

УДК 535.51

ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР IN SITU (РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ)

Биленко Д. И., Дворкин Б. А., Дружинина Т. Ю., Краснобаев С. Н.
и Полянская В. П.

Проанализированы возможности решения обратной задачи эллипсометрии прозрачных слоев в слоистых структурах в процессе их формирования (осаждения или травления). Предложена методика решения, основанная на расширении получаемой в ходе образования структуры информации измерением наряду с поляризационными одного из энергетических параметров отраженного излучения. Разработанный алгоритм решения обратной задачи на ЭВМ при таком контроле основывается на использовании условия прозрачности контролируемого слоя и линеаризации уравнений Эйри при поиске начальных приближений.

Алгоритмы решения обратной задачи, основывающиеся на измерении поляризационных параметров отраженного структурой излучения

Определение параметров слоя n и d по измерениям ψ и Δ (ψ — азимут линейной поляризации, Δ — разность фаз между ортогональными компонентами электрического поля световой волны) возможно на основе двух подходов: а. формирующаяся структура аппроксимируется тонкослойной системой, и для описания ее поляризационных свойств используется уравнение эллипсометрии для многослойных структур в рекуррентной форме. Решение обратной задачи осуществляется последовательным определением параметров всех элементарных слоев, причем параметры предыдущих слоев запоминаются и используются для нахождения параметров каждого последующего слоя [1]; б. формирующаяся структура моделируется некоторой эквивалентной системой, свойства которой находятся по измеренным значениям поляризационных параметров на основании решения уравнения эллипсометрии, описывающего эту систему [1-3].

Уравнение эллипсометрии, описывающее произвольную слоисто-неоднородную по оптическим свойствам изотропную систему, обычно получают разбиением оптически неоднородной области на систему квазиоднородных слоев и использованием уравнения Эйри для многослойных слоисто-однородных сред [1, 2]. Присваивая индекс m элементарному слою, выросшему (стравленному) за время $t_m = t_m - t_{m-1}$ и воспользовавшись методом, развитым в работе [4], уравнение эллипсометрии при измерениях in situ можно записать в рекуррентной форме

$$\rho_m = \frac{(r_m)_p}{(r_m)_s} = \operatorname{tg} \psi_m e^{i\Delta_m} = \frac{e^{-2i\delta_m} - F_p g_p}{F_p e^{-2i\delta_m} - g_p} \cdot \frac{F_s e^{-2i\delta_m} - g_s}{e^{-2i\delta_m} - F_s g_s}, \quad (1)$$

где ψ_m и Δ_m — значения, измеряемые в момент времени t_m ,

$$g_{p,s} = \frac{1 - (r_{m-1})_{p,s} F_{p,s}}{F_{p,s} - (r_{m-1})_{p,s}},$$

$F_{p,s} = |F|_{p,s} e^{i(\varphi)_{p,s}}$ — амплитудные коэффициенты отражения границ раздела слой—окружающая структура среда [4], $\delta_m = 2\pi d_m n_{m+1} (\tilde{n}_m^2 - \sin^2 \theta)^{1/2} / \lambda$ — фазовая толщина слоя, $\tilde{n}_m = (n_m / n_{m+1}) - i(x_m / n_{m+1})$ и d_m — приведенный комплексный

показатель преломления и толщина осажденного (удаленного) за время h_i слоя (в дальнейшем полагалось $\tilde{n}_m = n_m$, $x_m = 0$), n_{m+1} — показатель преломления окружающей среды, λ — длина волны излучения в вакууме, θ — угол падения излучения на образец, индексы p и s соответствуют поляризациям электрического поля световой волны в плоскостях падения излучения и образца соответственно, $(r_{m-1})_{p,s} = |r_{m-1}|_{p,s} \exp(i\varphi_{p,s})$ — коэффициенты отражения структуры перед нанесением m -го слоя в момент времени t_{m-1} .

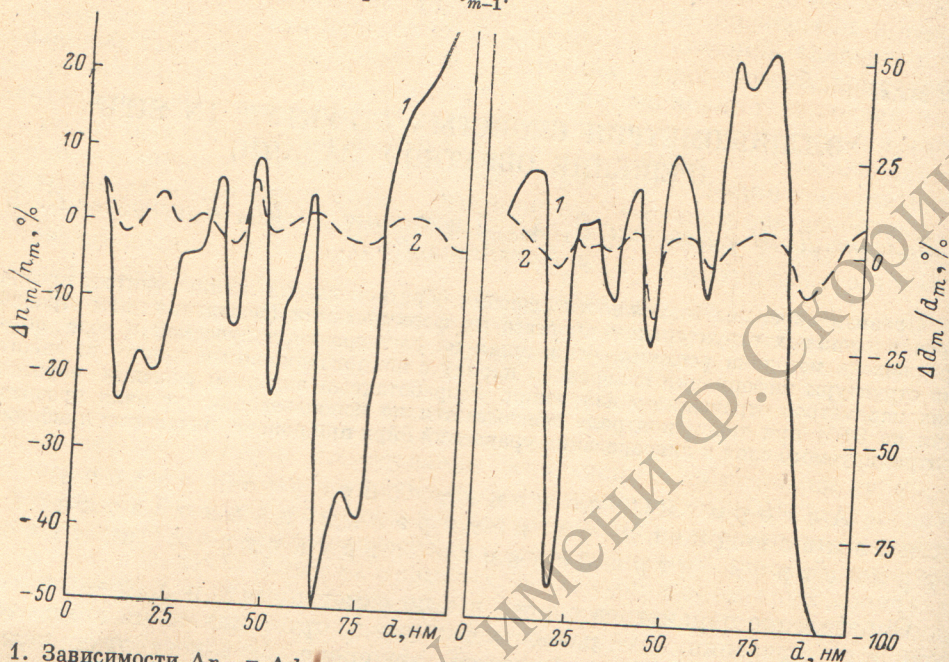


Рис. 1. Зависимости Δn_m и Δd_m от d при случайных погрешностях измерения параметров отраженного излучения.
1 — рекуррентный подход, 2 — поляризационно-энергетические измерения; $d_m = 5$ нм.

При использовании рекуррентного метода решение уравнения (1) относительно параметров внешнего m -го слоя n_m и d_m выражается через параметры нижерасположенных слоев

$$\left. \begin{aligned} n_m &= n_m(n_1, d_1, \dots, n_{m-1}, d_{m-1}, \psi_m, \Delta_m), \\ d_m &= d_m(n_1, d_1, \dots, n_{m-1}, d_{m-1}, \psi_m, \Delta_m). \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Погрешности в показателе преломления и толщине m -го слоя Δn_m и Δd_m можно записать как

$$\left. \begin{aligned} \Delta n_m &= \left(\frac{\partial n}{\partial \psi} \Delta(\psi) \right)_m + \left(\frac{\partial n}{\partial \Delta} \Delta(\Delta) \right)_m + \sum_{j=m}^{j=m-1} \left(\frac{\partial n_m}{\partial n_j} \Delta n_j + \frac{\partial n_m}{\partial d_j} \Delta d_j \right), \\ \Delta d_m &= \left(\frac{\partial d}{\partial \psi} \Delta(\psi) \right)_m + \left(\frac{\partial d}{\partial \Delta} \Delta(\Delta) \right)_m + \sum_{j=m}^{j=m-1} \left(\frac{\partial d_m}{\partial n_j} \Delta n_j + \frac{\partial d_m}{\partial d_j} \Delta d_j \right), \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где $\Delta(\psi)_m$ и $\Delta(\Delta)_m$ — погрешности измерения поляризационных параметров излучения.

С ростом числа слоев погрешность определения параметров m -го слоя может возрастать вследствие накопления погрешностей измерения ψ и Δ . Для выяснения влияния случайных погрешностей в ψ и Δ на результате определения n_m и d_m был проведен машинный эксперимент, моделирующий реальные условия измерения. Значения погрешностей измерения ψ и Δ рассчитывались как $\Delta(\psi)_m = K_{1m} \Delta(\psi)$ и $\Delta(\Delta)_m = K_{2m} \Delta(\Delta)$, где $K_{1,2m}$ выбирались случайным образом от +1 до 1 по нормальному закону стандартной подпрограммой «Гаусс»

юя
ру-
пу-
го
ю,
не-

(ЭВМ ЕС-1022) при $\Delta(\psi) = \Delta(\Delta) = 0.1^\circ$ и доверительной вероятности 0.95. Результаты расчета Δn_m и Δd_m для структуры типа Si—SiO₂ иллюстрируются на рис. 1. Приведенные данные наглядно показывают возрастание погрешностей с ростом числа слоев, причем вероятностный характер изменения $\Delta(\psi)$ и $\Delta(\Delta)$, не изменяет ситуацию. Закономерность возрастания погрешностей определения параметров внешнего слоя справедлива по отношению к любому способу измерения внешнего слоя — интерференционному, дифракционному, если измеренные свойства ранее сформированных слоев используются при расчете параметров выросшего последнего слоя. Другим принципиальным недостатком описанного метода расчета является невозможность его использова-

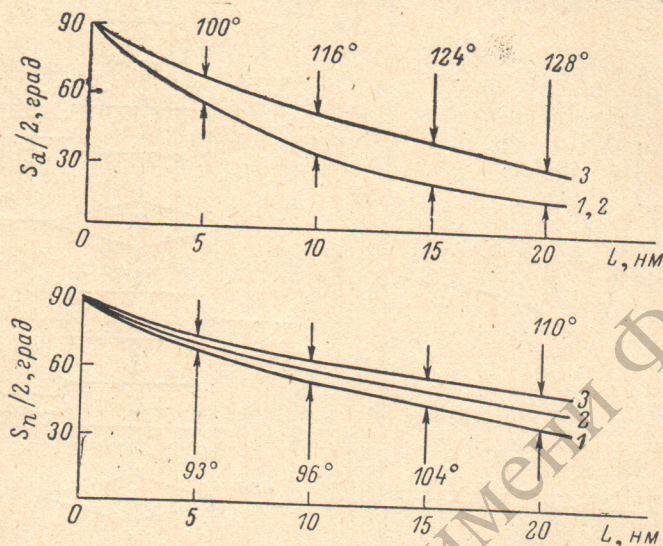


Рис. 2. Зависимости $s_{n,d}/2$ от L для структур типа Si—SiO₂ с переходной областью между слоем и подложкой при углах падения излучения $45^\circ \leq \theta \leq 75^\circ$ и $\lambda = 0.6328$ мкм.

Закон изменения $n(x)$ в переходной области задавался функциями вида: 1 — $n(x) = n_0 - [(n_0 - n_1)/L]x$, 2, 3 — $n(x) = N + a(n_L) \exp[\pm b(n_L)(x - L_1(n_L) \pm c(n_L)(x - L_1(n_L)))]$, где

$$N = \begin{cases} n_0 + n_1 & 0 \leq x \leq L_1(n_L), \\ 0 & L_1(n_L) \leq x \leq L, \end{cases}$$

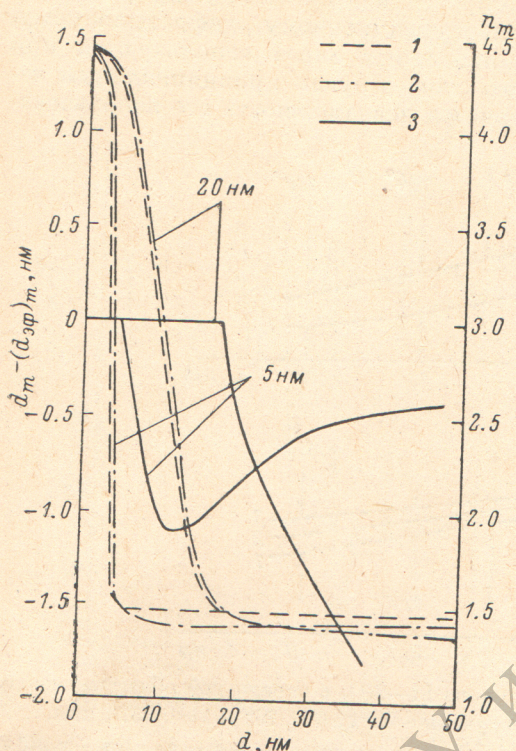
$L_1(n_L)$; $a(n_L)$; $b(n_L)$; $c(n_L)$ — параметры, определяемые значением координаты точки сшива экспонент n_L , 2 — $n_L = 2.39$ — симметричный выпукло-вогнутый закон $n(x)$, 3 — $n_L = n_0$ — вогнутый экспоненциальный закон $n(x)$.

ния при контроле структур, в которых по мере формирования последующих слоев свойства предыдущих меняются.

Выход из создавшейся ситуации возможен на основе установления взаимосвязи вида $\psi_m = \psi_m(n_m, d_m, \psi_{m-1}, \Delta_{m-1})$ и $\Delta_m = \Delta_m(n_m, d_m, \psi_{m-1}, \Delta_{m-1})$, т. е. на основе только измерений, проведенных непосредственно до и после образования m -го слоя. Построение такой взаимосвязи возможно лишь на основе моделирования структуры некоторой эквивалентной системой. В соответствии с принципами теории эквивалентности произвольная слоистая среда эквивалентно отображается двуслойной системой [4]. Отсюда следует, что взаимодействие произвольной слоистой системы с изучением характеризуется в общем случае четырьмя параметрами. Методы решения обратной задачи, основывающиеся на отыскании лишь двух эффективных параметров эквивалентной структуры из условий $\psi = \psi_{\text{экр}}$ и $\Delta = \Delta_{\text{экр}}$ являются приближенными. Целесообразность применения таких методов определяется свойствами исследуемого объекта и конечной целью измерений in situ, что обуславливает необходимость априорных машинных экспериментов по выбору методики расчета в каждом конкретном случае.

Наиболее часто употребляемой является модель типа однородный слой — подложка. Как показано в работах [5–7], неадекватность этой модели реальной структуре, обладающей даже незначительной неоднородностью в слое, приво-

дит к отклонению эффективных параметров слоя от фактических, особенно значительному в областях толщин, примыкающих к границам периода однозначности эллипсометрии. Проведенный по отношению к структурам типа Si—SiO₂ с переходными слоями различной формы и толщины расчет позволил построить зависимости интервалов фазовых толщин $s_{n,d}$ при определении n и d



(d — суммарная толщина однородной части слоя в переходной области) от толщины переходного слоя L , в которых наличие неоднородности вызы-

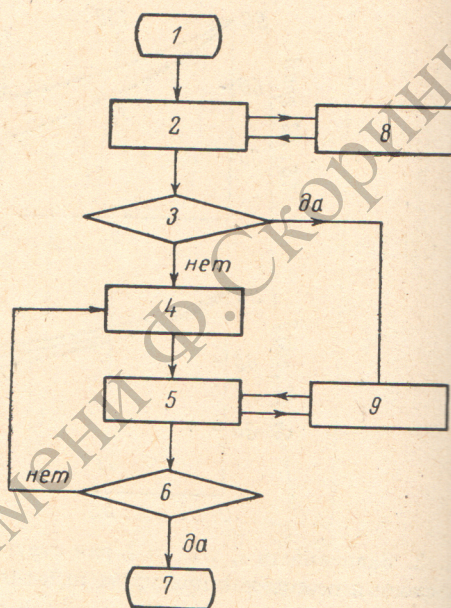


Рис. 3. Пример характерных зависимостей n_m и d_m от суммарной толщины слоя d в структурах Si—SiO₂ с переходным слоем толщиной $L=5$ и 20 нм и $n_L=2.39$, $45^\circ \leq \theta \leq 75^\circ$, $\lambda=0.6328$ мкм.

1 — заданный закон $n(x)$, 2 — $n(d)$, 3 — $[d_m - (d_{эф})_m]$.

Рис. 4. Схема алгоритма расчета на ЭВМ n_m и d_m при измерениях in situ поляризационных и энергетических характеристик отраженного излучения; 1 — ввод (ψ , Δ , $R_{p,s}$) _{$m-1$} , θ , λ и интервала поиска n_m ; 2 — нахождение корней (4) минимизацией $f_j = |y_j| - 1$ методом деления отрезка пополам с использованием (8), т. е. расчет n_m и $\varphi_{p,m-1}^*$ при $j=1,2$; 3 — решение есть; 4 — задание начальных приближений по $\varphi_{p,m-1}$; 5 — решение системы уравнений (6) и (7) с подстановкой (5) минимизацией симплекс-методом функционала $\mathcal{F}_{1,2}$. 6 — решение есть; 7 — вывод данных на печать; 8 и 9 — подпрограммы определения квадранта $\varphi_{p,m-1}$.

вайт погрешность в определяемых значениях n и d , не превышающую 5% (рис. 2). На эти же графики нанесены значения фазовых толщин $\delta_{n,d}$, соответствующие центру интервалов s_n и s_d . Допустимый диапазон изменения фазовых толщин $S_{n,d}$ слоя рассчитывается из графиков как $S_{n,d} = \delta_{n,d} \mp (s_{n,d}/2)$. Из этих данных следует, например, что модель слой—подложка целесообразно использовать для рассмотренного типа структур в диапазоне S от $\sim 30^\circ \div 50^\circ$ до $150^\circ \div 170^\circ$ при $L \leq 5.0$ нм и от $\sim 110^\circ \div 100^\circ$ до $150^\circ \div 160^\circ$ при $L \leq 20$ нм, вне этих диапазонов необходимо знание профиля распределения оптических свойств в переходной области.

Задачу определения свойств слоя в переходной области, как показали проведенные расчеты, позволяет решить использование модели двухслойной системы, в которой расположенная под определяемым элементарным слоем структура аппроксимируется как система однородный слой—подложка с эффектив-

ными параметрами $(n_{\text{эф}})_1$, $(d_{\text{эф}})_1$, определяемыми по ψ_{m-1} и Δ_{m-1} при известных свойствах подложки. Из приведенных на рис. 3 зависимостей следует, что рассчитываемые этим методом параметры адекватно отображают свойства контролируемого слоя лишь в области оптической неоднородности между слоем и подложкой. Погрешности расчета n_m и d_m в переходной области на основе этого алгоритма не превышают $\sim 1\%$ и резко возрастают при $d > L$. Следует отметить, что вследствие периодичности зависимостей ψ и Δ от фазовой толщины слоя использование алгоритмов на основе введения эквивалентных систем принципиально позволяет получать информацию о стабильности свойств переходной области в течение процесса, если суммарная толщина слоя превышает период однозначности эллипсометрии.

Таким образом, применимость каждого из рассмотренных алгоритмов носит ограниченный характер. Их комбинация принципиально позволяет осуществлять решение обратной задачи во всем диапазоне однозначности эллипсометрии, но определение областей достоверности каждого из алгоритмов возможно лишь при априорном знании распределения оптических свойств по глубине структуры.

Алгоритм решения обратной задачи при измерениях поляризационных и энергетических характеристик отраженного излучения

Из выражения (1) следует, что вся структура, включая контролируемый элементарный слой, описывается шестью параметрами $(n_m, d_m, |r_{m-1}|_s, p, \varphi_{m-1})_p$.

При измерениях *in situ* в отраженном свете ψ , Δ и $R_p = |r_p|^2$ (или $R_s = |r_s|^2$) в моменты времени t_m и t_{m-1} число неизвестных сводится к трем, а именно, n_m , d_m и $(\varphi_{m-1})_p$ или $(\varphi_{m-1})_s$, так как $(\varphi_{m-1})_s = (\varphi_{m-1})_p - \Delta_{m-1}$, а $|(r_{m-1})_s| = |(r_{m-1})_p| / \operatorname{tg} \psi_{m-1}$. Единственным допущением при этом является обычно выполняемое на практике при измерениях *in situ* условие неизменности оптических постоянных элементов структуры на временном интервале h_t .

Используя метод, описанный в [2], преобразуем (1) к виду

$$E y_m^2 + B y_m + C = 0, \quad (4)$$

где

$$E(n_m, d_m, (\varphi_{m-1})_p) = F_s - F_p r_m,$$

$$B(n_m, d_m, (\varphi_{m-1})_p) = r_m(F_p F_s g_s + g_p) - (F_p F_s g_p + g_s),$$

$$C(n_m, d_m, (\varphi_{m-1})_p) = g_s g_p (F_p - r_m F_s),$$

$$y_m = e^{-2i\delta_m}.$$

Условие прозрачности контролируемого слоя $|y_m| = 1$ позволяет выразить d_m явно

$$d_m = \frac{\lambda}{4\pi(n_m^2 - \sin^2 \theta)^{1/2}} \cdot \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left(\frac{\operatorname{Im} y_m}{\operatorname{Re} y_m} \right). \quad (5)$$

Решение задачи сводится к поиску значения n_m и $(\varphi_{m-1})_p$, удовлетворяющих системе уравнений

$$|y_m|_{1,2} = 1, \quad (6)$$

$$(R_m)_{p(s)} = |(y_m) - F_{p(s)} g_{p(s)}| / (F_{p(s)} y_m - g_{p(s)})|^2, \quad (7)$$

где

$$(y_m)_{1,2} = (-B \mp \sqrt{B^2 - 4EC}) / 2E.$$

Отыскание решения системы уравнений существенно упрощается выбором начальных приближений на основе линеаризации уравнения (7) при $(d_m/\lambda) \ll 1$.

условии, естественным образом реализуемом при измерениях *in situ*. Преобразования приводят к следующему выражению:

$$\operatorname{ctg}(\varphi_{m-1})_p = \left[\frac{(R_m)_s - (R_{m-1})_s}{(R_m)_p - (R_{m-1})_p} \cdot \frac{1 - (R_{m-1})_p}{1 - (R_{m-1})_s} Q \operatorname{tg} \psi_{m-1} + \cos \Delta_{m-1} \right] / \sin \Delta_{m-1}, \quad (8)$$

где $Q = (n_m^2 \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) / n_m^2$.

Подстановкой (5, 8) в (4) удается перевести поиск решения в одномерное n_m -пространство. Найденные при использовании (8) решения являются приближенными, поэтому найденные таким образом значения параметров n_m^* и $(\varphi_{m-1})_p^*$ используются как начальные приближения при поиске решения системы уравнений (6), (7). Алгоритм расчета поясняется блок-схемой на рис. 4. Подпрограммы 1, 2 нахождения квадранта $(\varphi_{m-1})_p$ служат для обеспечения опроса по $(\varphi_{m-1})_p$ во всех четвертях [выражение (8) позволяет найти лишь главные значения фазы] или для корректировки ее значения с помощью вводимых физических условий. В разработанной программе к ЭВМ ЕС 1022 решение системы уравнений (6)–(7) отыскивалось симплекс-методом [8] минимизацией одного из функционалов $\mathcal{F}_{1,2} = [(|y_m| - 1)^2 + |(R'_m)_{p(s)} - (R_m)_{p(s)}|^2]^{1/2} [(R_m)_{p(s)}]$ и $(R'_m)_{p(s)}$ — измеряемые и расчетные значения коэффициента отражения].

При измерении обоих энергетических коэффициентов отражения R_p и R_s возникает избыточность информации, позволяющая провести проверку корректности решения или вести решение системы (6)–(7) по наиболее оптимальному (чувствительному к параметрам) варианту.

Выяснение влияния случайных погрешностей в измерениях ψ , Δ и $R_{p(s)}$ на результаты определения n_m и d_m по предложенному алгоритму осуществлялось машинным экспериментом, описанным выше образом. Погрешность измерения $\Delta(R_m)$ задавалась как $\Delta(R_m)_{p,s} = K_{zm} \Delta(R_{p,s})$, где $\Delta(R_{p,s}) = 5 \cdot 10^{-3} \cdot R_{p,s}$. Результаты расчета Δn_m и Δd_m для структур типа Si—SiO₂ приведены на рис. 1. Из сопоставления приведенных данных видно, что поляризационно-энергетический метод контроля параметров прозрачного слоя и описанный алгоритм расчета более эффективен по сравнению с двухпараметровой эллипсометрией и позволяет при одинаковых для обоих методов погрешностях в измерениях ψ и Δ реализовать меньшие погрешности в нахождении параметров слоев (практически не более 5%). Метод не требует знания оптических свойств подложки и может использоваться также для контроля структур, оптические свойства которых меняются во время технологического процесса, если эти изменения пренебрежимо малы за время роста (травления) элементарного контролируемого слоя.

Литература

- [1] А. В. Ржанов, К. К. Свиташев. Основы эллипсометрии. Наука, Новосибирск, 1979.
- [2] М. М. Горшков. Эллипсометрия. Сов. радио, М., 1974.
- [3] Т. Г. Ланская, Р. И. Любинская. ЖТФ, 51, 1920, 1981.
- [4] П. К. Бернинг. Теория и методы расчета оптических свойств тонких пленок. В кн.: Физика тонких пленок, т. 1. Мир, М., 1967.
- [5] Д. И. Биленко. Дефектоскопия, № 9, 28, 1980.
- [6] Д. И. Биленко, Б. А. Дворкин. Тезисы докл. II Всесоюз. конф. Эллипсометрия — метод исследования физико-химических процессов на поверхности твердых тел. Новосибирск, 1981.
- [7] Р. Б. Бендере, Р. П. Калынина. Тезисы докл. II Всесоюз. конф. Эллипсометрия — метод исследования физико-химических процессов на поверхности твердых тел. Новосибирск, 1981.
- [8] Д. Химмельблау. Анализ процессов статистическими методами. Мир, М., 1973.

Поступило в Редакцию 2 марта 1982 г.