КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 535-46

АНАЛИЗ ОСНОВНОГО УРАВНЕНИЯ ПРОСВЕТНОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

М. И. Абаев и *Э. С. Путилин*

Отражательная эллипсометрия в настоящее время является общепризнанным и широко используемым методом исследования слоистых систем. Просветная эллипсометрия используется для этих целей редко, несмотря на то что ее возможности не менее широки. Более того, в некоторых случаях эллипсометрическое исследование может быть выполнено только в проходящем свете.

В работе [1] проведен анализ основного уравнения эллипсометрии в линейном приближении. В настоящей работе такой анализ проводится на основе точных формул. Сравнение результатов дается ниже.

Основная формула просветной эллипсометрии для модели, представленной на рис. 1, имеет вид

$$\rho \equiv \operatorname{tg} \Psi e^{i\Delta} = \frac{T_{12p}T_{23p}}{T_{12s}T_{23s}} \frac{1 + R_{12s}R_{23s}e^{2i\delta}}{1 + R_{12p}R_{23p}e^{2i\delta}}, \tag{1}$$

где Δ и Ψ — измеряемые на эллипсометре параметры, $\delta = 2\pi n_2 d \cos \varphi_2 / \lambda$, а T_{12p}, T_{12s}, T_{23p}, T_{23s}, R_{12p}, R_{12s}, R_{23p}, R_{23s} есть коэффициенты пропускания и отражения Френеля для соответствующих границ [2].

Исходя из физических соображений и удобства изложения, рассмотрим два случая: 1) $n_2 > n_1$ или $n_2 < n_1$ при $0 < \varphi_1 < \varphi_c = \arcsin (n_2/n_1)$ (угол падения меньше критического φ_c), 2) $n_2 < n_1$ при $\varphi_1 > \varphi_c$ (угол падения больше критического).

Для первого случая перепишем формулу (1) в виде

$$\rho \equiv \operatorname{tg} \Psi \, e^{i\Delta} = \frac{A_1 A_2 + A_3 A_4 e^{2i\delta}}{B_1 B_2 + B_3 B_4 e^{2i\delta}}, \tag{2}$$

где

$$A_1 = n_1 \cos \varphi_1 + n_2 \cos \varphi_2, \quad A_2 = n_2 \cos \varphi_2 + n_3 \cos \varphi_3, \quad A_3 = n_1 \cos \varphi_1 - n_2 \cos \varphi_2,$$
$$A_4 = n_2 \cos \varphi_2 - n_3 \cos \varphi_3, \quad B_1 = n_2 \cos \varphi_1 + n_1 \cos \varphi_2, \quad B_2 = n_3 \cos \varphi_2 + n_2 \cos \varphi_3,$$
$$B_3 = n_2 \cos \varphi_1 - n_1 \cos \varphi_2, \quad B_4 = n_3 \cos \varphi_2 - n_2 \cos \varphi_3,$$

а величины углов φ_2 и φ_3 определяются из закона Снеллиуса $n_1 \sin \varphi_1 = n_2 \sin \varphi_2 = n_3 \sin \varphi_3$.

Во втором случае в соответствии с законом Снеллиуса угол φ_2 перестает быть действительным, а величина

$$\cos \varphi_2 = \sqrt{1 - \frac{n_1^2 \sin^2 \varphi_1}{n_2^2}}$$

становится чисто мнимой. Физически это означает, что волна затухает по мере проникновения в среду слоя, даже если поглощение в ней отсутствует. Запишем формулу (1) для этого случая в виде

$$\rho \equiv \operatorname{tg} \Psi e^{i\Delta} = \frac{X_1 (1 - e^{-2\delta}) + iY_1 (1 + e^{-2\delta})}{X_2 (1 - e^{-2\delta}) + iY_2 (1 + e^{-2\delta})}, \tag{3}$$

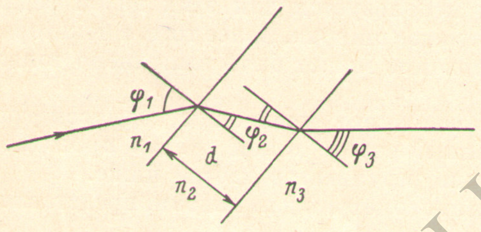
где

$$X_1 = n_1 n_3 \cos\varphi_1 \cos\varphi_3 - n_2^2 \,|\cos\varphi_2|^2, \quad X_2 = n_2 \,|\cos\varphi_2|\,(n_1 \cos\varphi_1 + n_3 \cos\varphi_3),$$
$$Y_1 = n_2^2 \cos\varphi_1 \cos\varphi_3 - n_1 n_3 \,|\cos\varphi_2|^2, \quad Y_2 = n_2 \,|\cos\varphi_2|\,(n_1 \cos\varphi_3 + n_3 \cos\varphi_1),$$

а $|\cos\varphi_2| = \sqrt{\frac{n_1^2 \sin^2\varphi_1}{n_2^2} - 1}$ — действительная величина.

На рис. 2 приведены зависимости эллипсометрических углов Δ и Ψ от угла падения, рассчитанные по формулам (2) и (3). Кривые показывают, что наибольшая чувствительность величин Δ и Ψ к параметрам слоя (область оптимальных условий эксперимента по просветной эллипсометрии) реализуется при больших углах падения в отличие от отражательной эллипсометрии, где наибольшая чувствительность имеет место при углах падения, близких к углу Брюстера $\varphi_Б = \operatorname{arctg}(n_3/n_1)$.

Аналогичная зависимость, полученная в работе [1], указывает на монотонное увеличение чувствительности с углом падения, причем вплоть до $\varphi_1 = 90°$.



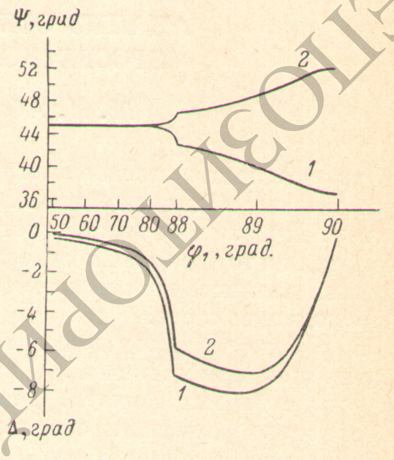


Рис. 1. Оптическая модель системы с однородным слоем.

Рис. 2. Зависимость эллипсометрических углов Δ и Ψ от угла падения φ_1 при $n_1 = n_3 = 1.5$, $d = 100$ Å.

Кривая *1* — для $n_2 = 1.3$ ($\varphi_c = 60°04'$), кривая *2* — для $n_2 = 1.7$.

Из физических соображений, однако, ясно, что при $\varphi_1 = 90°$ (пучок ориентирован параллельно слою) наличие последнего эллипсометрически не может быть обнаружено. Это разногласие, являющееся следствием рассмотрения в линейном приближении по толщине ($d \ll \lambda$), свидетельствует о неприменимости подобного рассмотрения в оптимальных условиях — при φ_1 вблизи 90°.

В оптимальных условиях величина $(\pi/2) - \varphi_1$ мала. Если считать все среды диэлектрическими и также малыми величины $d \ll \lambda$ и разницу в коэффициентах преломления $n_2 = n_1(1 \pm \beta)$, $\beta \ll 1$, то при $n_1 = n_3$ путем разложения по всем этим малым величинам получаются формулы линейного приближения просветной эллипсометрии — аналоги формул линейного приближения Друде для отражательной эллипсометрии

$$\left.\begin{aligned} \Delta &= -\frac{2\pi d n_1 \beta^2}{\lambda(\pi - 2\varphi_1)}, \\ \Psi &= \frac{\pi}{4} - \frac{32\pi^2 d^2 n_1^2 \beta}{\lambda^2} \quad (n_2 < n_1); \\ \Psi &= \frac{\pi}{4} + \frac{16\pi^2 d^2 n_1^2 \beta^2}{\lambda^2 (\pi - 2\varphi_1)^2} \quad (n_2 > n_1). \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Сравнение результатов, полученных по точным (2) и (3) и приближенным (4) формулам при $\varphi_1 = 88°$, приводит к следующему: если $\beta = 10\%$, то для толщин до 100 Å, ошибка не превышает 20%, если $\beta = 1\%$, то ошибка, меньшая 20%, получается для толщин до 500 Å.

Укажем далее на возможность использования в просветной эллипсометрии одного метода решения обратной задачи, т. е. вычисления величин

n_2 и d по экспериментальным значениям Δ и Ψ. Идея метода, аналогичная идее метода Холмса [3], состоит в следующем. Выражение (2) можно решить относительно величины $e^{2i\delta}$, в показателе степени которой стоит чисто мнимая величина, если в слое отсутствует поглощение, т. е. для этого случая $|e^{2i\delta}|=1$. Решение запишем в виде

$$e^{2i\delta}=\frac{A_1A_2-\rho B_1B_2}{\rho B_3B_4-A_3A_4}\equiv g-ih. \tag{5}$$

Таким образом, имеем нелинейное уравнение

$$\left|\frac{A_1A_2-\rho B_1B_2}{\rho B_3B_4-A_3A_4}\right|-1=0, \tag{6}$$

в правую часть которого входят известные величины φ_1, n_1, n_3, Δ,Ψ и одна неизвестная n_2. Решив это уравнение, получим значение интересующего нас коэффициента преломления n_2 и соответствующие величины g и h. Из выражения (5) с очевидностью следует значение толщины слоя

$$d=\frac{\lambda \operatorname{arc\,tg}(h/g)}{4\pi\sqrt{n_2^2-n_1^2\sin^2\varphi_1}}+(0,\ 1,\ 2\ldots)\frac{\lambda}{4\sqrt{n_2^2-n_1^2\sin^2\varphi_1}}. \tag{7}$$

Аналогичный анализ формулы (3) приводит к

$$e^{-2\delta}=\frac{X_1+\rho X_2+i(\rho Y_2-Y_1)}{X_1-\rho X_2-i(\rho Y_2-Y_1)}\equiv l+im. \tag{8}$$

Но в этом случае $e^{-2\delta}$ действительно, т. е. должно быть

$$\operatorname{Im}\left[\frac{X_1+\rho X_2-i(\rho Y_2-Y_1)}{X_1-\rho X_2-i(\rho Y_2-Y_1)}\right]=0. \tag{9}$$

Это уравнение полностью аналогично (6). Определив из него n_2, из (8) получим значение толщины слоя

$$d=-\frac{\lambda\ln l}{4\pi\sqrt{n_1^2\sin^2\varphi_1-n_2^2}}. \tag{10}$$

По поводу полученных результатов необходимо сделать следующие замечания. Уравнения (6) и (9) наверняка имеют несколько корней, поэтому следует найти их все и выбрать один, исходя из физических соображений (например, $1.3<n_2<2.5$ для сплошных сред). Далее, толщина слоя по формуле (7) определяется с точностью до периода (обычно несколько тысяч Å). Если же толщина превышает период, необходимо грубое ее определение другими методами, дающее число периодов, и последующее уточнение из данных эллипсометрии. Во втором случае — формула (10) — толщина определяется однозначно, что является весьма благоприятным обстоятельством.

Таким образом, решение обратной эллипсометрической задачи в наших случаях, как и в методе Холмса, сводится к определению одной неизвестной величины — n_2 — из одного нелинейного уравнения, тогда как вторая — d — просто вычисляется по формулам (7) или (10). Для проведения такой процедуры в вычислительной математике разработано много методов [4] и стандартных программ [5]. Особая привлекательность развитого подхода, по мнению авторов, состоит в возможности реализации таких программ на малых вычислительных устройствах с объемом памяти в несколько килобайт.

Литература

[1] R. M. A. Azzam., M. Elshazly-Zaghloul, N. M. Bashara. Appl. Opt., *14*, 1652, 1975.
[2] O. S. Hevens. Optical Properties of Thin Solid Films, *52*, N.—Y., 1965.
[3] D. A. Holmes. Appl. Opt., *6*, 168, 1967.
[4] Н. Н. Калиткин. Численные методы, 138—150. М., 1978.
[5] Библиотека стандартных программ для вычислительного устройства 15-ВСМ5, т. 1, № 1—02.

Поступило в Редакцию 26 января 1979 г.