

В.А. Швец, Е.В. Спесивцев

Эллипсометрия

Учебно-методическое пособие
к лабораторным работам

Новосибирск

2013

Введение	4
Глава 1.	6
1.1. Плоская электромагнитная волна, её распространение в среде.	6
1.2. Отражение плоской электромагнитной волны от исследуемой поверхности. Основные определения.....	8
1.3. Основное уравнение эллипсометрии. Прямая и обратная задачи.	9
1.4. Однородная полубесконечная среда.	11
1.5. Однослойная модель.	13
1.6. Многослойная модель и оптически неоднородный слой.	15
1.7. Композиционные среды.....	17
1.8. Учет рельефа поверхности и размытия межфазных границ.....	19
Глава 2. Методы решения обратной задачи эллипсометрии	22
2.1. Графо-аналитический метод решения обратной задачи.	22
2.2. Численное решение обратной задачи.....	24
Рисунок 9	26
Рисунок 10	27
2.3. Определение большого числа неизвестных параметров и их корреляция.....	29
2.4. Спектральная эллипсометрия.....	32
2.5. Многотолщинные измерения	35
2.6. Решение обратной задачи для неоднородных слоев.	37

ГЛАВА 3. Методы измерения эллипсометрических параметров. Оптические схемы эллипсометров.	41
3.1 Оптические элементы эллипсометров.....	41
3.1.1. Поляризаторы	41
3.1.2. Фазосдвигающие устройства.	43
ГЛАВА 4. Описание Эллипсометрических установок и методические указания по выполнению лабораторных работ. ..	62
4.1. Спектральная эллипсометрическая установка	62
4.2. Сканирующий эллипсометр высокого пространственного разрешения.....	67
4.3. Методические указания по выполнению лабораторных работ	72
Лабораторная работа №1	72
Лабораторная работа №2	81

Введение

Под термином “эллипсометрия” понимают оптический метод исследования поверхностей или объемных сред, который основан на анализе амплитудных и фазовых изменений световой волны при ее взаимодействии с исследуемым объектом. В более широком аспекте об эллипсометрии говорят как о разделе оптики, в котором рассматривается взаимодействие поляризованного света с отражающей поверхностью или слоистыми структурами. В некоторых случаях анализируют поляризационные свойства волны, прошедшей через среду. Тогда говорят об эллипсометрии пропускания. Однако чаще приходится иметь дело с волной, отраженной от поверхности образца; в этом случае говорят об отражательной эллипсометрии. Спектральный диапазон, в котором используются идеи и принципы метода эллипсометрии очень широк и перекрывает область от микроволнового излучения (радиоволновая эллипсометрия) до мягкого рентгеновского (эллипсометрия синхротронного излучения). Однако, наиболее часто эллипсометрические исследования проводятся в спектральном диапазоне 220-1000 нм, что соответствует энергии фотона 1.2 - 6 эВ, (ближний инфракрасный, видимый и ближний ультрафиолетовый диапазоны).

Основоположителем эллипсометрического метода является немецкий исследователь Пауль Друде (Paul Drude), который в конце 19-го века впервые применил принципы эллипсометрии при изучении оптических констант металлов и сверхтонких плёнок. Долгое время после этого метод оставался невостребованным. Второе рождение он получил в середине 20-го века. Этому способствовал ряд обстоятельств: потребности бурно развивающейся в то время микроэлектроники, появление источников монохроматического излучения – лазеров, а также прогресс в развитии вычислительной техники. Всё это вместе взятое привело к тому, что метод эллипсометрии получил мощный импульс развития и в настоящее время занимает одно из лидирующих мест в ряду других аналитических методов.

На сегодняшний день эллипсометрические исследования находят широкое применение в различных областях научных знаний: в микро- и наноэлектронике,

физике полупроводников и физике твёрдого тела, в оптике, электрохимии, химии полимеров, биологии, медицине и в других. Широкое применение эллипсометрия находит также в наукоёмких технологиях в качестве экспрессного и неразрушающего метода их контроля. Возможности эллипсометрии и возрастающий интерес к ней подкрепляются с одной стороны развитием аппаратной базы, постоянным совершенствованием экспериментальных приёмов, с другой – развитием методического и программного обеспечения, созданием новых, более эффективных алгоритмов решения обратных задач и интерпретации результатов измерений.

Предлагаемое пособие ставит целью дать первое сжатое представление об эллипсометрии, не загружая изложение излишними математическими подробностями и деталями. Для более детального знакомства с методом можно рекомендовать ряд прекрасных монографий [1-5], где читатель может найти развёрнутые ответы на вопросы, возникающие после первого знакомства с эллипсометрией.

Глава 1.

Отражение света, прямая и обратная задачи эллипсометрии.

Моделирование исследуемых структур.

1.1. Плоская электромагнитная волна, её распространение в среде.

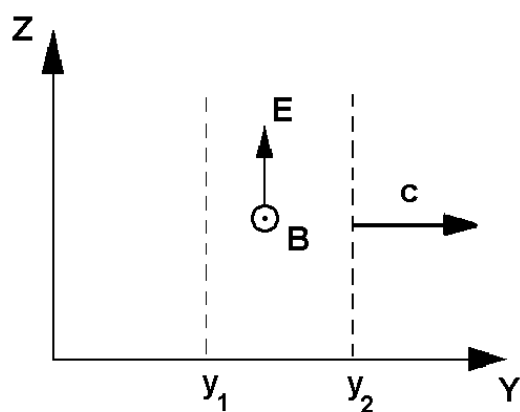


Рисунок 1

Напомним некоторые сведения из курса физической оптики. Пусть в момент времени $t=0$ в области пространства, ограниченной плоскостями $y=y_1$ и $y=y_2$ существует электрическое поле $E_z(y,0)$, вектор напряженности которого направлен по оси Z и магнитное поле, направленное по оси X с вектором магнитной индукции равным $B_x(y,0) = \frac{E_z(y,0)}{c}$, где c -

скорость света. В плоскости XZ поля однородны. Согласно уравнениям Максвелла, такая конфигурация полей будет перемещаться в пространстве вдоль оси Y со скоростью света c , так что в произвольный момент времени решение будет даваться соотношением $E_z(y,t) = E_z(y - c/t, 0)$ и $B_x(y,t) = B_x(y - c/t, 0)$. Такое решение называется плоской электромагнитной волной. Частный случай плоской волны - синусоидальная волна, когда $E(y)$ меняется по гармоническому закону.

В плоской электромагнитной волне напряженность электрического поля и магнитная индукция зависят от одной координаты вдоль направления распространения волны. Поскольку поля E и B однозначно связаны друг с другом соотношением $B=E/c$, то для описания волны достаточно задать только напряженность E . Рассмотрим плоскую синусоидальную волну, которая

распространяется вдоль оси Y . Запишем напряженность электрического поля с помощью комплексной экспоненты как функцию координаты y и времени t :

$$E(y) = E_0 \exp[i(\omega t - ky)]. \quad (1)$$

Здесь ω - круговая частота, k - волновой вектор, которые связаны с периодом и длиной волны простыми соотношениями: $T = \frac{2\pi}{\omega}$, $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Величина E_0 называется

амплитудой колебаний электрического поля (амплитудой волны). Волновой вектор и частота связаны дисперсионным соотношением $k = \frac{\omega}{c}$. Если волна распространяется

в изотропной однородной среде, то за счет взаимодействия поля со средой возникают два эффекта. Во-первых, изменяется фазовая скорость волны или, что то же самое, изменяется длина волны. Во-вторых, происходит уменьшение амплитуды волны вдоль направления распространения, связанное с поглощением. Формально это можно учесть, если записать волновой вектор в виде $k = \frac{(n - i\kappa)\omega}{c}$, где

величины n и κ называются *показателями преломления и поглощения среды* и характеризуют её взаимодействие с волной.* Действительно, если подставить выражение для k в формулу (1), то получим:

$$E(y, t) = E_0 \exp\left(-\frac{\kappa\omega}{c}y\right) \cdot \exp\left[i\left(\omega t - \frac{n\omega}{c}y\right)\right].$$

Мы видим, что амплитуда волны (множитель перед комплексной экспонентой) экспоненциально затухает вдоль направления распространения волны, а пространственная частота $\frac{n\omega}{c}$ в n раз больше, чем в вакууме, что соответствует уменьшению фазовой скорости в n раз. Величину $N=n-i\kappa$ называют *комплексным показателем преломления среды*.

Рассмотренные выше соотношения справедливы для оптически изотропных сред. Для анизотропных сред их оптические свойства зависят от ориентации вектора E относительно оптических осей и распространение света носит более сложный характер. Рассмотрим распространение света в одноосном кристалле. Такие кристаллы характеризуются наличием одной оптической оси. Если электрическое

* Традиционно волновой вектор обозначают латинской буквой k . Показатель поглощения тоже чаще всего обозначают этой же буквой. Чтобы избежать недоразумений, мы будем обозначать показатель поглощения греческой буквой κ (каппа).

поле волны направлено вдоль оптической оси, то показатель преломления среды равен n_e (*необыкновенная волна*), если же вектор поля перпендикулярен оптической оси, то показатель преломления равен n_o (*обыкновенная волна*). Отсюда следует, что волна, распространяющаяся вдоль оптической оси – всегда обыкновенная, а в случае распространения перпендикулярно оптической оси будут существовать две волны – обыкновенная и необыкновенная - со взаимно ортогональными поляризациями. Более подробно распространение света в анизотропных материалах и преобразование поляризации света будет рассмотрено в главе 3.

1.2. Отражение плоской электромагнитной волны от исследуемой поверхности. Основные определения.

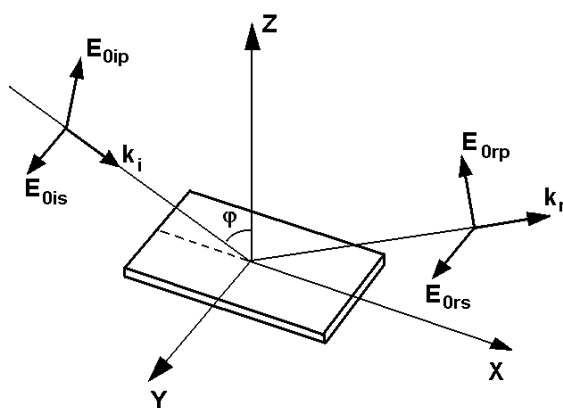


Рисунок 2

Пусть плоская волна падает на поверхность, расположенную в плоскости XY. Выберем оси X и Y так, чтобы ее волновой вектор \mathbf{k}_i лежал в плоскости XZ (рис.2). Тогда электрические векторы падающей и отраженной волн можно записать в виде:

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0i} \cdot \exp(i(\omega t - \mathbf{k}_i \mathbf{r})) \quad \text{и}$$

$\mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0r} \cdot \exp(i(\omega t - \mathbf{k}_r \mathbf{r}))$, здесь \mathbf{k}_i , \mathbf{k}_r - волновые векторы, \mathbf{E}_{0i} , \mathbf{E}_{0r} - комплексные амплитуды падающей и отраженной волн, а ω - частота волны. Амплитуды получаются комплексными потому, что в общем случае в показателях экспонент для каждой волны следовало бы приписать еще фазовые добавки. Однако удобнее отнести эти фазовые добавки к амплитудному множителю.

Плоскость, проведенная через векторы \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_r называется *плоскостью падения* света (в нашем случае она совпадает с плоскостью XZ). Для дальнейшего удобно разложить векторы амплитуд электрического поля на составляющие, лежащие в плоскости падения и перпендикулярно к ней (p и s компоненты): $\mathbf{E}_{0i} = \mathbf{e}_p E_{0ip} + \mathbf{e}_s E_{0is}$, $\mathbf{E}_{0r} = \mathbf{e}'_p E_{0rp} + \mathbf{e}_s E_{0rs}$, где \mathbf{e}_p , \mathbf{e}'_p и \mathbf{e}_s - единичные

векторы вдоль соответствующих направлений. Комплексными коэффициентами отражения называются отношения амплитуд отраженной и падающей волн: $R_p = E_{0rp}/E_{0ip}$, $R_s = E_{0rs}/E_{0is}$. Модуль комплексного коэффициента отражения показывает во сколько раз изменилась амплитуда волны после отражения, а фаза характеризует фазовый сдвиг между падающей и отраженной волнами. Значения коэффициентов отражения определяются свойствами отражающей поверхности, то есть распределением оптических постоянных в приповерхностных слоях, геометрией поверхности (рельефом), а также внешними по отношению к поверхности параметрами: углом между нормалью к поверхности и вектором k_i , (углом падения света φ), показателем преломления внешней среды n_a , длиной волны λ , которые всегда считаются известными величинами. Поскольку значения коэффициентов отражения содержат в неявном виде информацию о структуре отражающей поверхности, то полезно было бы измерить их амплитуды и фазы. Однако экспериментально при эллипсометрических измерениях определяются не сами коэффициенты отражения, а их отношение. В силу исторических причин это отношение представляют в виде:

$$\rho = \operatorname{tg} \psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s} \quad (2)$$

Параметры ψ и Δ называются *эллипсометрическими параметрами* (или *эллипсометрическими углами*, реже – *поляризационными параметрами*) и являются измеряемыми в эксперименте величинами. Иногда для удобства записанную выше комбинацию эллипсометрических параметров обозначают символом ρ и называют *комплексным эллипсометрическим параметром*. Физический смысл эллипсометрических параметров простой: $\operatorname{tg} \psi$ показывает отношение амплитуд коэффициентов отражения для p- и s- волн, а параметр Δ равен разности между фазовыми скачками этих волн при отражении.

1.3. Основное уравнение эллипсометрии. Прямая и обратная задачи.

Обратимся к уравнению (2). В левой его части стоят измеряемые величины, в правой - отношение комплексных коэффициентов отражения. Для конкретного исследуемого объекта комплексные коэффициенты отражения можно рассчитать, если задать оптическую модель отражающей структуры. Пусть p_1, p_2, \dots, p_N - параметры этой модели. Это могут быть оптические постоянные, толщины слоев структуры или какие-либо другие величины. Тогда уравнение (2) можно переписать в символическом виде:

$$\operatorname{tg}\Psi \cdot e^{i\Delta} = F(p_1, p_2, \dots, p_N, \varphi, \lambda, n_a) \quad (3)$$

Параметры p_i называют внутренними параметрами оптической модели, а угол падения, длину волны и показатель преломления внешней среды - внешними параметрами. Для заданной структуры с известными внутренними и внешними параметрами мы всегда можем представить аналитически и рассчитать численно соответствующие ей эллипсометрические углы Ψ и Δ . Такую задачу называют *прямой задачей эллипсометрии*. Уравнение (3) - комплексное алгебраическое уравнение и оно позволяет определить любые два неизвестных из числа параметров p_{i1} и p_{i2} . Такая задача – определение параметров модели по измеренным значениям Ψ и Δ называется *обратной задачей эллипсометрии*. В отличие от прямой, обратная задача лишь в исключительных случаях имеет аналитическое решение, поэтому чаще всего для отыскания неизвестных параметров прибегают к численным методам, либо используют другие приемы.

Проблемы, которые возникают при численном решении обратной задачи эллипсометрии будут рассмотрены в главе 2. Здесь же отметим лишь, что структура основного уравнения эллипсометрии такова, что решение обратной задачи практически всегда неоднозначно. То есть, имеется несколько решений, удовлетворяющих уравнению (3). Часть из них удаётся отбросить, если они не подходят по физическому смыслу. Например, если определяется показатель поглощения какого-либо слоя (или его толщина) и решением является значение $k < 0$ (или $d < 0$), то можно подозревать, что это нефизические, ложные корни. Однако полной уверенности в этом нет. Действительно, если истинным значением показателя поглощения является значение $k = 0$, то за счет экспериментальных погрешностей можно получить при численных расчетах значение $k < 0$. Другое дело, если найденное решение далеко отстоит от физической области параметров. Например, $n > 100$ почти наверняка указывает

на то, что найденный корень является ложным*. Рассмотрим простейшие модели отражающих систем.

1.4. Однородная полубесконечная среда.

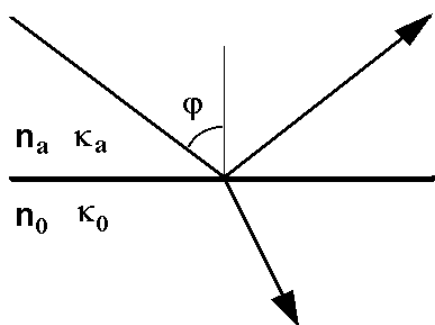


Рисунок 3

Свет отражается от идеально гладкой границы раздела двух сред, которые обозначим индексами **a** (ambient - внешняя среда) и **0** (подложка), как показано на рис.3. Показатели преломления и поглощения исследуемой среды обозначим через n_0 и κ_0 . Здесь и далее (кроме

специально оговоренных случаев) будем считать все среды оптически изотропными и немагнитными ($\mu=1$). Часто образцом служит пластина некоторой толщины. Моделирование такого образца полубесконечной средой возможно, если волна, отраженная от нижней границы пластины не попадает в измерительный тракт. Такое происходит в том случае, когда толщина пластины много больше глубины проникновения света. Либо поглощение мало, но отраженный от нижней грани луч оказывается смещенным на достаточно большое расстояние и не попадает в измерительный тракт. В том и в другом случае анализируется свет, отраженный от единственной границы раздела «внешняя среда – исследуемая среда». При эллипсометрических измерениях внешней средой является, как правило, воздух с показателем преломления $n_a=1$, однако мы выпишем соответствующие коэффициенты отражения (их называют

* Развитие технологий привело к появлению новых метаматериалов с совершенно необычными оптическими свойствами. Поэтому утверждение относительно нефизичности таких значений n следует делать осторожно.

коэффициентами Френеля*) для случая произвольных показателей преломления и поглощения внешней среды n_a и κ_a . Обозначив через N_a и N_0 комплексные показатели преломления соответствующих сред, можем написать для коэффициентов Френеля следующие выражения:

$$r_p = \frac{N_0^2 \cos \varphi - N_a \sqrt{N_0^2 - N_a^2 \sin^2 \varphi}}{N_0^2 \cos \varphi + N_a \sqrt{N_0^2 - N_a^2 \sin^2 \varphi}} \quad (4a)$$

$$r_s = \frac{N_a \cos \varphi - \sqrt{N_0^2 - N_a^2 \sin^2 \varphi}}{N_a \cos \varphi + \sqrt{N_0^2 - N_a^2 \sin^2 \varphi}} \quad (46)$$

Тогда для эллипсометрических параметров получаем:

$$\rho \equiv \operatorname{tg} \Psi \cdot e^{i\Delta} = \frac{N_a \sin^2 \varphi - \cos \varphi \sqrt{N_0^2 - N_a^2 \sin^2 \varphi}}{N_a \sin^2 \varphi + \cos \varphi \sqrt{N_0^2 - N_a^2 \sin^2 \varphi}} \quad (5)$$

Уравнение (5) дает решение прямой задачи для рассматриваемой модели.

Оно легко разрешается относительно N_0 , в результате получаем:

$$N_0 = N_a \sin \varphi \sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi \left(\frac{1 - \rho}{1 + \rho} \right)^2} \quad (6)$$

Итак, если для однородной полубесконечной среды измерены эллипсометрические параметры, то по формуле (6) легко можно рассчитать ее оптические постоянные. Это один из немногих случаев в эллипсометрии, когда обратная задача имеет аналитическое решение.

Однако в большинстве случаев рассмотренная выше модель является довольно грубым приближением. Мы предполагали наличие резкой границы раздела, что практически недостижимо. Во-первых, любая технология подготовки поверхности (для измерений требуется зеркально гладкая поверхность) приводит к образованию нарушенной приповерхностной области, размеры которой могут составлять от нескольких Ангстрем до

* Обычно коэффициентами Френеля называют комплексные коэффициенты отражения для границы раздела двух однородных сред и обозначают прописной буквой r . В отличие от этого, коэффициенты отражения от произвольной поверхности обозначают заглавной R . Иногда их называют еще обобщенными коэффициентами Френеля.

микрон. Во-вторых, большинство материалов при контакте с воздухом образуют тонкий слой оксида на поверхности. Наконец, если бы даже удалось устранить эти проблемы, нам все равно не удалось бы получить оптически резкой границы раздела из-за дискретности строения вещества. Атомы, находящиеся на поверхности, имеют другое окружение и, как следствие, имеют другие физико-химические (в том числе и оптические) свойства. Учитывая высокую чувствительность эллипсометрических измерений к состоянию поверхности, отмеченные выше причины могут самым катастрофическим образом сказаться на результатах измерения оптических постоянных, если пользоваться моделью полубесконечной среды.

1.5. Однослойная модель.

Устранить вышеописанную трудность можно, вводя в рассмотрение однородный поверхностный слой. Модель «однородная подложка – однородный слой» наиболее часто используется при эллипсометрических исследованиях. Во-первых, она служит достаточно хорошим приближением для многих исследуемых структур. Причем рассматриваемый слой может быть как целенаправленно сформирован, так и возникать в результате побочного

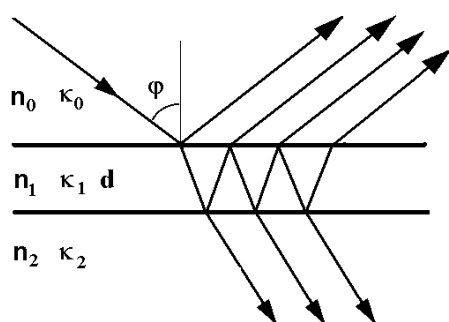


Рисунок 4

действия каких-либо технологических операций или процессов. Во-вторых, эта модель проста и позволяет легко и наглядно интерпретировать полученные результаты.

На рис.4 показан схематически ход лучей при взаимодействии света с однослойной структурой. Индексы 0, 1 и 2 соответствуют внешней среде, слою и подложке.

Переобозначим для единообразия $n_a=n_0$, $\kappa_a=\kappa_0$. Пусть внешней средой является воздух ($n_0=1$ и $\kappa_0=0$). Падающая волна расщепляется на каждой границе раздела на две: отраженную и прошедшую и в результате образуется

бесконечный ряд парциальных волн, амплитуды которых E_i уменьшаются по геометрической прогрессии. Кроме того, каждая из волн сдвинута по фазе относительно предыдущей на одну и ту же величину, которую обозначим 2δ . В результате можно записать $E_{i+1} = r_{12}r_{10}E_1e^{-2i\delta}$, где r_{12} , r_{10} – коэффициенты отражения Френеля для границ раздела соответствующих сред. Если n_1 – показатель преломления слоя, то из геометрических построений несложно получить, что

$$\delta = 2\pi \frac{d}{\lambda} \sqrt{n_1^2 - \sin^2 \varphi}. \quad (7)$$

Величина δ называется *фазовой толщиной слоя*. Если слой поглощающий, то вместо вещественного показателя преломления n_1 в подкоренное выражение нужно подставить комплексный показатель N_1 . При этом фазовая толщина тоже становится комплексной. Последнее означает, что уменьшение амплитуды парциальных волн обусловлено не только потерями при отражении, но и частичным поглощением в слое.

Отраженная и прошедшая волны возникают как результат интерференции парциальных волн. Геометрическое смещение лучей вдоль границы раздела здесь не играет роли, так как мы рассматриваем бесконечную плоскую волну (то есть в данном приближении толщина слоя много меньше апертуры луча). Проводя суммирование членов геометрической прогрессии, получим для коэффициентов отражения такой системы следующее выражение:

$$R_{p,s} = \frac{r_{01p,s} + r_{12p,s}X}{1 + r_{01p,s}r_{12p,s}X} \quad (8)$$

Здесь $X = \exp(-2i\delta)$, $r_{ijp,s}$ – коэффициенты Френеля соответствующих границ раздела для р- и s- поляризаций света, причем угол падения для $r_{10p,s}$ выбирается из соотношения Снелла: $\varphi_1 = \sqrt{1 - \sin^2 \varphi / N_1^2}$. Подставляя найденные выражения для $R_{p,s}$ в (2) получим основное уравнение эллипсометрии для однослойной модели*. В отличие от случая полубесконечной среды для однослойной модели не удастся аналитически разрешить основное уравнение относительно N_1 или N_0 . Однако, при заданных значениях оптических

* В английской литературе чаще используется сочетание “three-phase model”.

постоянных всех сред получается квадратное уравнение для X , решая которое можно аналитически выразить толщину слоя по измеренным эллипсометрическим параметрам.

Для очень тонких слоев можно воспользоваться малостью фазовой толщины и разложить выражение (8) по малому параметру. Тогда получим в линейном по δ приближении:

$$\operatorname{tg} \psi e^{i\Delta} = \operatorname{tg} \psi_0 e^{i\Delta_0} \left(1 - \frac{4\pi i d}{\lambda} \frac{N_0^2 (N_0^2 - N_1^2)(N_1^2 - 1)}{N_1^2 (N_0^2 - 1)} \frac{\cos \varphi \sin^2 \varphi}{N_0^2 \cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi} \right), \quad (9)$$

где параметры Ψ_0, Δ_0 соответствуют отражению от подложки и рассчитываются по приведенной выше формуле (5). Выражение (9) называется приближением Друде. Следует отметить, что его применение в эллипсометрии весьма ограничено, несмотря на то, что толщины исследуемых пленок зачастую много меньше длины волны света. На самом деле, малой величиной должно быть не отношение d/λ , а фазовая толщина $\delta \approx 2\pi N_1 d/\lambda$. Для полупроводниковых материалов $N_1 \sim 4$ и для видимого диапазона ($\lambda \sim 500$ нм) получаем $\delta \approx d/20$, если брать d в нанометрах. Эта оценка показывает, что приближение Друде работает только для очень тонких слоев, толщины которых не превышают нескольких нанометров.

1.6. Многослойная модель и оптически неоднородный слой.

Если для адекватного описания структуры требуется два или более слоев, то основное уравнение, представленное в аналитическом виде, становится громоздким и малоприменимым для практического использования. В этом случае удобнее пользоваться рекуррентными соотношениями. Рассмотрим многослойную структуру: «подложка – M однородных слоев». Комплексный показатель j -го слоя и его толщину обозначим через N_j и d_j (счет идет от

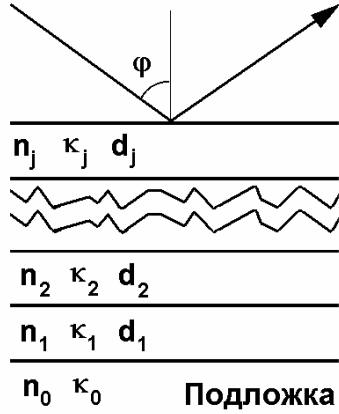


Рисунок 5

подложки), остальные обозначения остаются прежними. Рассмотрим, как будут меняться коэффициенты отражения R_j (индексы r и s мы здесь опускаем) при последовательном добавлении слоев рассматриваемой системы. Наша задача заключается в том, чтобы выразить R_{j+1} через R_j и параметры $j+1$ -го слоя. Выражение для R_1 мы уже знаем, это - формула (8). Однако нам надо преобразовать это выражение к такому виду, чтобы вместо коэффициентов Френеля r_{a1} в правой части (8) фигурировали коэффициенты отражения от границы раздела «внешняя среда – подложка», то есть r_{a0} . Воспользуемся следующим свойством коэффициентов Френеля [6]:

$$r_{i0} = \frac{r_{a0} - r_{a1}}{1 - r_{a1}r_{a0}} \quad (10)$$

Доказательство этого утверждения предоставим читателю, для этого достаточно подставить в (10) выражениями для коэффициентов Френеля (4). Смысл предпринимаемого нами преобразования заключается в том, чтобы привести все коэффициенты Френеля по отношению к одной и той же внешней среде с индексом a . Подставив выражение для коэффициентов Френеля в виде (10) в уравнение (8) получим:

$$R_1 = \frac{r_{a1}(1 - r_{a1}r_{a0}) + (r_{a0} - r_{a1})X_1}{1 - r_{a1}r_{a0} + r_{a1}(r_{a0} - r_{a1}X_1)} \quad (11)$$

В таком виде это уравнение уже является по существу рекуррентным, так как в рамках принятых обозначений $r_{a0}=R_0$. Обобщая формулу (11) и убирая общий для всех коэффициентов индекс внешней среды, можно записать для произвольного количества слоев:

$$R_{j+1} = \frac{r_{j+1}(1 - r_{j+1}R_j) + (R_j - r_{j+1})X_{j+1}}{1 - r_{j+1}R_j + r_{j+1}(R_j - r_{j+1}X_{j+1})} \quad (12)$$

Здесь $X_{j+1} = \exp(-2i\delta_{j+1})$ – экспоненциальная функция фазовой толщины $j+1$ -го слоя, r_j – соответствующие коэффициенты Френеля. Выражение (12) позволяет

легко рассчитать коэффициенты отражения, а значит и эллипсометрические параметры, для любого количества слоев, если известны их оптические постоянные и толщины. Отметим еще одно удобство представленных формул. Все коэффициенты Френеля, фигурирующие в (12) относятся к одной и той же внешней среде и выражаются через заданный угол падения света φ .

Полученные выражения можно применить для расчета эллипсометрических параметров оптически неоднородного слоя. Такие слои возникают при облучении поверхности полупроводника ионами высоких энергий, при механической или химической обработке оптических поверхностей, при выращивании слоя с неоднородными свойствами и в ряде других случаев. Оптические постоянные такого слоя будем описывать функцией $N(z)$, где z – координата в направлении нормали к поверхности. Проведем достаточно мелкое разбиение неоднородного слоя на M участков в пределах которых функцию $N(z)$ можно считать постоянной. Тогда поставленная задача сводится к расчету эллипсометрических параметров M -слойной системы с заданными параметрами слоев, которая решается путем последовательного применения рекуррентного соотношения (12). Что касается числа слоев разбиения, то для каждого профиля $N(z)$ этот вопрос решается индивидуально. Следует, однако предостеречь от чрезмерно мелкого разбиения, так как в этом случае дискретность машинного счета и округления могут свести на нет выигрыш от увеличения числа слоев.

В заключение отметим следующее. Хотя представленные здесь соотношения для коэффициентов отражения получены путем полуинтуитивных соображений, они являются точным решением задачи электродинамики и могут быть строго получены из уравнений Максвелла с использованием формализма матрицы рассеяния [2].

1.7. Композиционные среды

Часто бывает, что один или несколько слоев структуры представляют собой смесь различных материалов. Например, при ионной имплантации в облученном полупроводнике образуются кластеры имплантанта (или продукта

реакции с его участием). В результате получается оптически неоднородная среда, состоящая из областей основного материала и внедренных в нее кластеров, обладающих другими оптическими свойствами. Могут возникать и более сложные композиции, состоящие из трех и более компонентов.

Если характерные геометрические размеры неоднородностей (средний размер кластера и среднее расстояние между ними) много меньше длины волны, то рассеянием Релея можно пренебречь, и для распространяющейся световой волны такая гетерогенная среда эквивалентна однородной с некоторым эффективным комплексным показателем преломления $N_{эф}$. Такая замена приводит к модели эффективной среды (в английской литературе *effective medium approximation* - *EMA*). Для того, чтобы рассчитать $N_{эф}$, необходимо знать оптические постоянные N_1 и N_2 каждого из компонентов, составляющих неоднородную среду и их соотношение. Обозначим через q объемную долю компонента 1, при этом $1-q$ – объемная доля компонента 2. Тогда оптические постоянные эффективной среды вычисляются по формуле Бругемана [7]:

$$q \frac{N_1^2 - N_{эф}^2}{N_1^2 + 2N_{эф}^2} + (1-q) \frac{N_2^2 - N_{эф}^2}{N_2^2 + 2N_{эф}^2} = 0 \quad (13)$$

Эта формула выражает тот факт, что дипольный момент единицы объема для смеси получается сложением соответствующих величин для каждого из компонентов. Формулу Бругемана можно обобщить и на случай m компонент. Обозначив через q_i долю объема, занимаемого i -м компонентом так, что выполняется $\sum q_i = 1$, получим для оптических постоянных эффективной среды следующее уравнение:

$$\sum_{i=1}^m q_i \frac{N_i^2 - N_{эф}^2}{N_i^2 + 2N_{эф}^2} = 0 \quad (14)$$

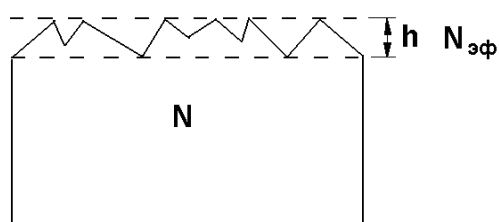
Отметим, что задание N_i и q_i для композиционной среды, строго говоря, еще не определяет ее оптические свойства. Значительную роль может играть их взаимное расположение в смеси. В этом легко убедиться, рассмотрев следующий классический пример из электродинамики. Пусть среды 1 и 2 образуют слоистую структуру, составленную из чередующихся слоев обеих компонент. Если электрическое поле приложено вдоль границ раздела, то оно

остается однородным и диэлектрическая постоянная находится усреднением: $\varepsilon_{эф} = q_1\varepsilon_1 + q_2\varepsilon_2$. Если же поле перпендикулярно границам раздела, то на границах появляются наведенные заряды, которые изменяют поля в обеих средах, в результате чего диэлектрическая постоянная вычисляется как $\varepsilon_{эф} = \left(\frac{q_1}{\varepsilon_1} + \frac{q_2}{\varepsilon_2}\right)^{-1}$.

Аналогично рассмотренному примеру, геометрия границ будет влиять и на оптические свойства композиционной среды. Это влияние можно учесть при расчете $N_{эф}$, вводя в рассмотрение так называемый фактор экранирования. Мы, однако, не будем здесь останавливаться на таких деталях. В большинстве случаев микроструктура композиционных смесей обладает сферической симметрией для которой формулы (13) и (14) достаточно хорошо описывают поведение их оптических постоянных.

1.8. Учет рельефа поверхности и размытия межфазных границ

В рассмотренных выше моделях мы предполагали, что слои имеют резкие границы. Ясно, что это приближение выполняется далеко не всегда, и границы раздела сред имеют больший или меньший рельеф. Оказывается, что даже рельеф высотой порядка 1 нм может заметно повлиять на результаты измерений. Причины появления рельефа различны. При оптической полировке поверхности всегда существует остаточный рельеф. При формировании слоев, например путем эпитаксии, рельеф поверхности зависит как от условий роста, так и от кристаллографической ориентации поверхности. Часто на границе раздела двух сред возникают островковые включения одной фазы в другой. Во



всех этих случаях необходимо учитывать влияние неидеальности границы раздела на результаты эллипсометрических измерений.

На сегодняшний день наиболее принятый подход для

Рисунок 6

описания рельефа состоит в использовании модели эффективной среды. Пусть h – характерный размер шероховатости в направлении, перпендикулярном плоскости границы раздела (высота шероховатости). Выделим на границе слой толщиной h , состоящий из двух сред, как это показано на рис.6. По модели эффективной среды можно рассчитать его оптические постоянные. Таким образом, задача отражения поляризованного света от шероховатой границы свелась к задаче отражения света однослойной системой, решение которой дается формулами (2), (8). При этом предполагается, что и высота шероховатости, и ее размеры в плоскости границы раздела должны быть много меньше длины волны, чтобы можно было использовать приближение эффективной среды. Отметим, что таким же образом можно рассчитать отражение света от островковых плёнок (рис.7).

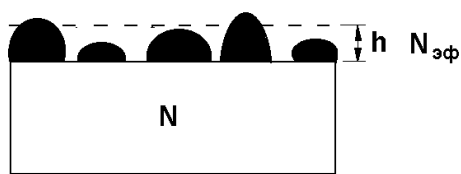


Рисунок 7

Такие плёнки часто образуются на начальных стадиях роста, например, при гетероэпитаксии Ge на кремнии. В этом случае вторым компонентом эффективной среды является, очевидно, воздух (или вакуум) с показателем

преломления $n_a=1$.

Рассмотренный подход достаточно прост и требует минимума исходных данных: кроме оптических постоянных граничащих сред нужно задать высоту шероховатости и их объемное соотношение в выделенном слое. Однако описание шероховатости с помощью эффективного слоя носит весьма приближенный характер и дает лишь качественную картину явления. Основная причина этого – жесткие требования к размерам рельефа. Действительно, длина волны в среде равна 100 – 200 нм, поэтому при латеральных размерах шероховатости больше или порядка 50 нм расчет будет носить качественный характер. Кроме того, здесь никак не учитывается анизотропия рельефа, которая часто возникает на поверхности кристаллических слоев.

Литература к главе 1.

1. Основы эллипсометрии / Под ред. А.В. Ржанова. Новосибирск: Наука, 1979. – 422 с.
2. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981. – 583 с.
3. Громов В.К. Введение в эллипсометрию. Л.: Изд. Ленинградского университета, – 1986. - 191 с.
4. Пшеницын В.И., Абаев М.И., Лызлов Н.Ю. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях. Л.: Химия, 1986. – 162 с.
5. Fujiwara H. Spectroscopic ellipsometry. John Wiley&Songs Ltd. The Atrium, Chichester, West Sussex, England, 2007. – 369 с.
6. Антонов В.А., Дронь О.С., Пшеницын В.И. Эллипсометрия неоднородных поверхностных слоев и пленок // Эллипсометрия – метод исследования поверхности / Под ред. А.В. Ржанова. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1983. - С. 9 - 13.
7. Aspnes D.E. Optical properties of thin films // Thin Sol. Films. - 1982. - V. 89. - P. 249.

Глава 2. Методы решения обратной задачи эллипсометрии

В предыдущей главе уже отмечалось, что решение основного уравнения эллипсометрии в большинстве случаев может быть найдено лишь численно. В настоящее время существует большое количество прикладных математических пакетов, которые позволяют без труда решать подобные уравнения. Имеет смысл, однако подробнее остановиться на всех проблемах, сопутствующих численному решению обратной задачи эллипсометрии.

2.1. Графо-аналитический метод решения обратной задачи.

Графо-аналитический метод возник на заре развития компьютерной техники, когда вычислительные ресурсы были жестко лимитированы. Однако он оказался настолько продуктивным, что применяется и по сей день.

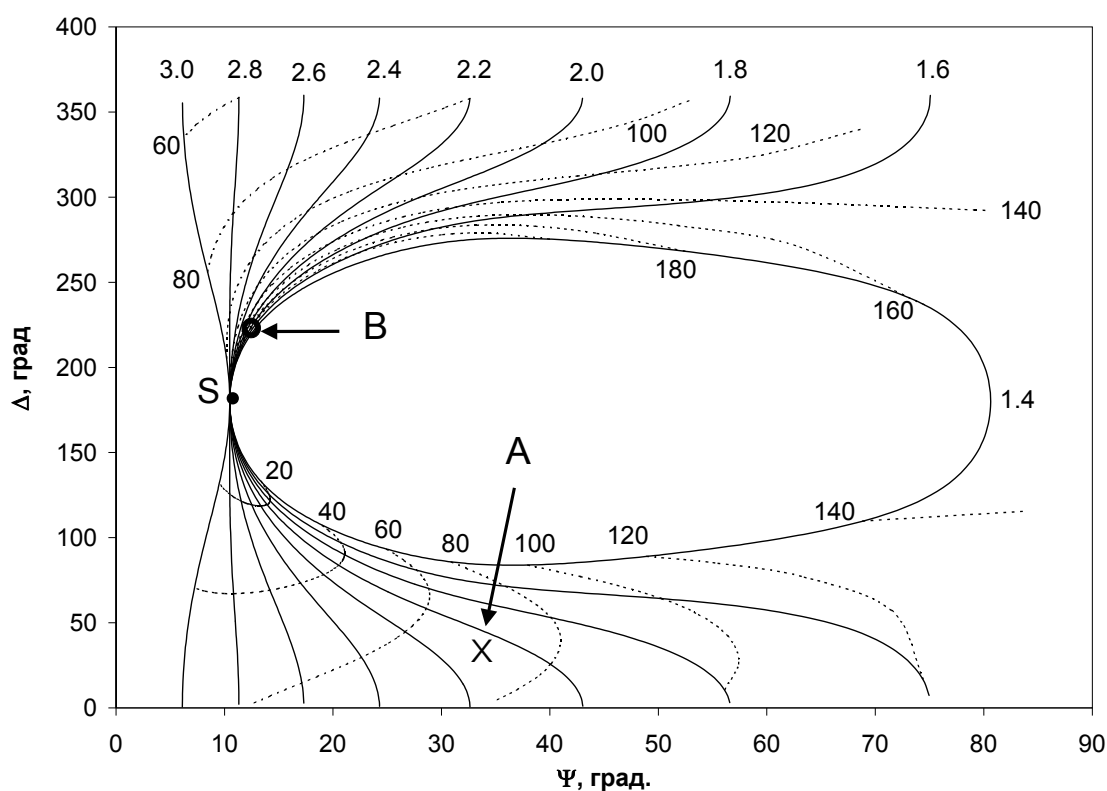


Рисунок 8.

Суть метода в следующем. Пусть p_1 и p_2 – параметры, которые необходимо определить из основного уравнения эллипсометрии (2). Предполагаем, что все остальные параметры, входящие в это уравнение, известны. Тогда мы можем просчитать значения Ψ и Δ для некоторого набора значений p_1 и p_2 в выбранном интервале и построить решения в координатах Ψ - Δ в виде сетки кривых $p_1=\text{const}$ и $p_2=\text{const}$.

На рис.8 показаны такие решения для структуры «кремний - прозрачная пленка», рассчитанные согласно уравнению для однослойной модели. Параметры, подлежащие определению – показатель преломления пленки n_1 и ее толщина d . Сплошные линии соответствуют постоянному значению n_1 , (значения n_1 на рисунке показаны цифрами возле кривых), пунктир – постоянному значению d (цифры соответствуют значению толщины в нанометрах). Обратим внимание, что разрыв линий (сплошных и пунктирных) на границах графика является кажущимся, так как прямые $\Delta=0^\circ$ и $\Delta=360^\circ$ тождественно идентичны. Точка S соответствует подложке Si без пленки, поэтому в ней пересекаются все линии $n_1=\text{const}$. Такая сетка кривых называется номограммой. С её помощью очень просто найти неизвестные n_1 и d исследуемой пленки. Пусть $\Psi_1=33.5^\circ$ и $\Delta_1=30^\circ$ - измеренные значения эллипсометрических параметров образца, которые попадают на номограмму между сплошными линиями $n_{11}=2$ и $n_{12}=2.2$ и пунктирными $d_1=60$ нм и $d_2=80$ нм (эта точка обозначена крестиком на номограмме - точка A). Проводя линейную интерполяцию находим искомые значения: $n_1 \approx 2.08$, $d \approx 70$ нм. Номограмму (или ее фрагмент) всегда можно построить в любом выбранном масштабе, чтобы обеспечить требуемую точность определения искомых параметров.

Графо-аналитический метод обладает рядом полезных качеств. Прежде всего, он нагляден и дает информацию не только о решении, но и о его точности. Пусть точка B соответствует другому измерению (на номограмме она показана кружком). Ясно, что при одной и той же ошибке измерения эллипсометрических параметров погрешности определения n_1 и d для

экспериментов А и В будут совершенно разные. Действительно, точка В лежит в области, где линии номограммы сгущаются, поэтому малейшая ошибка в ψ или Δ дает большую погрешность определения как показателя преломления, так и толщины. Обычные численные методы могут выдать вам решение, но без дополнительного анализа вы никогда не будете знать, каков его доверительный интервал. В графо-аналитическом методе эта информация заложена сразу и представлена в удобном для восприятия виде.

Второй пример связан с неоднозначностью решения, о которой уже говорилось в первой главе. Линии $n_1 = \text{const}$ на рисунке образуют вложенные одна в другую замкнутые кривые. Однако, такая особенность присуща только подложкам с малым или нулевым показателем поглощения как, например, для кремния, где $\kappa_{Si} = 0.023$. Аналогичная номограмма для подложки Ge ($\kappa_{Ge} = 0.9$), будет иметь область, где кривые для разных n_1 пересекаются. Это означает, что одной и той же паре измеренных углов Ψ и Δ будут соответствовать решения с разными значениями n_1 . Ситуация очень неприятная, но в ряде случаев неизбежная. Однако еще более неприятная ситуация возникнет, если вы численным методом получите одно из альтернативных решений и не будете даже догадываться, что оно не единственно (в заданной области параметров). Графо-аналитический метод позволяет избежать и этой неприятности.

2.2. Численное решение обратной задачи.

Гладко было на бумаге,
Да забыли про овраги

Пусть p_1, p_2 – параметры, подлежащие определению из уравнения (2) для некоторых измеренных значений поляризационных углов $\Psi_э, \Delta_э$. Решением будем называть такие значения параметров, при которых уравнение (2) выполняется. Нет, однако, необходимости искать точные (в математическом смысле) решения, да это и невозможно сделать численно. На практике решением можно считать любые значения пары (p_1, p_2) , если соответствующие им расчетные значения Ψ_p, Δ_p отличаются от экспериментальных $\Psi_э, \Delta_э$ на

величины, не превышающие экспериментальные ошибки. Запишем целевую функцию в виде:

$$S(p_1, p_2) = \frac{(\Psi_s - \Psi_p)^2}{\delta\Psi^2} + \frac{(\Delta_s - \Delta_p)^2}{\delta\Delta^2}, \quad (15)$$

где $\delta\Psi$, $\delta\Delta$ - экспериментальные погрешности. Тогда утверждение, что p_1, p_2 - являются решениями равнозначно утверждению, что $S(p_1, p_2) = 0$. На самом деле любую пару искомым параметров можно считать (почти) решением, если соответствующее им значение целевой функции меньше или порядка 1. Таким образом, решение уравнения (2) сводится к нахождению корней уравнения $S(p_1, p_2) = 0$.

Выбор самой целевой функции неоднозначен. Вместо (15) можно было написать

$$S = |\rho_s - \rho_p|^2, \quad (16)$$

где $\rho = \text{tg}\Psi e^{i\Delta}$. В обоих случаях решения уравнения (2) совпадают с корнями целевой функции, однако алгоритм численного решения может сильно отличаться и зависеть от выбора целевой функции. Например, пусть измеренное $\Delta_s = 0.1^\circ$, а расчетное значение $\Delta_p = 359.9^\circ$. Тогда целевая функция, представленная в виде (15) оказывается очень большой, а целевая функция вида (16), как и положено, будет малой. Целевую функцию можно сконструировать и таким образом, чтобы использовать какую-либо априорную информацию. Например, нам известно, что искомая толщина пленки лежит, скорее всего, в интервале от $d_0 - \delta d$ до $d_0 + \delta d$. Тогда добавка к целевой функции слагаемого вида $\alpha \left(\frac{d - d_0}{\delta d}\right)^2$ приведет к тому, что преимущественно будут искаться корни из указанного интервала. Такие добавки называются регуляризирующими.

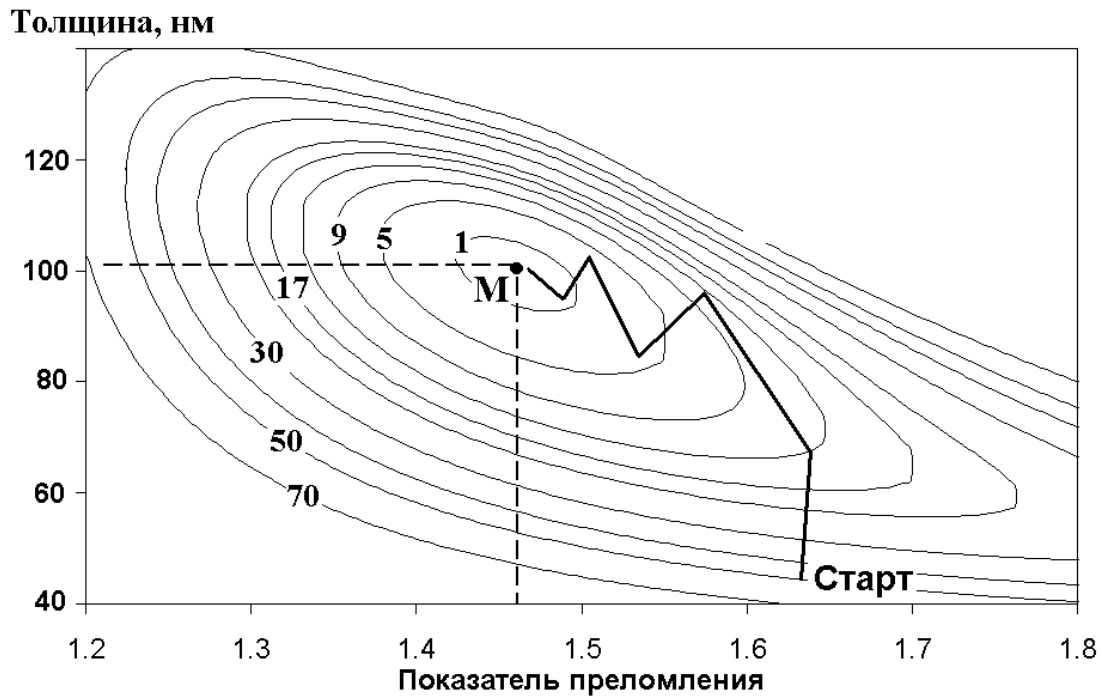


Рисунок 9

На рис.9 в плоскости параметров n_1 и d изображена топограмма целевой функции для системы Si-SiO₂ с толщиной пленки 100 нм. Линии постоянного значения S образуют систему вложенных замкнутых кривых вокруг точки M с координатами $n_1=1.46$, $d=100$ нм, в которой значение целевой функции обращается в ноль. Значения целевой функции для некоторых кривых показаны на рисунке. Существующие алгоритмы решения обратной задачи сводятся к тому, чтобы, двигаясь в плоскости n_1 - d , уменьшать на каждом шаге величину целевой функции. Для этого можно использовать метод градиентного спуска. В каждой точке поиска находится направление максимального спуска (направление градиента), затем делается шаг определенной длины в этом направлении. Выбор длины шага не такая простая задача и зависит от градиента, от ограничений на область поиска и от многих других условий. Такая последовательность действий выполняется, пока целевая функция не станет меньше некоторого заданного значения. Примерный путь для описанного алгоритма показан на рисунке ломаной линией.

Может показаться, что метод градиентного спуска – это как раз то, что нужно для подобных задач. На самом деле это не так и этот метод мало используется при решении эллипсометрических задач оптимизации. Причина в том, что для него существуют ловушки. Рассмотрим топограмму целевой функции для той же системы, но при толщине пленки $d=35$ нм (рис.10).

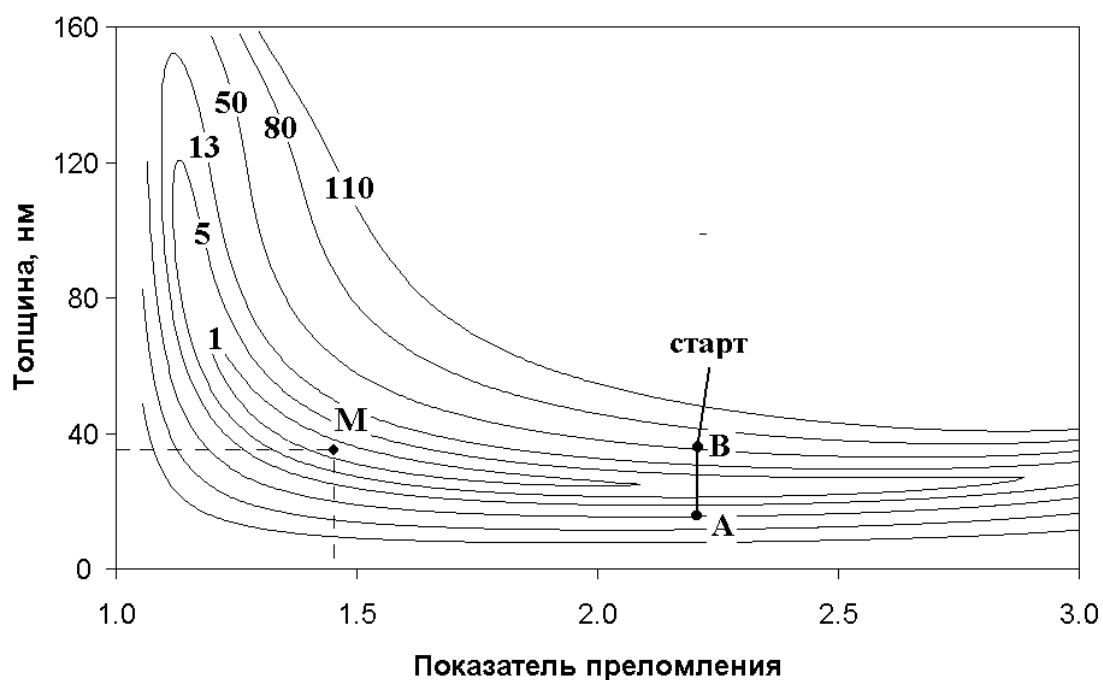


Рисунок 10

Картина теперь совершенно иная. Линии $S=\text{const}$ вытягиваются вдоль некоторого направления, а поверхность целевой функции представляет собой вытянутую долину или овраг. Пользуясь методом градиентного спуска, вы очень быстро попадете на дно оврага, но дальнейшее движение затормозится, и алгоритм может вообще заикнуться. На рисунке этому соответствует циклическое движение между точками А и В. Действительно, пользуясь численными методами, вы не попадете точно на дно оврага, а окажетесь где-то вблизи него. При этом направление максимального спуска будет перпендикулярно линии дна оврага, так как производные в направлениях

«вдоль» и «поперек» могут отличаться на несколько порядков. Двигаясь по линии градиента вы с большой долей вероятности остановитесь снова не на дне оврага, а на его противоположном склоне. Дальше ситуация повторяется и происходит заикливание. Чтобы избежать этого применяют различные приемы и используют неградиентные алгоритмы. Одним из наиболее эффективных алгоритмов является метод Нелдера-Мида (метод модифицируемого многогранника). Однако рассмотрение этого метода выходит за рамки данного пособия.

Отметим еще одну особенность решения, представленного целевой функцией на рис. 10. Если принимать за решение любую пару n_1, d , для которой выполняется $S(n_1, d) \leq 1$, то область, удовлетворяющая этому условию, оказывается очень большой: $n_1 = 1.25 - 2.1$ и $d = 30 - 65$ нм. Для предыдущего примера на рис. 9 аналогичная область заметно меньше. Таким образом, минимизация целевой функции до порогового значения еще не гарантирует правильность найденного решения. Данная ситуация возникает при корреляции параметров и будет более подробно рассмотрена ниже.

Рассмотрим в качестве примера один практически важный случай численного определения толщины d и показателя преломления n_f прозрачной пленки, нанесенной на подложку с известными оптическими постоянными n_s и k_s . Выражения для эллипсометрических параметров однослойной системы получаются подстановкой обобщённых коэффициентов Френеля (8) в формулу (2):

$$\operatorname{tg} \Psi e^{i\Delta} = \left(\frac{r_{\hat{a}1p} + r_{10p} X}{1 + r_{\hat{a}1p} r_{10p} X} \right) \left(\frac{1 + r_{\hat{a}1s} r_{10s} X}{r_{\hat{a}1s} + r_{10s} X} \right). \quad (17)$$

Это квадратное уравнение относительно комплексной экспоненциальной функции $X = \exp\left(-\frac{4\pi i d}{\lambda} \sqrt{n_f^2 - \sin^2 \varphi}\right)$. Оно позволяет выразить X в аналитическом виде как функцию показателя преломления пленки: $X = X(n_f)$. Показателем экспоненты в данном случае является мнимая величина, поэтому для тех значений n_f , которые являются решением уравнения (17), должно выполняться условие

$$|X(n_f)| = 1 \quad (18)$$

Это и есть уравнение для отыскания показателя преломления пленки. Таким образом, проблема отыскания двух неизвестных параметров сведена к нелинейному уравнению относительно одного из них. После того, как n_f найдено толщина пленки рассчитывается прямым вычислением по формуле

$$d = \frac{\lambda}{4\pi\sqrt{n_f^2 - \sin^2 \varphi}} (-\arg X + 2\pi m), \quad (19)$$

здесь m – любое неотрицательное целое число, которое называется порядком периода.

Рассмотренный здесь алгоритм называется методом Холмса и широко применяется для численного отыскания параметров прозрачных пленок.

2.3. Определение большого числа неизвестных параметров и их корреляция.

Выше были рассмотрены методы решения обратной задачи эллипсометрии при отыскании двух неизвестных параметров. Как следует поступать, если число неизвестных более двух, например, три или четыре? Ведь комплексное уравнение (2) позволяет определить только два вещественных неизвестных. Для этого необходимо пополнить систему уравнений. Сделать это можно, проведя дополнительные измерения при другом значении какого-либо из внешних параметров, например при другом угле падения света. В результате получится система уравнений вида:

$$\operatorname{tg} \psi_1 e^{i\Delta_1} = F(p_1, p_2, \dots, p_N, \varphi_1, \lambda, n_a) \quad (20a)$$

$$\operatorname{tg} \psi_2 e^{i\Delta_2} = F(p_1, p_2, \dots, p_N, \varphi_2, \lambda, n_a) \quad (20б)$$

Решив эту систему численным методом, мы найдем искомые значения для любых 4-х параметров модели: p_{x1} , p_{x2} , p_{x3} и p_{x4} . Может показаться, что, проводя измерения при других углах падения и увеличивая тем самым число уравнений можно в итоге определить любое количество неизвестных

параметров. Это не совсем так, по крайней мере, в случае многоугольных измерений. Дело в том, что такие измерения не совсем независимые, и каждый новый угол падения добавляет все меньше и меньше информации об исследуемой системе.

Эту ситуацию легко пояснить графически. Пусть p_1 , p_2 и p_3 – параметры, подлежащие определению. Из уравнения (20а) можно вычислить p_1 и p_2 при заданном p_3 . Если параметр p_3 варьировать в некотором диапазоне, вычисляя для каждого его значения пару (p_1, p_2) , то в плоскости p_1 - p_2 получается кривая, изображающая возможные решения. Вторую такую же кривую можно получить из уравнения (20б) для другого угла падения. На рис.12 эти кривые показаны жирными линиями. Очевидно, что пересечение найденных кривых (точка O) и есть искомое решение для p_1 и p_2 .*

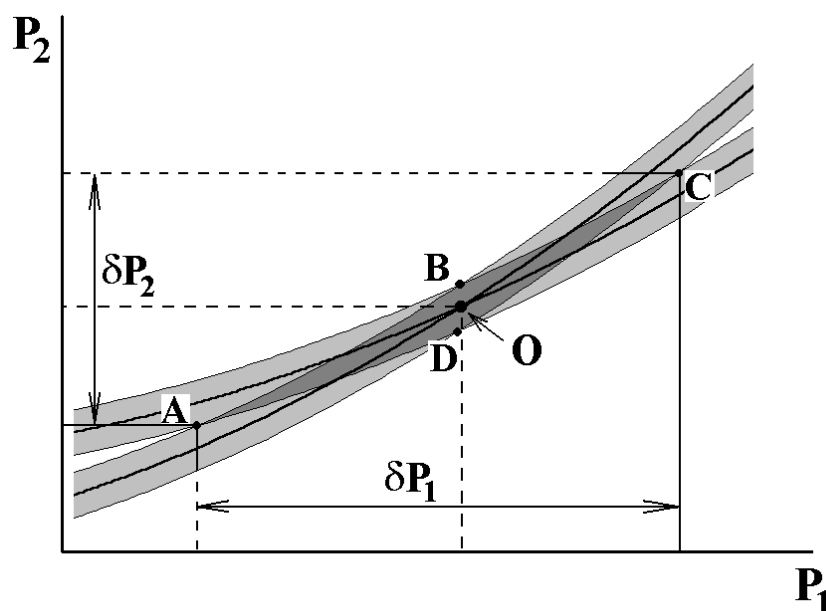


Рисунок 11.

Экспериментальные погрешности приводят к размытию кривых. На рисунке это размытие показано в виде полутонких полос серого цвета, которые соответствуют доверительному интервалу. Пересечение полос дает область решений параметров p_1 и p_2 – фигура $ABCD$ (показана более темным

* В данном случае параметры p_3 для каждой кривой в точке пересечения могут и не совпадать, так как система уравнений (20) для трех параметров p_1, p_2, p_3 переопределена.

цветом). Так вот, в задачах эллипсометрии весьма типична ситуация, когда кривые возможных решений пересекаются под малыми углами, как это показано на рисунке. В этом случае область решений оказывается вытянутой вдоль кривых, а неопределенность искомых параметров оказывается слишком большой. Добавление новых углов падения ничего не изменит к лучшему, так как соответствующие им кривые будут лежать в узком секторе углов. О такой ситуации говорят как о взаимной корреляции параметров. Такая корреляция для двух параметров была рассмотрена в предыдущем пункте и проявлялась на примере пленки SiO_2 толщиной 35 нм.

В чем состоит физическая причина взаимной корреляции параметров при многоугловых измерениях? Отраженная волна, параметры которой мы измеряем, формируется в результате когерентного рассеяния волны, распространяющейся в исследуемой структуре под углом преломления. Если слои структуры имеют показатель преломления $n \sim 4$, то угол преломления, связанный законом Снелла, мал и слабо меняется при изменении угла падения света (из воздуха). Так, при изменении угла падения от 45° до 90° угол преломления меняется в диапазоне чуть больше 4° (от 10.2° до 14.5°). Поэтому и добавочная информативность измерений при новых углах падения также невелика. Из этих рассуждений следует также, что взаимная корреляция параметров должна меньше проявляться для структур с малым показателем преломления слоев $n < 2$. Это действительно так: для структур типа Si-диэлектрические слои с малым n корреляция параметров заметно меньше.

Другой способ пополнить систему уравнений – проводить измерения при различных значениях показателя преломления внешней среды n_a – так называемые *иммерсионные измерения* (от английского *immersion* – погружение). Сразу отметим, что возможности этого способа тоже ограничены корреляцией параметров, хотя и не столь значительной, как при многоугловых измерениях. Кроме того, добавляются еще проблемы технического и методического плана, связанные с образованием переходного слоя между жидкостью и образцом, который обусловлен межмолекулярным взаимодействием на границе раздела двух фаз. Все эти проблемы усложняют эксперимент и ограничивают использование иммерсионных измерений.

2.4. Спектральная эллипсометрия.

Решить проблему корреляции параметров и повысить информативность измерений позволяет метод спектральной эллипсометрии за счёт изменения длины волны зондирующего излучения. В отличие от многоугловых и иммерсионных измерений с изменением длины волны могут меняться также искомые параметры структуры, например оптические постоянные слоев за счет дисперсии. Добавляя новые уравнения в систему (20) мы формально увеличиваем число неизвестных, что делает задачу отыскания однозначного решения с математической точки зрения трудноразрешимой. Однако это не так и спектральные измерения оказываются наиболее информативными.

Следует учесть, что, во-первых, все геометрические параметры – толщины слоев, размеры рельефа, если таковой имеется, не меняются с длиной волны. Во-вторых, изменения оптических постоянных с длиной волны не являются независимыми, а подчиняются закону дисперсии. Это значит, что мы можем привлечь для интерпретации спектральных эллипсометрических измерений дополнительную информацию об оптических свойствах исследуемых слоев. В третьих, иногда специально можно выбрать в исследуемом спектральном диапазоне область, в которой часть искомых параметров либо известна, либо вообще не влияет на результат измерений и, значит, может быть исключена из уравнений.

Поясним на примерах. Пусть исследуется пленка ZnTe на подложке Si. В эллипсометрии часто используют вместо шкалы длин волн шкалу энергий. Энергия фотона E (эВ) связана с длиной волны (мкм) простым количественным соотношением: $E=1.24/\lambda$. Для ZnTe край фундаментального поглощения составляет 2.26 эВ, поэтому для спектрального диапазона лежащего ниже края поглощения (по энергии) можно положить показатель поглощения пленки равным нулю. Это делает возможным определение толщины пленки из измерений в указанном диапазоне. Теперь, зная толщину, можно рассчитать оптические постоянные исследуемой пленки во всем спектральном интервале и тем самым решить поставленную задачу.

Второй пример - структура SiO₂-Si-SiO₂ на подложке Si (кремний на изоляторе – КНИ структура). В зависимости от технологии оптические

постоянные слоя кремния могут в той или иной мере отличаться от соответствующих значений для монокристаллического Si. Поэтому неизвестными параметрами будем считать толщины всех трех слоев и оптические постоянные слоя Si (на каждой длине волны получается 5 неизвестных). В ультрафиолетовой области спектра поглощение в кремнии очень велико ($k_{Si} \sim 5$) и глубина проникновения света, определяемая соотношением $d_p = \lambda / 4\pi k_{Si}$, составляет ~ 10 нм. Типичные же значения толщины кремния в таких структурах могут составлять сто и более нанометров. Поэтому отраженная волна "чувствует" только слой SiO₂ и границу раздела с кремнием. Ясно, что параметры нижележащего слоя SiO₂ и толщина отсеченного слоя Si никак не влияют на измерения, поэтому исследуемая структура может быть заменена более простой SiO₂-Si. При этом количество параметров, подлежащих определению на каждой длине волны сокращается до трех (толщина верхнего SiO₂ и оптические постоянные слоя Si). Таким образом, в ультрафиолетовой области спектра рассматриваемая задача существенно упрощается. Полученная при этом информация может быть использована для интерпретации результатов во всем спектральном диапазоне.

Однако наиболее продуктивный подход для интерпретации спектроэллипсометрических измерений состоит в том, чтобы описать с помощью какой-либо модели дисперсию оптических постоянных и тем самым уменьшить количество неизвестных параметров. Выбор моделей оптических постоянных очень разнообразен и зависит от типа материала, спектрального диапазона и других обстоятельств. Рассмотрим некоторые из них.

Наиболее простая модель, описывающая зависимость оптических постоянных от энергии фотона – модель гармонического осциллятора. Для одиночного гармонического осциллятора с резонансной энергией E_0 диэлектрическая функция может быть представлена в виде:

$$\varepsilon(E) = 1 + A \left(\frac{1}{E + E_0 + i\Gamma} - \frac{1}{E - E_0 + i\Gamma} \right), \quad (21)$$

где A – сила осциллятора, Γ - параметр уширения (аналог трения в механическом осцилляторе). Для одиночного осциллятора зависимости оптических постоянных по спектру описываются тремя параметрами: E_0 , A и Γ . В рассматриваемом интервале спектра может находиться несколько

гармонических осцилляторов, тогда диэлектрическая функция получается суммированием по всем осцилляторам:

$$\varepsilon(E) = 1 + \sum_j A_j \left(\frac{1}{E + E_{0j} + i\Gamma_j} - \frac{1}{E - E_{0j} + i\Gamma_j} \right) \quad (22)$$

Для полупроводников такое приближение для $\varepsilon(E)$ оказывается слишком грубым и используется модель диэлектрической функции, учитывающая комбинированную плотность состояний вблизи критических точек в зоне Бриллюэна. Как и в случае модели гармонических осцилляторов, результирующая функция $\varepsilon(E)$ получается суммированием по всем критическим точкам. Модель достаточно хорошо описывает поведение диэлектрической функции в широком диапазоне спектра, однако содержит порядка 20 подгоночных параметров, которые должны быть определены эмпирическим путем. Однако, в отличие от многоугловых измерений, в этом случае корреляция параметров отсутствует или проявляется очень слабо. Это легко понять на примере осцилляторов: если резонансные частоты E_{0j} достаточно разнесены, то для определения параметров каждого осциллятора используется свой спектральный диапазон.

В том случае, когда исследуемый спектральный интервал далеко отстоит от резонансных энергий и можно пренебречь мнимой частью в (22), используется формула Зельмейера:

$$n^2(\lambda) = A + B \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2}, \quad k(\lambda) = 0. \quad (23)$$

Это приближение хорошо работает для диэлектриков в области их прозрачности. Подгоночными параметрами являются A , B и λ_0 . Альтернативой формуле Зельмейера является формула Коши:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad k(\lambda) = 0 \quad (24)$$

Формула Коши может применяться и для слабо поглощающих материалов, тогда для показателя поглощения справедлива аналогичная зависимость от λ :

$$k(\lambda) = D + \frac{E}{\lambda^2} + \frac{F}{\lambda^4} \quad (25)$$

Задавая дисперсию оптических постоянных с помощью одной из рассмотренных выше моделей, мы сводим обратную задачу эллипсометрии к отысканию подгоночных параметров этой модели путем сравнения измеренных и рассчитанных спектров эллипсометрических параметров Ψ и Δ . Даже для сравнительно простой структуры, такой как однородная поглощающая пленка на подложке с известными оптическими свойствами, число подгоночных параметров может быть велико. Например, если использовать формулу Коши, то необходимо определять 7 параметров. В случае двух и более слоев число параметров будет еще больше. При этом, как это часто бывает для задач эллипсометрии, начинает проявляться взаимная корреляция параметров. Однако ничего страшного в этом нет. Например, в случае непоглощающего слоя в формуле Коши (24) коррелируют параметры В и С, поэтому точность их определения невысока. Однако, для каждой найденной пары этих параметров дисперсионная зависимость $n(\lambda)$ остается почти без изменения.

2.5. Многотолщинные измерения

Мы рассмотрели случаи, когда варьируются внешние параметры системы. Однако для получения добавочных уравнений можно варьировать также и внутренние параметры. Конечно, трудно представить, чтобы можно было реализовать измерения, в которых меняется только показатель преломления (или поглощения) какого-либо слоя, и при этом все остальные параметры остаются неизменными. Но ситуация, когда меняется толщина слоя, встречается очень часто. Например, эллипсометрические измерения ведутся в процессе роста (или травления) какого-либо слоя с неизвестными оптическими постоянными. Если имеется N измерений, то количество неизвестных будет составлять $N+2$ (N значений толщин и 2 значения оптических постоянных). При этом число вещественных уравнений оказывается равным $2N$. Очевидно, достаточно двух измерений, чтобы определить все неизвестные; при большем числе измерений система будет переопределенной.

При многотолщинных измерениях корреляция параметров проявляется очень слабо. Конечно, если измерения проведены для двух близко

расположенных толщин, то корреляция по-прежнему будет иметь место, однако экспериментатор всегда может оптимизировать выбор толщин. Графически, вся проблема сводится к построению в Ψ - Δ плоскости кривой определенной формы* через три заданные точки (рис. 12). Одна точка S соответствует подложке и её координаты (Ψ_0, Δ_0) определяются оптическими постоянными подложки. Две другие точки $A_1=(\Psi_1, \Delta_1)$ и $A_2=(\Psi_2, \Delta_2)$ – результаты измерений при толщинах d_1 и d_2 . Ясно, что для повышения точности опорные точки желательно выбрать подальше друг от друга.

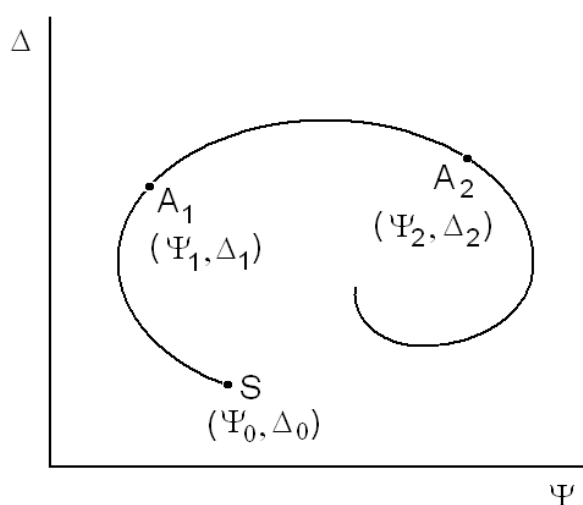


Рисунок 12

Рассмотрим алгоритм нахождения параметров однослойной структуры при двухтолщинных измерениях. Неизвестными являются n_f , k_f , d_1 и d_2 . Для этих неизвестных имеется 2 уравнения:

$$\operatorname{tg} \psi_1 e^{i\Delta_1} = F(n_f, k_f, d_1) \quad (26a)$$

$$\operatorname{tg} \psi_1 e^{i\Delta_1} = F(n_f, k_f, d_2) \quad (26b)$$

Выберем пробные значения n_n и k_n и рассчитаем для них толщины пленки. Эти решения можно получить в аналитическом виде, подобно тому, как это делалось в методе Холмса. Запишем результат в виде

$$d_1 = d_1(n_n, k_n, \operatorname{tg} \Psi_1 e^{i\Delta_1}) \quad (27a)$$

*Форма кривой определяется заданием оптических постоянных слоя

$$d_2 = d_2(n_n, k_n, \text{tg } \Psi_2 e^{iA_2}) \quad (276)$$

Толщины должны быть вещественными величинами, в то время как в правых частях (27) – комплексные выражения. Ясно, что при правильно выбранных значениях n_n и k_n мнимые части этих выражений должны быть равны нулю.

Поэтому целевая функция вида

$$S = (\text{Im } d_1(n_n, k_n))^2 + (\text{Im } d_2(n_n, k_n))^2 \quad (28)$$

обращается в ноль при одновременном выполнении $n_n = n_f$ и $k_n = k_f$. После того, как показатели преломления и поглощения слоя найдены толщины слоев находятся из выражений (27), которые становятся вещественными.

Нам удалось свести задачу отыскания 4-х неизвестных к задаче отыскания двух неизвестных, что в численных методах реализовать значительно проще. Нетрудно догадаться, что в случае измерений при m толщинах целевая функция должна состоять из m слагаемых, аналогичных (28). Однако теперь из-за экспериментальных погрешностей она может и не обращаться в ноль ни при каких значениях оптических постоянных. Поэтому следует искать минимум целевой функции, который будет достигаться вблизи истинных значений n_f и k_f .

2.6. Решение обратной задачи для неоднородных слоев.

Неоднородные слои встречаются довольно часто при исследовании различных структур. У любого слоя приповерхностная область или область вблизи подложки имеет, как правило, оптические свойства, слегка отличающиеся от остальной его части. Однако главный интерес представляют неоднородные структуры, сформированные целенаправленно: слои переменного состава по толщине, слои, имплантированные ионами высоких энергий[†] и другие подобные структуры.

[†] При этом в мишени возникает большое количество структурных нарушений, которые и изменяют оптические свойства.

Решение обратной задачи для неоднородных слоев предполагает определение профилей оптических постоянных, то есть зависимостей $n(z)$ и $k(z)$, где z – координата по нормали к поверхности. Существует множество различных вариантов постановки обратной задачи. Следует сразу отметить, что в общем случае, когда профили оптических постоянных произвольные функции и требуется их определить неразрушающим способом – эта задача не имеет однозначного решения. Ясно, что число параметров, необходимое для описания произвольного профиля, очень велико, и их невозможно определить не из многоугловых, ни из каких-либо других измерений не разрушая структуру.

Другое дело, если форма профиля задана, например в виде гауссиана или какой-либо другой аналитической функцией. Тогда число неизвестных параметров, подлежащих определению, существенно сокращается и их удается найти численным методом. Однако такой подход годится только для очень простых профилей: малейшее усложнение приводит к увеличению числа неизвестных и, как следствие, к их взаимной корреляции.

Более широко применяется разрушающий метод определения профилей. В этом случае эллипсометрические параметры измеряются при последовательном снятии тонких слоев, на которые разбивается весь неоднородный слой, вплоть до однородной подложки. Толщины этих слоев должны быть достаточно тонкими, чтобы удаляемый слой можно было считать однородным. С другой стороны, с уменьшением толщины возрастают требования к точности эллипсометрических измерений. Параметры слоев определяются, начиная с подложки. Если толщины удаляемых слоев известны, то на каждом шаге находим оптические постоянные слоя на известной подложке. Параметры подложки (комплексные коэффициенты отражения) при этом рассчитываются с учетом параметров нижележащих слоев, которые были определены на предыдущих итерациях. К сожалению, далеко не всегда толщины удаляемых слоев известны с эллипсометрической точностью. В принципе, можно при каждом снятии слоя проводить измерения при нескольких углах с тем, чтобы помимо оптических постоянных находить также и толщину снятого слоя. Однако точность решения обратной задачи при этом невелика из-за корреляции параметров.

Иногда случается так, что оба оптических параметра изменяются коррелированным образом, например зависят от состава композита. Тогда для каждого снятого слоя требуется определить только два параметра: толщину и состав. В этом случае зависимости $n(z)$ и $k(z)$ определяются с высокой эллипсометрической точностью.

Хотя мы назвали рассматриваемый здесь подход «разрушающим», однако такие же по сути измерения при вариации толщины неоднородного слоя можно получить в процессе его роста. Более того, в этом случае частоту измерений можно сделать гораздо выше и получить таким образом (по крайней мере, чисто умозрительно) непрерывную зависимость эллипсометрических параметров в процессе роста. Возникает закономерный вопрос: а нельзя ли в этом случае точно (в теоретическом смысле) определить профиль оптических постоянных? Ведь измерив Ψ и Δ как функции времени можно рассчитать производные от Ψ по Δ первого и более высоких порядков и попытаться извлечь из этого какую-то информацию. Можно даже предложить следующий алгоритм, который как будто позволяет по указанным зависимостям определять профиль. Пусть $\{\Psi_i, \Delta_i\}$ набор эллипсометрических углов, измеренных в процессе роста ($i=0,1,\dots,m$, причем $i=0$ соответствует подложке). Разобьем, как и выше, весь неоднородный слой на однородные элементарные слои. Такое разбиение достаточно произвольно, поэтому мы проведем его так, чтобы все четные значения индекса i соответствовали границам элементарных слоев, а нечетные лежали внутри элементарного слоя. Используя теперь изложенный в п.2.5 алгоритм определения оптических постоянных при многотолщинных измерениях, мы можем последовательно находить параметры всех слоев (включая и их толщины) начиная от подложки.

Такой алгоритм действительно работает, но только для слоев с малым градиентом оптических постоянных, когда выполняется условие

$$\left| \frac{dN}{dz} \right| \frac{\lambda}{N} \ll 1. \quad (29)$$

При этом искомый профиль определяется не однозначно, а с точностью до некоторой аддитивной осциллирующей по координате z добавки. Период осцилляций этой добавки равен $d_0/2$, где $d_0 = \lambda / 2 \sqrt{|N^2| - \sin^2 \varphi}$ -

интерференционный период для неоднородного слоя, и амплитуда осцилляций мала, если выполняется условие (29). При нарушении критерия (29) амплитуда осциллирующей добавки становится сравнима с изменениями оптических постоянных в неоднородном слое и полученный таким путем профиль перестает соответствовать истинному. Таким образом, можно утверждать, что обратная задача для неоднородного слоя при непрерывном мониторинге эллипсометрических параметров в процессе его роста может быть решена только в приближении малого градиента оптических постоянных.

ГЛАВА 3. Методы измерения эллипсометрических параметров. Оптические схемы эллипсометров.

3.1 Оптические элементы эллипсометров.

Прибор, с помощью которого измеряются эллипсометрические параметры называется эллипсометром. Существует огромное разнообразие оптических схем эллипсометров, однако в основе их работы лежат одни и те же оптические элементы. В настоящем параграфе мы рассмотрим основные из них и рассмотрим взаимодействие света с этими элементами.

3.1.1. Поляризаторы

Поляризаторы предназначены для формирования линейно поляризованного пучка света. Рассмотрим некоторые их типы. На рис.13 схематически изображен поляризатор, который называется призмой Глана-Фуко. Он состоит из двух одинаковых призм, вырезанных из оптически одноосного кристалла и

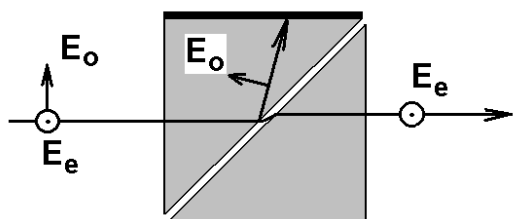


Рисунок 13

соединенных друг с другом так, что между ними остается воздушный зазор. В качестве материала призм обычно используют кальцит. Оптическая ось кристалла ориентирована перпендикулярно плоскости рисунка. Угол между гранями призмы выбирают таким образом, чтобы луч, поляризованный в плоскости рисунка (обыкновенная волна E_o) испытывал полное внутреннее

отражение на границе призмы с воздушным зазором и падал на почерненную грань призмы. При этом луч, поляризованный перпендикулярно плоскости рисунка (необыкновенная волна E_e), преломляется в воздушный зазор и проходит через вторую призму не меняя своего направления. Таким образом, на выходе призмы всегда будет только необыкновенная волна, с поляризацией, ориентированной перпендикулярно плоскости рисунка. Это направление называют осью пропускания поляризатора.

Толщина воздушного зазора должна превышать глубину проникновения поля световой волны в воздух при полном внутреннем отражении и составляет обычно несколько сотен микрон. Вторая призма нужна только для того, чтобы сохранить исходное направление луча и в принципе может быть выполнена из изотропного материала.

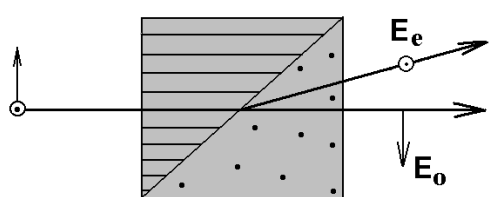


Рисунок 14

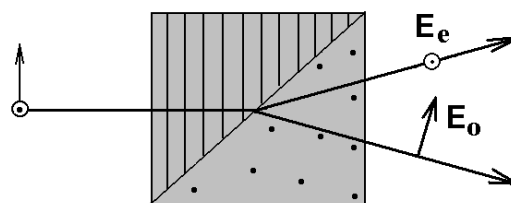


Рисунок 15

На рис.14 показан другой тип поляризатора – призма Рошона, которая состоит из двух половинок, посаженных на оптический контакт. Оптические оси обеих половинок показаны на рисунке линиями или точками. В этом устройстве обыкновенный луч проходит без изменения, в то время как необыкновенный луч отклоняется на некоторый угол и выводится из оптического тракта. Угол отклонения необыкновенного луча зависит от величины двулучепреломления n_o-n_e и составляет обычно несколько градусов. Если оптические оси расположены так, как показано на рис.15, то оба луча

будут отклоняться от первоначального направления. Такое устройство называется призмой Волластона.

Поляризаторы характеризуются двумя параметрами: осью пропускания и коэффициентом пропускания. В случае поляризаторов Рошона и Волластона пропускание определяется просто коэффициентами Френеля, в то время как в призме Глана-Фуко пропускание зависит еще и от интерференции лучей при многократном отражении. Это ограничивает применение данной призмы в фотометрических устройствах, так как пропускание будет меняться по спектру, а из-за слабой клиновидности воздушного зазора также и по поверхности призмы.

3.1.2. Фазосдвигающие устройства.

Фазосдвигающее устройство (*компенсатор*) предназначено для относительного сдвига фаз между двумя ортогонально поляризованными волнами. В эллипсометрах различного типа, работающих при одной длине волны чаще всего используется в качестве компенсатора пластина кристаллического кварца, оптическая ось которой ориентирована в плоскости поверхности пластины.

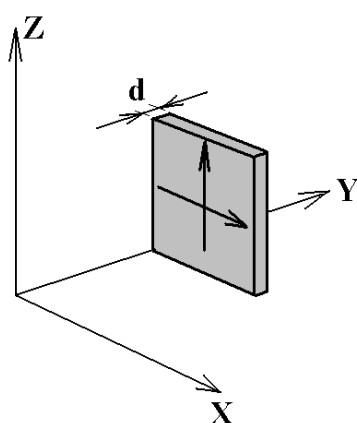


Рисунок 16

Пусть свет распространяется вдоль оси Y. Расположим пластину толщины d так, чтобы ее плоскость была перпендикулярна лучу, а ориентация оптической оси совпадала с направлением координатной оси Z, как это показано на рис.16. При прохождении через пластину фаза волны изменяется на величину, равную произведению волнового вектора на толщину d (мы пренебрегаем здесь эффектом

многократных отражений света на пластине). Для обыкновенной и необыкновенной волн (векторы поляризации E_x и E_z) соответствующие набеги

фаз будут равны $\delta_x = \frac{2\pi n_o d}{\lambda}$ и $\delta_z = \frac{2\pi n_e d}{\lambda}$, а относительный сдвиг фаз $\delta_x - \delta_z$

выражается формулой

$$\delta_c = \frac{2\pi(n_o - n_e)d}{\lambda} \quad (3.1)$$

Толщину пластины подбирают таким образом, чтобы относительный фазовый сдвиг был равен $\pi/2$. В длинах волн это соответствует $\lambda/4$, поэтому такая пластина называется *четвертьволновой пластиной* или компенсатором с набегом фаз $\lambda/4$. Направления в плоскости пластины вдоль оптической оси и перпендикулярно к ней называются *осями компенсатора* (на рисунке оси компенсатора расположены вдоль координат x и z). Если $n_o > n_e$, то x -направление, соответствующее поляризации обыкновенного луча, называют *быстрой осью*, а перпендикулярное к нему z -направление – *медленной осью**. Замена быстрой и медленной осей компенсатора эквивалентна его повороту на 90° или, что то же самое, замене $\delta_c \rightarrow -\delta_c$. В дальнейшем будем подразумевать под осью компенсатора его быструю ось, а под фазовым сдвигом компенсатора δ_c – фазовый сдвиг волны, поляризованной вдоль быстрой оси по отношению к волне, поляризованной вдоль медленной оси.

Рассмотренный тип компенсатора достаточно прост в изготовлении, однако обладает некоторыми недостатками. Во-первых, технологически трудно изготовить пластину заданной толщины с требуемой точностью. Для кварца, например $n_o - n_e = 0.009$, поэтому отклонение толщины пластины на 0.2 мкм приведет к изменению δ_c более, чем на 1° . Но главное заключается в другом. Из (3.1) видно, что температурные изменения δ_c за счет термооптического эффекта (изменения показателей преломления с температурой) или за счет термического расширения будут пропорциональны толщине d . Из соображений технологического характера пластины изготавливают толщиной порядка 0.5 мм, так, чтобы фазовый сдвиг был равен $2\pi m + \pi/2$, где m – целое число. Поэтому фазовый сдвиг компенсатора сильно меняется с температурой. Реально эти

*Названия "быстрая" и "медленная" относятся не к фазовой скорости, а к набегу фазы на толщине пластины.

изменения составляют величину порядка 10° при изменении температуры от 15 до 30°C .

Второй недостаток кварцевого компенсатора проявляется при проведении спектральных эллипсометрических измерений. Из (3.1) видно, что фазовый сдвиг сильно зависит от длины волны, поэтому кварцевый компенсатор может быть использован как четвертьволновая пластина только в очень узком спектральном интервале. Отчасти эта проблема может быть решена, если вместо кварца использовать оптическую слюду. Для слюды легко получить пластины толщиной десятки микрон. Однако радикально проблема решается с

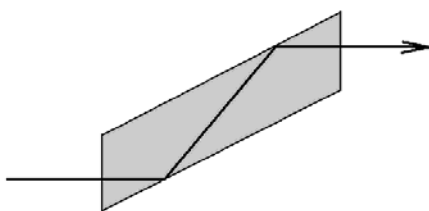


Рисунок 17

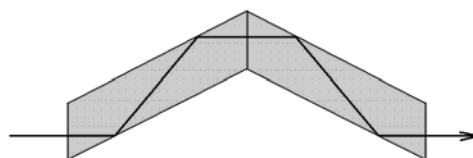


Рисунок 18

помощью ахроматических компенсаторов. На рис.17 показан один из таких компенсаторов, который называется ромбом Френеля. Принцип действия ромба Френеля основан на явлении полного внутреннего отражения. Сдвиг фаз при полном внутреннем отражении зависит от угла падения света и показателя преломления материала (в данном случае используется оптически изотропный материал – стекло или плавленый кварц). Геометрия устройства выбирается таким образом, чтобы после двукратного отражения суммарный сдвиг фаз между ортогональными компонентами составлял $\pi/2$. При прохождении света через ромб Френеля луч сохраняет свое направление, но испытывает параллельное смещение. Это недопустимо, если в процессе измерений требуется азимутальное вращение компенсатора. В этом случае используется двойной ромб Френеля (рис.18), который получается путем склеивания двух ромбов Френеля и обеспечивает соосность входящего и выходящего лучей.

3.2. Преобразования поляризации при прохождении через оптические элементы.

Рассмотрим последовательное прохождение света через поляризатор и компенсатор. Нас будет в первую очередь интересоваться, как меняется поляризация света. Пусть ось компенсатора повернута относительно оси пропускания поляризатора на угол θ и совпадает с координатной осью x (рис. 19). За положительное направление поворота выберем направление против часовой стрелки, если смотреть навстречу лучу.

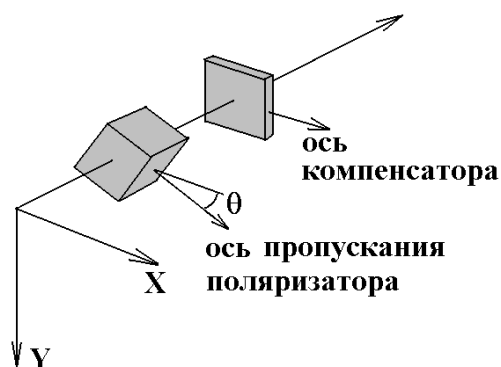


Рисунок 19

После прохождения поляризатора волна будет линейно поляризована, причем направление ее поляризации будет совпадать с осью пропускания поляризатора. Разложим вектор электрического поля этой волны на составляющие вдоль координатных осей x и y : $E_x^P = E_0 \cos \theta \cdot e^{i\omega t}$, $E_y^P = E_0 \sin \theta \cdot e^{i\omega t}$. Здесь E_0 – амплитуда поля на выходе поляризатора. После прохождения компенсатора волна, поляризованная вдоль оси x , получит дополнительный фазовый сдвиг δ_c . Кроме того, следует учесть различие в пропускании для быстрой и медленной осей, которые мы обозначим T_b и T_m . Поэтому для x и y компонент электрического поля получатся следующие выражения:

$$E_{\alpha}^N(t) = E_0 \cos \theta \cdot e^{i\omega t} T_d e^{i\delta_c}, E_y^C(t) = E_0 \sin \theta \cdot T_m e^{i\omega t} \quad (3.2)$$

Формулы (3.2) задают в самом общем виде плоскую поляризованную волну. Такая поляризация называется *эллиптической*, поскольку фигура, которую описывает конец вектора E в xu -плоскости является эллипсом. Параметры этого эллипса (отношение большой и малой осей и их ориентация) определяются азимутальным положением поляризатора, компенсатора, фазовым сдвигом компенсатора δ_c , а также отношением его коэффициентов пропускания $f=T_6/T_m$. При фазовых сдвигах 0 и 180° эллипс вырождается в прямые, а при $\delta_c=90^\circ$ оси эллипса ориентированы вдоль координатных осей x и y . Величину

$$\rho_{\vec{n}} = f e^{i\delta_c} \quad (3.3)$$

называют *комплексным параметром компенсатора*. По физическому смыслу это то же самое, что комплексный эллипсометрический параметр образца ρ , который был определен в главе 1.

Легко видеть, что вместо компенсатора можно поместить любое фазосдвигающее устройство, например отражающую поверхность. При этом коэффициентам пропускания T_x и T_y будут соответствовать модули коэффициентов отражения $|R_p|$ и $|R_s|$, а фазовому сдвигу компенсатора δ_c – эллипсометрический параметр Δ . Таким образом, эллипсометрические параметры образца однозначно определяют параметры эллипса поляризации отраженного света – его эллиптичность и ориентацию осей, при условии, что поляризация падающего света задана. Иными словами, между параметрами эллипса отражённой волны и эллипсометрическими параметрами Ψ , Δ имеется взаимно однозначное соответствие. Измеряя параметры эллипса можно определить Ψ и Δ . Отсюда и произошло название метода – эллипсометрия, то есть измерение параметров эллипса поляризации.

3.3. Оптические схемы эллипсометрических измерений.

Существует большое разнообразие оптических схем эллипсометров – приборов для измерения эллипсометрических параметров. Их можно разделить на два типа: нулевые схемы, когда ориентацией оптических элементов

добиваются полного гашения света, отраженного от образца и фотометрические, когда измеряется интенсивность поляризационных компонент. И в том, и в другом случае интенсивность можно модулировать, изменяя параметры оптических элементов.

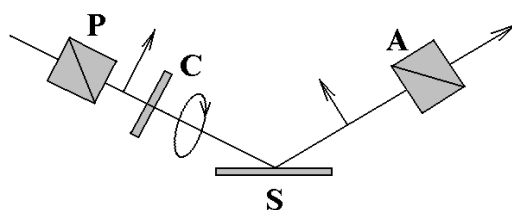


Рисунок 20

На рис.20 изображена оптическая схема нулевых эллипсометрических измерений. Ее называют PCSA-схемой по названию основных элементов. Луч света после прохождения

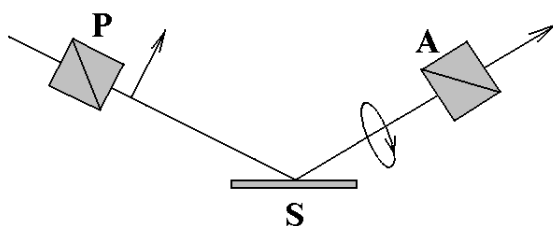
поляризатора P приобретает линейную поляризацию. Компенсатор C превращает эту линейную поляризацию в эллиптическую. После взаимодействия с исследуемым образцом S свет в общем случае будет иметь эллиптическую поляризацию. Однако если специальным образом подобрать азимуты поляризатора и компенсатора, то можно добиться, чтобы отраженная волна вновь стала линейно поляризованной (на самом деле этого можно добиться вращением одного из элементов при фиксированном азимуте второго). При этом фазовые сдвиги, создаваемые компенсатором и образцом, взаимно компенсируют друг друга. Именно это функциональное назначение компенсатора лежит в основе его названия. Легко понять, что линейную поляризацию отраженного света можно загасить, поместив на пути луча второй поляризатор в скрещенное положение, то есть такое положение, когда его ось пропускания перпендикулярна поляризации отраженной волны. Этот поляризатор выполняет функцию анализирующего устройства, поэтому называется анализатором и обозначен на схеме буквой A.

Алгоритм нулевых эллипсометрических измерений выглядит следующим образом. Зафиксировав положение одного из оптических элементов (обычно это компенсатор) вращением двух других добиваются гашения света на выходе анализатора. Соответствующие гашению азимутальные положения оптических элементов позволяют рассчитать параметры эллипса поляризации отраженной волны и следовательно эллипсометрические параметры образца. В

принципе, компенсатор можно расположить после образца, в плече анализатора. Тогда получим схему PSCA. Обе эти схемы равнозначны в смысле идеологии измерений.

Если параметры компенсатора заданы, то для измерения эллипсометрических параметров достаточно в принципе измерить только одну пару углов гашения поляризатора и анализатора. Однако параметры компенсатора, как правило, неизвестны с требуемой точностью (хотя бы по причине их температурного дрейфа), поэтому на практике проводят измерение двух пар углов гашения (P_1, A_1) и (P_2, A_2), которые позволяют исключить параметры компенсатора и определить эллипсометрические углы Ψ и Δ . Нулевая схема измерений нечувствительна к колебаниям интенсивности источника света, имеет высокую абсолютную точность измерений, но требует много времени на одно измерение и трудно поддается автоматизации.

На рис. 21 представлена классическая схема фотометрических измерений



(схема PSA). В этой схеме регистрируется интенсивность света, отраженного от образца и прошедшего через оптические элементы. Если азимут поляризатора не совпадает с p- или s- направлением, то свет,

Рисунок 21

отраженный от поверхности, будет в общем случае иметь эллиптическую поляризацию. Параметры эллипса поляризации зависят от эллипсометрических параметров образца. Устанавливая поочередно анализатор в различные положения, и регистрируя интенсивность прошедшей волны, можно восстановить параметры эллипса и тем самым определить эллипсометрические параметры. Обратим внимание, что в отличие от ψ значение Δ определяется в этой схеме неоднозначно: параметры образца $\Delta_1=180^\circ+\delta$ и $\Delta_2=180^\circ-\delta$ образуют одни и те же эллипсы, отличающиеся только направлением вращения электрического вектора. Чтобы избежать этой неоднозначности, в оптический

тракт вставляют компенсатор. Методическая часть обработки результатов при этом немного усложняется, но зато устраняется неоднозначность.

Параметры эллипса отраженной волны можно определить в этой схеме, если непрерывно вращать один из элементов. Тогда интенсивность прошедшего света будет меняться по синусоидальному закону, и параметры этой синусоиды также позволяют рассчитать Ψ и Δ . Таким путем удастся легко автоматизировать измерения.

3.4. Статическая фотометрическая схема.

В лабораторном практикуме представлены эллипсометры, в основе которых лежит статическая фотометрическая схема измерений. Поэтому мы остановимся на этой схеме более подробно. Она изображена на рис. 22.

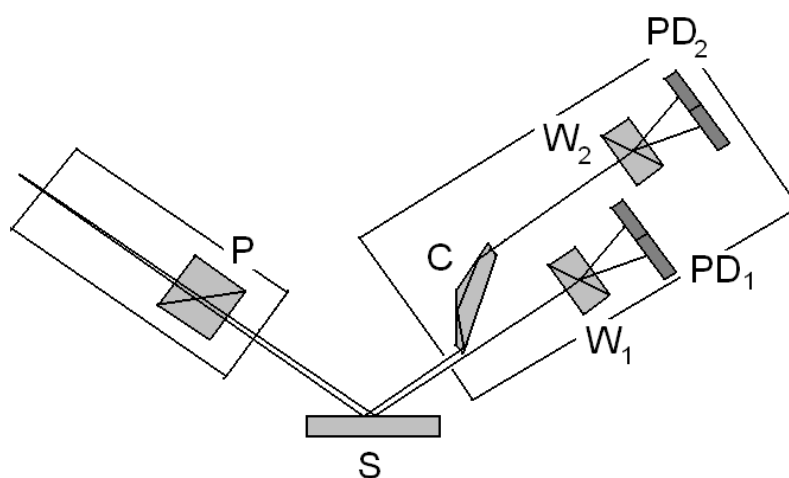


Рисунок 22 Принципиальная оптическая схема статических фотометрических измерений.

Слабо расходящийся пучок света поляризуется поляризатором P, отражается от исследуемой поверхности S и попадает в анализирующий блок эллипсометра. Здесь свет расщепляется по фронту на два пучка: один проходит напрямую (канал «пси»), второй отщепляется призмой полного внутреннего

отражения С и попадает в канал «дельта». В обоих каналах свет расщепляется поляризационными призмами Волластона W_1 и W_2 на два пучка со взаимно-ортогональными поляризациями. Эти пучки засвечивают площадки фотодетекторов PD_1 и PD_2 с которых снимаются электрические сигналы, S_1, S_2, S_3 и S_4 , пропорциональные интенсивностям этих пучков. Эллипсометрические параметры рассчитываются на основании значений измеренных сигналов.

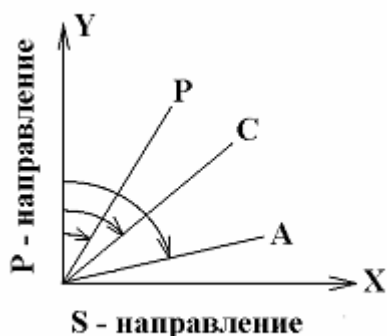


Рисунок 23

Рассмотрим преобразование поляризации при прохождении света через элементы эллипсометра в канале «дельта». Для канала «пси» результат можно получить из тех же преобразований, если заменить компенсатор элементом, тождественным единичному. Расположим координатную ось x перпендикулярно плоскости падения (s -направление), а ось y в плоскости падения света (p -направление). Азимуты осей пропускания поляризатора, анализатора и быстрой оси компенсатора, отсчитанные от p – направления, обозначим P, A и C (см. рис.23). Пусть E_0 – амплитуда поля волны на выходе поляризатора. После прохождения поляризатора вектор электрического поля будет повернут на угол P относительно плоскости падения, поэтому амплитуды p - и s - компонент падающего света будут равны:

$$\begin{aligned} E_p^D &= E_0 \cos P \\ E_s^D &= E_0 \sin P \end{aligned} \quad (3.4)$$

Верхний индекс в уравнениях обозначает элемент, на выходе которого рассматривается поле, а нижний показывает, какому базисному направлению соответствует данная компонента. После отражения от образца каждая компонента домножается на соответствующий коэффициент отражения:

$$E_p^S = E_0 R_p \cos P$$

$$E_s^S = E_0 R_s \sin P \quad (3.5)$$

Разложим теперь поле, представленное формулами (3.5) по быстрой (б) и медленной (м) осям компенсатора.

$$E_a^S = E_0 [R_p \cos P \cos C + R_s \sin P \sin C]$$

$$E_i^S = E_0 [-R_p \cos P \sin C + R_s \sin P \cos C] \quad (3.6)$$

После прохождения компенсатора каждая из представленных в (3.6) компонент домножается на соответствующий комплексный коэффициент пропускания \hat{O}_a или \hat{O}_i . Поскольку нас интересуют только относительные изменения компонент поляризованной волны, мы можем поделить оба уравнения на \hat{O}_i и, учитывая, что отношение $\hat{T}_a / \hat{O}_i = \rho_{\hat{n}}$ записать амплитуды полей на выходе из компенсатора в следующем виде:

$$E_a^{\hat{N}} = E_0 [R_p \cos P \cos C + R_s \sin P \sin C] \rho_{\hat{n}}$$

$$E_i^{\hat{N}} = E_0 [-R_p \cos P \sin C + R_s \sin P \cos C] \quad (3.7)$$

Наконец, компоненты полей на выходе из призмы Волластона находятся проекцией обеих компонент (3.7) на оси пропускания призмы (индексы 1 и 2). При этом получают следующие выражения:

$$E_1^W = E_0 [R_p \cos P \cos C + R_s \sin P \sin C] \rho_{\hat{n}} \cos(A - C) +$$

$$+ E_0 [-R_p \cos P \sin C + R_s \sin P \cos C] \sin(A - C) \quad (3.8)$$

$$E_2^W = E_0 [R_p \cos P \cos C + R_s \sin P \sin C] \rho_{\hat{n}} \sin(A - C) -$$

$$- E_0 [-R_p \cos P \sin C + R_s \sin P \cos C] \cos(A - C) \quad (3.9)$$

Для канала «пси» выражения для компонент полей получаются из (3.8) и (3.9), если положить $\rho_c=1$. Окончательно для интенсивностей поляризационных компонент в обоих каналах получаются следующие выражения.

Для канала «пси»:

$$I_1 = |\rho \cos P \cos A_1 + \sin P \sin A_1|^2 I_{0\psi} \quad (3.10)$$

$$I_2 = |\rho \cos P \sin A_1 + \sin P \cos A_1|^2 I_{0\psi} \quad (3.11)$$

Для канала «дельта»:

$$I_3 = |(\rho \cos P \cos C + \sin P \sin C) \cos(A_2 - C) \rho_c - (\rho \cos P \sin C - \sin P \cos C) \sin(A_2 - C)|^2 I_{0\Delta} \quad (3.12)$$

$$I_4 = |(\rho \cos P \cos C + \sin P \sin C) \sin(A_2 - C) \rho_c + (\rho \cos P \sin C - \sin P \cos C) \cos(A_2 - C)|^2 I_{0\Delta} \quad (3.13)$$

Здесь $I_{0\psi}$, $I_{0\Delta}$ – множители, которые соответствуют интенсивностям на входах каналов, A_1 , A_2 , – азимутальные положения анализаторов в каналах «пси» и «дельта». Если считать, что параметры компенсатора известны, то система уравнений (3.23) позволяет в принципе выразить эллипсометрические параметры ψ и Δ , исключив неизвестные $I_{0\psi}$ и $I_{0\Delta}$. Для этого достаточно провести измерения при некотором фиксированном положении оптических элементов. Поэтому данная схема и называется статической: измерения происходят при фиксированных положениях азимутов оптических элементов. Однако, детальный анализ уравнений (3.10) – (3.13) показывает, что точность измерения эллипсометрических углов ψ и Δ зависит как от их значений, так и от целого набора неучтённых несовершенств оптических элементов (оптического дихроизма, погрешностей юстировки, рассеяния света и т.д.). По этой причине целесообразно проводить измерения Ψ и Δ при нескольких фиксированных значениях оптических элементов, чтобы избежать больших ошибок.

Рассмотрим, какие азимутальные углы оптических элементов представляют наибольший интерес. Прежде всего, необходимо исключить значения $P=0$ и 90° , так как при этом исчезает одна из поляризационных компонент в падающем пучке. Для аналитического рассмотрения удобно выбирать значения углов, кратные 45° (при этом получаются наиболее простые выражения для тригонометрических функций). Если из рассмотрения исключить симметричные положения, которые не добавляют новых уравнений, то в итоге получается 8 независимых конфигураций оптических элементов, которые приведены в таблице. Для каждой конфигурации поляризатор может принимать два положения $P=\pm 45^\circ$.

Таблица конфигураций оптических элементов.

Номер конфигурации	A ₁	C	A ₂
1	0	0	0
2	0	0	45
3	0	45	0
4	0	45	45
5	45	0	0
6	45	0	45
7	45	45	0
8	45	45	45

Рассмотрим частные случаи. Пусть $A_1=A_2=0^\circ$, $C=45^\circ$, $P=\pm 45^\circ$. Предположим также, что коэффициенты пропускания для быстрой и медленной осей компенсатора одинаковы, то есть $\rho_c = e^{i\delta_c}$. Подставляя эти значения в (3.23) получим после некоторых преобразований:

$$\cos 2\psi = -F_\psi \quad (3.24)$$

$$\pm \sin 2\psi \sin \Delta \sin \delta_c - \cos 2\psi \cos \delta_c = F_\Delta \quad (3.25)$$

Здесь введены обозначения: $F_\psi = \frac{I_1 - I_2}{I_1 + I_2}$, $F_\Delta = \frac{I_3 - I_4}{I_3 + I_4}$, знак \pm в (3.25)

соответствует положениям поляризатора $\pm 45^\circ$. Уравнение (3.24) однозначно определяет параметр ψ , а из уравнения (3.25) получаем для Δ :

$$\sin \Delta = \pm \frac{F_\Delta - F_\psi \cos \delta_c}{\sqrt{1 - F_\psi^2 \sin^2 \delta_c}} \quad (3.26)$$

Параметр Δ определяется неоднозначно этим уравнением, так как на интервале $(0, 360^\circ)$ функция $\sin\Delta$ имеет два решения. Чтобы устранить эту неоднозначность, необходимо провести дополнительное измерение при других положениях элементов. Например, если установить $A_2=45^\circ$, не меняя азимуты остальных элементов, то уравнение аналогичное (3.25) примет вид

$$\pm \sin 2\psi \cos \Delta = F_\Delta \quad (3.27)$$

(в уравнении (3.27) количественно значение F_Δ отличается от того, что фигурировало в уравнении (3.25) из-за различия в азимутах A_2). Из (3.27) можно определить $\cos\Delta$ и в сочетании с (3.26) это позволяет найти однозначное значение Δ .

Можно проводить измерения и при других азимутах оптических элементов. При этом получаются уравнения, связывающие ψ и Δ с измеренными интенсивностями, аналогичные (3.24), (3.27). Однако неоднозначность измерений эллипсометрических параметров, выполненных при одной конфигурации оптических элементов, по-прежнему остается. Это одно из неудобств однозонных измерений (то есть, измерений при одном фиксированном наборе элементов). Впрочем, это неудобство компенсируется рядом существенных преимуществ. Прежде всего - это малое время измерений, поскольку отсутствует необходимость в механических поворотах. Отсутствует также точная механика и лимбы отсчета углов, поэтому конструкция прибора существенно упрощается. Требования к стабильности источника тоже не столь жесткие как в динамической фотометрической схеме. Необходимо, чтобы интенсивность оставалась постоянной в течение последовательного считывания сигналов с фотоприемников (а это времена порядка десятков микросекунд). Если реализовать параллельное считывание сигналов с фотоприемников, то нестабильность источника вообще перестанет влиять на измерения.

Мы показали, как можно определить эллипсометрические параметры при известном фазовом сдвиге компенсатора. Покажем теперь, как можно определить сам фазовый сдвиг. Обратившись к уравнению (3.25) видим, что для этого необходимо провести измерения интенсивностей при двух положениях поляризатора: $P=45^\circ$ и $P=-45^\circ$. Тогда

$$\cos \delta_c = \frac{F_{\Delta}(45^{\circ}) + F_{\Delta}(-45^{\circ})}{2F_{\psi}} \quad (3.28)$$

В формуле (3.28) при вычислении $\cos \delta_c$ параметры образца исключаются, поэтому для измерений годится практически любой образец. Однако в том случае, когда ψ близко к 45° получаем $F_{\psi} \rightarrow 0$ и в (3.28) имеет место неопределенность типа $0/0$. Конечно, всегда можно выбрать образец, у которого ψ достаточно далеко отстоит от 45° . Но это требование к параметру ψ исключает практически важный случай измерений "на просвет", когда свет из плеча поляризатора падает в плечо анализатора минуя образец. Действительно, при этом $R_p=R_s=1$, поэтому $\psi=45^{\circ}$ и $\Delta=0^{\circ}$. Существует и другой способ измерения δ_c при положениях $P=0^{\circ}$ и 90° . Здесь по-прежнему рассматривается конфигурация элементов $A_1=A_2=0^{\circ}$ и $C=45^{\circ}$. Нетрудно убедиться прямой подстановкой, что $\cos \delta_c = F_{\Delta}(0^{\circ}) = -F_{\Delta}(90^{\circ})$. В этом случае нет никаких ограничений на параметры образца, в частности, можно проводить измерения "на просвет".

В статической фотометрической схеме дрейф параметров компенсатора оказывает такое же нежелательное действие на результаты измерений, как и в нулевой схеме. Однако в силу высокого быстродействия эллипсометра целесообразно тем не менее использовать однозонные измерения, корректируя периодически параметры компенсатора. Следует отметить, что проблема абсолютной точности измерений в фотометрической схеме является актуальной. Для ее решения требуется не только точное знание параметров компенсатора, но и учет других возможных несовершенств оптической схемы.

3.5. Модели эллипсометров, производимых в ИФП СО РАН и другими производителями

На базе статической схемы создан ряд моделей эллипсометров. Один из них – это лазерный эллипсометр ЛЭФ-752 (рис. 24).



Рисунок 24.

Технические характеристики эллипсометра:

Длина волны - 632.8 нм

Предельная чувствительность эллипсометрических параметров:

$$\delta\Psi=0.003$$

$$\delta\Delta=0.005$$

Время измерения в одной зоне – 1 мс

Время измерения в 4-х зонах 30 с

Диапазон углов падения от 45 до 70° дискретно через 5°



Рисунок 25

Другой представитель эллипсометров нового поколения, в основе которых лежит статическая фотометрическая схема – это спектральный эллипсометр (рис.25). Он состоит из двух отдельных блоков: осветителя и измерительного. Источником излучения служит ксеноновая короткодуговая лампа высокого давления. Малогабаритным монохроматором вырезается узкая спектральная полоса и с помощью световода передается в измерительные каналы эллипсометра. Положения оптических элементов (поляризатора и анализатора в канале пси) переключаются автоматически с помощью электроприводов. В качестве ахроматического компенсатора используется модифицированный ромб Френеля, азимутальное положение которого не меняется. Ниже приведены основные характеристики спектрального эллипсометра:

Спектральный диапазон, нм	250 – 1000
Спектральное разрешение, нм	3
Время измерения полного спектра, с	20
Точность измерения эллипсометрических параметров, град.:	

$\delta\Psi$	0.1
$\delta\Delta$	0.3

Оба эллипсометра как лазерный, так и спектральный соединяются с компьютером через USB порт и имеют развернутое программное обеспечение, которое включает различные режимы измерений, моделирование эллипсометрических задач и библиотеку оптических постоянных различных материалов.



Рисунок 26.

На рис.26 показан эллипсометр высокого пространственного разрешения ЛЭФ-8 МИКРОСКАН. Это лазерный эллипсометр, который предназначен для исследования локальных объектов, а также для картирования и отрисовки поляризационно оптических характеристик по площади образца. Здесь используется та же статическая фотометрическая схема, и в дополнение прибор снабжён двухкоординатным автоматическим столиком. Для повышения локальности измерений перед образцом установлен микрообъектив, который фокусирует лазерное излучение на образце. Из расходящегося отраженного пучка диафрагмой вырезается узкая область, соответствующая отражению на

заданном угле. Рабочие характеристики прибора: локальность измерений 5-10 мкм; точность перемещения столика, а также дискретность его перемещения по осям X и Y составляет 10 мкм; диапазон перемещения 150x150 мм. Время сканирования исследуемой области зависит от ее размеров и плотности сканирования. Для области размером 10x10 мм характерное время порядка одной минуты. Полученные результаты отображаются в виде топограммы или трехмерного изображения.

За рубежом производством эллипсометров занимаются несколько крупных компаний, таких как SENTECH Instruments, Nanofilm, Gaertner, J.A.Woollam Co., Jobin Yvon и другие. Ими производится эллипсометрическая аппаратура для научных исследований и специализированные эллипсометры для контроля в производственных циклах.

Практика производства эллипсометрической аппаратуры построена таким образом, что существуют базовые модели, к которым имеется набор различных опций. Например, базовая модель спектрального эллипсометра SE-800 фирмы SENTECH Instruments (с номинальным диапазоном длин волн от 350 до 850 нм) может быть укомплектована источником ультрафиолетового излучения, позволяющим расширить доступный диапазон до 250 нм, а также автоматически управляемыми гониометром, автоматическим столиком и микрообъективными насадками для проведения локальных измерений.

Из приборов выпускаемых фирмой J.A.Woollam Co следует отметить модели серии M44, где измерения проводятся параллельно на 44 длинах волн в диапазоне 410-750 нм. Для этого отраженный от образца белый свет разлагается по спектру дифракционной решеткой и засвечивает линейку кремниевых фотодиодов. Используя динамическую фотометрическую схему с вращающимся анализатором, удастся уменьшить время измерения спектра до 40 миллисекунд.

Следует также отметить модель той же компании VASE (Variable Angle Spectroscopic Ellipsometer), которая позволяет в автоматическом режиме измерять спектры эллипсометрических параметров при контролируемом изменении угла падения света. Получаемый большой массив экспериментальной информации используют затем при моделировании. Технические характеристики базовой модели:

Спектральный диапазон, нм	250 – 1000
Диапазон углов падения, град.	12 – 90
Время накопления сигнала на одной длине волны, сек.	1 – 2
Воспроизводимость измерений, град.:	
$\delta\Psi$	0.015
$\delta\Delta$	0.08

Фирмой Gaertner производятся серия моделей эллипсометров различного функционального назначения на базе оригинальной статической фотометрической схемы. Измеряются интенсивности поляризованного пучка света, который последовательно отражается от фотоприемных площадок, находящихся в фиксированном положении и специальным образом ориентированных относительно пучка. Часть света, падающего на каждый фотоприемник, поглощается на нем, создавая аналоговый сигнал, а оставшаяся часть отражается и падает на следующий приемник. Эллипсометрические параметры рассчитываются по интенсивностям, измеряемым на всех четырех приемниках.

ГЛАВА 4. Описание Эллипсометрических установок и методические указания по выполнению лабораторных работ.

4.1. Спектральная эллипсометрическая установка

В данном разделе приведено техническое описание спектрального эллипсометра, разработанного и изготовленного в ИФП СО РАН. Эллипсометр включает следующие узлы и компоненты:

Источник света

- лампа с блоком поджига
- источник питания
- монохроматор
- основание
- световолокно

Плечо поляризатора:

- коллимационная линза
- поляризатор

плечо анализатора:

- два анализатора
- светоотделяющий фазосдвигающий элемент
- фотодиоды с усилительно-приемными устройствами

основание

- гониометр с механизмами установки угла падения света
- предметный столик

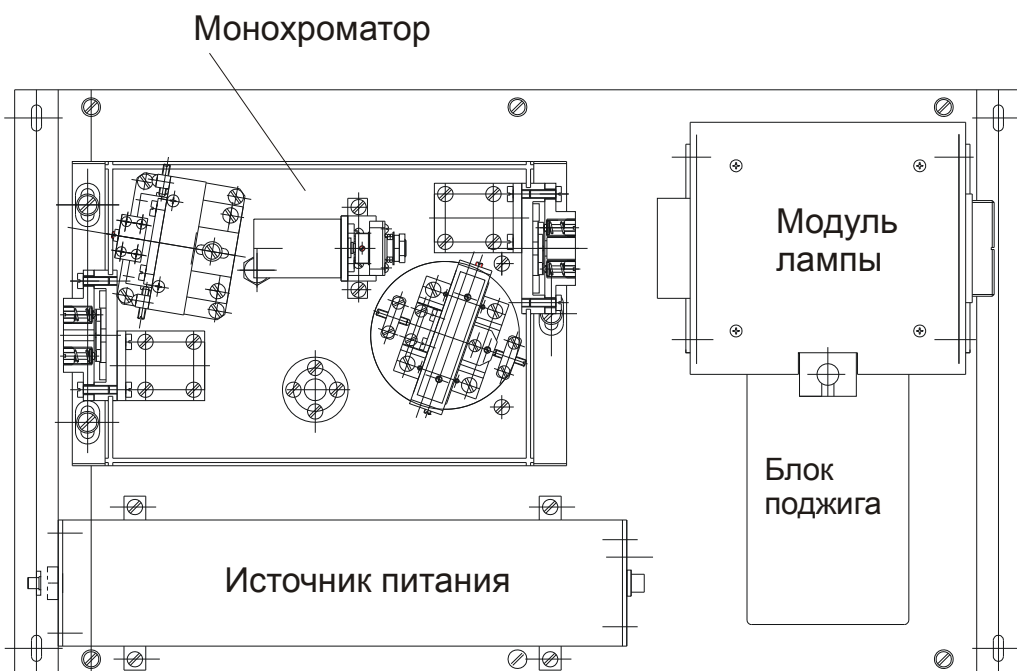
Источник света

На основании источника света закреплены: корпус лампы с блоком поджига, источник питания и монохроматор.

Устройство источника света включает ксеноновую дуговую лампу высокого давления мощностью 120 Вт. Лампа размещена в специальном термоохлаждаемом корпусе. Лампа закреплена на контактах, жестко связанных с устройством поджига и вместе с устройством поджига имеет возможность вертикального перемещения для настройки.

Стабилизированный источник питания предназначен для питания лампы и монохроматора.

Малогабаритный монохроматор управляется от компьютера через контроллер. Плата контроллера расположена в нижней половине монохроматора.

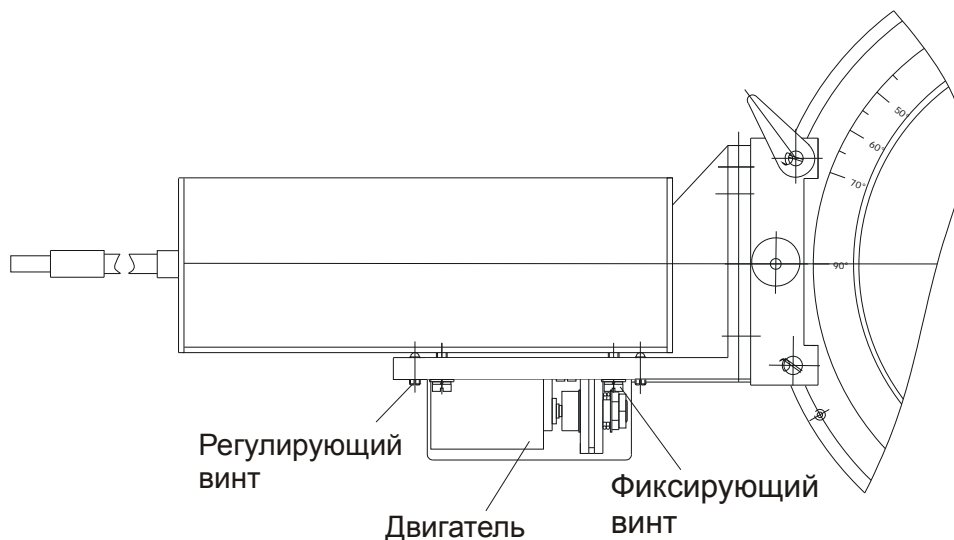


Световое излучение из монохроматора передается в плечо поляризатора через кварцевое световолокно.

Плечо поляризатора

Плечо поляризатора фиксируется на кронштейне гониометра крепежными винтами. Регулировочные винты предназначены для настройки положения плеча поляризатора.

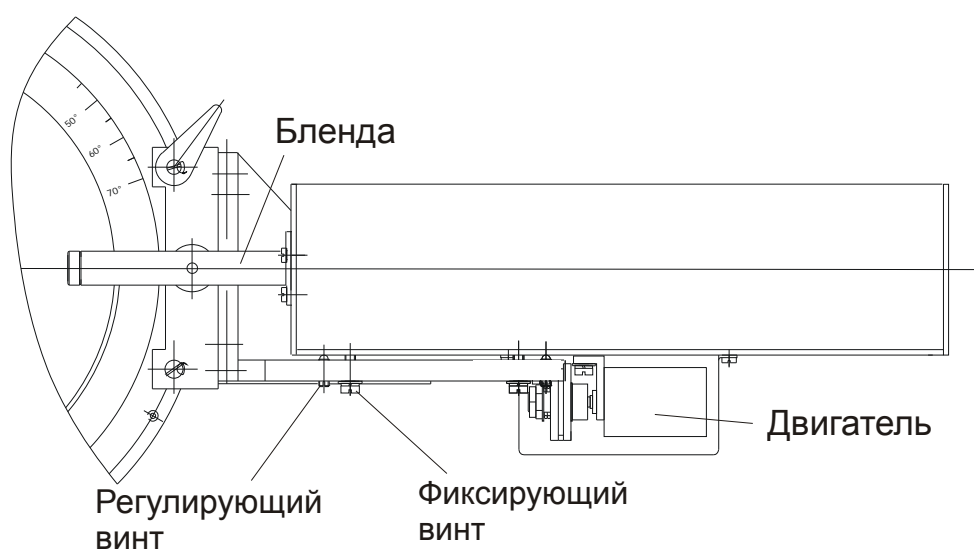
Поляризационная призма имеет возможность поворота вокруг оси и фиксации в положении -45 , $+45$. Переключение положения призмы поляризатора осуществляется мотором от компьютера через контроллер, расположенный под плечом поляризатора.



Плечо анализатора

Плечо анализатора, так же как плечо поляризатора фиксируется на кронштейне гониометра крепежными винтами. Регулировочные винты предназначены для настройки положения плеча анализатора.

В приемном плече анализатора измеряется состояние поляризации света, отраженного от поверхности образца.



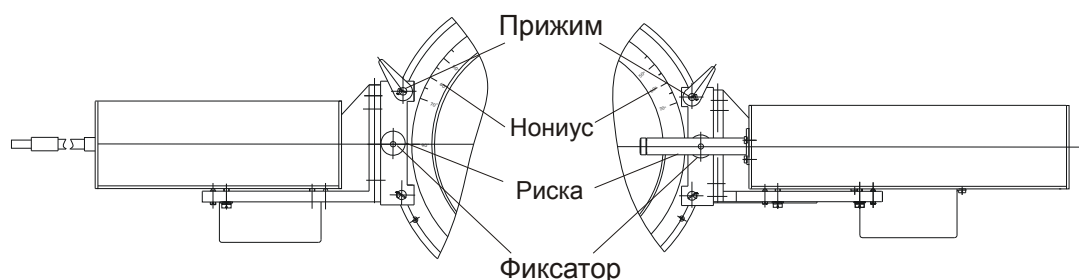
Анализирующее устройство в фазовом измерительном канале позволяет изменять азимут анализатора вместе с фотоприемником и устанавливать его в положение 0° или 45° относительно плоскости падения в зависимости от условий измерения.

Два положения анализатора предусмотрены для проведения измерений, исключающих неоднозначность определения параметра Ψ , а также для выбора наиболее оптимальных условий измерений.

Сигналы I_1 и I_2 , а также I_3 и I_4 , снимаемые с фотоприемников обоих каналов оцифровываются с помощью АЦП и передаются в компьютер для дальнейших расчетов эллипсометрических параметров и оптических характеристик.

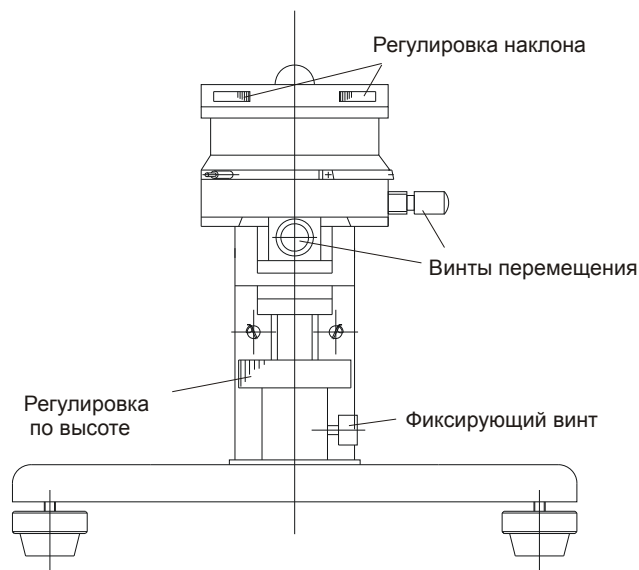
Механизм изменения угла падения

Плечи эллипсометра имеют возможность подниматься и фиксироваться в угловых положениях $0, 45, 50, 55, 60, 65, 70$ и 90° . Для изменения угла нужно ослабить прижим, оттянуть на себя фиксатор, поднять или опустить плечо поляризатора (или анализатора) до щелчка в нужном положении и затянуть прижим. Совпадение риски со значением на нониусе показывает установленный угол падения.



Предметный столик

Предметный столик закреплен на основании эллипсометра. Столик может вертикально перемещаться с помощью гайки вертикального перемещения для компенсации толщины измеряемого образца.



Кроме того, столик может перемещаться в двух горизонтальных направлениях с помощью микровинтов, а также вращаться вокруг своей оси на 360° . Вертикальное положение столика фиксируется стопорным винтом.

Для настройки углового положения образца верхняя пластина столика регулируется с помощью винтов.

Настройка образца в рабочее положение:

- Поместите образец на предметный столик
- Установите желаемый угол падения (стр 9)
- Вращением гайки подъема столика добейтесь прохождения отраженного от образца светового пучка через центр диафрагмы.

4.2. Сканирующий эллипсометр высокого пространственного разрешения.

Эллипсометр включает следующие узлы и компоненты:

Плечо поляризатора:

- HeNe лазер
- Узел поляризатора
- Микрофокусирующая насадка

Плечо анализатора:

- Два узла анализатора
- Светоделительный фазосдвигающий элемент
- Фотодиоды с усилительно-приемными устройствами
- Микропроекционная насадка

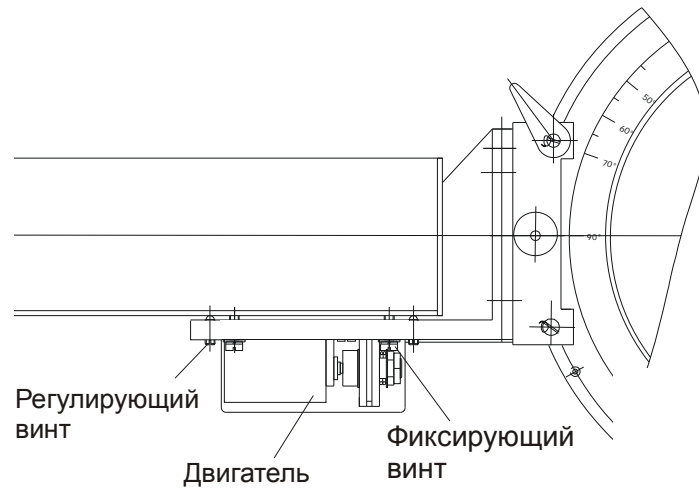
Основание

- Гониометр с механизмами установки угла падения света
- Сканирующий предметный столик
- Автоколлиматор/Микроскоп

Плечо поляризатора

Плечо поляризатора фиксируется на кронштейне гониометра крепежными винтами. Регулировочные винты предназначены для настройки положения плеча поляризатора.

Поляризационная призма имеет возможность поворота вокруг оси и фиксации в положении -45 , $+45$. Переключение положения призмы поляризатора осуществляется от компьютера двигателем постоянного тока через контроллер, расположенный под плечом



Плечо анализатора

Плечо анализатора, так же как плечо поляризатора фиксируется на кронштейне гониометра крепежными винтами. Регулировочные винты предназначены для настройки положения плеча анализатора.

В приемном плече анализатора измеряется состояние поляризации света, отраженного от поверхности образца.

Анализирующее устройство в фазовом измерительном канале позволяет изменять азимут анализатора вместе с фотоприемником и устанавливать его в положение 0° или 45° относительно плоскости падения в зависимости от условий измерения.

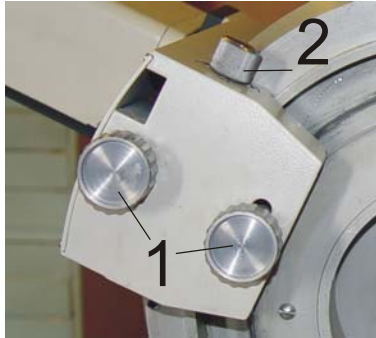
Два положения анализатора предусмотрены для проведения измерений, исключающих неоднозначность определения параметра Ψ , а также для выбора оптимальных условий измерений.

Сигналы I_1 и I_2 , а также I_3 и I_4 , снимаемые с фотоприемников обоих каналов оцифровываются с помощью АЦП и передаются в компьютер для дальнейших расчетов эллипсометрических параметров и оптических характеристик.

Механизм изменения угла падения

Плечи эллипсометра имеют возможность подниматься и фиксироваться в непрерывном диапазоне от 45° до 90° град. Для

изменения угла падения ослабьте фиксирующие винты 1 с задней стороны гониометра и, поддерживая плечо, установите его в требуемое положение. Затяните фиксирующие винты. При необходимости произведите тонкую доводку угла падения регулировочным винтом 2.

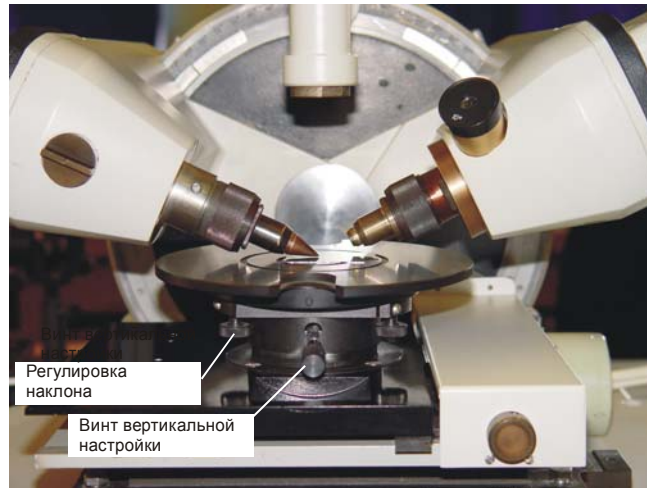


Совпадение риски со значением на нониусе показывает установленный угол падения.



Предметный столик

Сканирующий двух-координатный предметный столик закреплен на основании эллипсометра. Перемещение по обоим координатам осуществляется от шаговых приводов в пределах 0 – 150 мм. Столик может вертикально перемещаться с помощью винта вертикального перемещения для компенсации толщины измеряемого образца.



Вертикальное положение столика фиксируется стопорным винтом.

Угловое положение плоскости образца настраивается наклоном верхней пластины столика с помощью регулировочных винтов.

Микропроекционная система

Микропроекционная система предназначена для фокусировки лазерного пучка на поверхности измеряемого локального объекта и контроля качества наведения. Она включает в себя следующие узлы:

- фокусирующий микрообъектив;
- осветитель микропроекционной системы, расположенный в плече поляризатора;
- микроскопическая система, расположенная на входе плеча анализатора.



Настройка образца в рабочее положение:

Поместите образец на предметный столик

Установите требуемый угол падения (стр 7)

Отрегулируйте наклон образца с помощью автоколлиматора, при этом автоколлимационное пятно должно находиться в центре перекрестия сетки окуляра. Вертикальное положение образца настройте с помощью микропроекционной системы. Для этого введите поворотом ответный микрообъектив в оптический тракт. Включите осветительную систему микропроекционной насадки с помощью рукоятки включения, расположенной на входе плеча поляризатора. Наблюдая в окуляр микропроекционной системы и перемещая образец по высоте добейтесь минимального размера пятна.

4.3. Методические указания по выполнению лабораторных работ

Лабораторная работа №1

Измерение толщин и оптических постоянных сверхтонких слоёв в многослойных структурах

Введение

Тонкие слои диэлектриков, полупроводников и металлов в различных сочетаниях используются в микро- и нанoeлектронике при создании полупроводниковых структур, или устройств, при нанесении пассивирующих, просветляющих или отражающих покрытий, для создания омических контактов и в целом ряде других случаев. Как правило, толщины таких слоев должны быть выращены с прецизионной точностью. Например, ошибка в толщине просветляющего покрытия, составляющая одну десятую длины волны в материале (т.е. $\delta d \sim 10$ нм), может заметно повлиять на его спектральные характеристики. Особенно актуальной проблема измерения толщин сверхтонких слоев становится в связи с тенденцией миниатюризации электронных устройств и перехода технологических процессов ко все меньшим и меньшим размерам. Измерения оптических постоянных тонких слоев могут иметь как самостоятельное значение (например, при создании оптоэлектронных устройств), так и служить косвенной характеристикой физических и структурных и иных свойств этих слоев. Например, показатель преломления диоксида кремния зависит от его плотности, наличия пор и содержания гидроксильных групп. Показатель преломления нитрида кремния в значительной степени зависит от технологии его изготовления.

Метод эллипсометрии наиболее удобен для измерений оптических характеристик и толщин тонких слоев и обладает рядом преимуществ: он является бесконтактным, экспрессным, высокочувствительным и технологичным.

Цели работы:

1. Освоить методику измерения толщины и оптических характеристик тонких слоев диэлектриков и полупроводников для одно-, двух- и трехслойных структур с помощью спектрального эллипсометра.
2. Научиться моделировать измерения эллипсометрических параметров для оптимизации эксперимента, правильного выбора исходных параметров и оценки погрешности измерений.
3. Провести измерение толщины и показателя преломления пленок SiO_2 и Si_3N_4 на подложке кремния, двухслойных структур $\text{Si-SiO}_2\text{-Si}_3\text{N}_4$ и других.

Приборы и оборудование:

Спектральный эллипсометр, набор образцов, пинцет.

Компьютерное моделирование.

Перед измерениями образцов целесообразно провести компьютерное моделирование, которое состоит из следующих этапов:

1. Задание модели отражающей структуры и ее параметров;
2. Расчет спектральных зависимостей эллипсометрических параметров (прямая задача) и получение «как бы измеренных» спектров, то есть имитация измерений;
3. Решение обратной задачи для рассчитанных спектров и восстановление параметров структуры;
4. Сравнение эллипсометрических спектров при вариации параметров структуры.

Такое моделирование позволяет ответить на целый ряд принципиально важных вопросов, которые касаются общих закономерностей при решении прямой и обратной задач, достижимой в эксперименте точности измерения, визуальной оценки зависимостей эллипсометрических параметров для различных структур, предельных возможностей метода и других. Ниже

приведены примерные задания по моделированию. При этом каждый может пользуясь возможностью программы формулировать и решать свои индивидуальные вопросы. Прежде чем приступить к моделированию рекомендуем внимательно ознакомиться с теорией метода эллипсометрии (главы 1 и 2).

Задание 1. Зависимость спектров от толщины пленки.

Загрузите программу «Спектральный эллипсометр» и войдите в режим «обработка результатов». Задайте в окне слева структуру в виде однослойной системы, выбрав в качестве подложки файл «Si», а в качестве пленки - файл «SiO₂». В центральном окне вы сразу же получите спектральные зависимости эллипсометрических параметров. Изменяя толщину пленки d от 0 до 1000 нм наблюдайте, как будут меняться зависимости $\Psi(\lambda)$ и $\Delta(\lambda)$.

Вопросы для проверки:

1. Чему соответствуют спектры при $d=0$?
2. Почему с увеличением d в спектрах Ψ и Δ появляются осцилляции?
3. Как зависит частота осцилляций от толщины пленки и почему?
4. Почему спектры $\Delta(\lambda)$ получаются с разрывами?
5. Оцените максимальную толщину пленки, которую еще можно измерить эллипсометром, учитывая, что предельное разрешение монохроматора составляет 2 нм.

Задание 2. Восстановление толщины для тонких и для толстых пленок.

Для структуры, выбранной в предыдущем задании рассчитайте спектры для толщины $d=100$ нм. Нажмите на нижней панели кнопку «как измеренные». Теперь расчетные спектры воспринимаются программой как измеренные и могут быть в любой момент вызваны на экран нажатием кнопки «измерение». Измените толщину пленки на несколько нанометров. На экране вместе с «измеренными» спектрами появятся также расчетные для новой толщины. Отметьте флажком в качестве параметра поиска толщину пленки d и проведите поиск толщины. Вы должны получить исходную толщину 100 нм. Выполните эту операцию для разных начальных толщин поиска и определите область сходимости решения.

Задайте теперь спектральную зависимость показателя преломления пленки по формуле Коши, отметив коэффициенты A и B как подлежащие поиску (исходные значения можно взять $A=1.45$, $B=30$), при этом параметр $C=0$. Коэффициенты, определяющие поглощение в материале при этом должны быть равны нулю. Снова проведите поиск всех параметров модели. Прodelайте эту процедуру для разных толщин пленки начиная от единиц нанометров, определяя всякий раз коэффициент A , B и толщину d .

Вопросы для проверки:

1. Почему найденные значения толщин при задании оптических свойств пленки из файла и в виде формулы Коши не совпадают друг с другом?
2. Почему для пленки, заданной формулой Коши погрешность определения ее толщины возрастает с уменьшением d ? Почему этого не наблюдается, если оптические постоянные пленки заданы из файла?
3. Как, по вашему мнению следует задавать оптические свойства пленки, если ее толщина порядка 20 нм? 50 нм? 100 нм?
4. Как для тонкой пленки ($d=10$ нм) коррелируют найденные значения толщины и показателя преломления $n(\lambda)$ для некоторой фиксированной длины волны? Объясните результат. (Имеется в виду, что вы проводите несколько фитингов из разных стартовых положений, определяя всякий раз n и d).

Задание 3. Влияние переходного слоя.

Измените модель добавлением еще одного слоя в структуру. Задайте параметры промежуточного слоя (переходного слоя): показатель преломления в виде формулы Коши так, чтобы его среднее значение составляло ~ 2.5 , а толщину выберете несколько нанометров. Задайте параметры верхнего слоя так, как это делалось в предыдущих заданиях и просчитайте «как бы измеренные» спектры для полученной структуры. Снова перейдите к однослойной структуре и включите поиск для определения параметров слоя – толщины и коэффициентов формулы Коши. Прodelайте это для разных толщин верхнего и переходного слоев.

Вопросы для проверки:

1. Восстановленная толщина слоя отличается от исходной. В какую сторону и почему? Дайте наглядное объяснение.
2. Как изменились восстановленные спектры по сравнению с исходным?
3. Как зависит разница между исходными и восстановленными параметрами структуры (то есть, ошибка «измерения») от толщин верхнего и переходного слоев?

Задание 4. Поглощающие слои.

Выберите однослойную структуру и задайте оптические параметры слоя формулой Коши с поглощением $k \sim 0.2$ (показатель поглощения задается коэффициентами D, E и F). Просчитайте несколько спектров для разной толщины слоя (диапазон изменения толщины от единиц нанометров до 1000). Проведите фитинг параметров слоя для некоторых из этих толщин во всем диапазоне d. Прделайте то же самое для сильно поглощающих слоев ($k \sim 1$).

Вопросы для проверки:

1. Как зависит точность определения параметров от толщины слоя?
2. Почему точность определения заметно ухудшается для толстых пленок?
3. До какой максимальной толщины (по порядку величины) можно проводить измерения параметров слоев и самой толщины? Как эта толщина связана с показателем поглощения?
4. Какой моделью следует пользоваться, если толщина слоя превышает глубину проникновения света?

Задание 5. Двухслойные структуры.

Рассчитайте спектры для двухслойной структуры Si-SiO₂-Si₃N₄, взяв оптические постоянные слоев из соответствующих файлов или задавая их в виде формулы Коши. Толщины слоев задайте порядка сотни нанометров, разными для каждого слоя. Отметьте полученные спектры «как измеренные» и восстановите поиском параметры структуры. В качестве параметров поиска отметьте коэффициенты A и B для каждого слоя и толщины слоев. Попытайтесь восстановить параметры структуры, отметив максимальное количество параметров поиска (коэффициенты A, B, C, D, E, F для каждого слоя и толщины

d_1 и d_2). Перейдите в структуре к однослойной модели и для тех же «как бы измеренных» спектров восстановите параметры слоя.

Вопросы:

1. Как справляются с фитингом различные поисковые методы? Какой из них наиболее оптимальный?
2. Как зависит точность восстановления параметров от их числа?
3. Почему с увеличением числа искомых параметров точность их восстановления уменьшается?
4. Почему при поиске по однослойной модели совпадение расчетных и «как бы измеренных» спектров плохое?
5. Что можно использовать в качестве критерия адекватности между выбранной моделью и реальной исследуемой структурой?

Порядок выполнения работы.

Задание 1.

Установите на предметный столик эллипсометра один из образцов Si-SiO₂ и измерьте его спектры, перейдя в режим «измерение». После этого перейдите в режим «обработка результатов» и определите толщину пленки, задав ее оптические свойства как файл «SiO₂». Проведите ту же процедуру поиска, задав показатель преломления пленки по модели Коши, а показатель поглощения приняв равным нулю. Сравните результаты. Проведите поиск, включив в него также коэффициенты, описывающие поглощение в пленке.

Вопросы:

1. Почему толщина пленки, определенная двумя способами (при задании пленки в виде файла и в виде формулы Коши) получается различной?
2. Как влияет на точность определения толщины увеличение числа искомых параметров (при допущении поглощения в пленке)? Следует ли использовать априорную информацию об оптических свойствах материалов для достижения максимальной точности измерений?

Задание 2.

Проведите аналогичные измерения и обработку результатов для нескольких пленок диоксида кремния с различной толщиной и определите их параметры при двух способах задания пленки (как это предлагалось в предыдущем задании).

Вопросы:

1. Почему для тонких пленок наблюдается разброс в экспериментально определенных спектральных зависимостях для показателя преломления, в то время как для толстых пленок результаты оказываются более воспроизводимыми от образца к образцу.
2. В каких случаях следует описывать пленку формулой Коши, а в каких случаях следует задавать ее параметры из файла?
3. Оцените точность измерения толщины пленки в ваших экспериментах.

Задание 3.

Проведите измерения для пленок диоксида кремния, выращенных по различным технологиям и определите спектральные зависимости показателя преломления этих пленок. Чтобы точность измерения была выше желательно проводить измерения на пленках толщиной не менее 100 нм. Сравните спектральные зависимости $n(\lambda)$ для измеренных пленок. Какие пленки имеют наибольший показатель преломления?

Задание 4.

Проведите измерение эллипсометрических спектров для образцов Si-Si₃N₄ и рассчитайте параметры пленок (толщину и спектральную зависимость показателя преломления). Проведите эти измерения для нескольких точек на шайбе и составьте карту распределения толщины и показателя преломления пленки по площади шайбы.

Задание 5.

Измерьте спектры эллипсометрических параметров для образца со слоем поликристаллического кремния (Si-SiO₂-p-Si). Перейдите в режим моделирования и, выбрав двухслойную структуру – (первый слой файл «SiO₂», второй слой файл поликремния; обратите внимание, что в библиотеке есть два

файла поликремния), попробуйте провести фитинг и определить толщины слоев. Вы обнаружите, что наблюдается не очень хорошее совпадение измеренных и расчетных спектров. Подумайте, из-за чего такое может происходить?

Известно, что поверхность поликристаллического кремния имеет развитый рельеф. Кроме того, кремний окисляется на воздухе, поэтому на поверхности должен присутствовать слой окисла. Чтобы учесть рельеф и поверхностный окисел, необходимо усложнить модель, добавив к ней еще два слоя. Третий слой (от подложки) должен описывать влияние рельефа поверхности. Его оптические свойства можно задать в виде смеси поликристаллического кремния и пустот (файл материалов «voids») в определенном соотношении. Тогда оптические свойства такой смеси рассчитываются по модели Бругемана (см. п.1.7 «теории метода эллисометрии»). Окисную пленку можно выделить в виде отдельного 4-го слоя, задав ее свойства в виде файла диоксида кремния. Однако, учитывая, что поверхностный рельеф превышает толщину естественного окисла, логично и шероховатый слой и окисел описать одним слоем. При этом наличие окисла будет еще сильнее уменьшать рефракцию эффективного слоя, действуя в том же направлении, что и пустоты. Поэтому, в принципе, вообще можно не учитывать окисную пленку, а ее действие на результаты измерений описывать дополнительным объемом пустот в добавленном третьем слое. Полученная в результате структура схематически изображена на рисунке.

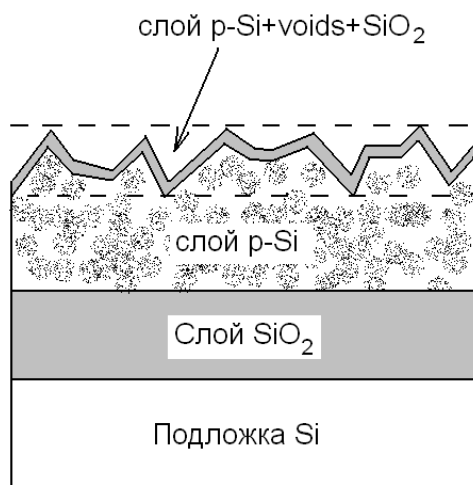


Рисунок
Схематическое изображение модели для шероховатого слоя поликристаллического кремния на Si-SiO₂.

Проведите фитинг, используя в качестве подгоночных параметров толщины всех трех слоев и долю пустот в верхнем слое. Чтобы отметить долю материала как подгоночный параметр, следует открыть окно «градиент» и отметить флажком соответствующий коэффициент. Улучшилось или нет теперь совпадение измеренных и расчетных спектров? Чтобы объективно оценивать совпадение спектров, используйте для этого критерий качества поиска q , значение которого высвечивается в нижней части верхнего окна. При этом учтите, что сравнивать можно только значения q , полученные для одной и той же целевой функции, вид которой также задается в этом окне.

Добиться лучшего совпадения спектров можно еще одним способом. Оптические свойства поликристаллического кремния зависят от технологических особенностей его выращивания и могут варьироваться в широком диапазоне. Качественно эти вариации можно объяснить наличием в объеме поликремния небольшого количества аморфного или монокристаллического кремния, а также незначительной доли пустот. Наконец, можно учесть размытие границы раздела между SiO_2 и поликремнием. Это достигается также заданием переходного слоя из смеси соответствующих материалов.

Предлагается провести самостоятельное исследование с использованием всех перечисленных рекомендаций и добиться максимального совпадения спектров. Результаты исследования представить в виде отчета, где представлены графики и краткие пояснения к ним. Кроме того, отдельной таблицей представьте параметр качества при подгонке с указанием соответствующей модели и укажите параметры самой модели, найденные в результате поиска.

Лабораторная работа №2

Изучение диэлектрических функций полупроводниковых материалов и критических точек их зонной структуры.

Общие сведения из оптики полупроводников.

Оптические постоянные полупроводников являются их фундаментальными физическими характеристиками. В видимом, ультрафиолетовом и ближнем инфракрасном диапазонах длин волн поглощение света в полупроводниках обусловлено межзонными переходами и поэтому их оптические свойства тесно связаны с особенностью зонной структуры. Спектральная эллипсометрия является базовым методом для измерения оптических свойств полупроводников и исследования особенностей их зонной структуры.

Интерпретация оптических спектров может быть построена на основе зонной теории полупроводников. В основе ее лежит положение, что все разрешенные состояния электронов образуют на шкале энергий энергетические зоны. Наивысшая по энергии зона – зона проводимости – отделена от валентной зоны энергетическим зазором ширины E_g , где разрешенных состояний нет. Электрон может поглотить фотон и перейти на более высокий энергетический уровень. В видимом и приграничных к нему диапазонах энергия фотона E_ϕ , которая связана с длиной волны соотношением $E_\phi(\text{эВ}) = 1.24/\lambda(\text{мкм})$, сравнима с шириной запрещенной зоны для многих полупроводников. Если $E_\phi < E_g$, то энергии фотона оказывается недостаточно, чтобы перебросить электрон из одной разрешенной зоны в другую. В этом случае полупроводник проявляет себя как прозрачный материал, и показатель его поглощения равен нулю.* Если же $E_\phi > E_g$, то свет будет поглощаться с одновременным переходом электронов

* При этом возможны внутризонные переходы, которые играют заметную роль только в дальнем инфракрасном диапазоне (поглощение на свободных носителях).

из валентной зоны в зону проводимости. Такое поглощение называется собственным или фундаментальным поглощением света.

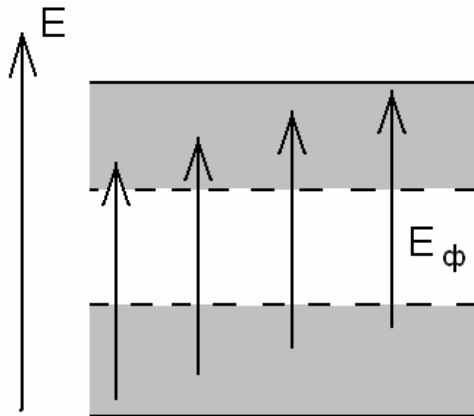
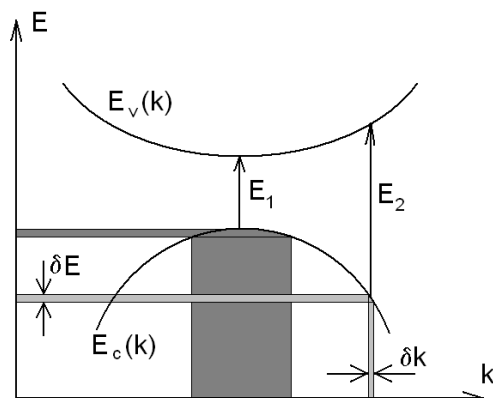


Рисунок 1

На рис.1 вертикальными стрелками схематично показаны возможные варианты переходов электрона из нижней энергетической зоны в верхнюю. Во всех случаях разность между энергиями конечного и начального состояний одна и та же и равна энергии фотона E_ϕ . Вероятность поглощения фотона с энергией E_ϕ определяется суммированием по всем возможным переходам с заданной энергией возбуждения. При подсчете этой вероятности определяющую роль играет плотность электронных состояний, которые могут принимать участие в таких переходах. Она называется комбинированной



плотностью состояний, так как зависит от плотности состояний в обеих зонах.

Рисунок 2

При определенных значениях энергии фотона комбинированная плотность состояний имеет сингулярность. Такие точки в зоне Бриллюэна называются критическими.

Существование критических точек объясняется схемой на рис.2, где показаны зависимости энергии электрона от волнового вектора для валентной зоны $E_v(k)$ и зоны проводимости $E_c(k)$. Для переходов с энергией E_2 внутри интервала δE существует соответствующий интервал δk в k -пространстве. Число состояний, попадающий в интервал δE , будет пропорционально δk . Переходам с энергией E_1 при том же интервале δE соответствует значительно больший интервал δk , а следовательно и большее число состояний из-за того, что $\frac{dE}{dk} = 0$. Поэтому и вероятность переходов с энергией E_1 будет больше, чем с энергией E_2 .

Здесь показана упрощенная картина. Во-первых, следует провести такие же рассуждения для зоны проводимости и учесть общий вклад обеих зон (при этом появляется понятие комбинированной плотности состояний на интервал энергии). Во-вторых, волновой вектор k трехмерный, а это создает более сложную картину при описании электрон – фотонного взаимодействия. Но в любом случае, при выполнении условия $\frac{dE_v}{dk} = \frac{dE_c}{dk}$ в данной точке k -пространства появляется сингулярность в комбинированной плотности состояний, отнесенной на интервал энергии.

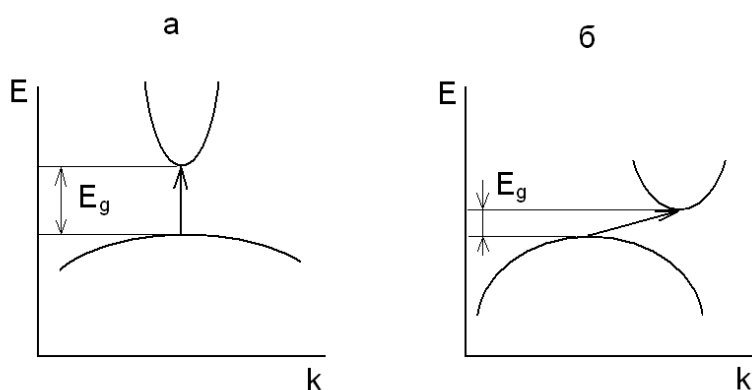


Рисунок 3

Различают прямые и непрямые межзонные переходы. Если максимум валентной зоны и дно зоны проводимости расположены в одной точке зоны Бриллюэна, то имеет место прямой переход, который происходит без изменения квазиимпульса электрона (рис.3а). Прямозонным полупроводником является, например GaAs. Если же экстремумы рассматриваемых энергетических зон разнесены в k -пространстве, то возможен переход с изменением квазиимпульса. Такие переходы называют непрямыми (рис. 3б). Поглощение на таких переходах возможно с участием рассеивателя, например фонона, поэтому оно имеет меньшую вероятность по сравнению с прямыми переходами и коэффициент поглощения для непрямозонных полупроводников медленно возрастает с энергией фотона. Примером непрямозонных полупроводников является кремний и германий.

Из проведенных рассуждений ясно, что для энергий фотона вблизи критических точек должен наблюдаться максимум поглощения. Вообще, спектры полупроводников вблизи энергий, соответствующих критическим точкам, представляют наибольший интерес и обнаруживают максимальную чувствительность к любым внешним воздействиям. Существуют различные модели, позволяющие описать спектры диэлектрических функций вблизи критических точек. Расчет диэлектрической функции на основе точного решения квантомеханической задачи представляет очень сложную задачу. Поэтому обычно используют полуэмпирические подходы. Один из таких подходов – представление критической точки моделью гармонического осциллятора (формула 21 главы 2). Следует отметить, что диэлектрическая функция, рассчитанная по модели гармонического осциллятора автоматически удовлетворяет соотношению Крамерса-Кронига. Поэтому подгоночные параметры E_0 , A и Γ , удовлетворяющие вещественной части измеренной диэлектрической функции, будут автоматически удовлетворять и мнимой и наоборот. Это распространяется и на спектры эллипсометрических параметров. Однако, учитывая экспериментальные погрешности целесообразно проводить фитинг параметров E_0 , A и Γ , опираясь на оба спектра $\Psi(E)$ и $\Delta(E)$.

Порядок выполнения работы

Задание 1.

Измерьте спектры эллипсометрических параметров образца Si и в режиме «моделирование» рассчитайте для этих измерений диэлектрические функции $\epsilon_1(E)$ и $\epsilon_2(E)$. Необходимо учесть, что образец кремния имеет естественный поверхностный окисел, поэтому рассчитанные в программе (расчет проводится по модели полубесконечной среды) диэлектрические функции не соответствуют их истинным значениям. Следует провести корректировку спектров. Для этого измеренные спектры ϵ занесите в библиотеку оптических материалов. Используя эти спектры как эффективную подложку можно рассчитать скорректированные спектры кремния, если нанести на эту эффективную подложку слой SiO_2 с отрицательной толщиной ~ -2 нм (толщину оксида можно уточнить, если сравнить измеренный спектр со спектром модели Si-SiO₂). Действительно, «нанесение» слоя отрицательной толщины физически эквивалентно удалению такого слоя. Учитывая, что для сверхтонких слоев возможна замена структуры эффективной подложкой, то рассмотренный выше алгоритм является вполне корректным.

Для рассчитанных вышеописанным образом спектров $\epsilon_{1,2}(E)$ определите положения критических точек E_1 и $E_1 + \Delta_1$ (они совпадают с максимумами функции $\epsilon_2(E)$), оцените полуширину спектральных максимумов. Используя модель гармонических осцилляторов, промоделируйте поведение диэлектрической функции вблизи критических точек и найдите параметры осцилляторов.

В диапазоне длин волн 500 – 1000 нм можно описать спектры диэлектрических функций моделью Коши. Пользуясь возможностями поиска, заложенными в программу, найдите коэффициенты Коши. Прodelайте это для различных диапазонов спектра. Определите максимальную погрешность аппроксимации. Прodelайте то же самое с использованием аппроксимационной формулы Сельмейера.

Вопросы:

1. Почему в диапазоне длин волн от 500 до 1000 нм наблюдается довольно слабая дисперсия оптических постоянных?

2. Как зависит высота пика $E_1 + \Delta_1$ в спектре псевдодиелектрической функции ϵ_2 от толщины естественного окисла?

3. При какой толщине шайбы она становится полупрозрачной на длине волны 1 мкм, и нельзя пользоваться моделью полубесконечной среды? Можно ли в этом случае пользоваться однослойной моделью «воздух - кремний - воздух»?

Задание 2.

Измерьте спектр арсенида галлия. Сравните полученные результаты со спектрами, имеющимися в библиотеке. Аналогично тому, как это было выполнено в предыдущем задании, скорректируйте измеренный спектр на наличие естественного окисла. При этом показатель преломления окисла можно задать по модели Коши, а толщину выбрать такую, чтобы измеренные спектры максимально совпадали с расчетными в длинноволновом диапазоне. Определите край поглощения арсенида галлия и положения критических точек.

Диэлектрическую функцию GaAs можно описать в рассматриваемом спектральном диапазоне моделью 6 осцилляторов. Исходные параметры осцилляторов приведены в таблице. Уточните их значения применительно к вашему измеренному спектру.

Номер осциллятора	E_i	A_i	Γ_i
1			
2			
3			
4			
5			
6			

Вопросы:

1. При учете естественного окисла зависит ли коррекция спектров от выбранного значения показателя преломления?

2. С какой точностью удастся аппроксимировать измеренные спектры моделью осцилляторов?
3. Почему в отличие от кремния для GaAs поглощение быстро растет по мере удаления от края поглощения?

Задание 3.

Измерьте спектры одной из пленок теллурида цинка. Аналогично тому, как это делалось в двух предыдущих заданиях, скорректируйте эти спектры, чтобы избавиться от влияния естественного окисла. Определите положение критических точек в спектре. Для этого лучше рассматривать спектр диэлектрической функции ϵ_2 , тогда положения критических точек E_1 и $E_1+\Delta_1$ просто совпадают с соответствующими максимумами $\epsilon_2(E)$. Определите край для ZnTe по началу осцилляций в спектрах. Ограничиваясь длинноволновым диапазоном, где поглощение в спектре отсутствует, определите толщину пленки. Для этого дисперсию показателя преломления следует задать формулой Коши и провести поиск коэффициентов Коши и толщины пленки.

Проведите измерения спектров для пленки тройного соединения CdZnTe. Проведите сравнительный анализ со спектрами ZnTe.

Вопросы:

1. Почему для ZnTe в области прозрачности наблюдаются интерференционные осцилляции, в то время как для GaAs в аналогичной ситуации никаких осцилляций нет?
2. Оцените, как сильно возрастает ϵ_2 по мере удаления от края фундаментального поглощения и ответьте, является ли ZnTe прямозонным полупроводником или непрямозонным?