработки; кривая 3 — поверхность после химико-механической обработки

Были изучены 3 образца сапфира, один из которых имеет поверхность скола, у второго поверхность обработана только механическим способом, а у третьего — химико-механическим способом. Измерения проводились в диапазоне углов падения светового пучка ($55, 70^\circ$). Были получены экспериментальные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для всех трех образцов. На рис. 7 и 8 кривым 1 отвечает поверхность скола, а кривым 2 и 3 соответствуют поверхности, полученные после механической и химико-механической обработок.

Обратная задача решалась с использованием трехслойной модели (рис. 1, б). В рамках этой модели нарушенный слой представляется нижним (на границе с массивом) и верхним (на границе с внешней средой (воздухом)) переходными слоями, между которыми находится основная (по толщине) часть нарушенного слоя. Показатель преломления однородной подложки не фиксировался, т. е. он определялся, как и 6 параметров трех слоев. Это очень важный момент, непосредственно связанный с действием разработанного для математической программы критерия выбора оптимальной точки глобального минимума целевой функции. При этом надо иметь в виду, что для используемой длины световой волны для показателя преломления объема сапфира принято справочное значение 1.767.

Рассмотрим основные результаты.

4.1. Нарушенный слой на поверхности скола

Для поверхности скола толщины и показатели преломления всех трех слоев ведут себя следующим образом:

$$\begin{aligned} d_3 &= 2.62 \text{ нм}, & n_3 &= 1.420; \\ d_2 &= 4658.79 \text{ нм}, & m_0 &= 22, & n_2 &= 1.763; \\ d_1 &= 204.70 \text{ нм}, & n_1 &= 1.772; \\ & & n_0 &= 1.764. \end{aligned}$$

На поверхности скола сапфира нижний переходный слой (толщиной до 200 нанометров) оказывается оптически более плотным, нежели массив, верхний же переходный слой обладает заметно меньшей оптической плотностью по сравнению с массивом, однако он очень мал по толщине (около 3 нанометров). А вот основная (по толщине) средняя часть нарушенного слоя на поверхности скола по показателю преломления практически не отличается от массива. Создается вполне обоснованное впечатление, что при операции скола прилегающий к поверхности скола очень тонкий слой испытал напряжение сдвига, что привело к появлению напряженной границы между подложкой и возникшим нарушенным слоем, причем основная часть нарушенного слоя сохранила оптические

свойства подложки. Появление очень тонкого и рыхлого верхнего переходного слоя можно объяснить эффектом разрыва.

4.2. Нарушенный слой на поверхности сапфира после механической полировки

Для нарушенного поверхностного слоя на сапфире, возникшего в результате механической полировки, получены следующие результаты:

$$\begin{aligned} d_3 &= 65.94 \text{ нм}, & n_3 &= 1.742; \\ d_2 &= 15177.87 \text{ нм}, & m_0 &= 76, & n_2 &= 1.784; \\ d_1 &= 102.19 \text{ нм}, & n_1 &= 1.775; \\ & & n_0 &= 1.767. \end{aligned} \quad (45)$$

В случае нарушенного слоя на поверхности сапфира, полученной с помощью относительно грубой механической обработки, обращают на себя внимание значения показателей преломления нижнего переходного слоя и основного среднего слоя. Нижний переходный слой оптически несколько более плотен по сравнению с подложкой, а еще большей плотностью обладает основной средний слой. Это можно объяснить напряжением, возникающим в приповерхностном слое в процессе механической обработки поверхности. Что касается верхнего переходного слоя, то у него показатель преломления меньше, чем у подложки. Это естественный результат, т. к. сама поверхность обладает выраженной при использованном способе механической обработки шероховатостью.

4.3. Нарушенный слой на поверхности сапфира после химико-механической полировки

Химико-механическая полировка, проведенная после чисто механической обработки поверхности сапфира, приводит к следующим результатам для нарушенного слоя:

$$\begin{aligned} d_3 &= 184.25 \text{ нм}, & n_3 &= 1.773; \\ d_2 &= 18100.67 \text{ нм}, & m_0 &= 88, & n_2 &= 1.751; \\ d_1 &= 103.17 \text{ нм}, & n_1 &= 1.758; \\ & & n_0 &= 1.765. \end{aligned} \quad (46)$$

Применение дополнительной химико-механической полировки, как показывает технологический опыт, даже на ранней стадии этой полировки снимает механическое напряжение, однако след от действия механической обработки (в виде трещин, пористости и т. д.) остается. По этой причине главная часть нарушенного слоя на поверхности сапфира, подвергнутой дополнительной (после механической обработки) химико-механической полировке, как и нижняя граница этого слоя, оказывается, как показало проведенное исследование,

оптически менее плотной по сравнению с массивом. Верхняя же граница нарушенного слоя в этом случае оптически плотнее массива. Это можно объяснить как сведением до минимума шероховатости, что подтверждается результатами, полученными на атомно-силовом микроскопе, так и некоторым уплотнением поверхности, обусловленным характером химико-механической полировки.

Подводя итоги, можно сказать, что полученные результаты оказались удивительными, особенно если учесть, что сапфир по твердости приближается к алмазу. Толщина нарушенных слоев на поверхностях скола составляет около 5 мкм, а на всех остальных образцах, причем независимо от способа обработки (с дополнительной химико-механической полировкой или без нее), составляет 15–20 мкм. Что касается показателя преломления, то его изменение в пределах нарушенного слоя очень сильно зависит от типа образца, при этом любой характер поведения показателя преломления находит свое физическое обоснование.

Приведенные результаты по нарушенным слоям на сапфире относятся к весьма ограниченному кругу способов и режимов обработки поверхностей и фактически демонстрируют лишь возможности нового эллипсометрического подхода. В то же время широкое использование такого надежного способа контроля нарушенных слоев позволит испытать целый ряд новых технологических приемов и выйти в результате на гораздо более высокий уровень в технологии обработки поверхностей различных материалов.

5. НАРУШЕННЫЕ СЛОИ НА ПОВЕРХНОСТИ ОПТИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

Нарушенные слои на поверхности оптических стекол исследовались и ранее, например в ИФП СО РАН (г. Новосибирск) и в ГОИ им. С.И. Вавилова (г. С.-Петербург), но тогда не предполагалось, что нарушенные слои на оптических стеклах могут быть очень толстыми, и полученные результаты не были обоснованными — они просто вписывались в существовавшие представления. Мы приведем лишь один результат, относящийся к на-

рушенным слоям на поверхности оптического стекла К-8. По измерениям зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ на таком стекле были получены следующие результаты:

$$\begin{aligned} d_3 &= 208.24 \text{ нм}, & n_3 &= 1.5201; \\ d_2 &= 47297.87 \text{ нм}, & m_0 &= 194, & n_2 &= 1.5093; \\ d_1 &= 126.03 \text{ нм}, & n_1 &= 1.5159; & n_0 &= 1.5225. \end{aligned} \quad (47)$$

Стало ясно, что нарушенные слои на оптических стеклах могут быть очень толстыми (до десятков микрометров). В этих условиях использование нового эллипсометрического подхода позволит надежно контролировать качество обрабатываемых поверхностей оптических стекол, способствуя одновременно совершенствованию технологических процессов.

В данной работе мы совершенно не касались относительно толстых поглощающих пленок. Для них наблюдаются существенные особенности, о которых пойдет речь в одной из следующих работ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семенов А.И., Семенов И.А. // Научное приборостроение. 2005. Т. 15, № 3. С. 63–76.
2. Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семенов А.И. и др. Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979. 422 с.
3. Vox M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. V. 8. P. 42–51.

*Институт прикладной физики НАН Украины,
г. Сумы (Семенов А.И.)*

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург (Семенов И.А.)*

Материал поступил в редакцию 6.12.2005.

**ON THE NEW POTENTIALS OF ELLIPSOMETRY ARISING
FROM THE NULL OPTICAL CIRCUIT.
ELLIPSOMETRY OF REAL SURFACE STRUCTURES.
4. INVESTIGATION OF RELATIVELY THICK TRANSPARENT
FILMS AND DISRUPTED SURFACE LAYERS
ON TRANSPARENT MATERIALS**

A. I. Semenenko, I. A. Semenenko *

Institute of Applied Physics NAS, Ukraine, Sumy

**Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg*

A new ellipsometric approach to investigation of thick (relative to thickness periods of the polarization angles Ψ and Δ) transparent films has been developed. The method was tested on silicon-polymer sample) as well as on disrupted surface layers on sapphire and optical glasses K-8. Conceptually new results were obtained.