

## О ТОЧНОСТИ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ ТОНКИХ СЛОЕВ

В. Г. Житарюк и С. Г. Гуминецкий

С помощью ЭВМ проведен анализ возможных погрешностей, возникающих при использовании некоторых спектрофотометрических (интерференционных) методов для нахождения коэффициента преломления, показателя поглощения и толщины тонких слоев, нанесенных на непоглощающую подложку. Полученные результаты дают возможность определить границы применимости и выяснить области наиболее целесообразного использования каждого из рассмотренных методов в практике научного эксперимента.

Результат взаимодействия световой волны и тонкого слоя определяется оптическими характеристиками последнего. Для изучения оптических свойств тонких слоев широко используются интерференционные (входящие в группу спектрофотометрических) методы [1-4], за исключением случаев, когда интерференционная картина не возникает.

Спектрофотометрические методы предполагают измерение коэффициентов отражения и пропускания тонких слоев. Математические соотношения в этом случае для системы воздух—слой—подложка имеют вид [1]

$$R_{13} = \frac{\operatorname{ch}(\varepsilon + \chi_{23} - \chi_{12}) + \cos(\delta + \varphi_{23} - \varphi_{12})}{\operatorname{ch}(\varepsilon + \chi_{12} + \chi_{23}) + \cos(\delta + \varphi_{12} + \varphi_{23})}, \quad (1)$$

$$T_{13} = \frac{1}{2} \frac{\tau_{12}\tau_{23}e^{(\chi_{12} + \chi_{23})}}{\operatorname{ch}(\delta + \chi_{12} + \chi_{23}) + \cos(\delta + \varphi_{12} + \varphi_{23})}, \quad (2)$$

где  $\chi_{ik} = -\frac{1}{2} \ln r_{ik}$ ,  $r_{ik}$  и  $\tau_{ik}$  — энергетические коэффициенты отражения и пропускания соответствующих границ раздела,

$$r_{ik} = \frac{(n_i - n_k)^2 + (\kappa_i - \kappa_k)^2}{(n_i + n_k)^2 + (\kappa_i + \kappa_k)^2},$$

$$\tau_{ik} = 4 \frac{n_k}{n_i} \frac{(n_i^2 + \kappa_k^2)}{(n_i + n_k)^2 - (\kappa_i + \kappa_k)^2},$$

$$\varphi_{ik} = \operatorname{arctg} \frac{(n_i - n_k)(\kappa_i + \kappa_k) - (n_i + n_k)(\kappa_i - \kappa_k)}{(n_i^2 - n_k^2) + (\kappa_i^2 - \kappa_k^2)}$$

сдвиг фазы при отражении на этих границах;  $\delta = 4\pi n_2 d_2 / \lambda$  и  $\varepsilon = 4\pi \kappa_2 d_2 / \lambda$  — фазовые сдвиги при прохождении излучения с длиной волны  $\lambda$  исследуемого слоя толщиной  $d_2$ ;  $n_2$  и  $\kappa_2$  — безразмерные коэффициенты преломления и показатель поглощения отдельных составляющих системы, в частности, для слоя

$$\tilde{n}_2 = n_2 - i\kappa_2 \quad (3)$$

Решения уравнений (1) и (2) относительно параметров  $n_2$ ,  $\kappa_2$  и  $d_2$  в явном виде не удается получить. Поэтому в литературе намечились два подхода: I — решение одного из соотношений (1), (2) на ЭВМ с применением итерационных методов, например, [5]; II) пренебрежение поглощением высших порядков малости, допускающих решение указанных зависимостей относительно оптических постоянных слоя [6-8]. Задача данной работы — определить границы применимости некоторых распространенных интерференционных методов [5-8]

с целью выяснения области наиболее целесообразного использования каждого из них.

Схема расчета кратко состоит в следующем [9]. Используя соотношения (1) и (2) с соответствующей инверсией индексов, с помощью ЭВМ рассчитывался спектральный ход коэффициента пропускания системы воздух—слой—подложка—воздух в зависимости от оптических параметров слоя  $n_2$ ,  $\kappa_2$ ,  $d_2$  и подложки  $n_3$ ,  $\kappa_3$ , согласно соотношению

$$T_c = \frac{T_{31}T_{34}}{1 - R_{31}R_{34}} \quad (4)$$

Здесь  $R_{34}$  — френелевский коэффициент отражения от последней границы раздела подложка—воздух. При этом задавались произвольные, но вполне реальные значения указанных величин. Для подложки принимались  $n_3=1.5$ ,  $\kappa_3=0$ . Значения параметров слоя  $n_2=1.5, 1.75, 2.0, 2.25, 2.55, 2.75$ , причем каждому  $n_2$  соответствовали значения показателя поглощения  $\kappa_2=0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001$ . Длины волн выбирались согласно соотношению  $\lambda = 20/(20+m)$  (мкм), где  $m=1, 2 \dots 36$ ; толщина слоя определялась условием  $d_2=1.25/n$  (мкм), обеспечивающим достаточное количество экспериментальных точек интерференционной картины.

Полученные таким образом значения  $T_c$ , равно как и  $R_{ik}$ ,  $T_{ik}$ , использовались в дальнейшем в качестве исходных для нахождения оптических параметров слоя  $n'_2$ ,  $\kappa'_2$  и  $d'_2$ , которые и приводятся в соответствие с данными параметрами слоя  $n_2$ ,  $\kappa_2$  и  $d_2$  посредством относительной ошибки, вычисляемой, например, для коэффициента преломления, исходя из соотношения

$$\frac{\Delta n_2}{n_2} = \frac{n_2 - n'_2}{n_2} \quad (5)$$

Эти ошибки и представляют собой систематические погрешности в определении оптических параметров слоя с помощью каждого из рассматриваемых методов.

Однако реальные экспериментальные данные, служащие в качестве исходных для применяемых в исследованиях методов, включают в себя также и приборную погрешность измерений коэффициентов  $T_c$  и  $R_c$ . Теоретически погрешность метода, на наш взгляд, не может быть вычислена простым дифференцированием, поскольку, во-первых, отсутствует явный вид зависимостей  $n_2$ ,  $\kappa_2$ ,  $d_2$  как функций  $T_c$  и  $R_c$ , а, во-вторых, некоторые методы используют последовательные приближения, заведомо предполагающие определенные ограничения, налагающие дополнительную ошибку на метод. В связи с этим нами теоретически проведен анализ погрешности рассматриваемых методов при изменении полученных в ходе вычислений значений коэффициента пропускания  $T_c$  на величину 0.5%, т. е.

$$(T_c)_{\max} = (T_c)_{\max} (1 + 0.005), \quad (T_c)_{\min} = (T_c)_{\min} (1 - 0.005). \quad (6)$$

Здесь предполагается, что спектральный прибор обеспечивает измерения с точностью  $\pm 0.5\%$ , причем взяты крайние случаи: при измерении коэффициента пропускания в максимуме измерительная система завышает показания, а в минимуме — занижает на 0.5%. Анализ результатов расчетов показал, что для выяснения общих закономерностей достаточно представить их только для одного из значений показателя преломления слоя. Мы остановились на  $n_2=2.25$ , так как при использовании подложки с  $n_3=1.5$  в этом случае наблюдается максимальный контраст интерференционной картины. Полученные при этом результаты приведены в табл. 1 и 2. Здесь каждый из рассматриваемых методов символически обозначен номером: I — метод последовательных приближений Милославского—Ляшенко [6], II — аналогичный метод Валева [7], III — итерационный метод Гисина—Конюхова—Несмелова [5], IV — модельный метод Черемухина—Кириенко—Гурдина [4].

Итерационный метод использует в качестве исходных точные соотношения (1) и (2) без каких-либо допущений и пренебрежений. Методы последовательных приближений проще в использовании, однако в [6] нужно очень внимательно определять порядок интерференции той или иной экстремальной точки

Таблица 1  
Значения относительной ошибки (в %) в зависимости от числа приближений

Номер приближения	Ошибка				
	$\Delta n_2/n_2, \%$		$\Delta \kappa_2/\kappa_2, \%$		$\Delta d_2/d_2, \%$
	I	II	I	II	I
1	1.32	-8.15	-14.4	-2.78	-1.34
2	0.07	0.62	-0.72	0.41	-0.07
3	0.02	0.04	-0.12	0.68	-0.02
4	-0.02	0.01	-0.09	0.70	-0.02

Таблица 2  
Значения относительной ошибки (в %) в зависимости от величины  $\kappa_2$

Ошибка	Метод	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-5}$
$\Delta n_2/n_2, \%$	I	2.31	-0.02	0.0	0.0	0.0
		0.21	-0.86	-0.80	-0.80	-0.80
	II	-11.0	0.01	0.0	0.0	0.0
		-12.0	0.88	0.81	0.82	0.80
	III	-6.15	0.01	0.0	0.0	—
		-5.64	0.88	0.80	0.80	—
	IV	7.41	1.91	0.21	0.02	0.0
		6.46	0.99	-0.71	-0.90	-0.92
$\Delta \kappa_2/\kappa_2, \%$	I	0.75	-0.09	-0.01	0.0	0.0
		0.17	-3.95	-43.67	-438.5	-4388.0
	II	-6.42	0.70	0.85	0.88	0.9
		6.46	-4.62	-43.16	-426.6	-4261.0
	III	-0.71	-0.07	0.01	0.01	—
		18.51	3.42	-38.1	-183.2	—
	IV	13.1	34.9	-89.4	-2640.7	-28155.0
		12.9	-38.2	-126.3	-3012.8	-31879.0
$\Delta d_2/d_2, \%$	I	2.37	-0.02	0.0	0.0	0.0
		0.21	0.85	0.80	0.80	0.80
	II	3.89	0.03	0.0	0.0	—
		-19.66	0.90	0.80	0.80	—

интерференционной картины, особенно при большом поглощении. Кроме этого, если в [5, 6] предполагается применение клиновидных подложек или же предварительная обработка экспериментальных данных, то в [7] эти данные используются непосредственно. Модельный метод использует в качестве теоретических предпосылок решения обратной задачи теорию интерферометра Фабри—Перо. Здесь слой на подложке представляется как вырожденный эталон Фабри—Перо с неодинаково отражающими зеркалами, в качестве которых служат границы раздела между средами.

В табл. 1 сооставлены результаты расчетов систематических погрешностей определения оптических параметров слоя двумя методами последовательных приближений в зависимости от числа приближений для одного из значений показателя поглощения ( $\kappa_2=0.01$ ) слоя. Видно, что уже второе приближение дает погрешность в определении значений  $n_2$ ,  $\kappa_2$  и  $d_2$  не более 1%, что вполне соответствует выводам, полученным авторами указанного метода экспериментальным путем.

В табл. 2 приведены результаты вычислений тех же погрешностей в зависимости от величины поглощения слоя, причем для методов последовательных приближений данные соответствуют четвертому приближению. Здесь для каж-

дого из методов верхняя строка значений получена с использованием в качестве исходных данные результатов точного решения уравнений (1) и (2), а нижняя — с учетом возможных экспериментальных погрешностей в соответствии с выражением (6). Видно, что при использовании коэффициентов пропускания  $T_c$ , полученных в результате точного решения уравнений (1) и (2) относительно  $R_{ik}$  и  $T_{ik}$ , первые три метода дают превосходные совпадения рассчитанных значений коэффициента преломления с заданными при  $x_2 < 0.1$ . Аналогичный вывод можно сделать и для определяемых значений толщины слоя. Модельная методика (IV) в этом случае дает несколько худшие результаты. Точность определения показателя поглощения слоя  $x_2$  в первых трех методах, хотя и хуже, но все же относительная погрешность и здесь не превышает 1%, если  $x_2 < 0.1$ , однако для четвертой методики обнаруживаются значительные погрешности, которые тем больше, чем меньше  $x_2$ . Если при вычислении  $n'_2$ ,  $x'_2$  и  $d'_2$  использовать значения  $T_c$  с учетом предполагаемой экспериментальной погрешности  $\pm 0.5\%$ , то ошибки в определении всех параметров слоя в основном возрастают, однако и в этом случае для коэффициента преломления и толщины они не превышают 1.0% для всех рассматриваемых методов. В то же время показатель поглощения слоя определяется во всех методах со значительными погрешностями (за исключением методов последовательных приближений для  $x_2 \geq 0.01$ ), существенно возрастающими с уменьшением  $x_2$ . Это говорит о том, что показатель поглощения слоя является наиболее чувствительным параметром к экспериментальным погрешностям, безусловно имеющим место при измерении его коэффициентов отражения и пропускания с помощью типичных спектрофотометров. Необходимо также отметить, что с точки зрения полноты исследований, точности и простоты в использовании наиболее предпочтительным из рассмотренных методов является метод последовательных приближений, развитый в [6], хотя для большей достоверности получаемых с его помощью результатов необходима его комбинация с любым другим методом, не требующим определения и порядка интерференции, поскольку данная операция чаще всего является источником ошибок, особенно при сильном поглощении объектов.

В заключение в плане сравнения с рассмотренными методами представляет интерес остановиться на методике, предложенной авторами в [9]. Ее суть состоит в моделировании границ раздела системы воздух—слой—подложка—воздух одной эффективной границей раздела, на которой и происходит расщепление падающего потока на отраженный и прошедший. Физически это соответствует явлению двухлучевой интерференции, а исходные соотношения базируются на использовании закона Бугера. В [9] показано, что для слоя с  $n_2 = 2.25$  на подложке с  $n_3 = 1.5$  погрешность в определении показателя поглощения слоя при использовании данной методики не превышает 7% в интервале изменений  $x_2$  от 0.1 до 0.001 без учета экспериментальных ошибок. Оценка с учетом этих ошибок показала, что в области отмеченного интервала изменений  $x_2$  систематические погрешности в определении показателя поглощения слоя практически не возрастают, а в области  $x_2 < 1 \cdot 10^{-4}$  рассчитанные значения  $x_2$  стремятся к нулю. В этом усматривается принципиальное отличие указанной методики от рассмотренных выше методов, для которых при уменьшении  $x_2$ , как это следует из табл. 2, систематические погрешности с учетом ошибок эксперимента в этом случае существенно возрастают, что приводит к значительно завышенным значениям  $x_2$ . Таким образом, полученные результаты говорят о том, что большинство рассмотренных интерференционных методов могут успешно применяться для определения оптических параметров тонких слоев, однако в каждом конкретном случае эффективность использования того или иного метода должна быть строго определена, в особенности если учитывать существование реальных экспериментальных погрешностей, неизбежно возникающих при измерениях коэффициентов пропускания и отражения.

#### Литература

- [1] Г. В. Розенберг. Оптика тонкослойных покрытий. ГИФМЛ, М., 1958.
- [2] A. Vasicek. Optics of Thin Films. North-Holland, Amsterdam, 1960.
- [3] В. Е. Кондрашов. Оптика фотокатодов. «Наука», М., 1966.

- [4] А. В. Раков. Спектрофотометрия тонкопленочных полупроводниковых структур. «Сов. радио», М., 1975.
- [5] М. А. Гисин, Г. П. Конохов, Е. А. Несмелов. Опт. и спектр., 26, 301, 1969.
- [6] С. Г. Ляценок, В. К. Милославский. Опт. и спектр., 16, 151, 1964.
- [7] А. С. Валеев. Опт. и спектр., 15, 500, 1963.
- [8] Г. С. Черемухин, Б. В. Кириенко, Е. К. Гурдин. Оптико-механич. промышл., 6, 13, 1976.
- [9] В. Г. Житарюк, С. Г. Гуминецкий. Ж. прикл. спектр., 28, 1068, 1977.

Поступило в Редакцию 15 июля 1980 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скоринны