

УДК 535.32+535.34

## АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПРОЗРАЧНОГО СЛОЯ НА ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПОДЛОЖКЕ

**Н.И. Стаськов***Могилевский государственный университет им. А.А. Кулешова*

## THE ANALYTICAL SOLUTION OF THE INVERSE PROBLEM FOR THE SPECTROPHOTOMETRIC TRANSPARENT LAYER ON AN ABSORBING SUBSTRATE

**N.I. Stas'kov***A.A. Kuleshov Mogilev State University*

Впервые получено аналитическое и численное решения обратной спектрофотометрической задачи для слоя диоксида кремния на кремниевой подложке. Аналитически определенные параметры слоя и подложки можно использовать в качестве первых приближений при численных расчетах параметров трехслойной модели. Структуру неоднородных поверхностного и переходного слоев интерпретировали моделью Максвелла-Гарнетта и Бруггемана.

**Ключевые слова:** интерференционная спектрофотометрия, переходный слой, оптические постоянные, толщина слоя.

For the first time, an analytical and numerical solution of the inverse problem for the spectrophotometric silicon dioxide layer on a silicon substrate is obtained. Analytical determination of the parameters of the layer and the substrate can be used as the first approximation in numerical calculations of the parameters of the three-layer model. Inhomogeneous structure of the surface and transition layers is interpreted by Maxwell-Garnett & Bruggeman model.

**Keywords:** interference spectrophotometry, transition layer, optical constants, thickness of the layer.

### Введение

Известно [1], что при оптической толщине слоя, соизмеримой с длиной волны света  $\lambda$ , в спектрах отражательных  $R(\lambda)$  и пропускательных  $T(\lambda)$  способностей наблюдаются максимумы и минимумы. В работе [2] для модельного однородного поглощающего слоя на однородной диэлектрической пластине конечной толщины с постоянными оптическими характеристиками продемонстрирована возможность численного определения всех параметров слоя – толщины  $d$ , показателей преломления  $n_i(\lambda)$  и поглощения  $k_i(\lambda)$ . Методика [3], [4] аналитического определения трех параметров слоя основана на построении огибающих экстремумов в экспериментальных спектрах и получении аналитических выражений этих огибающих. Такая процедура практически не возможна уже для спектров двухслойной структуры [5]. Применение аналитической методики и точность определения параметров полимерных пленок, нанесенных на кремниевые подложки, обсуждалось в работе [4]. В работе [6] теоретически получены аналитические выражения огибающих максимумов и минимумов коэффициентов отражения  $s$  и  $p$  поляризованного света модельной многослойной структуры для  $\lambda = \text{const}$  и угла падения от 0 до 90°. В литературе отсутствуют данные аналитического

определения оптических характеристик подложки, на которой находится интерференционный слой.

Все рассмотренные работы основываются на известной классической модели среда – слой – подложка с идеальными границами раздела. Обратим внимание на то, что интерференция на слое обуславливается когерентностью волн отраженных от поверхности слоя и подложки. Не вызывает сомнения, что в рассматриваемом случае наличие переходного слоя должно проявляться на измеренных спектрах и на рассчитанных параметрах структуры. В работе [7] натуральными и численными экспериментами (ЛЭФ-3М,  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ ) исследовано влияние переходных слоев между наноразмерной пленкой диоксида кремния и кремниевой подложкой КЭФ5 на эллипсометрические углы. Показана целесообразность замены структуры подложка – переходный слой подложкой с эффективными оптическими характеристиками при определении толщины и показателя преломления пленки. В работе [8] переходный слой между диоксидом и кремниевой подложкой не учитывается при исследовании методом спектральной эллипсометрии двухслойной кремниевой структуры.

В данной работе сделана попытка обнаружения переходных слоев в пленочных структурах методами интерференционной спектрофотометрии. Получены аналитические решения обратной четырехпараметрической спектрофотометрической

задачи для толстого ( $d \sim \lambda$ ) прозрачного ( $k_1(\lambda) = 0$ ) слоя на поглощающей подложке с оптическими характеристиками  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$ . Предложены две методики аналитического определения оптических характеристик подложки, основанные на использовании спектров  $R_s(\lambda)$ ,  $R_p(\lambda)$  для одного угла падения и спектров  $R_s(\lambda)$  для двух углов падения. Практически алгоритмы аналитических решений реализованы на методе огибающих интерференционных экстремумов в спектрах  $R(\lambda)$  слоя диоксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ) на кремниевой подложке (cSi, КДБ12). Эта структура достаточно исследована и может использоваться для тестирования различных оптических задач.

### 1 Теория метода

Для слоя на подложке (рисунок 1.1) коэффициент отражения  $s$  и  $p$  поляризованного света

$$R(\lambda) = \frac{\left| r_{01}(\lambda) e^{i\alpha_{01}(\lambda)} + |r_{12}(\lambda)| e^{i(\alpha_{12}(\lambda) - 2\delta(\lambda))} \right|^2}{\left| 1 + |r_{01}(\lambda)| |r_{12}(\lambda)| e^{i(\alpha_{01}(\lambda) + \alpha_{12}(\lambda) - 2\delta(\lambda))} \right|^2}, \quad (1.1)$$

при  $k_1(\lambda) = 0$  не выходит за пределы максимальных  $(+, \alpha_{12}(\lambda) - 2\delta(\lambda) = 2m\pi)$  и минимальных  $(-, \alpha_{12}(\lambda) - 2\delta(\lambda) = 2(m+1)\pi, m \in N \cup \{0\})$  значений, которые являются соответствующими огибающими экстремумов

$$R_{\pm}(\lambda) = \left( \frac{|r_{01}(\lambda)| \pm |r_{12}(\lambda)|}{1 \pm |r_{01}(\lambda)| |r_{12}(\lambda)|} \right)^2. \quad (1.2)$$

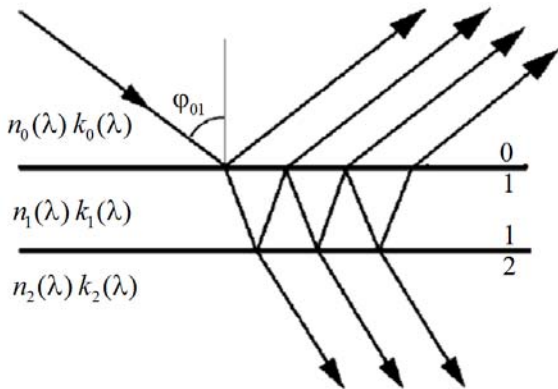


Рисунок 1.1 – Оптическая модель слоя

В выражении (1.1)  $r_{ij}(\lambda)$  и  $\alpha_{ij}(\lambda)$  – хорошо известные амплитудные коэффициенты отражения и фазы отраженных лучей на границах раздела ( $i = 0, 1, j = 1, 2$ ),  $\delta(\lambda)$  – фазовая толщина слоя [1]. На основании выражения (1.2) можно показать, что для диэлектрических пленок с малым показателем преломления ( $n_1(\lambda) < 2$ ) в области слабого поглощения спектры  $R_-(\lambda)$  близки к нулю, в особенности, для  $p$  поляризованного

света. Определение таких спектров на практике неизбежно приведет к большим ошибкам при расчете толщины и оптических характеристик слоя.

В нашем случае свет падает на слой из воздуха ( $n_0(\lambda) = 1, k_0(\lambda) = 0$ ) под углом  $\varphi_{01}$ . При этом не учитывается отражение излучения от нижней грани достаточно толстой поглощающей подложки. Учет нижней грани прозрачной ( $k_0(\lambda) = 0$ ) подложки сделан в работе [2]. В работе [3] представлена методика определения по спектрам  $R_+(\lambda)$  и  $R_-(\lambda)$  спектров коэффициентов отражения  $s$  и  $p$  поляризованного света для границ раздела воздух – слой

$$R_{01}(\lambda) = \quad (1.3)$$

$$= \left( \frac{1 - \sqrt{R_+(\lambda)} \sqrt{R_-(\lambda)} - \sqrt{(1 - R_-(\lambda))(1 - R_+(\lambda))}}{\sqrt{R_+(\lambda)} - \sqrt{R_-(\lambda)}} \right)^2$$

и слой – подложка  $R_{12}(\lambda) = |r_{12}(\lambda)|^2$ .

Как видим, для определения оптических характеристик подложки необходимо определить  $n_1(\lambda)$ , угол падения света из слоя на подложку  $\varphi_{12}$  и по огибающим спектров определить  $R_{12}(\lambda)$  [3]. Это приведет к увеличению погрешностей определения значений  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$ . В отличие от подхода, предложенного в работе [3], воспользуемся, во-первых, тем, что для прозрачного слоя  $R_{01}(\lambda)$  зависит только от параметра  $n_1(\lambda)$ , значение которого можно найти при одном угле падения. При использовании  $s$  поляризованного света выражение для определения спектра  $n_1(\lambda)$  имеет вид

$$n_1(\lambda) = \quad (1.4)$$

$$= \sqrt{\sin^2 \varphi_{01} + \left( \frac{\cos \varphi_{01} [1 + R_{01s}(\lambda) + 2\sqrt{R_{01s}(\lambda)}]}{1 - R_{01s}(\lambda)} \right)^2}.$$

Во-вторых, не трудно показать, что для прозрачного слоя спектры  $R_+(\lambda)$  в (1.2) являются спектрами чистой подложки

$$R_{+s} = \left| \frac{\cos \varphi_{01} - \left( (n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2 \varphi_{01} \right)^{0.5}}{\cos \varphi_{01} + \left( (n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2 \varphi_{01} \right)^{0.5}} \right|^2,$$

$$R_{+p} = \left| \frac{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 \cos \varphi_{01} - \left( (n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2 \varphi_{01} \right)^{0.5}}{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 \cos \varphi_{01} + \left( (n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2 \varphi_{01} \right)^{0.5}} \right|^2,$$

которые определяются углом падения и неизвестными параметрами  $n_2(\lambda)$ ,  $k_2(\lambda)$ . Рассмотрим два подхода к определению оптических параметров подложки. Во-первых, параметры  $n_2(\lambda)$  и

$k_2(\lambda)$  аналитически можно найти по отношению спектров  $\frac{R_{+p}(\lambda)}{R_{+s}(\lambda)}$  и спектру  $R_{+s}(\lambda)$ , измеренным при одном угле падения

$$n_2(\lambda) - ik_2(\lambda) = \sqrt{(\eta_1(\lambda) - i\eta_1(\lambda))^2 + \sin^2 \varphi_{01}},$$

где

$$C(\lambda) = \frac{R_{+p}(\lambda)}{R_{+s}(\lambda)}, \quad (1.5)$$

$$\eta_1(\lambda) = \frac{(\cos^2 \varphi_{01} - \sin^2 \varphi_{01})(1 - C(\lambda))(1 - R_{+s}(\lambda))}{2 \cos \varphi_{01} \left[ \cos^2 \varphi_{01} (1 - C(\lambda))(1 + R_{+s}(\lambda)) - \sin^2 \varphi_{01} (1 + C(\lambda))(1 - R_{+s}(\lambda)) \right]},$$

$$\eta_2(\lambda) = \sqrt{\frac{(\cos \varphi_{01} - \eta_1(\lambda))^2 - (-R_{+s}(\lambda)(\cos \varphi_{01} + \eta_1(\lambda))^2)}{R_{+s}(\lambda) - 1}}.$$

Во-вторых, характеристики подложки  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  аналитически можно найти и по спектрам  $R_{+s}(\lambda)$ , рассчитанным для двух углов падения излучения на слой подобно тому, как это было сделано в работе [9] при определении оптических параметров однородной среды по спектрам НПВО. В таком случае необходимо при двух углах падения  $\varphi_{01}^*$  и  $\varphi_{01}^{**}$  измерить два интерференционных спектра  $R_{+s}^*(\lambda)$  и  $R_{+s}^{**}(\lambda)$ , и по ним определить спектры огибающих максимумов  $R_{+s}^*(\lambda)$  и  $R_{+s}^{**}(\lambda)$ . Ниже приведен алгоритм аналитического расчета оптических функций подложки для этого подхода:

$$a_1(\lambda) = (1 - R_{+s}^*(\lambda))^4 (R_{+s}^*(\lambda))^{-1}, \quad (1.6)$$

$$b_1(\lambda) = (1 + R_{+s}^*(\lambda))^2 \cos^4 \varphi_{01}^*,$$

$$c_1(\lambda) = (1 - R_{+s}^*(\lambda))^2 \cos^2 \varphi_{01}^*,$$

$$d_1(\lambda) = R_{+s}^*(\lambda) \cos^4 \varphi_{01}^*,$$

$$a_2(\lambda) = (1 - R_{+s}^{**}(\lambda))^4 (R_{+s}^{**}(\lambda))^{-1},$$

$$b_2(\lambda) = (1 + R_{+s}^{**}(\lambda))^2 \cos^4 \varphi_{01}^{**},$$

$$c_2(\lambda) = (1 - R_{+s}^{**}(\lambda))^2 \cos^2 \varphi_{01}^{**},$$

$$d_2(\lambda) = R_{+s}^{**}(\lambda) \cos^4 \varphi_{01}^{**},$$

$$p(\lambda) = \frac{a_1(\lambda)d_2(\lambda) - a_2(\lambda)d_1(\lambda)}{c_1(\lambda)d_2(\lambda) - c_2(\lambda)d_1(\lambda)},$$

$$q(\lambda) = \frac{b_1(\lambda)d_2(\lambda) - b_2(\lambda)d_1(\lambda)}{c_1(\lambda)d_2(\lambda) - c_2(\lambda)d_1(\lambda)},$$

$$x(\lambda) = 0.25(a_1(\lambda) - c_1(\lambda)p(\lambda) + 0.25d_1(\lambda)p^2(\lambda)),$$

$$y(\lambda) = 4(c_1(\lambda)q(\lambda) - b_1(\lambda) - 0.5d_1(\lambda)p(\lambda)q(\lambda)),$$

$$z(\lambda) = 16d_1(\lambda)q^2(\lambda),$$

$$m(\lambda) = \left( -y(\lambda) - (y^2(\lambda) - 4x(\lambda)z(\lambda))^{0.5} (2x(\lambda))^{-1} \right),$$

$$u(\lambda) = q(\lambda) - 16^{-1} p(\lambda) m(\lambda),$$

$$w(\lambda) = \left| (m(\lambda) - u^2(\lambda))^{0.5} \right|,$$

$$v_2(\lambda) = \left( (u(\lambda) - 1) + ((u(\lambda) - 1)^2 + w^2(\lambda))^{0.5} \right) (w(\lambda))^{-1},$$

$$n_2(\lambda) = (0.5 w(\lambda) v_2^{-1}(\lambda))^{0.5},$$

$$k_2(\lambda) = n_2(\lambda) v_2(\lambda).$$

Алгоритмы (1.5) и (1.6) можно использовать для определения оптической функции слоя  $n_1(\lambda)$  по спектрам коэффициентов отражения  $R_{01s}^*(\lambda)$ ,  $R_{01p}^*(\lambda)$  и  $R_{01s}^{**}(\lambda)$ , которые рассчитываются по выражению (1.3) для соответствующих поляризаций и углов падения  $\varphi_{01}^*$  и  $\varphi_{01}^{**}$ . При правильном построении огибающих спектров, прозрачном и не шероховатом слое мнимая часть показателя преломления слоя должна быть близка к нулю. Это известный критерий [10], который применяется, например, при численном определении физических не комплексных величин.

Для определения толщины слоя лучше выбрать в спектре два любых интерференционных максимума, положения которых достаточно точно задаются  $\lambda_v$  и  $\lambda_{v+j}$  ( $\lambda_{v+j}, \lambda_{v+j} > \lambda_v, j = 1; 2; 3$ ), и определить две оптические характеристики слоя  $n_1(\lambda_v)$  и  $n_1(\lambda_{v+j})$ . Для прозрачного слоя в области контрастного интерференционного спектра ( $k_2(\lambda) < 0,1$ ) выражение для определения толщины имеет вид [11]

$$d = \frac{j\lambda_v \lambda_{v+j}}{2 \left( \lambda_{v+j} \sqrt{n_1^2(\lambda_v) - \sin^2 \varphi_{01}} - (-\lambda_v \sqrt{n_1^2(\lambda_{v+j}) - \sin^2 \varphi_{01}}) \right)}. \quad (1.7)$$

## 2 Моделирование структуры слой SiO<sub>2</sub> – подложка cSi

Табличные значения оптических характеристик слоя SiO<sub>2</sub>, подложки cSi и аморфного кремния ( $n_a(\lambda), k_a(\lambda)$ ), приведенные в программном обеспечении спектрального эллисометра ES2, в области от 0.4 мкм до 1 мкм можно задать функциями

$$n_1(\lambda) = 1.4470 + 1.3147 \times 10^{-3} \lambda^2 + 4.6542 \times 10^{-3} \lambda^{-2} - 2.4312 \times 10^{-4} \lambda^{-4}, \quad (2.1)$$

$$n_2(\lambda) = 3.3828 - 0.017 \lambda^2 + 0.2313 \lambda^{-2} - 0.0293 \lambda^{-4} + 0.0072 \lambda^{-6}, \quad (2.2)$$

$$k_2(\lambda) = -0.0394 + 0.0117 \lambda^2 + 0.039 \lambda^{-2} - 0.0136 \lambda^{-4} + 0.0027 \lambda^{-6},$$

$$n_a(\lambda) = 2.0664 - 0.7761 \lambda^2 + 1.2311 \lambda^{-2} - 0.1702 \lambda^{-4} + 0.008 \lambda^{-6}, \quad (2.3)$$

$$k_a(\lambda) = -0.7403 + 0.6601\lambda^2 + 0.1043\lambda^{-2} - 0.0821\lambda^{-4} - 0.0044\lambda^{-6}.$$

Это позволило, во-первых, по формулам (1.1) для  $s$  и  $p$  поляризованного света рассчитать точные значения коэффициентов отражения  $R_{s,p}(\lambda)$  слоя ( $d = 0.95\mu\text{m}$ ) на подложке. Углы падения света на слой выбирались так, чтобы чувствительность

$$\varepsilon = \frac{R(n_1, n_2, k_2, d) - R(\Delta n_1, \Delta n_2, \Delta k_2, \Delta d)}{R(n_1, n_2, k_2, d)}$$

этих коэффициентов к малым изменениям параметров модельной структуры  $\Delta n_1(\lambda)$ ,  $\Delta n_2(\lambda)$ ,  $\Delta k_2(\lambda)$  и  $\Delta d$  была максимальной.

Во-вторых, на рассчитанных спектрах  $R_{s,p}(\lambda)$  построить огибающие экстремумов и сравнить значения  $R_{\pm}(\lambda)$  со значениями, полученными по выражению (1.2). После этого по выражению (1.3), удалось рассчитать  $R_{01}(\lambda)$ .

Решение обратных задач спектрофотометрии (расчет спектров оптических характеристик) показывает, что при точном задании значений коэффициентов отражения  $R_{s,p}(\lambda)$ , по выражению (1.4) и алгоритмам (1.5), (1.6) однозначно восстанавливаются оптические функции (2.1) и (2.2), а по выражению (1.7) находится толщина модельного слоя. Эту задачу удалось решить благодаря тому, что на аналитически рассчитанных спектрах  $R_{s,p}(\lambda)$  можно точно определить координаты экстремумов и построить их огибающие.

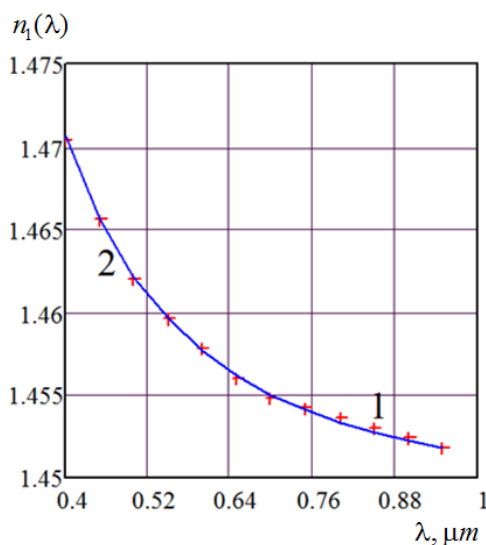


Рисунок 2.1 – Влияние погрешностей определения коэффициентов отражения на спектр показателя преломления модельного слоя

Исследуем влияние возможных погрешностей определения коэффициентов отражения ( $\Delta R(\lambda) = \pm 0.0005$ ) и угла падения ( $\Delta \varphi_{01} = \pm 0.1^\circ$ ) на аналитически определяемые параметры слоя и

подложки. На рисунке 2.1 приведены рассчитанные (кривая 1,  $\varphi_{01} = 30^\circ$ ) по выражению (1.4) и заданные на основании (2.1) (кривая 2) спектры  $n_1(\lambda)$  модельного диэлектрика. Увеличение точности расчетов  $n_1(\lambda)$  наблюдается в коротковолновой области спектра и при увеличении угла падения. Это объясняется соответствующим увеличением значений  $R_{01s}(\lambda)$ . При точном определении огибающих экстремумов спектров и указанных погрешностях определения коэффициентов отражения, угла падения, погрешность расчета показателя преломления слоя  $\pm 0.0003$ .

На рисунке 2.2 приведены аналитически рассчитанные по двухугловому ( $\varphi_{01}^* = 30^\circ$ ,  $\varphi_{01}^{**} = 60^\circ$ ) алгоритму спектры  $n_2(\lambda)$  (кривая 1) модельного полупроводника. Показатели преломления  $n_2(\lambda)$  менее чем на 0.5% отличаются от заданных (кривая 2) по выражению (2.2). Соответствующие показатели поглощения в области  $\lambda < 0.6\mu\text{m}$  отличаются от заданных менее чем на 5%. При  $\lambda > 0.6\mu\text{m}$  отличие сравниваемых показателей поглощения в отдельных точках спектра увеличивается и для определения  $k_2(\lambda)$  приходится использовать функции полиномиальной регрессии.

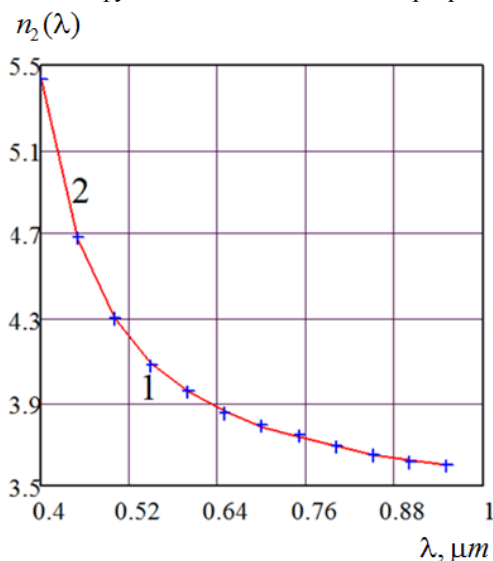


Рисунок 2.2 – Влияние погрешностей определения коэффициентов отражения на спектр показателя преломления модельной подложки

Таким образом, при отсутствии переходных и поверхностных слоев в модельной структуре  $\text{SiO}_2 - \text{cSi}$  и высокой точности определения коэффициентов отражения (не более 0.1%) аналитически можно рассчитать спектры оптических характеристик слоя и подложки. На результаты аналитических решений существенное влияние оказывают углы падения. Если спектр  $n_2(\lambda)$  подложки можно определить как по двухугловой

так и по одноугловой методикам, то для определения  $k_2(\lambda)$  на участке спектра слабого поглощения из-за недостаточной точности определения коэффициентов отражения  $R_{+s}(\lambda)$  и  $R_{+p}(\lambda)$  необходимо использовать функции полиномиальной регрессии.

### 3 Эксперимент и результаты

Перед нанесением слоя  $\text{SiO}_2$  промышленную подложку КДБ12 очищали от естественного поверхностного слоя с использованием известной методики [12]. Слой диоксида кремния получали путем окисления подложки в атмосфере сухого кислорода. Такая технология используется при изготовлении многих кремниевых структур. Спектры  $R_s(\lambda)$ ,  $R_p(\lambda)$  и  $\frac{R_p(\lambda)}{R_s(\lambda)}$  образцов

измеряли на спектрофотометре Photon RT производства ООО «ЭссентОптикс» при углах падения  $\varphi_{01}$  от  $10^\circ$  до  $60^\circ$  в спектральной области от  $0,220 \mu\text{m}$  до  $1 \mu\text{m}$ . Шаг измерений по  $\lambda$  составлял  $0,5 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}$ , по углу  $\varphi_{01} - 10^\circ$ . Точность измерения коэффициентов отражения – не хуже 0,1%.

На рисунке 3.1 для угла падения  $30^\circ$  приведены измеренные спектры  $R_s(\lambda)$  и  $R_p(\lambda)$  слоя  $\text{SiO}_2$  на пластине КДБ12 (кривые 1), пластины КДБ12 до очистки от естественного слоя (кривые 2) и огибающие экстремумов (кривые 3, 4). Спектры отражения для границы раздела воздух – чистый кристаллический кремний, рассчитанные на основании (2.2), проходят между кривыми (2) и (3). Несовпадение спектров (2), (3) и чистого кремния можно объяснить тем, что по оптическим и геометрическим параметрам переходный слой отличается от естественного слоя на пластине КДБ12. Другими словами, при термическом отжиге пластин между слоем  $\text{SiO}_2$  и очищенной кремниевой подложкой образуется тонкий переходный слой.

Спектр показателя преломления слоя (рисунок 3.2, кривая 1) на пластине КДБ12 был рассчитан по двухугловому алгоритму (1.6). Для этого  $R_{+s}^*(\lambda)$  и  $R_{+s}^{**}(\lambda)$  заменяли на  $R_{01}^*(\lambda)$  и  $R_{01}^{**}(\lambda)$ , соответствующие углам падения  $30^\circ$  и  $60^\circ$ . Для  $s$  поляризованного света в средней части спектра коэффициент отражения  $R_{01}(\lambda)$  имеет значение около 5%, а для  $p$  поляризованного света – около 2%. При определении такой отражательной способности материала слоя велика роль погрешностей измерения спектров  $R_{s,p}(\lambda)$ .

Обработанный функцией полиномиальной регрессии (кривая 2) спектр  $n_1(\lambda)$  располагается под спектром, рассчитанным по функции (2.1) (кривая 3). Эффективные значения показателя преломления диоксида кремния и малая мнимая

часть ( $k_1(\lambda) \approx 10^{-8}$ ), по-видимому, обусловлены наличием поверхностного слоя.

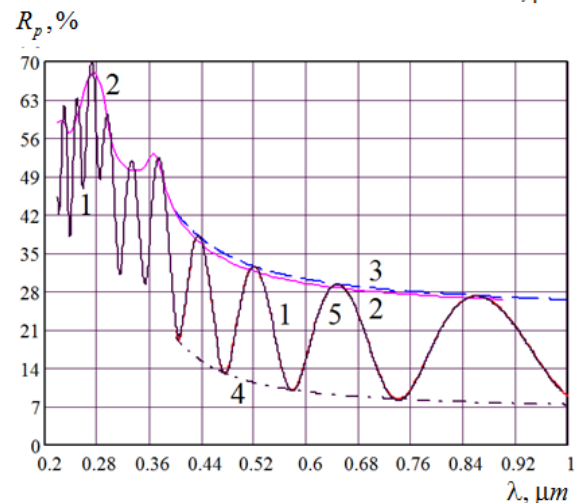
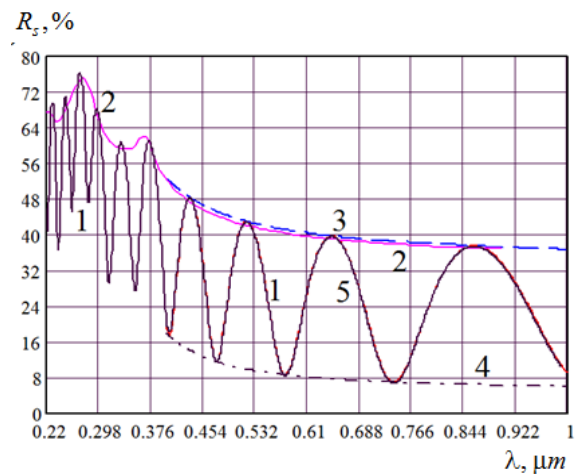


Рисунок 3.1 – Измеренные спектры слоя на подложке (1), подложки (2), огибающих (3), (4) и рассчитанный спектр слоя на подложке (5)  $n_1(\lambda)$

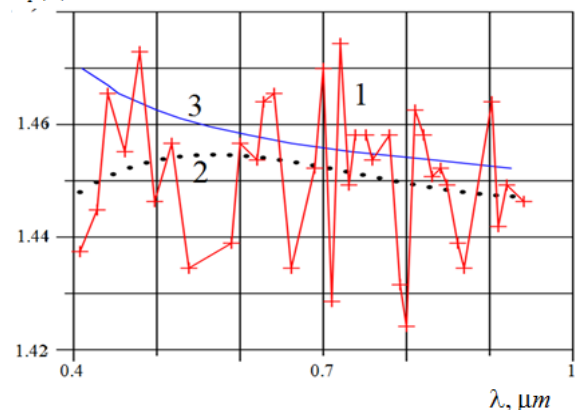


Рисунок 3.2 – Спектры показателя преломления слоя диоксида кремния

На рисунке 3.3 (кривые 1) представлены спектры оптических характеристик подложки КДБ12, которые были определены по огибающим максимумов (кривые 3, рисунок 3.1). Для этого использовался алгоритм (1.5). Допустим,



что дисперсия оптических характеристик кремневой подложки (рисунок 3.3, кривые 2) задается выражением (2.2). Тогда приведенные данные указывают на отличие структуры переходной и объемной областей подложки. Эффективные значения  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  подтверждают наличие переходного слоя между слоем диоксида кремния и подложкой КДБ12. Такой слой необходимо учитывать при выборе более сложной электродинамической модели структуры слой  $\text{SiO}_2$  – подложка cSi.

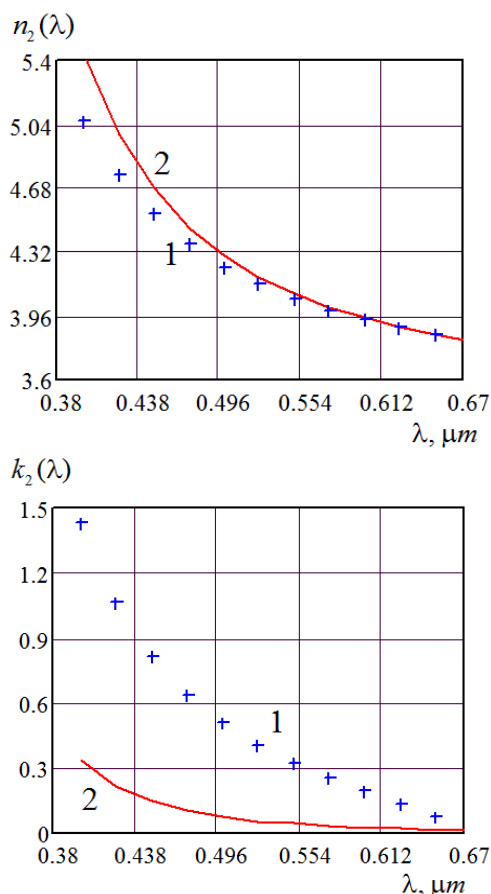


Рисунок 3.3 – Спектры оптических характеристик подложки КДБ12

Для определения толщины слоя (таблица 3.1) диоксида кремния в выражение (1.7) подставляли длины волн максимумов ( $\lambda_v$ ) из измеренных спектров (рисунок 3.1, кривые 1). Толщина слоя  $\text{SiO}_2$ , нанесенного на пластину КДБ12, оказалась равной  $(0.948 \pm 0.008) \mu\text{m}$ .

Мы пытались численно решить обратную задачу спектрофотометрии по измеренным спектрам  $R_{s,p}(\lambda)$ . Для этого использовалась трехслойная электродинамическая модель: поверхностный слой – смесь воздушных пор ( $f_1$ ) и диоксида кремния  $(1 - f_1)$  (модель Максвелла-Гарнетта); однородный слой  $\text{SiO}_2$ ; переходный слой – матрица из аморфного кремния  $(1 - f_2 - f_3)$  со

сферическими частицами из диоксида кремния ( $f_2$ ) и кристаллического кремния ( $f_3$ ) (модель Максвелла-Гарнетта и Бруггемана. Дисперсия оптических характеристик материалов задавалась функциями (2.1)–(2.3). Методом наименьших квадратов определялись шесть параметров – толщины слоев  $d_1, d_2, d_3$  и доли материалов поверхностного и переходного слоев  $f_1, f_2, f_3$ , при которых рассчитанные спектры были наиболее близки к измеренным спектрам (рисунок 3.1, кривые 1 и 5). Решения этой задачи приведены в таблице 3.2.

Таблица 3.1 – Толщина слоя  $\text{SiO}_2$

$v$	$\lambda_v, \mu\text{m}$	$v + j, v$	$d_1, \mu\text{m}$	$d_{cp}, \mu\text{m}$
1	0.43504	2, 1	0.939	
2	0.52047	3, 2	0.950	
3	0.64775	4, 3	0.953	0.948
4	0.85952	4, 1	0.947	
		4, 2	0.952	
		3, 1	0.945	

Таблица 3.2 – Параметры трехслойной модели для  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$

Слой	$d_j, \mu\text{m}$	$n_j$	$k_j$	$f_1$	$f_2$	$f_3$
Поверхностный	$2.9 \cdot 10^{-3}$	1.422		0.074	0.926	
$\text{SiO}_2$	0.9466	1.457				
Переходный	$3.6 \cdot 10^{-3}$	2.685	0.036	0.108	0.491	0.401

Толщина слоя  $\text{SiO}_2$  в этом случае оказалась  $0.9466 \mu\text{m}$ . Как видим, для слоя диоксида кремния наблюдается удовлетворительная корреляция величин толщин, которые определялись аналитически и численно. Переходный слой имеет толщину 3,6 нм, содержит 11% аморфного кремния, 40% кристаллического кремния и 49% диоксида кремния. Показатели преломления переходного слоя (таблица 3.2) меньше, чем у кристаллического кремния, а соответствующие показатели поглощения больше, чем у кристаллического кремния. Такое соотношение показателей преломления свойственно и поверхностному слою. Оно объясняет поведение кривых на рисунках 3.2 и 3.3. Поверхностный слой состоит из диоксида кремния (93%) и воздушных пор (7%).

### Заключение

Численное моделирование и экспериментальное исследование структуры диэлектрический слой  $\text{SiO}_2$  – полупроводниковая подложка КДБ12 показывает:

1. Определение оптических спектров подложки и толщины прозрачного слоя можно выполнить аналитически, используя упрощенный метод огибающих максимумов, при точности измерений коэффициентов отражения не хуже 0,1%.

2. На результаты аналитических решений существенное влияние оказывает не только точность измерения коэффициентов отражения, но и выбор углов падения. Если спектр  $n_2(\lambda)$  подложки можно определить достаточно точно как по двухугловой, так и по одноугловой методикам, то для определения  $k_2(\lambda)$  на отдельных участках спектра слабого поглощения полупроводника приходится пользоваться функциями полиномиальной регрессии. При этом точность определения показателей преломления около 0.5%, а для  $k_2(\lambda)$  относительная погрешность около 15%. Определяющим фактором при этом является отыскание оптимальных углов падения, которые обеспечивают достаточную чувствительность соответствующих коэффициентов отражения.

3. Эффективные значения  $n_1(\lambda)$ ,  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$ , рассчитанные аналитически, обусловлены наличием поверхностного слоя на слое  $\text{SiO}_2$  и переходного слоя между слоем диоксида и подложкой КДБ12. Такие слои необходимо учитывать при выборе электродинамической модели структуры слой  $\text{SiO}_2$  – подложка  $\text{cSi}$ .

4. Аналитические решения спектрофотометрической задачи прозрачный слой на поглощающей подложке можно использовать в качестве первых приближений при численном определении параметров более сложной трехслойной модели. Это существенно уменьшает время расчетов и обеспечивает минимальную невязку значений измеренных и рассчитанных коэффициентов отражения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Борн, М. Основы оптики: пер. с англ. / М. Борн, Э. Вольф. – М.: Наука, 1970. – 856 с.
2. Minkov, D. Computation of the optical constants of a thin dielectric layer on a transmitting substrate from the reflection spectrum at inclined incidence of light / D. Minkov // JOSA A. – 1991. – Vol. 8, № 2. – P. 306–310.
3. Филиппов, В.В. Аналитический метод определения оптических постоянных и толщины поглощающих пленок по спектрам отражения / В.В. Филиппов // Оптика и спектроскопия. – 1995. – Т. 78, № 5. – С. 798–801.

4. Филиппов, В.В. Точность определения оптических параметров тонких пленок методом огибающих экстремумов спектра отражения / В.В. Филиппов, В.П. Кутаевич // ЖПС. – 2003. – Т. 70, № 1. – С. 109–115.

5. Филиппов, В.В. Метод огибающих для исследования системы двух пленок на отражающей подложке / В.В. Филиппов // Оптика и спектроскопия. – 2006. – Т. 101, № 3. – С. 485–489.

6. Кособуцкий, П.С. Аналитические функции огибающих спектров Фабри-Перо многослойных структур / П.С. Кособуцкий // Письма в ЖТФ. – 2008. – Т. 34, № 10. – С. 79–82.

7. Биленко, Д.И. Влияние переходного слоя на результаты эллипсометрических исследований наноразмерных слоев / Д.И. Биленко, В.П. Полянская, М.А. Гецьман, Д.А. Горин, А.А. Невешкин, А.М. Ященко // ЖТФ. – 2005. – Т. 75, вып. 6. – С. 69–73.

8. Беляева, А.И. Границы раздела слоев и шероховатость в многослойной кремниевой структуре / А.И. Беляева, А.А. Галуза, С.Н. Коломиец // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38. – № 9. – С. 1050–1055.

9. Fahrenfort, J. On the determination of optical constants in the infrared by attenuated total reflection / J. Fahrenfort, W.M. Visser // Spectrochim. Acta. – 1962. – Vol. 18, № 9. – P. 1103–1116.

10. Пшеницын, В.И. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях / В.И. Пшеницын, М.И. Абаев, Н.Ю. Лызлов // Ленинград: Химия. – 1986. – 152 с.

11. Стаськов, Н.И. Переходные слои в кремниевых структурах  $\text{SiO}_2$  –  $\text{cSi}$  и  $\text{PSi}$  –  $\text{SiO}_2$  –  $\text{cSi}$  / Н.И. Стаськов, С.О. Парашков, Т.Н. Коледа // Актуальные вопросы теоретической физики, физики конденсированных сред и астрофизики: Межд. научно-практ. конф. Брест, 2–3 октября 2014 г. / БрГУ им. А.С. Пушкина; ред. А.В. Демидчик и [др.]. – Брест. – 2014. – С. 96–101.

12. Chiou, Y.I. Growth characteristics of silicon produced by rapid thermal oxidation processes / Y.I. Chiou, C.H. Sow, G. Li, K.A. Ports // Appl. Phys. Lett. – 1990. – Vol. 57, № 9. – P. 881–883.

Поступила в редакцию 10.02.15.