ИССЛЕДОВАНИЯ, ПРИБОРЫ, МОДЕЛИ — И МЕТОДЫ АНАЛИЗА

УДК 535.5.511: 531.7

© А. И. Семененко, И. А. Семененко

О НОВЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ "НУЛЕВОЙ" ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМОЙ. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ РЕАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР. 8. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ АНИЗОТРОПНЫХ СРЕД. МЕТОД ОБОБЩЕННЫХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ ЗОН

Работа посвящена последовательному изложению "нулевой" эллипсометрии анизотропных сред. Рассмотрены особенности и способы их устранения в методе обобщенных измерительных зон прибора. Изложены общие положения матричного метода в оптике анизотропных слоистых сред, подробно рассмотрен случай одноосного кристалла с произвольной ориентацией оптической оси и проанализированы предельные ситуации, связанные с расположением оптических осей. С помощью матричного метода и нового, более естественного представления для общего поля в подложке заново рассмотрены комплексные амплитудные коэффициенты отражения, на основе которых строятся основные уравнения эллипсометрии анизотропных сред, при этом прослежено поведение двух плоских волн в анизотропной подложке при переходе к "изотропному" случаю. Сделан также анализ особенностей обратной задачи эллипсометрии для случая анизотропных сред.

введение

Эллипсометрия позволяет успешно исследовать также и анизотропные вещества. При этом имеются в виду не только заведомо анизотропные материалы, но и структуры, которые по ряду основных признаков считаются изотропными. Эти структуры очень часто обладают поверхностной анизотропией, обусловленной способом обработки поверхности, способами нанесения пленок, различными механическими и температурными воздействиями и т. д. Успешное исследование систем, обладающих слабой анизотропией, можно проводить только на основе теории, естественным образом вытекающей из эллипсометрии изотропных систем и обобщающей все ее результаты.

В эллипсометрии анизотропных сред есть два подхода к измерению поляризационных углов. Один из них — фотометрический, а второй — "нулевой", определяющий поляризационные углы по положениям гашения оптических элементов. Прибор с фотометрической схемой не позволяет в явной форме провести разделение истинной и эффективной анизотропии, обусловленной неоднородностью поверхности. Но это можно сделать, используя "нулевую" эллипсометрию. "Нулевая" эллипсометрия позволяет не только оценивать, но и разделять источники экспериментальных ошибок (см. [1]), что особенно важно при исследовании эффектов анизотропии. Принципиальное значение имеет и другая особенность "нулевого" подхода. В рамках данного подхода только по нарушению известных простых соотношений, которым

удовлетворяют положения гашения оптических элементов при исследовании изотропных сред [2], можно судить о наличии и выраженности анизотропии.

Основной задачей настоящей работы является последовательное изложение "нулевой" эллипсометрии анизотропных сред. "Нулевой" подход к измерению поляризационных углов анизотропных отражающих систем был предложен в работе [3] как метод обобщенных измерительных зон, однако наличие ряда особенностей в этом методе требует дальнейшего детального анализа. Оптические свойства анизотропных слоистых сред, включая основные уравнения эллипсометрии, проще всего рассматривать, используя матричный метод. Матричный метод для отражающих многослойных систем произвольной анизотропии был развит в работе [4], однако и здесь, если иметь в виду решение обратной задачи эллипсометрии, требуется дополнительное рассмотрение важных частных случаев.

Мы начнем с рассмотрения метода обобщенных измерительных зон прибора, затем перейдем к матричному методу. Используя матричный метод и более естественное представление для общего поля в подложке, заново рассмотрим комплексные амплитудные коэффициенты отражения, на основе которых строятся основные уравнения эллипсометрии анизотропных слоистых сред. Наконец, в заключение рассмотрим некоторые особенности обратной задачи эллипсометрии для случая анизотропных сред.

1. МЕТОД ОБОБЩЕННЫХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ ЗОН В ЭЛЛИПСОМЕТРИИ АНИЗОТРОПНЫХ СРЕД

Метод эллипсометрии, как известно, основан на анализе изменений состояния поляризации светового пучка, возникающих в результате отражения от исследуемого образца. В общем случае анизотропной среды изменение состояния поляризации плоской монохроматической электромагнитной волны характеризуется уже не одной, как в случае изотропной отражающей системы, а тремя парами поляризационных углов

$$\Psi_{11}, \Delta_{11}, \Psi_{12}, \Delta_{12}, \Psi_{21}, \Delta_{21},$$
(1)

первая из которых связана с диагональными коэффициентами отражения и представляет собой простое обобщение поляризационных углов Ψ и Δ изотропной системы, а две другие определяются недиагональными коэффициентами отражения и при переходе к "изотропному" случаю исчезают. Теоретический расчет трех пар поляризационных углов ведется на основе системы из трех комплексных основных уравнений [2, 3]:

$$tg \Psi_{11} \exp(i\Delta_{11}) = \frac{R_{pp}}{R_{ss}},$$

$$tg \Psi_{12} \exp(i\Delta_{12}) = \frac{R_{ps}}{R_{ss}},$$

$$tg \Psi_{21} \exp(i\Delta_{21}) = \frac{R_{sp}}{R_{ss}},$$

(2)

где R_{pp} , R_{ps} , R_{sp} *и* R_{ss} — коэффициенты отражения, связывающие *p*- и *s*-составляющие комплексных амплитуд отраженной и падающей волн.

"Нулевой" подход к измерению поляризационных углов анизотропных сред, предложенный в работе [3], реализуется через метод обобщенных измерительных зон (см. также [2]). Дадим краткую характеристику этого метода.

Для экспериментального определения поляризационных углов анизотропных сред по положениям гашения оптических элементов, в отличие от "изотропного" случая, когда в принципе необходима лишь одна измерительная зона прибора, требуется уже одновременное привлечение трех измерительных зон. Из четырех измерительных зон можно составить четыре сочетания по три зоны. Каждое такое сочетание представляет собой обобщенную измерительную зону, в которой одна простая зона играет основную роль, а две другие связаны только с анизотропией и перестают работать при переходе к "изотропному" случаю, что обеспечивает непосредственную и однозначную связь каждой обобщенной зоны с одной из четырех простых зон [2, 3]. Обобщенной зоне $S_{kl}^{(j)}$ ($j \neq k \neq l$) ставится в соответствие как основная *j*-я простая зона. Согласно принятому в [3] порядку задания индексов *j*, *k*, *l*, имеются четыре обобщенные зоны

$$S_{24}^{(1)}, \qquad S_{13}^{(2)}, \qquad S_{42}^{(3)}, \qquad S_{31}^{(4)}, \qquad (3)$$

каждой из которых отвечают соотношения, определяющие три пары поляризационных углов по положениям гашения оптических элементов в соответствующих простых зонах [2, 3].

Таким образом, основные принципы "нулевого" подхода к измерению поляризационных углов анизотропных отражающих сред представляются довольно ясными. Однако метод обобщенных измерительных зон обладает рядом важных особенностей, на которых мы здесь и остановимся.

Рассмотрим оптическую схему эллипсометра PKSA (поляризатор—компенсатор—образец анализатор) с фазовым компенсатором, характеризующимся тремя комплексными параметрами

$$\rho = f \exp(-i\delta), \qquad \rho_1 = f_1 \exp(-i\delta_1), \qquad (4)$$

$$\rho_2 = f_2 \exp(-i\delta_2).$$

Параметр ρ полностью определяет свойства идеального компенсатора, для которого $\rho_1 = \rho_2 = 0$, а ρ_1 и ρ_2 , представляющие недиагональные элементы соответствующей матрицы Джонса [2], связаны с нарушениями в установке и оптической юстировке компенсатора, а также с его оптической активностью, если таковая присутствует.

В предыдущих работах [2, 3, 5] использовался вариант методики, в котором "быстрая" ось компенсатора в каждой измерительной зоне прибора образует с плоскостью падения угол $\psi_k = 45^\circ$. Но, как выяснилось, такое ограничение значительно снижает ценность метода обобщенных измерительных зон. Поэтому мы будем рассматривать общий случай, когда "быстрая" ось компенсатора в *m*-й измерительной зоне располагается относительно плоскости падения под любым углом $\psi_k^{(m)}$, принадлежащим интервалу (0, 90°). Для определенности отметим, что матрица Джонса компенсатора в случае, когда "быстрая" ось (или эффективная "быстрая" ось) совпадает с плоскостью падения ($\psi_k^{(m)} = 0$), имеет следующий вид

$$\mathbf{M}_{k} \sim \begin{pmatrix} 1 & \rho_{1} \\ -\rho_{1} + \rho_{2} & \rho \end{pmatrix}.$$
 (5)

Для нахождения соотношений, связывающих поляризационные углы анизотропной отражающей среды с положениями гашения оптических элементов в обобщенной зоне $S_{kl}^{(j)}$, обратимся к процедуре, использующей аппарат матриц Джонса и подробно описанной в работе [2]. Запишем систему уравнений гашения световой волны на выходе прибора, отвечающих *j*-й, *k*-й и l-й простым зонам:

$$\zeta_{m}b_{1m}\rho_{11} + \zeta_{m}b_{2m}\rho_{12} + b_{1m} \operatorname{tg}\psi_{a}^{(m)}\rho_{21} = = -b_{2m} \operatorname{tg}\psi_{a}^{(m)}, \qquad m = j, k, l,$$
(6)

где

$$\rho_{11} = \operatorname{tg} \Psi_{11} \exp(i\Delta_{11}), \qquad \rho_{12} = \operatorname{tg} \Psi_{12} \exp(i\Delta_{12}), \qquad (7)$$

$$\rho_{21} = \operatorname{tg} \Psi_{21} \exp(i\Delta_{21});$$

$$b_{1m} = K_{11}^{(m)} \cos \gamma_p^{(m)} + K_{12}^{(m)} \sin \gamma_p^{(m)},$$

$$b_{2m} = K_{22}^{(m)} \sin \gamma_p^{(m)} + K_{21}^{(m)} \cos \gamma_p^{(m)};$$
(8)

$$K_{11}^{(m)} = (1+\rho) - (1-\rho)\sin 2\theta_m - \eta_m \rho_2 \cos 2\theta_m, K_{12}^{(m)} = \eta_m (1-\rho)\cos 2\theta_m - \rho_2 \sin 2\theta_m + (2\rho_1 - \rho_2), K_{21}^{(m)} = \eta_m (1-\rho)\cos 2\theta_m - \rho_2 \sin 2\theta_m - (2\rho_1 - \rho_2), K_{22}^{(m)} = (1+\rho) + (1-\rho)\sin 2\theta_m + \eta_m \rho_2 \cos 2\theta_m;$$
(9)

$$\begin{aligned}
\theta_m &= \psi_k^{(m)} - \frac{\pi}{4}, \\
\zeta_m &= (-1)^{m+1}, \quad \eta_m = \begin{cases} 1, & m = 1, 2, \\ -1, & m = 3, 4; \end{cases}
\end{aligned} \tag{10}$$

 $\gamma_p^{(m)}$ и $\psi_a^{(m)}$ — положения гашения поляризатора и анализатора в пределах *m*-й простой зоны; θ_m — величина, характеризующая отклонение "быстрой" оси компенсатора от ее стандартного положения ($\psi_k = 45^\circ$); $K_{11}^{(m)},...,K_{22}^{(m)}$ — элементы матрицы Джонса компенсатора, отвечающие произвольному значению величины θ_m ($-\frac{\pi}{4} < \theta_m < \frac{\pi}{4}$).

Из системы линейных относительно ρ_{11}, ρ_{12} и ρ_{21} уравнений находим:

$$\rho_{11} = -\zeta_j \frac{b_{2j}}{b_{1j}} \operatorname{tg} \psi_a^{(j)} [1 + \frac{\zeta_j}{D_{jkl} b_{2j}} \operatorname{tg} \psi_a^{(j)} (W_{jk} - W_{jl})], \quad (11)$$

$$\rho_{12} = = \frac{\zeta_j}{D_{jkl}} [b_{1j} \operatorname{tg} \psi_a^{(j)} W_{kl} - b_{1k} \operatorname{tg} \psi_a^{(k)} W_{jl} + b_{1l} \operatorname{tg} \psi_a^{(l)} W_{jk}], (12)$$

$$\rho_{21} = \frac{-1}{D_{jkl}} [b_{2j} W_{kl} + b_{2k} W_{jl} - b_{2l} W_{jk}], \qquad (13)$$

где

$$D_{jkl} = b_{1j}\tilde{W}_{kl} - b_{1k}\tilde{W}_{jl} + b_{1l}\tilde{W}_{jk} , \qquad (14)$$

$$W_{mn} = \begin{vmatrix} \zeta_{m} b_{1m} & b_{2m} \operatorname{tg} \psi_{a}^{(m)} \\ \zeta_{n} b_{1n} & b_{2n} \operatorname{tg} \psi_{a}^{(n)} \end{vmatrix},$$

$$\tilde{W}_{mn} = \begin{vmatrix} \zeta_{m} b_{1m} \operatorname{tg} \psi_{a}^{(m)} & b_{2m} \\ \zeta_{n} b_{1n} \operatorname{tg} \psi_{a}^{(n)} & b_{2n} \end{vmatrix}.$$
(15)

Соотношения (11)-(13) определяют непосредственную связь поляризационных углов анизотропной среды с положениями гашения оптических элементов в обобщенной зоне $S_{kl}^{(j)}$ для случая произвольной ориентации "быстрой" оси компенсатора относительно плоскости падения. В этих соотношениях большую роль играют величины *W*_{*mn*}, являющиеся инвариантами эллипсометрии изотропных сред [2]. При переходе к изотропной среде, когда $W_{jl} = W_{jk} = W_{kl} = 0$, формулы (12) и (13) для недиагональных поляризационных углов дают тривиальное решение, а формула (11) для диагональных углов преобразуется в выражение, определяющее поляризационные углы Ψ и Δ изотропной отражающей системы через положения гашения оптических элементов в *j*-й простой зоне.

Исследование систем, обладающих слабой анизотропией, можно успешно вести только на основе теории, обобщающей все результаты эллипсометрии изотропных систем. Прежде всего необходимо выделить те параметры, которые всегда равны нулю в "изотропном" случае и отличны от нуля в общем случае анизотропных систем. В работах [2, 3] в качестве таких параметров, являющихся носителями эффектов анизотропии, выбраны величины α_{jl} и β_{jl} , характеризующие нарушение известных соотношений "изотропного" случая:

$$\alpha_{jl} = tg(\gamma_p^{(j)} + \gamma_p^{(l)}), \qquad \beta_{jl} = tg\psi_a^{(j)} - tg\psi_a^{(l)}, \qquad (16)$$

(jl = 1,4; 2,3).

Относительно параметров α_{jl} и β_{jl} доказана теорема [2], согласно которой равенство данных параметров нулю всегда влечет за собой равенство нулю недиагональных коэффициентов отражения R_{ps} и R_{sp} и наоборот, т. е. для анизотропных систем параметры $\alpha_{14}, \alpha_{23}, \beta_{14}$ и β_{23} в общем случае отличны от нуля.

Однако все сказанное о параметрах α_{jl} и β_{jl} верно лишь для идеального компенсатора, параметры ρ_1 и ρ_2 которого равны нулю, а "быстрая" ось во всех измерительных зонах располагается относительно плоскости падения под углами, удовлетворяющими условиям [2, 6]

$$\Psi_k^{(1)} = \Psi_k^{(4)}, \quad (\theta_1 = \theta_4),$$
 (17)

$$\Psi_k^{(2)} = \Psi_k^{(3)}, \quad (\theta_2 = \theta_3).$$
 (18)

Желая сохранить простые соотношения эллипсометрии изотропных сред

$$\begin{aligned} \psi_{a}^{(j)} &= \psi_{a}^{(l)}, \quad \gamma_{p}^{(j)} + \gamma_{p}^{(l)} = n\pi, \\ (n = 0, \pm 1, ...), \quad (jl = 1, 4; 2, 3), \end{aligned} \tag{19}$$

нарушение которых, определяемое параметрами α_{jl} и β_{jl} , связано (при $\rho_1 = \rho_2 = 0$) с наличием у исследуемых образцов анизотропии, в дальнейшем будем рассматривать только те варианты зонной методики, которые связаны с выполнением условий (17) и (18). Очевидно, для наиболее употребительного ($\psi_k^{(j)} = 45^\circ$, $\theta_j = 0$, j = 1,...,4), как и для более общего, но такого же простого варианта

$$\psi_{k}^{(1)} = \psi_{k}^{(2)} = \psi_{k}^{(3)} = \psi_{k}^{(4)} \neq 45^{\circ},$$

($\theta_{1} = \theta_{2} = \theta_{3} = \theta_{4} \neq 0$), (20)

данные условия выполняются.

При использовании неидеального компенсатора ($\rho_1 \neq 0$, $\rho_2 \neq 0$) параметры α_{jl} и β_{jl} отличны от нуля и в "изотропном" случае, т. е. они не всегда удовлетворяют поставленным требованиям и должны быть заменены параметрами, имеющими действительно универсальный характер. В качестве таких параметров целесообразно выбрать величины W_{mn} , которые в "изотропном" случае при любом компенсаторе всегда равны нулю

$$W_{mn} = 0, \quad (m < n = 1,...,4).$$
 (21)

Но отличие параметров W_{mn} (как и величин α_{jl} и β_{il} при $\rho_1 = \rho_2 = 0$) от нуля может быть связано не только с анизотропией исследуемых объектов, но также и с нарушением оптической юстировки и неправильным определением параметров компенсатора, т. е. с приборными погрешностями. Приборные погрешности хорошо проявляются через обобщенные зонные соотношения (11)-(13). При работе на идеальном приборе (при известных с абсолютной точностью параметрах компенсатора) экспериментальные значения поляризационных углов, определенные с помощью обобщенных зонных соотношений, должны совпадать по всем обобщенным зонам. И тогда отличие величин W_{mn} от нуля связано только с анизотропией исследуемых образцов. Если же наблюдается разброс значений поляризационных углов по обобщенным зонам, то это указывает на наличие приборных погрешностей и необходимость их устранения в рамках возможностей самого прибора. В этом случае отличие W_{mn} от нуля может быть лишь

частично связано с анизотропией.

Таким образом, при исследовании анизотропных сред также возникает проблема практической реализации однозонной эллипсометрической методики [1, 7], предполагающей совпадение результатов измерений по всем обобщенным зонам. Для успешного решения этой задачи необходимо проанализировать особенности, содержащиеся в зонных соотношениях (11)–(13), и наметить пути к их устранению.

Анализ формул (11)–(13) лучше всего провести для случая идеального компенсатора

$$\rho_1 = \rho_2 = 0 . \tag{22}$$

В этом случае выражения (8) для b_{1m} и b_{2m} существенно упрощаются:

$$b_{1m} = (1+\rho)\cos\gamma_{p}^{(m)} + \eta_{m}(1-\rho)\sin(\gamma_{p}^{(m)} - 2\eta_{m}\theta_{m}), b_{2m} = (1+\rho)\sin\gamma_{p}^{(m)} + \eta_{m}(1-\rho)\cos(\gamma_{p}^{(m)} - 2\eta_{m}\theta_{m}),$$
(23)

и зонные соотношения преобразуются к удобному для анализа виду:

$$\rho_{11} = -\zeta_j \frac{b_{2j}}{b_{1j}} \operatorname{tg} \psi_a^{(j)} \left[1 + \frac{\zeta_{jkl}^{(0)}}{\omega_{jkl}} \right], \tag{24}$$

$$\rho_{12} = \zeta_j \operatorname{tg} \psi_a^{(j)} \frac{\xi_{jkl}^{(1)}}{\omega_{jkl}}, \qquad \rho_{21} = -\frac{b_{2j}}{b_{1j}} \frac{\xi_{jkl}^{(2)}}{\omega_{jkl}}, \qquad (25)$$

где

$$\xi_{_{jkl}}^{(0)} =$$

$$= -\alpha_{jl}C_{kl}^{(-)}(g_j + t_j)(U_{kl}^{(+)} + \alpha_{jl}V_{kl}) - \beta_{jl}U_{kl}^{(-)}\frac{C_{jk}^{(+)}}{\operatorname{tg}\psi_a^{(j)}}, \quad (26)$$

$$\xi_{jkl}^{(i)} = 2\zeta_k W_{kl} - -\alpha_{jl} C_{kl}^{(-)} [V_{kl} + g_j (U_{kl}^{(+)} + \alpha_{jl} V_{kl})] - \beta_{jl} U_{kl}^{(-)} \frac{\mathrm{tg} \psi_a^{(k)}}{\mathrm{tg} \psi_a^{(j)}}, \quad (27)$$

$$\xi_{jkl}^{(2)} = 2\zeta_k W_{kl} - -\alpha_{jl} C_{kl}^{(-)} [V_{kl} - t_j (U_{kl}^{(+)} + \alpha_{jl} V_{kl})] + \beta_{jl} U_{kl}^{(-)}, \qquad (28)$$

$$\omega_{jkl} = 2\zeta_k \tilde{W}_{kl} + + \alpha_{jl} C_{kl}^{(-)} [V_{kl} + g_j (U_{kl}^{(+)} + \alpha_{jl} V_{kl})] + \beta_{jl} U_{kl}^{(-)},$$
(29)

$$U_{kl}^{(\pm)} = b_{1k}b_{2l} \pm b_{1l}b_{2k}, \qquad V_{kl} = b_{2k}b_{2l}^{(-)} - b_{1k}b_{1l}^{(-)}, \quad (30)$$

$$g_{j} = \frac{b_{2j}^{(-)}}{b_{1j}}, \qquad t_{j} = \frac{b_{1j}^{(-)}}{b_{2j}}, \qquad (31)$$
$$C_{mn}^{(\pm)} = \mathrm{tg}\psi_{a}^{(m)} \pm \mathrm{tg}\psi_{a}^{(n)},$$

величины $b_{1m}^{(-)}$ и $b_{2m}^{(-)}$ отличаются от b_{1m} и b_{2m} изменением знака перед вторыми слагаемыми в соответствующих выражениях (23).

В работе [5] показано, что при использовании стандартной методики, когда "быстрая" ось идеального компенсатора в каждой измерительной зоне образует с плоскостью падения угол $\psi_k^{(m)} = 45^\circ$ ($\theta_m = 0, m = 1,...,4$), зонные соотношения (24) и (25) при $\delta = 90^\circ$, где δ — основной фазовый параметр компенсатора (см. (4)), содержат особенность типа 0/0. Это непосредственно следует из выражений (24)–(31), если учесть, что при $\delta = 90^\circ$ имеют место следующие равенства [2, 8]:

$$C_{kl}^{(-)} = 0, \qquad U_{kl}^{(-)} = 0, \qquad W_{kl} = \tilde{W}_{kl} = 0.$$
 (32)

При значениях δ , близких, но не равных 90°, формулы (24) и (25) определяют поляризационные углы через отношения малых, не равных нулю величин, что может явиться источником больших экспериментальных ошибок в определении этих углов; поэтому фазовый параметр δ компенсатора не должен быть слишком близок к 90° (желательно не использовать интервал его значений 85÷95°). Но такой способ ухода от особенностей не может удовлетворять, особенно если проводятся спектральные исследования. Кроме того, исключение лучшего интервала значений фазового параметра δ становится необоснованным при переходе к исследованию (на том же приборе) практически изотропных систем, когда используются обычные зонные соотношения, не содержащие никаких особенностей.

Существует другой способ устранения особенностей, связанный с отказом от стандартной зонной методики. Для простоты рассмотрим вариант (20), когда отклонение "быстрой" оси компенсатора от ее стандартного положения определяется в каждой зоне одним и тем же углом θ ($\theta = \theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_4$).

Прежде всего выясним зависимость от этого угла величины \tilde{W}_{kl} . В "изотропном" случае величина W_{kl} , с которой связана \tilde{W}_{kl} , является инвариантом и записывается следующим образом [2, 6]:

$$\zeta_k W_{kl} = -\eta_k P_{kl}^{(+)} \Omega_{kl} -$$

$$-2 \left[\eta_{k}g_{kl} + C_{kl}^{(-)}\sin(\gamma_{p}^{(k)} + \gamma_{p}^{(l)})\right]\rho + +\eta_{k}\rho^{2}P_{kl}^{(-)}\Omega_{kl} = 0, \quad (kl = 1, 3; 2, 4),$$
(33)

где

$$P_{kl}^{(\pm)} = \cos(\gamma_p^{(k)} + \gamma_p^{(l)}) \pm \eta_k \sin(\gamma_p^{(k)} - \gamma_p^{(l)} - 2\eta_k \theta), \quad (34)$$

$$g_{kl} = C_{kl}^{(+)} \sin 2\theta \cos(\gamma_p^{(k)} - \gamma_p^{(l)} - 2\eta_k \theta),$$

$$\Omega_{kl} = C_{kl}^{(+)} \cos 2\theta \qquad (35)$$

Из уравнения (33) легко определяем (в приближении изотропной среды)

$$f\cos\delta = \frac{g_{kl} + \eta_k C_{kl}^{(-)}\sin(\gamma_p^{(k)} + \gamma_p^{(l)})}{P_{kl}^{(-)}\Omega_{kl}}.$$
 (36)

Величина \tilde{W}_{kl} отличается от W_{kl} перестановкой $\psi_a^{(k)}$ и $\psi_a^{(l)}$. Это позволяет, исходя из выражения (33) для W_{kl} , найти \tilde{W}_{kl} в приближении изотропной среды:

$$\zeta_{k}\tilde{W}_{kl} = \zeta_{k}W_{kl} + 4\rho C_{kl}^{(-)}\sin(\gamma_{p}^{(k)} + \gamma_{p}^{(l)}) = = 4\rho C_{kl}^{(-)}\sin(\gamma_{p}^{(k)} + \gamma_{p}^{(l)}).$$
(37)

Дальнейшее упрощение сделаем, положив $\delta = 90^{\circ}$. Используя (36), выразим $C_{kl}^{(-)} \times \sin(\gamma_p^{(k)} + \gamma_p^{(l)})$ через g_{kl} . В результате для \tilde{W}_{kl} получим

$$\zeta_k \tilde{W}_{kl} = -4\rho \eta_k C_{kl}^{(+)} \sin 2\theta \cos(\gamma_p^{(k)} - \gamma_p^{(l)} - 2\eta_k \theta).$$
(38)

Формула (38) описывает приближенную зависимость \tilde{W}_{kl} от угла θ . Эта зависимость при соответствующем выборе значения θ является основной. Анизотропия отражающей среды и разумное отклонение δ от 90° не могут существенно изменить ее. Это означает, что главную часть знаменателя ω_{ikl} из зонных соотношений (24) и (25) составляет \tilde{W}_{kl} . Как следует из (38), соответствующим выбором угла θ величину $\omega_{_{jkl}}$ всегда можно сделать заметно отличающейся от нуля. Для этого нет необходимости привлекать слишком большие θ . В большинстве случаев достаточно использовать значение $\theta = \pm 5^{\circ}$. Кроме того, надо иметь в виду, что отклонение δ от 90° и нарушение условия (22), т. е. учет реальных свойств компенсатора, в свою очередь также способствуют увеличению знаменателя ω_{ikl} .

Таким образом, отказ от стандартной зонной методики снимает проблему особенностей в обобщенных зонных соотношениях. Более точный анализ, основанный на использовании инвариантов эллипсометрии анизотропных сред, не только подтверждает этот вывод, но еще более усиливает его. Существенным моментом является то, что при нарушении условия (22), т. е. при $\rho_1 \neq 0$ и $\rho_2 \neq 0$, особенности, возникающие в стандартной зонной методике при $\delta = 90^{\circ}$, в некоторой степени снимаются, но и в этом случае мы имеем дело с отношениями малых величин. Отказ от стандартной зонной методики является решением проблемы независимо от типа компенсатора.

Аналогично рассматривается оптическая система PSKA. Уравнение гашения в *m*-й зоне для системы PSKA отличается от уравнения гашения для системы PKSA (см. (6), а также (7)–(10)) заменой

$$\psi_a^{(m)} \to \psi_p^{(m)}, \qquad \gamma_p^{(m)} \to \gamma_a^{(m)},$$
(39)

перестановкой недиагональных элементов ρ_{12} и ρ_{21} , а также следующим изменением выражений для b_{1m} и b_{2m} :

$$b_{1m} = K_{11}^{(m)} \cos \gamma_a^{(m)} + K_{21}^{(m)} \sin \gamma_a^{(m)}, b_{2m} = K_{22}^{(m)} \sin \gamma_a^{(m)} + K_{12}^{(m)} \cos \gamma_a^{(m)}.$$
(40)

Это означает, что обобщенные зонные соотношения системы PSKA легко получаются из соотношений (11)–(13) (с учетом (14) и (15)) путем замены (39) и (40) при условии, что величины ρ_{12} и ρ_{21} после такой замены обмениваются своими выражениями.

2. МАТРИЧНЫЙ МЕТОД В ОПТИКЕ АНИЗОТРОПНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ СРЕД. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Наиболее общая теория распространения плоских монохроматических электромагнитных волн через изотропные слоистые среды развита в работах Абелеса [9]. Он ввел матрицы второго порядка, позволяющие довольно просто описать любую систему из многих плоскопараллельных изотропных слоев. В работе [4] матричный метод Абелеса распространен на многослойные среды произвольной анизотропии (см. также монографию [2]). Приведем здесь общие положения данной работы.

Основу матричного метода для описания оптических свойств анизотропных слоистых сред составляет уравнение

$$\mathbf{Q}(0) = \mathbf{M}(0, z_0)\mathbf{Q}(z_0), \qquad (41)$$



Схематическое изображение *N*-слойной анизотропной отражающей системы

где $\mathbf{M}(0, z_0)$ — полная четырехмерная матрица слоистой системы (см. рисунок)

$$\mathbf{M}(0, z_0) = \mathbf{M}_1(0, z_1) \mathbf{M}_2(z_1, z_2) \dots \mathbf{M}_N(z_{N-1}, z_0); \quad (42)$$

 $\mathbf{M}_{j}(z_{j-1}, z_{j})$ — четырехмерная матрица *j*-го однородного слоя толщиной d_{i}

$$\mathbf{M}_{j}(z_{j-1}, z_{j}) = \mathbf{M}_{j}(z_{j} - z_{j-1}) = \mathbf{M}_{j}(d_{j});$$
(43)

 $\mathbf{Q}(z)$ — четырехмерный вектор, образованный тангенциальными составляющими электрического (E_x, E_y) и магнитного (H_x, H_y) полей,

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ H_x \\ H_y \end{pmatrix}.$$
(44)

Матричное уравнение (41) связывает значение вектора **Q** на верхней границе подложки (z = 0) со значением этого вектора на границе внешней среды (ε_0), из которой происходит падение световой волны, с отражающей системой ($z = z_N \equiv z_0$). При построении матрицы однородного анизотропного слоя используются условия на *x*- и *y*составляющие волнового вектора **k** плоской монохроматической волны

$$k_x = \text{const}, \qquad k_y = \text{const}, \qquad (45)$$

являющиеся следствием однородности в плоскости (x, y). Поскольку плоскость падения выбирается совпадающей с координатной плоскостью (x, z), то

$$k_{x} = k_{0x} = \kappa_{0} \sqrt{\varepsilon_{0}} \sin \varphi_{0},$$

$$k_{y} = k_{0y} = 0, \qquad \kappa_{0} = \frac{\omega}{c},$$
(46)

где $\varepsilon_0, \varphi_0, \mathbf{k}_0$ — диэлектрическая проницаемость внешней среды, угол падения светового пучка и волновой вектор падающей волны (см. рисунок). Условия (45) и (46) означают, что в однородной анизотропной среде зависимость общего поля, формирующегося под влиянием падающей волны и представляющего собой сумму плоских монохроматических волн, от времени и координат *x*, *y* в каждой точке пространства определяется множителем

$$\exp(i\omega t - ik_x x - ik_y y) = \exp(i\omega t - ik_{0x} x).$$
(47)

Данное общее поле как функция координаты *z* находится из волнового уравнения

$$\Delta \mathbf{E} - \operatorname{graddiv} \mathbf{E} + \kappa_0^2 \mathbf{D} = 0, \qquad (48)$$

следующего из уравнений Максвелла для монохроматической волны. Волновое уравнение позволяет построить систему двух дифференциальных уравнений второго порядка относительно E_x и E_y (см. [2, 4]), из которых находятся линейно независимые частные решения:

$$e_x^{(m)} = \gamma_x^{(m)} \exp(-ik_{mz}z), e_y^{(m)} = \exp(-ik_{mz}z), \qquad (m = 1, ..., 4);$$
(49)

$$\gamma_{x}^{(m)} = \frac{1}{\kappa_{0}^{2}} \frac{f(\kappa_{0}^{2} \varepsilon_{22} - k_{mz}^{2} - k_{0x}^{2}) - \kappa_{0}^{4} \varepsilon_{23}^{2}}{k_{mz} k_{0x} \varepsilon_{23} - (f \varepsilon_{12} - \kappa_{0}^{2} \varepsilon_{13} \varepsilon_{23})},$$

$$f = \kappa_{0}^{2} \varepsilon_{33} - k_{0x}^{2},$$
(50)

где ε_{ik} — элементы тензора диэлектрической проницаемости среды, относящиеся к координатной системе (x, y, z).

Выражения (49) и (50) с учетом общего множителя (47) определяют плоские монохроматические волны с волновыми векторами \mathbf{k}_m , для которых, в силу (46),

$$k_{mx} = k_{0x}, \qquad k_{my} = 0,$$
 (51)

а *z*-составляющие k_{mz} находятся из уравнения Френеля, представляющего собой равный нулю определитель следующего вида [2]:

$$\left|\kappa_0^2 \varepsilon_{ik} - \delta_{ik} k_m^2 + (\mathbf{k}_m)_i (\mathbf{k}_m)_k\right| = 0.$$
 (52)

Из четырех волновых векторов \mathbf{k}_m два имеют положительное (относительно оси *z*), а два других отрицательное направление. Условимся считать, что

$$k_{1(4)z} > 0, \qquad k_{2(3)z} < 0.$$
 (53)

В качестве линейно независимых частных решений могут быть выбраны и другие функции $E_x^{(m)}$ и $E_y^{(m)}$, удовлетворяющие определенным граничным условиям и являющиеся линейными комбинациями приведенных частных решений (49). В результате тангенциальные составляющие E_x и E_y общего поля запишутся:

$$E_x = \sum_{m=1}^{4} c_m E_x^{(m)}, \qquad E_y = \sum_{m=1}^{4} c_m E_y^{(m)}, \qquad (54)$$

причем в качестве $E_x^{(m)}$ и $E_y^{(m)}$ в определенных случаях (см. раздел 4) необходимо использовать и частные решения (49).

Что касается тангенциальных составляющих магнитного поля H_x и H_y , то они легко находятся из уравнения Максвелла (полагаем $\mu = 1$):

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -i\kappa_0 \mathbf{H} , \qquad (55)$$

$$H_{x} = \beta_{0} \frac{\partial E_{y}}{\partial z}, \quad H_{y} = \beta_{1} E_{x} + \beta_{2} E_{y} + \beta_{3} \frac{\partial E_{x}}{\partial z}, \quad (56)$$

где

$$\beta_{0} = -\frac{i}{\kappa_{0}}, \qquad \beta_{1} = \frac{\kappa_{0}}{f} k_{0x} \varepsilon_{13},$$

$$\beta_{2} = \frac{\kappa_{0}}{f} k_{0x} \varepsilon_{23}, \qquad \beta_{3} = i \frac{\kappa_{0}}{f} \varepsilon_{33}.$$
(57)

Приведенные здесь выражения для частных решений и тангенциальных составляющих общего поля позволяют построить матрицу *j*-го однородного анизотропного слоя $\mathbf{M}_{j}(d_{j})$, при этом величины $f, \mathbf{k}_{m}, k_{mz}, \varepsilon_{ik}$ в формулах (49)–(53) и (57) снабжаются индексом *j*:

$$f_{j}, \quad \mathbf{k}_{m}^{(j)}, \quad k_{mz}^{(j)}, \quad \varepsilon_{ik}^{(j)}.$$
 (58)

Подробное изложение всей процедуры по построению матрицы $\mathbf{M}_{j}(d_{j})$ содержится в работах [2, 4].

Отметим, что изменение расположения элементов вектора Q должно сопровождаться соответствующей перестановкой строк и столбцов матрицы $\mathbf{M}_{i}(d_{i})$ (*j* = 1, 2,..., *N*). В работах [2, 4] принято расположение, определенное формулой (44). Это вызывает определенные неудобства, связанные с предельным переходом к некоторым частным случаям, включая "изотропный" случай, когда р-и s-волны становятся полностью независимыми и их можно рассматривать отдельно [2]. В предельных случаях матрица $\mathbf{M}_{i}(d_{i})$, соответствующая вектору (44), распадается на два ненулевых блока, один из которых является внешним, образованным угловыми элементами матрицы, а другой — внутренним [2, 4]. То же самое относится и к полной матрице. Такая структура предельных матриц, очевидно, обеспечивает независимое рассмотрение *p*- и *s*-волн. С таким же успехом можно рассмотреть любую перестановку элементов вектора Q и соответствующие перестановки строк и столбцов матрицы $\mathbf{M}_{i}(d_{i})$. Однако наибольшие наглядность и удобство достигаются, если прематрицы блочноприобретают дельные диагональный вид, что обеспечивается следующим видом вектора:

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \\ E_y \\ H_x \end{pmatrix}.$$
 (59)

В формуле (59) два верхних элемента относятся к *р*-волне, а два нижних — к *s*-волне.

В дальнейшем будем иметь в виду представление вектора **Q** формулой (59). Вектор (59) отличается от (44) перемещением компоненты H_y с 4-го на 2-е место, что влечет за собой перемещение компонент E_y и H_x на 3-е и 4-е места. Это означает, что соответствующая вектору (59) матрица *j*-го однородного слоя $\mathbf{M}_j(d_j)$ получается из матрицы этого слоя, найденной в работе [4] и отвечающей вектору (44), путем последовательного перемещения 4-й строки и 4-го столбца на вторые места. Исходя из этого и используя результаты работ [2, 4], приведем выражения для элементов $m_{ik}^{(j)}$ матрицы $\mathbf{M}_i(d_j)$, отвечающей вектору (59):

$$m_{ik}^{(j)} = \frac{1}{w_0} \sum_{n=1}^{4} g_{in} b_{kn} \exp(ik_{nz}^{(j)} d_j), \quad (i, k = 1, ..., 4), \quad (60)$$

$$w_{0} = -(k_{1z}^{(j)}k_{2z}^{(j)} + k_{3z}^{(j)}k_{4z}^{(j)})\gamma_{12}\gamma_{34} + (k_{1z}^{(j)}k_{3z}^{(j)} + k_{2z}^{(j)}k_{4z}^{(j)})\gamma_{13}\gamma_{24} - (k_{1z}^{(j)}k_{4z}^{(j)} + k_{2z}^{(j)}k_{3z}^{(j)})\gamma_{14}\gamma_{23},$$
(61)

$$\gamma_{mn} = \gamma_x^{(m)} - \gamma_x^{(n)}, \tag{62}$$

$$b_{kn} = \sum_{\substack{m,q,l=1\\m < q}}^{4} \tau_{nmql} \gamma_{mq} A_{mql}^{(k)},$$
(63)

где $\tau_{nmql} = 0$, если среди индексов n, m, q, l есть хотя бы два одинаковых, иначе

$$\tau_{nmql} = \left(-1\right)^{\sigma_{nmql}},\tag{64}$$

 $\sigma_{\scriptscriptstyle nmql}$ — число беспорядков среди индексов.

Формулы (60)–(64) по своей структуре повторяют соответствующие формулы из работ [2, 4]. Изменение касается только величин g_{in} и $A_{mql}^{(k)}$, зависящих от индексов *i*, *k* матричного элемента, и связано оно с перемещением 4-й строки и 4-го столбца матрицы на вторые места. В соответствии с этим в наборах значений g_{in} (*i* = 1,..., 4) и $A_{mql}^{(k)}$ (*k* = 1,..., 4) делаются аналогичные перестановки:

$$g_{1n} = \gamma_x^{(n)}, \qquad g_{2n} = \beta_1 \gamma_x^{(n)} + \beta_2 - i\beta_3 \gamma_x^{(n)} k_{nz}^{(j)}, g_{3n} = 1, \qquad g_{4n} = -i\beta_0 k_{nz}^{(j)};$$
(65)

$$A_{mql}^{(1)} = -k_{mz}^{(j)}k_{qz}^{(j)} + i\frac{\beta_1}{\beta_3}k_{lz}^{(j)}, \quad A_{mql}^{(2)} = -\frac{i}{\beta_3}k_{lz}^{(j)},$$

$$A_{mql}^{(3)} = k_{mz}^{(j)}k_{qz}^{(j)}\gamma_x^{(l)} + i\frac{\beta_2}{\beta_3}k_{lz}^{(j)}, \quad A_{mql}^{(4)} = \frac{i}{\beta_0}k_{lz}^{(j)}\gamma_x^{(l)}.$$
(66)

Как уже указывалось, элементы тензора диэлектрической проницаемости среды ε_{ik} относятся к координатной системе (x, y, z). В работах [2, 4] они выражены через главные значения $\varepsilon^{(1)}, \varepsilon^{(2)}, \varepsilon^{(3)}$, отвечающие главным осям тензора ξ, η, ζ , и углы Эйлера χ, θ, v , определяющие ориентацию главных осей относительно системы (x, y, z). При $\chi = \theta = v = 0$ оси ξ, η, ζ совпадают с осями x, y, z соответственно, а матрица тензора ε_{ik} приобретает диагональный вид с расположенными по диагонали главными значениями. Углом χ (при $\theta = v = 0$) определяется поворот системы главных осей вокруг оси ζ , совпадающей с осью z. При этом на угол χ , очевидно, поворачиваются оси ξ и η . Затем осуществляется поворот на угол θ (при v = 0) вокруг нового положения оси ξ , в этом случае ось ζ впервые и единственный раз отклоняется от ее начального положения на угол θ , а ось η занимает уже второе положения на угол θ , а ось η занимает уже второе положение. Наконец происходит поворот вокруг нового положения оси ζ на угол v, и оси ξ и η занимают соответственно второе и третье положения. Мы не приводим здесь соответствующие формулы для элементов ε_{ik} (см. [2, 4]), однако будем использовать их, привлекая сделанные пояснения.

Выражения (41)-(43) и (59)-(66), представляющие матричное уравнение и матрицу однородного анизотропного слоя, позволяют описать оптические свойства любой многослойной системы произвольной анизотропии. Однако формулы (60)-(66), описывающие матричные элементы, содержат отношения малых величин, граничащие иногда с неопределенностью типа $\frac{0}{0}$. Проявляется это, прежде всего, через величины $\gamma_x^{(m)}$ (см. (50)). Это связано не только с небольшим разбросом главных значений $\varepsilon^{(1)}, \varepsilon^{(2)}, \varepsilon^{(3)}$ тензора ε_{ik} , но и с определенными значениями углов Эйлера, описывающими приближение к некоторым предельным ситуациям, связанным с расположением главных осей. Предельным является также и случай изотропной среды. В работах [2, 4] приведен очевидный результат, относящийся к "изотропному" случаю, однако сама процедура предельного перехода не показана. В следующем разделе при анализе матрицы однородного слоя одноосного кристалла с произвольной ориентацией оптической оси указанные неопределенности проявятся в явной форме, что позволит увидеть и характер перехода к предельным ситуациям.

3. МАТРИЦА ОДНОРОДНОГО СЛОЯ Одноосного кристалла с произвольной ориентацией оптической оси. предельные случаи.

Важнейшим видом анизотропии, допускающим устранение неопределенностей в матричных элементах, является случай одноосного кристалла с произвольной ориентацией оптической оси. Рассмотрим этот случай.

Для одноосного кристалла направления двух главных осей произвольны, а соответствующие им главные значения тензора $\varepsilon_{ik}^{(j)}$ для *j*-го слоя совпадают. Будем считать, что это 1-я и 2-я главные оси

$$\varepsilon_{j}^{(1)} = \varepsilon_{j}^{(2)} \equiv \varepsilon_{oj} \,. \tag{67}$$

Тогда 3-я главная ось — это оптическая ось, для которой

$$\mathcal{E}_{j}^{(3)} \equiv \mathcal{E}_{ej} \neq \mathcal{E}_{oj} \,. \tag{68}$$

В (67) и (68) индексы *о* и *е* соответствуют обыкновенной и необыкновенной волнам, распространяющимся в одноосном кристалле. Ориентация оптической оси, как следует из приведенного выше описания углов Эйлера χ_j , θ_j , v_j , полностью определяется углами χ_j и θ_j . Поскольку две первых главных оси эквивалентны и их направления произвольны, то угол v_j исключается из выражений для $\varepsilon_{ik}^{(j)}$, т. е. он может принимать любое значение, но для удобства полагаем

$$\boldsymbol{v}_{i} = \boldsymbol{0} \,. \tag{69}$$

Используя соответствующие формулы для $\varepsilon_{ik}^{(j)}$ из [2, 4] и учитывая (67)–(69), запишем:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^{(j)} &= \varepsilon_{oj} + \delta \varepsilon_{1}, \qquad \varepsilon_{22}^{(j)} = \varepsilon_{oj} + \delta \varepsilon_{2}, \\ \varepsilon_{33}^{(j)} &= \varepsilon_{ej} + \delta \varepsilon_{3}; \end{aligned} \tag{70}$$

$$\delta \varepsilon_{1} = (\varepsilon_{e_{j}} - \varepsilon_{o_{j}}) \sin^{2} \chi_{j} \sin^{2} \theta_{j},$$

$$\delta \varepsilon_{2} = (\varepsilon_{e_{j}} - \varepsilon_{o_{j}}) \cos^{2} \chi_{j} \sin^{2} \theta_{j};$$
(71)

$$\delta \varepsilon_3 = -(\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj}) \sin^2 \theta_j; \qquad (72)$$

$$\varepsilon_{23}^{(j)} = -(\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj}) \cos \chi_j \sin \theta_j \cos \theta_j \,. \tag{74}$$

Подставив (70)–(74) в уравнение Френеля (52), преобразуем его к виду

$$[(k_{z}^{(j)})^{2} - g_{o}^{2}] \times \times [(\varepsilon_{ej} + \delta\varepsilon_{3})(k_{z}^{(j)})^{2} + ak_{z}^{(j)} - \varepsilon_{oj}g_{e}^{2} + k_{0x}^{2}\delta\varepsilon_{1}] = 0, \quad (75)$$

где

() 2

$$g_o^2 = \kappa_0^2 \varepsilon_{oj} - k_{0x}^2, \qquad g_e^2 = \kappa_0^2 \varepsilon_{ej} - k_{0x}^2, \qquad (76)$$
$$a = 2\varepsilon_{13}^{(j)} k_{0x}.$$

Таким образом, уравнение Френеля для одноосного кристалла с произвольной ориентацией оптической оси распадается на два квадратных уравнения:

$$(k_z^{(j)})^2 - g_o^2 = 0, (77)$$

$$(\varepsilon_{ej} + \delta \varepsilon_3)(k_z^{(j)})^2 + ak_z^{(j)} - \varepsilon_{oj}g_e^2 + k_{0x}^2\delta \varepsilon_1 = 0.$$
 (78)

Уравнение (77) описывает обыкновенную, а уравнение (78) — необыкновенную волны. Из этих уравнений, в соответствии с (53), находим

$$k_{1z}^{(j)} = g_o, \qquad k_{2z}^{(j)} = -g_o,$$
(79)

$$k_{3,4z}^{(j)} = \frac{-a \mp \sqrt{a^2 - 4b + 4\varepsilon_{oj}\varepsilon_{ej}g_e^2}}{2(\varepsilon_{ej} + \delta\varepsilon_3)},$$
(80)

где

$$b = \varepsilon_{e_j} k_{0x}^2 \delta \varepsilon_1 - (\varepsilon_{o_j} g_e^2 - k_{0x}^2 \delta \varepsilon_1) \delta \varepsilon_3.$$
(81)

Верхний знак (-) в (80) отвечает величине $k_{3z}^{(j)}$, а нижний (+) — $k_{4z}^{(j)}$.

Параметры *a* и *b* пропорциональны малой величине ($\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj}$), поэтому их удобно представить в виде

$$a = (\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj})a_{0,} \qquad b = (\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj})b_{0}, \qquad (82)$$

$$a_{0} = 2k_{0x}\sin\chi_{j}\sin\theta_{j}\cos\theta_{j},$$

$$b_{0} = (\varepsilon_{ej}k_{0x}^{2}\sin^{2}\chi_{j} + \varepsilon_{oj}g_{e}^{2} - k_{0x}^{2}\delta\varepsilon_{1})\sin^{2}\theta_{j}.$$
(83)

Теперь можно перейти к исследованию матричных элементов $m_{ik}^{(j)}$. Прежде всего, используя (70)–(74) и (79)–(83), преобразуем величины $\gamma_x^{(m)}$ (m = 1,...,4). В процессе преобразования малая величина ($\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj}$) сокращается, и мы приходим к следующим выражениям:

$$\gamma_{x}^{(1,2)} = \cos \chi_{j} \sin \theta_{j} \frac{a_{1,2}}{b_{1,2}},$$

$$\gamma_{x}^{(3,4)} = \frac{1}{\cos \chi_{j} \sin \theta_{j}} \frac{a_{3,4}}{b_{3,4}};$$
(84)

$$a_1 = a_2 = g_o^2,$$

$$b_m = -k_{mz}^{(j)} k_{0x} \cos\theta_j + g_o^2 \sin\chi_j \sin\theta_j,$$

$$m = 1,..., 4;$$
(85)

$$a_{3,4} = \frac{-1}{2\kappa_0^2 (\varepsilon_{e_j} + \delta \varepsilon_3)^2} \times \\ \times [2f_j \varepsilon_{e_j} (k_{0x}^2 \cos^2 \theta_j + g_e^2 \sin^2 \chi_j \sin^2 \theta_j) \pm \\ \pm f_j a_0 \sqrt{4\varepsilon_{o_j} \varepsilon_{e_j} g_e^2 + a^2 - 4b} + \\ + 2(\varepsilon_{e_j} - \varepsilon_{o_j}) \sin^2 \theta_j C_{3,4}], \qquad (86)$$
$$C_{3,4} = f_j [k_{0x}^2 \sin^2 \chi_j - k_{0x}^2 \cos^2 \chi_j \cos^2 \theta_j - \\ -\kappa_0^2 \varepsilon_{o_j} \sin^2 \theta_j - \kappa_0^2 \varepsilon_{e_j} (1 - 2\cos^2 \chi_j \sin^2 \theta_j) + \\ \end{cases}$$

$$+\kappa_{0}^{2}\delta\varepsilon_{3}\cos^{2}\chi_{j}\sin^{2}\theta_{j}]+$$

$$+\kappa_{0}^{4}(\varepsilon_{ej}+\delta\varepsilon_{3})^{2}\cos^{2}\chi_{j}\cos^{2}\theta_{j};$$

$$f_{j} = g_{e}^{2} + \kappa_{0}^{2}\delta\varepsilon_{3}.$$
(87)

Таким образом, величины $\gamma_x^{(m)}$ не содержат особенностей по малому параметру ($\varepsilon_{ej} - \varepsilon_{oj}$), однако в полученных выражениях содержатся особенности по углам Эйлера, обусловленные приближением к предельным ситуациям. В предельных ситуациях одна из главных осей перпендикулярна плоскости падения. В случае одноосного кристалла, строго говоря, есть две предельных ситуации: в одной из них оптическая ось перпендикулярна плоскости падения

$$\chi_j = 0, \qquad \theta_j = 90^\circ, \qquad (88)$$

а в другой занимает произвольное положение в этой плоскости

 $\chi_i = 90^\circ, \qquad 0 \le \theta_i < 180^\circ.$ (89)

В нашем случае есть смысл выделить еще и третью ситуацию, являющуюся частным случаем второй:

$$0 \le \chi_i < 180^\circ, \qquad \theta_i = 0. \tag{90}$$

Добавление третьей ситуации необходимо для того, чтобы охватить все приближения к предельным ситуациям.

Выражения для матричных элементов $m_{ik}^{(j)}$ легко освобождаются от указанных особенностей, если в окрестности предельных ситуаций для углов χ_i и θ_i принять:

$$\chi_j = 0, \ \theta_j \neq 90^\circ$$
или $\chi_j \neq 0, \ \theta_j = 90^\circ;$ (91)

$$\chi_j \neq 90^\circ, \quad 0 \le \theta_j < 180^\circ;$$
 (92)

$$0 \le \chi_i < 180^\circ, \qquad \theta_i \ne 0. \tag{93}$$

Для упрощения соответствующей процедуры необходимо преобразовать общие выражения для $m_{ik}^{(j)}$. С этой целью в первую очередь преобразуются с учетом (84) величины γ_{mn} , которые затем подставляются в формулы (60)–(66). Эту процедуру мы подробно рассмотрим в следующей работе, посвященной роли фазового компенсатора в "нулевой" эллипсометрии. Отметим только, что вне опасных (в смысле появления особенностей) окрестностей предельных ситуаций приведенных здесь выражений достаточно для расчета матричных элементов $m_{ik}^{(j)}$ одноосных кристаллов с произвольной ориентацией оптической оси. Остановимся на переходе к предельным ситуациям. В предельных ситуациях недиагональные амплитудные коэффициенты отражения и пропускания обращаются в нуль, что означает независимость *p*- и *s*-волн, а в этом случае матрица однородного анизотропного слоя $\mathbf{M}_{j}(d_{j})$ становится блочно-диагональной, причем верхний блок отвечает *p*-волне, а нижний *s*-волне. Общие выражения для $m_{ik}^{(j)}$ в случае одноосного кристалла позволяют, руководствуясь условиями (91)–(93), заменив в них знак \neq на знак \rightarrow предельного перехода, получить предельную матрицу для каждого случая. Однако, имея в виду не только одноосные, но и двухосные кристаллы, мы получим предельные матрицы, используя более простую процедуру.

В предельных ситуациях система двух дифференциальных уравнений второго порядка относительно E_x и E_y [2, 4], из которых находятся частные решения (49), распадается на два независимых уравнения, что соответствует независимости *p*-и *s*-волн. Используя общий вид системы из работ [2, 4] и учитывая, что в предельных ситуациях

$$\varepsilon_{12}^{(j)} = \varepsilon_{13}^{(j)} = \varepsilon_{23}^{(j)} = 0$$
,

запишем эти независимые уравнения:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \kappa_0^2 g_{pj}^2 E_x = 0, \qquad (94)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + \kappa_0^2 g_{sj}^2 E_y = 0, \qquad (95)$$

где

$$g_{pj}^{2} = \frac{1}{\kappa_{0}^{2}} \frac{\varepsilon_{11}^{(j)}}{\varepsilon_{33}^{(j)}} f_{j} = \frac{\varepsilon_{11}^{(j)}}{\varepsilon_{33}^{(j)}} (\varepsilon_{33}^{(j)} - \varepsilon_{0} \sin^{2} \varphi_{0}),$$

$$g_{sj}^{2} = (\varepsilon_{22}^{(j)} - \varepsilon_{0} \sin^{2} \varphi_{0}).$$
(96)

Уравнение (94) соответствует *р*-волне, а уравнение (95) — *s*-волне. Частными решениями этих уравнений будут следующие пары экспонент:

$$e_x^{(1)} = \exp(i\kappa_0 g_{pj} z), \qquad e_x^{(2)} = \exp(-i\kappa_0 g_{pj} z), e_y^{(1)} = \exp(i\kappa_0 g_{sj} z), \qquad e_y^{(2)} = \exp(-i\kappa_0 g_{sj} z).$$
(97)

Вся дальнейшая процедура проводится так же, как и в случае однородного изотропного слоя. Прежде всего находятся новые пары частных решений $E_x^{(1)}, E_x^{(2)}$ и $E_y^{(1)}, E_y^{(2)}$, являющиеся линейными комбинациями $e_x^{(1)}, e_x^{(2)}$ и $e_y^{(1)}, e_y^{(2)}$ соответственно и удовлетворяющие следующим условиям на верхней границе *z* = *z_j j*-го анизотропного слоя с указанной выше ориентацией главных осей:

$$\begin{cases} E_x^{(1)}(z_j) = 1, & E_x^{(2)}(z_j) = 0, \\ H_y^{(1)}(z_j) = \beta_3 \frac{\partial E_x^{(1)}}{\partial z} = 0, & H_y^{(2)}(z_j) = \beta_3 \frac{\partial E_x^{(2)}}{\partial z} = 1; \end{cases}$$
(98)
$$\begin{cases} E_y^{(1)}(z_j) = 1, & E_y^{(2)}(z_j) = 0, \\ H_x^{(1)}(z_j) = \beta_0 \frac{\partial E_y^{(1)}}{\partial z} = 0, & H_x^{(2)}(z_j) = \beta_0 \frac{\partial E_y^{(2)}}{\partial z} = 1, \end{cases}$$
(99)

где β_3 и β_0 определяются формулами (57), причем параметр β_3 , учитывая (96), может быть преобразован к виду

$$\beta_3 = i \frac{\kappa_0}{f_j} \varepsilon_{33}^{(j)} = i \frac{\varepsilon_{11}^{(j)}}{\kappa_0 g_{pj}^2}.$$
 (100)

При написании граничных условий (98) и (99) использованы формулы (56) для H_x и H_y , в кото-

рых $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

Новые частные решения, удовлетворяющие граничным условиям (98) и (99), с учетом соответствующих выражений для H_x и H_y и формулы (100) запишутся:

$$\begin{cases} E_{x}^{(1)}(z) = \frac{1}{2} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} + e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}], \\ E_{x}^{(2)}(z) = -\frac{1}{2} \frac{g_{pj}}{\varepsilon_{11}^{(j)}} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} - e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}], \\ H_{y}^{(1)}(z) = -\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{11}^{(j)}}{g_{pj}} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} - e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}], \\ H_{y}^{(2)}(z) = \frac{1}{2} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} + e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}], \end{cases}$$
(101)

$$\begin{cases} E_{y}^{(1)}(z) = \frac{1}{2} [e^{-i\kappa_{0}g_{sj}(z_{j}-z)} + e^{i\kappa_{0}g_{sj}(z_{j}-z)}], \\ E_{y}^{(2)}(z) = \frac{1}{2g_{sj}} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} - e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}], \\ H_{x}^{(1)}(z) = \frac{g_{sj}}{2} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} - e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}], \\ H_{x}^{(2)}(z) = \frac{1}{2} [e^{-i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)} + e^{i\kappa_{0}g_{pj}(z_{j}-z)}]. \end{cases}$$
(102)

Применим способ построения матриц, описанный в [2, 4]. Учитывая независимость *p*- и *s*-волн и применяя формулы (101) и (102), находим

$$\mathbf{M}_{j}(d_{j}) = \begin{pmatrix} E_{x}^{(1)} & E_{x}^{(2)} & 0 & 0 \\ H_{y}^{(1)} & H_{y}^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{y}^{(1)} & E_{y}^{(2)} \\ 0 & 0 & H_{x}^{(1)} & H_{x}^{(2)} \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} a_{pj} & -\frac{g_{pj}}{\varepsilon_{11}^{(j)}} b_{pj} & 0 & 0 \\ -\frac{\varepsilon_{11}^{(j)}}{g_{pj}} b_{pj} & a_{pj} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{sj} & \frac{1}{g_{sj}} b_{sj} \\ 0 & 0 & g_{sj} b_{sj} & a_{sj} \end{pmatrix}, \quad (103)$$

где

$$a_{p(s)j} = \frac{1}{2} [e^{-i\delta_{p(s)j}} + e^{i\delta_{p(s)j}}],$$

$$b_{p(s)j} = \frac{1}{2} [e^{-i\delta_{p(s)j}} - e^{i\delta_{p(s)j}}], \qquad \delta_{p(s)j} = \kappa_0 g_{p(s)j} d_j.$$
(104)

Матрица (103) позволяет описать любой предельный случай независимо от того, одноосный это кристалл или двухосный. Мы не будем рассматривать разные случаи, отметим лишь, что в предельной ситуации для одноосного кристалла, определяемой условиями (89), элементы верхнего блока матрицы (103) проявляют через величины g_{pj} и $\varepsilon_{11}^{(j)}$ сильную зависимость от угла θ_j . То же самое будет наблюдаться и в аналогичных предельных ситуациях для двухосного кристалла.

4. КОМПЛЕКСНЫЕ АМПЛИТУДНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ОТРАЖЕНИЯ ДЛЯ АНИЗОТРОПНЫХ СЛОИСТЫХ СРЕД

Комплексные амплитудные коэффициенты отражения плоской монохроматической электромагнитной волны, входящие в систему трех основных уравнений (2), представлены в [2, 4] через элементы полной матрицы многослойной анизотропной системы. Однако в [2, 4] использован не совсем естественный подход к построению вектора $\mathbf{Q}(0)$ для верхней границы анизотропной подложки. Тангенциальные составляющие E_x и E_y в этих работах выражены через величины E_z, относящиеся к двум плоским волнам, распространяющимся в анизотропной подложке. Такое представление вызывает затруднения при переходе к предельным ситуациям, в которых составляющие E_x и E_z связаны только с *p*-волной, а E_y — только с *s*-волной.

Здесь мы используем другое представление, связанное с использованием частных решений (49). Через эти частные решения выражаются тангенциальные составляющие E_x и E_y общего поля (см. (54)). В анизотропной подложке общее поле складывается из полей двух плоских волн, распространяющихся в отрицательном направлении, поэтому E_x и E_y должны быть представлены в виде

$$E_{x} = C_{2}e_{x}^{(2)} + C_{3}e_{x}^{(3)} =$$

$$= C_{2}\gamma_{x}^{(2)}\exp(-ik_{2z}z) + C_{3}\gamma_{x}^{(3)}\exp(-ik_{3z}z),$$

$$E_{y} = C_{2}e_{y}^{(2)} + C_{3}e_{y}^{(3)} =$$

$$= C_{2}\exp(-ik_{2z}z) + C_{3}\exp(-ik_{3z}z),$$
(104)

где k_{2z} и k_{3z} удовлетворяют условию (53).

Далее идет стандартная процедура [2, 4], согласно которой прежде всего определяются вектора $\mathbf{Q}(0)$ и $\mathbf{Q}(z_0)$. Воспользуемся выражением для $\mathbf{Q}(z_0)$ из [2, 4]:

$$\mathbf{Q}(z_{0}) = \exp(i\omega t - ik_{0x}x) \times \\ \times \begin{pmatrix} (E_{0p}^{(0)} \exp(-ik_{0z}z_{0}) - E_{0p}^{(1)} \exp(ik_{0z}z_{0}))\cos\varphi_{0} \\ -(E_{0p}^{(0)} \exp(-ik_{0z}z_{0}) + E_{0p}^{(1)} \exp(ik_{0z}z_{0}))\sqrt{\varepsilon_{0}} \\ E_{0s}^{(0)} \exp(-ik_{0z}z_{0}) + E_{0s}^{(1)} \exp(ik_{0z}z_{0}) \\ (E_{0s}^{(0)} \exp(-ik_{0z}z_{0}) - E_{0s}^{(1)} \exp(ik_{0z}z_{0}))\sqrt{\varepsilon_{0}}\cos\varphi_{0} \end{pmatrix},$$
(105)

где $E_{0p(s)}^{(0)}$ и $E_{0p(s)}^{(1)}$ — амплитуды падающих и отраженных p(s)-волн, k_{0z} — z-составляющая волнового вектора падающей волны

$$k_{0z} = -\kappa_0 \sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_0 \, .$$

Используя (104), определим вектор Q(0):

$$\mathbf{Q}(0) = \exp(i\omega t - ik_{0x}x) \begin{pmatrix} C_2 \gamma_x^{(2)} + C_3 \gamma_x^{(3)} \\ \alpha_2 C_2 + \alpha_3 C_3 \\ C_2 + C_3 \\ \delta_2 C_2 + \delta_3 C_3 \end{pmatrix}; \quad (106)$$
$$\alpha_{2,3} = \beta_1 \gamma_x^{(2,3)} + \beta_2 + \frac{\kappa_0}{f} \varepsilon_{33} k_{2,3z} \gamma_x^{(2,3)}, \quad (107)$$

$$\delta_{2,3} = -\frac{k_{2,3z}}{\kappa_0},$$

где β_1 и β_2 определяются выражениями (57), в которых элементы ε_{ik} характеризуют в данном случае подложку (см. рисунок).

Подставляя в матричное уравнение (41) Q(0)

и $\mathbf{Q}(z_0)$, придем к системе 4 линейных относительно $E_{0p}^{(1)}$, $E_{0s}^{(1)}$, C_2 и C_3 уравнений. Запишем эту систему в векторном виде:

$$\mathbf{H}_{12}^{(+)} \exp(ik_{0z}z_{0})E_{0p}^{(1)} + \mathbf{H}_{34}^{(-)} \exp(ik_{0z}z_{0})E_{0s}^{(1)} + \\ + \mathbf{F}_{2}C_{2} + \mathbf{F}_{3}C_{3} = \\ = \mathbf{H}_{12}^{(-)} \exp(-ik_{0z}z_{0})E_{0p}^{(0)} + \mathbf{H}_{34}^{(+)} \exp(-ik_{0z}z_{0})E_{0s}^{(0)}.$$
(108)

В формуле (108) $\mathbf{H}_{12}^{(\pm)}$, $\mathbf{H}_{34}^{(\pm)}$, \mathbf{F}_2 и \mathbf{F}_3 — это столбцы, причем $\mathbf{H}_{12}^{(\pm)}$, $\mathbf{H}_{34}^{(\pm)}$ выражаются через столбцы \mathbf{h}_i (*i* = 1,..., 4) полной матрицы:

$$\mathbf{H}_{12}^{(\pm)} = \mathbf{h}_{1} \cos \varphi_{0} \pm \mathbf{h}_{2} \sqrt{\varepsilon_{0}},$$

$$\mathbf{H}_{34}^{(\pm)} = \pm \mathbf{h}_{3} + \mathbf{h}_{4} \sqrt{\varepsilon_{0}} \cos \varphi_{0},$$

$$\mathbf{h}_{i} = \begin{pmatrix} m_{1i} \\ m_{2i} \\ m_{3i} \\ m_{4i} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{F}_{2,3} = \begin{pmatrix} \gamma_{x}^{(2,3)} \\ \alpha_{2,3} \\ 1 \\ \delta_{2,3} \end{pmatrix}.$$
(109)

Из уравнения (108) легко находим

$$E_{0p}^{(1)} = R_{pp} E_{0p}^{(0)} + R_{ps} E_{0s}^{(0)},$$

$$E_{0s}^{(1)} = R_{sp} E_{0p}^{(0)} + R_{ss} E_{0s}^{(0)},$$

$$C_{2,3} = T_{2,3p} E_{0p}^{(0)} + T_{2,3s} E_{0s}^{(0)},$$

(110)

где

$$R_{pp} = \frac{\exp(-2ik_{0z}z_{0})}{W} \|\mathbf{H}_{12}^{(-)}, \mathbf{H}_{34}^{(-)}, \mathbf{F}_{2}, \mathbf{F}_{3}\|,$$

$$R_{ps} = 2\sqrt{\varepsilon_{0}}\cos\varphi_{0}\frac{\exp(-2ik_{0z}z_{0})}{W} \|\mathbf{h}_{3}, \mathbf{h}_{4}, \mathbf{F}_{2}, \mathbf{F}_{3}\|,$$

$$R_{sp} = -2\sqrt{\varepsilon_{0}}\cos\varphi_{0}\frac{\exp(-2ik_{0z}z_{0})}{W} \|\mathbf{h}_{1}, \mathbf{h}_{2}, \mathbf{F}_{2}, \mathbf{F}_{3}\|,$$

$$R_{ss} = \frac{\exp(-2ik_{0z}z_{0})}{W} \|\mathbf{H}_{12}^{(+)}, \mathbf{H}_{34}^{(+)}, \mathbf{F}_{2}, \mathbf{F}_{3}\|,$$

$$T_{2,3p} = \pm 2\sqrt{\varepsilon_{0}}\cos\varphi_{0}\frac{\exp(-ik_{0z}z_{0})}{W} \|\mathbf{h}_{1}, \mathbf{h}_{2}, \mathbf{H}_{34}^{(-)}, \mathbf{F}_{3,2}\|,$$

$$T_{2,3s} = \mp 2\sqrt{\varepsilon_{0}}\cos\varphi_{0}\frac{\exp(-ik_{0z}z_{0})}{W} \|\mathbf{H}_{12}^{(+)}, \mathbf{h}_{3}, \mathbf{h}_{4}, \mathbf{F}_{3,2}\|,$$

$$W = \|\mathbf{H}_{12}^{(+)}, \mathbf{H}_{34}^{(-)}, \mathbf{F}_{2}, \mathbf{F}_{3}\|.$$
(111)

Переход к предельным ситуациям анизотропной подложки в формулах (111) для коэффициентов отражения $R_{pp},...,R_{ss}$ и пропускания $T_{2,3p(s)}$ не-

трудно проследить на примере одноосного кристалла, используя результаты предыдущего раздела, в формулах которого надо опустить индекс *j*, нумерующий однородные слои. Особый интерес представляет выяснение вопроса, каким образом трансформируются две плоские волны, распространяющиеся в анизотропной подложке, в процессе предельного перехода к изотропной подложке. В связи с этим рассмотрим сначала переход к предельной ситуации для одноосного кристалла, определяемой условиями (90). Из выражений (84) для $\gamma_x^{(2)}$ и $\gamma_x^{(3)}$ следует, что в этом случае величина $\gamma_x^{(3)}$ имеет особенность типа $\frac{1}{0}$, определяемую общим угловым множителем, а $\gamma_x^{(2)}$ особенностей не имеет (в предельной ситуации обращается в нуль). Столбец F₃, входящий в определители из (111), заменим на столбец

$$\mathbf{F}_{03} = \alpha_0 \mathbf{F}_3, \qquad \alpha_0 = -\frac{\kappa_0 \sqrt{\varepsilon_o}}{k_{0x}} \cos \chi \sin \theta \,. \qquad (112)$$

При этом измениться могут только коэффициенты пропускания T_{3p} и T_{3s} . Чтобы этого не произошло, умножим соответствующие выражения из (111) на коэффициент α_0 , указанный в (112), т. е. представим T_{3p} и T_{3s} формулами

$$T_{3p} = \alpha_0 T_{03p}, \qquad T_{3s} = \alpha_0 T_{03s}, \qquad (113)$$

в которых T_{03p} и T_{03s} определяются выражениями (111) с указанной заменой столбца **F**₃. При переходе к предельной ситуации (90), определяемом условиями (93), в которых знак \neq надо заменить на знак \rightarrow предельного перехода, т. е. при $\theta \rightarrow 0$, имеем

$$\gamma_{x}^{(2)} \to 0, \quad \alpha_{0} \to 0, \quad \alpha_{0}\gamma_{x}^{(3)} \to \cos\varphi_{e},$$

$$\mathbf{F}_{03} \to \begin{pmatrix} \cos\varphi_{e} \\ -\sqrt{\varepsilon_{o}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_{2} \to \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \sqrt{\varepsilon_{o}}\cos\varphi_{o} \end{pmatrix}, \quad (114)$$

где φ_o и φ_e — углы преломления в подложку, определяемые диэлектрическими проницаемостями обыкновенной (ε_o) и необыкновенной (ε_e) волн.

Запишем выражения для тангенциальных составляющих общего поля в подложке E_x и E_y , подставив в формулы (104) величины C_2 и C_3 , определенные формулами (110), (111) и (113):

$$E_{x} = (T_{2p}E_{0p}^{(0)} + T_{2s}E_{0s}^{(0)})\gamma_{x}^{(2)}e^{-ik_{2z}z} + + (T_{03p}E_{0p}^{(0)} + T_{03s}E_{0s}^{(0)})\alpha_{0}\gamma_{x}^{(3)}e^{-ik_{3z}z}, E_{y} = (T_{2p}E_{0p}^{(0)} + T_{2s}E_{0s}^{(0)})e^{-ik_{2z}z} + + \alpha_{0}(T_{03p}E_{0p}^{(0)} + T_{03s}E_{0s}^{(0)})e^{-ik_{3z}z}.$$
(115)

Учитывая (114), преобразуем выражения (115), положив z = 0:

$$E_{x} = \cos\varphi_{e}(T_{03p}E_{0p}^{(0)} + T_{03s}E_{0s}^{(0)}),$$

$$E_{y} = T_{2p}E_{0p}^{(0)} + T_{2s}E_{0s}^{(0)}.$$
(116)

Переходя затем к случаю изотропной подложки

$$\varepsilon_o = \varepsilon_e = \varepsilon, \qquad \varphi_o = \varphi_e = \varphi, \qquad k_{2z} = k_{3z} = k_z,$$

где φ — угол преломления на верхней границе изотропной подложки, находим

$$E_{0p} = \frac{E_x}{\cos\varphi} = T_{pp} E_{0p}^{(0)} + T_{ps} E_{0s}^{(0)},$$

$$E_{0s} = E_y = T_{sp} E_{0p}^{(0)} + T_{ss} E_{0s}^{(0)},$$

$$T_{pp} = T_{03p}, \qquad T_{ps} = T_{03s},$$

$$T_{sp} = T_{2p}, \qquad T_{ss} = T_{2s}.$$
(117)

Полученные результаты означают, что в предельном случае из двух тангенциальных составляющих общего поля подложки E_x определяется только волной с вектором \mathbf{k}_3 , а E_y — волной с вектором \mathbf{k}_2 . Отсюда следует, что при переходе к изотропной подложке волна с волновым вектором \mathbf{k}_3 переходит в *p*-волну, а волна с \mathbf{k}_2 — в *s*-волну. Таким образом, представление тангенциальных составляющих общего поля подложки через частные решения $e_x^{(2)}$, $e_x^{(3)}$ и $e_y^{(2)}$, $e_y^{(3)}$ позволяет хорошо понять характер предельного перехода к случаю изотропной подложки.

Полученные в данном разделе результаты с учетом результатов предыдущего раздела позволяют обоснованно подходить к построению основных уравнений эллипсометрии анизотропных сред.

5. ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ АНИЗОТРОПНЫХ СРЕД

Эллипсометрия анизотропных сред позволяет исследовать системы с любым типом анизотропии. Имеется в виду прежде всего произвольный характер ориентации системы главных осей тензора диэлектрической проницаемости ε_{ik} . Именно в

этом случае отличны от нуля недиагональные коэффициенты отражения R_{ps} и R_{sp} , а следовательно, и недиагональные поляризационные углы. Используя систему из трех комплексных основных уравнений и экспериментальные значения поляризационных углов, найденные по положениям гашения в обобщенной измерительной зоне, можно определять оптические постоянные, ориентацию главных осей и толщины однородных слоев анизотропных отражающих систем (для одного угла падения света на образец — максимум шесть параметров). Но далеко не всегда полностью отсутствует какая-либо информация об ориентации системы главных осей. Можно использовать произвольную, но известную из других источников ориентацию главных осей однородного анизотропного кристалла. Тогда неизвестными параметрами будут только оптические постоянные этого кристалла, в нахождении которых недиагональные поляризационные углы сыграют большую роль, нежели диагональные.

Обратная задача эллипсометрии для анизотропных сред обладает рядом особенностей, связанных с предельными ситуациями. В окрестностях предельных ситуаций особенности устраняются в явной форме для одноосных кристаллов, для двухосных кристаллов определенность существует только для самих предельных ситуаций. В математической программе, предназначенной для решения обратной задачи, окрестности предельных ситуаций должны быть строго установлены. В рамках этих окрестностей необходимо использовать выражения для матричных элементов с устраненными особенностями, в частности для общего случая двухосных кристаллов — выражения, отвечающие предельным ситуациям, в том числе и "изотропному" случаю. Вне окрестностей предельных ситуаций можно использовать приведенные в настоящей работе общие выражения для матричных элементов (см. также [2, 4]). Подробнее об этом пойдет речь в работах, посвященных исследованию конкретных анизотропных систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Семененко А.И. // Научное приборостроение. 2005. Т. 15, № 2. С. 88–94.
- 2. Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семененко А.И. и др. Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979. 422 с.
- 3. Семененко А.И., Миронов Ф.С. // Физика твердого тела. 1976. Т. 18, № 11. С. 3511–3514.
- 4. Семененко А.И., Миронов Ф.С. // Оптика и спектроскопия. 1976. Т. 41, № 3. С. 456–462.
- 5. Бохонько А.И., Семененко А.И. // Оптика и спектроскопия. 1987. Т. 63, № 2. С. 351–355.
- 6. Семененко А.И. // Оптика и спектроскопия.

1978. T. 45, № 2. C. 387–388.

- 7. *Семененко А.И.* // Укр. физ. журн. 1992. Т. 37, № 4. С. 541–547.
- 8. *Семененко А.И.* // Укр. физ. журн. 1993. Т. 38, № 5. С. 675–682.
- Abeles F. // Ann. de Physique. 1950. V. 5. P. 596– 640, 706–782.

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

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

Материал поступил в редакцию 28.03.2007.

ON THE NEW POTENTIALS OF ELLIPSOMETRY ARISING FROM THE NULL OPTICAL CIRCUIT. ELLIPSOMETRY OF REAL SURFACE STRUCTURES. 8. ELLIPSOMETRY OF ANISOTROPIC MEDIUMS. METHOD OF GENERALIZED MEASUREMENT ZONES

A. I. Semenenko, I. A. Semenenko^{*}

Institute of Applied Physics NAS, Ukraine, Sumy *Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The goal of this paper is to describe step by step the method of "zero" ellipsometry of anisotropic mediums. Peculiarities and methods for their elimination within the scope of the instrument generalized measurement zones technique are considered. The paper presents general provisions of the matrix method in the field of anisotropic lamellar medium optics; the case of a monoaxial crystal with an arbitrary orientation of the optical axis is considered in details; ultimate situations with different optical axis orientations are analyzed. Using the matrix method and a new, more natural, representation of the common field in the substrate, complex amplitude reflection factors were reconsidered; those factors are used to derive basic equations of anisotropic medium ellipsometry; the behavior of two plane waves in an anisotropic substrate in the process of turning to the "isotropic" case are analyzed. In addition, analysis of the inverse ellipsometry problem peculiar features for anisotropic mediums has been performed.