

## РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПОДЛОЖКИ С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ

Н. И. Стаськов\*, А. В. Шульга

УДК 535.32+535.34

Белорусско-Российский университет,  
212000, Могилев, просп. Мира, 43, Беларусь; e-mail: ni\_staskov@mail.ru

(Поступила 30 июня 2015)

Получено аналитическое решение обратной задачи спектральной эллипсометрии для прозрачно-го слоя на поглощающей подложке, основанное на методе огибающих, и применено для определения спектральных зависимостей показателей преломления  $n(\lambda)$  и поглощения  $k(\lambda)$  модельной и реальной кремниевых подложек со слоями диоксида кремния. Аналитически в приближении модели слой—подложка с идеальными границами раздела удалось определить эффективные оптические характеристики кремниевой подложки. Этот факт и относительное расположение спектральных зависимостей эллипсометрических углов  $\tan \psi(\lambda)$  и  $\cos \Delta(\lambda)$ , измеренных для кремниевой подложки с естественным поверхностным слоем и структуры слой диоксида кремния—кремниевая подложка, объясняются тем, что слой диоксида кремния окружен переходным и поверхностным слоями.

**Ключевые слова:** спектральная эллипсометрия, слой на подложке, переходный слой, толщина слоя.

Analytical solution of the inverse spectroscopic ellipsometry problem for transparent layer on absorbing substrate was obtained on the base of the envelope method. The solution was applied for evaluating the spectra of refraction  $n(\lambda)$  and absorption  $k(\lambda)$  indices of a silicon substrate with a silicon dioxide layer. The effective optical characteristics for the silicon substrate were determined analytically using the layer—substrate model approximation with the ideal interfaces. The relative disposition of the spectra of ellipsometric angles  $\tan \psi(\lambda)$  and  $\cos \Delta(\lambda)$  measured for the silicon substrate with natural surface layers and the silicon dioxide layer—silicon substrate is explained by the fact that the silicon dioxide is surrounded by the transition and surface layers.

**Keywords:** spectroscopic ellipsometry, layer on substrate, transition layer, layer thickness.

**Введение.** Для определения параметров структуры прозрачный слой—поглощающая подложка используются различные оптические методы, в том числе эллипсометрия отраженного света. Если спектрофотометрические методы основаны на измерении только отражательной способности этой структуры для  $s$ - и  $p$ -поляризованного света  $R_{s,p}(\varphi, \lambda) = |r_{s,p}(\varphi, \lambda)|^2$ , где  $\varphi$  — угол падения света на образец,  $\lambda$  — длина волны света, то эллипсометрия позволяет определять и действительную, и мнимую части отношения амплитудных  $r_{s,p}(\varphi, \lambda)$  коэффициентов отражения или так называемые поляризационные углы  $\psi(\varphi, \lambda)$  и  $\Delta(\varphi, \lambda)$ . Связь спектрофотометрических и эллипсометрических параметров задается выражениями:

$$r_{s,p}(\varphi, \lambda)/r_{s,p}(\varphi, \lambda) = \tan \psi(\varphi, \lambda) \exp(i\Delta(\varphi, \lambda)), \quad \sqrt{R_p(\varphi, \lambda)/R_s(\varphi, \lambda)} = \tan \psi(\varphi, \lambda). \quad (1)$$

На значения параметра  $\Delta(\varphi, \lambda)$  большее влияние оказывает толщина слоя, а параметра  $\psi(\varphi, \lambda)$  — оптические характеристики слоя и подложки [1]. Первое выражение в (1) называют основным уравнением эллипсометрии. Его левая часть определяется электродинамической моделью отражающей

## SOLUTION OF THE INVERSE SPECTROSCOPIC ELLIPSOMETRY PROBLEM FOR ABSORBING SUBSTRATE WITH DIELECTRIC LAYER

N. I. Stas'kov\* and A. V. Shulga (Belarusian-Russian University, 43 Mir Prosp., Mogilev, 212000, Belarus; e-mail: ni\_staskov@mail.ru)

структуры с параметрами среды (воздух,  $n_0(\lambda) = 1$ ,  $k_0(\lambda) = 0$ ), слоя ( $n_1(\lambda)$ ,  $k_1(\lambda)$ ,  $d$ ) и подложки ( $n_2(\lambda)$ ,  $k_2(\lambda)$ ). Четыре оптические характеристики и толщина слоя подлежат определению через измеренные зависимости  $\psi_e(\varphi, \lambda)$  и  $\Delta_e(\varphi, \lambda)$ .

Известно [2], что при оптической толщине слоя, соизмеримой с длиной волны, на спектральных зависимостях  $R_{s,p}(\varphi, \lambda)$  наблюдаются максимумы и минимумы. В работах [3, 4] предложена методика аналитического определения трех параметров слоя, основанная на построении огибающих экстремумов на экспериментальных спектральных зависимостях  $R_{s,p}(\varphi, \lambda)$ . Такой подход к решению обратной задачи спектрофотометрии оказался неприемлемым уже для двухслойной структуры [5]. Применение эллипсометрии для определения параметров прозрачного слоя обсуждалось в [6].

Все рассмотренные работы основаны на известной классической модели среда—слой—подложка с идеальными границами раздела. Обратим внимание на то, что интерференция в слое обусловливается когерентностью волн, отраженных от поверхности слоя и подложки. Наличие переходных слоев должно проявляться в измеренных спектрах и рассчитанных параметрах структуры. Это связано с физическими особенностями эллипсометрии отраженного света. В работе [7] исследовано влияние переходных слоев между наноразмерной ( $d \ll \lambda$ ) пленкой диоксида кремния и кремниевой подложкой КЭФ5 на эллипсометрические углы, которые определяются на ЛЭФ-3М ( $\lambda = 0.6328$  мкм). Показана целесообразность замены структуры подложка—переходный слой подложкой с эффективными оптическими характеристиками при определении толщины и показателя преломления пленки методом многоугловой эллипсометрии.

В данной работе предпринята попытка получить аналитическое решение обратной задачи спектральной эллипсометрии для толстого ( $d \sim \lambda$ ) прозрачного ( $k_1(\lambda) = 0$ ) слоя на поглощающей подложке. Аналитические решения реализованы методом огибающих интерференционных экстремумов на спектральных зависимостях эллипсометрических углов  $\tan\psi(\lambda)$  и  $\cos\Delta(\lambda)$  слоя диоксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ) на кремниевой подложке (сSi, КДБ12). В таком случае  $n_1(\lambda) < n_2(\lambda)$ .

**Теория.** Для слоя на подложке отражательная способность  $s$ - и  $p$ -поляризованного света находится из выражения [2]:

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

где  $r_{ij}(\varphi, \lambda)$  и  $\alpha_{ij}(\varphi, \lambda)$  — хорошо известные амплитудные коэффициенты отражения и фазы отраженных лучей  $s$ - и  $p$ -поляризованного света на границах раздела  $ij$  ( $i=0, 1; j=1, 2$ ),  $\delta(\varphi, \lambda) = (2\pi/\lambda)d(n_1^2(\lambda) - \sin^2\varphi_{01})^{1/2}$  — фазовая толщина слоя. При  $k_1(\lambda) = 0$  максимальные значения функции (2)  $R_+(\varphi, \lambda)$  достигаются при условии  $\alpha_{12}(\varphi, \lambda) - 2\delta(\varphi, \lambda) = 2m\pi$ , минимальные  $R_-(\varphi, \lambda)$  — при  $\alpha_{12}(\varphi, \lambda) - 2\delta(\varphi, \lambda) = (2m+1)\pi$  ( $m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ ). Для некоторого угла падения найдутся длины волн, на которые приходится эти экстремумы. В таком случае выражение (2) преобразуется в формулу для соответствующих огибающих экстремумов:

$$R_{\pm}(\varphi, \lambda) = \left( \frac{|r_{01}(\varphi, \lambda)| \pm |r_{12}(\varphi, \lambda)|}{1 \pm |r_{01}(\varphi, \lambda)| |r_{12}(\varphi, \lambda)|} \right)^2. \quad (3)$$

В случае прозрачного слоя спектры  $R_+(\varphi, \lambda)$  — огибающие максимумов — являются спектрами подложки без диэлектрического слоя [6]:

$$R_{+s}(\varphi, \lambda) = R_{02s}(\varphi, \lambda) = \left| \frac{\cos\varphi_{01} - \sqrt{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2\varphi_{01}}}{\cos\varphi_{01} + \sqrt{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2\varphi_{01}}} \right|^2, \quad (4)$$

$$R_{+p}(\varphi, \lambda) = R_{02p}(\varphi, \lambda) = \left| \frac{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 \cos\varphi_{01} - \sqrt{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2\varphi_{01}}}{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 \cos\varphi_{01} + \sqrt{(n_2(\lambda) - ik_2(\lambda))^2 - \sin^2\varphi_{01}}} \right|^2, \quad (5)$$

которые при заданном угле падения зависят от  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$ . Эти параметры легко определить из отношения  $R_{+p}(\varphi, \lambda)/R_{+s}(\varphi, \lambda)$  и  $R_{+s}(\varphi, \lambda)$  для одного угла падения [4] или из  $R_{+s}(\varphi, \lambda)$  для двух углов падения.

На основании (1)—(5) не представляется сложным получить выражения для спектра  $\psi(\varphi, \lambda)$ :

$$\psi(\varphi, \lambda) = \tan^{-1} \sqrt{R_p(\varphi, \lambda)/R_s(\varphi, \lambda)}, \quad (6)$$

и огибающих его экстремумов  $\psi_{\pm}(\varphi, \lambda)$ :

$$\psi_+(\varphi, \lambda) = \tan^{-1} \sqrt{R_{-p}(\varphi, \lambda)/R_{-s}(\varphi, \lambda)}, \quad (7)$$

$$\psi_-(\varphi, \lambda) = \tan^{-1} \sqrt{R_{+p}(\varphi, \lambda)/R_{+s}(\varphi, \lambda)}. \quad (8)$$

В случае прозрачного слоя  $\psi_-(\varphi, \lambda)$  совпадает со спектром  $\psi_{02}(\varphi, \lambda)$  подложки без слоя, т. е.  $\psi_-(\varphi, \lambda) = \psi_{02}(\varphi, \lambda)$  и  $\tan \psi_-(\varphi, \lambda) = \tan \psi_{02}(\varphi, \lambda)$ . Для определения  $\Delta(\varphi, \lambda)$  необходимо исследовать знаки  $\text{Re}(r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda))$  и  $\text{Im}(r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda))$ . В зависимости от знаков спектр  $\Delta(\varphi, \lambda)$  толстого слоя на подложке определяется по одному из выражений — если мнимая и действительная части положительные:

$$\Delta(\varphi, \lambda) = \tan^{-1}(\text{Im}[r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda)]/\text{Re}[r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda)]),$$

если действительная часть отрицательная:

$$\Delta(\varphi, \lambda) = \tan^{-1}(\text{Im}[r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda)]/\text{Re}[r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda)]) + \pi,$$

если мнимая часть отрицательная, действительная часть положительная:

$$\Delta(\varphi, \lambda) = \tan^{-1}(\text{Im}[r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda)]/\text{Re}[r_p(\varphi, \lambda)/r_s(\varphi, \lambda)]) + 2\pi.$$

Определив таким образом  $\Delta(\varphi, \lambda)$ , найдем спектр  $\cos \Delta(\varphi, \lambda)$ , а по нему — огибающую минимумов:

$$\cos \Delta_-(\varphi, \lambda) = \cos \left[ \arg \left( \frac{r_{01p} + r_{12p}}{1 + r_{01p}r_{12p}} \bigg/ \frac{r_{01s} + r_{12s}}{1 + r_{01s}r_{12s}} \right) \right] = \cos \left[ \arg \left( r_{02p}/r_{02s} \right) \right]. \quad (9)$$

Как видно,  $\cos \Delta_-(\varphi, \lambda)$  совпадает с  $\cos \Delta_{02}(\varphi, \lambda)$  чистой подложки.

Таким образом, если переходный слой между диэлектрическим слоем и подложкой отсутствует, то спектры  $n_2(\lambda)$ ,  $k_2(\lambda)$ , рассчитанные аналитически из выражения [8]

$$n_2(\lambda) - ik_2(\lambda) = \sin \varphi_{01} \sqrt{\left( \frac{1 - \tan \psi_-(\varphi, \lambda) \exp i \Delta_-(\varphi, \lambda)}{1 + \tan \psi_-(\varphi, \lambda) \exp i \Delta_-(\varphi, \lambda)} \tan \varphi_{01} \right)^2 + 1}, \quad (10)$$

должны соответствовать подложке. При этом спектры  $\tan \psi_-(\varphi, \lambda)$  и  $\Delta_-(\varphi, \lambda)$  необходимо определять по измеренным спектрам  $\tan \psi_e(\lambda)$  и  $\Delta_e(\lambda)$  подложки со слоем.

Примем во внимание, что современные эллипсомеры кроме спектральных зависимостей поляризационных углов позволяют измерять спектральную зависимость отражательной способности  $s$ -поляризованного света. Поэтому определение  $n_1(\lambda)$  слоя проще осуществить по уже разработанной методике [4] с использованием огибающих  $R_{+s}(\lambda)$  и  $R_{-s}(\lambda)$ . В таком случае отражательную способность на границе воздух—слой находим из выражения

$$R_{01s}(\lambda) = \left( \frac{1 - \sqrt{R_{+s}(\lambda)} \sqrt{R_{-s}(\lambda)} - \sqrt{(1 - R_{-s}(\lambda))(1 - R_{+s}(\lambda))}}{\sqrt{R_{+s}(\lambda)} - \sqrt{R_{-s}(\lambda)}} \right)^2. \quad (11)$$

Для прозрачного слоя  $R_{01s}(\lambda)$  зависит только от параметра  $n_1(\lambda)$ , значение которого можно найти при одном угле падения. В случае  $s$ -поляризованного света выражение для  $n_1(\lambda)$  имеет вид

$$n_1(\lambda) = \sqrt{\sin^2 \varphi_{01} + \left( \frac{\cos \varphi_{01} \left[ 1 + R_{01s}(\lambda) + 2\sqrt{R_{01s}(\lambda)} \right]}{1 - R_{01s}(\lambda)} \right)^2}. \quad (12)$$

Для определения толщины слоя на спектральной зависимости  $\tan \psi(\lambda)$  следует выбрать два любых интерференционных максимума, положения которых задаются  $\lambda_v$  и  $\lambda_{v+j}$  ( $\lambda_{v+j} > \lambda_v$ ,  $j = 1, 2, 3, \dots$ ). Затем на этих длинах волн необходимо определить оптические характеристики слоя  $n_1(\lambda_v)$ ,  $n_1(\lambda_{v+j})$  и изменение фазы  $\alpha_{12}(\lambda_v)$ ,  $\alpha_{12}(\lambda_{v+j})$ . Для прозрачного слоя при наличии нескольких максимумов в спектре  $\tan \psi(\lambda)$  выражение для определения толщины имеет вид

$$d = \frac{\lambda_v \lambda_{v+j} [2j\pi - \alpha_{12}(\lambda_v) + \alpha_{12}(\lambda_{v+j})]}{4\pi (\lambda_{v+j} \sqrt{n_1^2(\lambda_v) - \sin^2 \varphi_{01}} - \lambda_v \sqrt{n_1^2(\lambda_{v+j}) - \sin^2 \varphi_{01}})}. \quad (13)$$

Подобные выражения для определения толщины слоя легко получить из условий двух минимумов или из условий максимума и минимума отражательной способности (2). В области слабого поглощения света подложкой ( $k_2(\lambda) < 0.1$ ) изменением фазы отраженных лучей на длинах волн  $\lambda_v$  и  $\lambda_{v+j}$  в выражении (13) можно пренебречь.

**Спектральная эллипсометрия модельной структуры слой SiO<sub>2</sub>—подложка cSi.** Допустим, что слой ( $d = 0.945$  мкм) аморфного диоксида кремния (SiO<sub>2</sub>) находится на кристаллической кремниевой подложке (cSi). Табличные значения [9] оптических характеристик слоя SiO<sub>2</sub> и подложки cSi в области 0.4—1.0 мкм можно интерполировать соответствующими степенными рядами:

$$n_1(\lambda) = 1.4470 + 1.3147 \cdot 10^{-3} \lambda^2 + 4.6542 \cdot 10^{-3} \lambda^{-2} - 2.4312 \cdot 10^{-4} \lambda^{-4}, \quad (14)$$

$$n_2(\lambda) = 3.3828 - 0.017 \lambda^2 + 0.2313 \lambda^{-2} - 0.0293 \lambda^{-4} + 0.0072 \lambda^{-6}, \quad (15)$$

$$k_2(\lambda) = -0.0394 + 0.0117 \lambda^2 + 0.039 \lambda^{-2} - 0.0136 \lambda^{-4} + 0.0027 \lambda^{-6}. \quad (16)$$

Во-первых, это позволяет для угла падения  $65^\circ$  по формулам (2) рассчитать амплитудные коэффициенты отражения  $r_{s,p}(\lambda)$ . Угол падения света выбран так, чтобы осуществить экспериментальные исследования реальной структуры на спектральных эллипсометрах Horiba UVISEL (Horiba-Jobin Yvon, Longjumeau, Франция) [10] и ES2 (ФГУП СКБ ИРЭ РАН, Россия) [11, 12], сигналы с которых, поступающие на детектор, математически обрабатываются и представляются в виде спектров  $\psi(\lambda)$ ,  $\Delta(\lambda)$  и  $\tan\psi(\lambda)$ ,  $\cos\Delta(\lambda)$ . Во-вторых, по выражениям (1) можно рассчитать спектры  $\tan\psi(65^\circ, \lambda)$ ,  $\cos\Delta(65^\circ, \lambda)$  (рис. 1, кривые 1 и 3), построить огибающие минимумов  $\tan\psi_-(65^\circ, \lambda)$  и  $\cos\Delta_-(65^\circ, \lambda)$  (кривые 2 и 4), определить длины волн экстремумов, определить  $\Delta_-(65^\circ, \lambda)$  и по формуле (10) рассчитать оптические спектры  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  подложки. В-третьих, можно рассчитать спектр  $R_s(65^\circ, \lambda)$ , построить огибающие  $R_{\pm s}(65^\circ, \lambda)$ , по выражению (11) определить отражательную способность на границе раздела воздух—слой  $R_{01s}(65^\circ, \lambda)$  и из выражения (12) найти спектр показателя преломления слоя  $n_1(\lambda)$ . Всех вышеперечисленных операций достаточно для определения толщины слоя  $d$ .

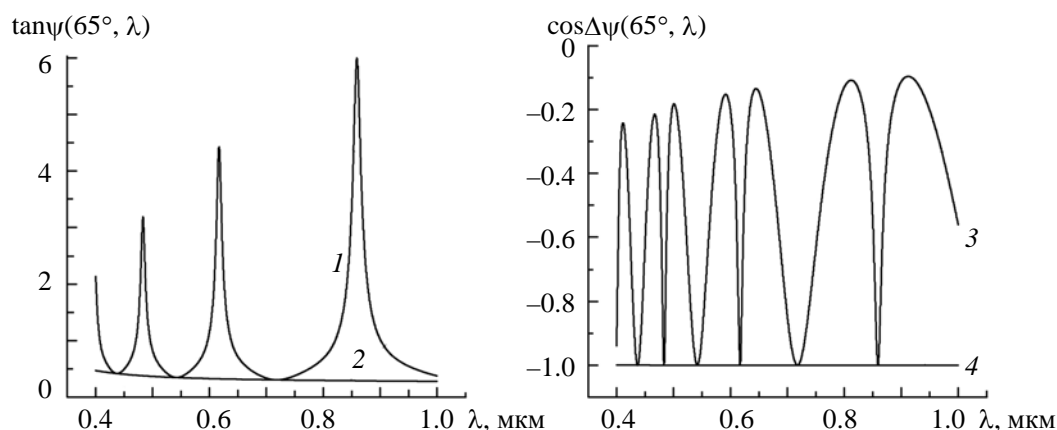


Рис. 1. Теоретические спектральные зависимости  $\tan\psi(65^\circ, \lambda)$  (1),  $\tan\psi_-(65^\circ, \lambda)$  (2) и  $\cos\Delta(65^\circ, \lambda)$  (3),  $\cos\Delta_-(65^\circ, \lambda)$  (4) модельной структуры SiO<sub>2</sub>-cSi

На спектральных зависимостях  $\tan\psi(65^\circ, \lambda)$  и  $\cos\Delta(65^\circ, \lambda)$  (рис. 1) видны по три минимума и максимума, положение которых характеризуется двумя тройками соответствующих длин волн. Минимумы  $\tan\psi_-(\varphi, \lambda)$  и  $\Delta_-(\varphi, \lambda)$ , входящие в выражение (10), необходимы для определения  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  модельной подложки, а длины волн шести экстремумов — для определения толщины слоя.

Аналитическое решение обратной задачи спектральной эллипсометрии (расчет спектральных зависимостей оптических характеристик  $n_1(\lambda)$ ,  $n_2(\lambda)$ ,  $k_2(\lambda)$  и толщины слоя) показывает, что при точном задании значений параметров  $\tan\psi(\varphi, \lambda)$ ,  $\cos\Delta(\varphi, \lambda)$  и  $R_s(\varphi, \lambda)$  по выражению (10) однозначно восста-

навливаются спектральные зависимости  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  подложки (формулы (15) и (16)), а по выражениям (12) и (13) — спектральная зависимость показателя преломления и толщина модельного слоя. Эту задачу удается решить благодаря тому, что на аналитически рассчитанных при всех углах падения спектральных зависимостях  $\tan\psi(\varphi, \lambda)$ ,  $\cos\Delta(\varphi, \lambda)$  и  $R_s(\varphi, \lambda)$  можно точно определить координаты соответствующих экстремумов и построить их огибающие.

Исследуем влияние возможных погрешностей определения отражательной способности  $\delta R(\lambda)/R(\lambda) = 0.1\%$ , поляризационных углов  $\delta\psi(\varphi, \lambda) = \pm 0.01^\circ$ ,  $\delta\Delta(\varphi, \lambda) = \pm 0.01^\circ$  и угла падения  $\delta\varphi_{01} = \pm 0.1^\circ$  на аналитически определяемые параметры слоя и подложки. На рис. 2 приведены спектральные зависимости  $n_1(\lambda)$  модельного слоя (14) (кривая 1) и рассчитанные по выражению (12) с использованием огибающих  $R_+(\lambda) \pm \delta R(\lambda)$  и  $R_-(\lambda) \pm \delta R(\lambda)$  при  $\varphi_{01} = \pm 65^\circ$  (кривая 2). Как видно, в коротковолновой области спектра колебания расчетных  $n_1(\lambda)$  относительно заданных значений уменьшаются. Это объясняется соответствующим увеличением значений  $R_{01s}(\lambda)$ . При указанной выше точности определения коэффициентов отражения и угла падения с помощью функции полиномиальной регрессии можно однозначно совместить кривые 1 и 2.

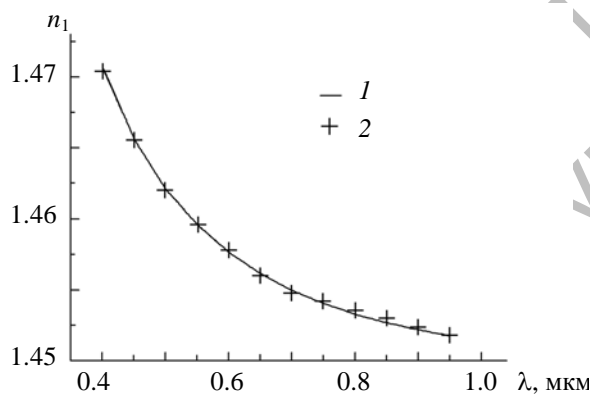


Рис. 2. Спектры  $n_1(\lambda)$  модельного слоя

На рис. 3 приведены спектральные зависимости  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  модельной подложки (15) (кривые 1) и аналитически рассчитанные по выражению (10) с использованием  $\tan(\psi_-(65^\circ, \lambda) \pm \delta\psi(\varphi, \lambda))$  и  $\Delta_-(65^\circ, \lambda) \pm \delta\Delta(\varphi, \lambda)$  (кривые 2). Рассчитанные на определенных длинах волн значения  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  находятся по разные стороны относительно заданных кривых 1. Как видно, и в этом случае дисперсионные зависимости подложки можно восстановить однозначно по рассчитанным значениям с помощью функций полиномиальной регрессии. Относительные погрешности определения показателей преломления слоя и подложки и показателя поглощения подложки возрастают с увеличением длины волны, но не превышают 0.5 и 15 %.

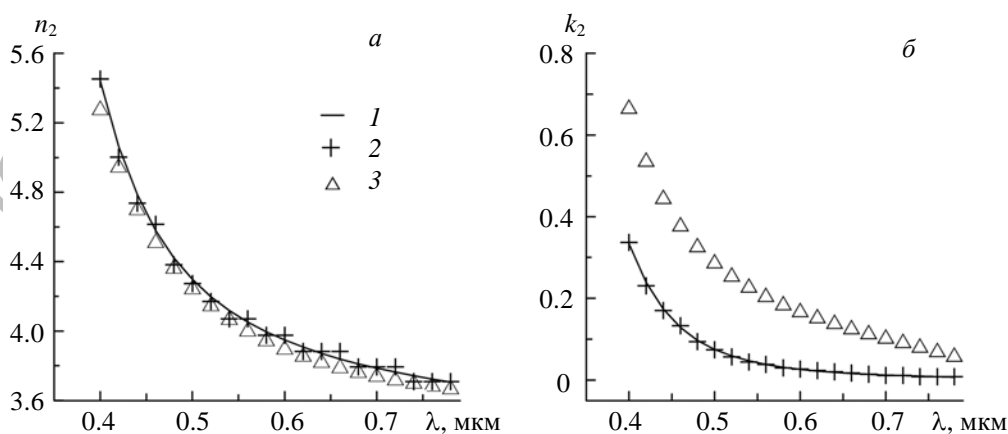


Рис. 3. Спектры  $n_2(\lambda)$  (а) и  $k_2(\lambda)$  (б) подложек: 1, 2 — модельной, 3 — КДБ12

Таким образом, в отсутствие переходных и поверхностных слоев в модельной структуре  $\text{SiO}_2\text{-cSi}$  и при указанной погрешности определения эллипсометрических параметров, которая соответствует стандартным спектральным эллипсометрам, аналитически можно рассчитать параметры слоя и подложки.

**Эксперимент.** Перед нанесением слоя  $\text{SiO}_2$  промышленную подложку КДБ12 очищали от естественного поверхностного слоя. Слой диоксида кремния получали путем окисления подложки в атмосфере сухого кислорода. Такая технология используется при изготовлении многих кремниевых структур. Измерения спектральных зависимостей  $\psi_e(\lambda)$ ,  $\Delta_e(\lambda)$  и  $\tan\psi_e(\lambda)$ ,  $\cos\Delta_e(\lambda)$  осуществляли на вышеуказанных спектральных эллипсометрах в диапазоне длин волн 0.4—1.0 мкм с шагом 0.002 мкм при угле падения  $65^\circ$ . Воспроизводимость измерения спектров эллипсометрических углов  $\delta\tan\psi_e(\lambda) = \pm 0.0001$  и  $\delta\cos\Delta_e(\lambda) = \pm 0.0001$  [11].

На рис. 4 приведены участки спектральных зависимостей  $\tan\psi_e(65^\circ, \lambda)$  и  $\cos\Delta_e(65^\circ, \lambda)$  структуры  $\text{SiO}_2\text{-КДБ 12}$  (кривые 1), огибающие  $\tan\psi_-(65^\circ, \lambda)$  и  $\cos\Delta_-(65^\circ, \lambda)$  (кривые 2) и спектры пластины КДБ12 до очистки от естественного слоя (кривые 3). Спектральные зависимости  $\tan\psi_{02}(65^\circ, \lambda)$  и  $\cos\Delta_{02}(65^\circ, \lambda)$  для границы раздела воздух—чистый кристаллический кремний cSi, рассчитанные с использованием (15), проходят между кривыми 2 и 3. Такое поведение спектров можно объяснить тем, что по оптическим и геометрическим параметрам переходный слой между слоем диоксида кремния и кремниевой подложкой отличается от естественного слоя на пластине КДБ12. Другими словами, при термическом отжиге пластин между слоем  $\text{SiO}_2$  и очищенной кремниевой подложкой образуется новый переходный слой.

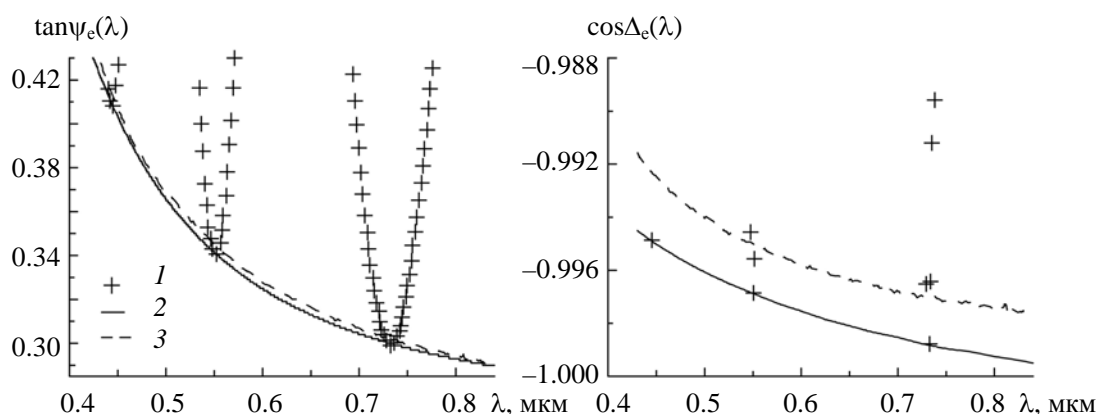


Рис. 4. Участки спектральных зависимостей  $\tan\psi_e(\lambda)$  и  $\cos\Delta_e(\lambda)$  структуры  $\text{SiO}_2\text{-cSi}$

В измеренных спектрах структуры  $\text{SiO}_2\text{-cSi}$  наблюдаются по три минимума и максимума. По огибающим  $R_{+s}(\lambda)$  и  $R_{-s}(\lambda)$  спектральной зависимости  $R_{se}(65^\circ, \lambda)$  из выражения (11) определена отражательная способность на границе воздух—слой. Затем по выражению (12) в области этих экстремумов найдены значения показателя преломления слоя. С использованием длин волн всех экстремумов в измеренных спектрах рассчитана средняя толщина слоя  $\text{SiO}_2$   $\langle d \rangle = 0.950 \pm 0.005$  мкм.

На рис. 3 также представлены спектральные зависимости оптических характеристик подложки КДБ12 (кривые 3), которые определены по выражению (10) с использованием кривых  $\tan\psi_-(65^\circ, \lambda)$  и  $\cos\Delta_-(65^\circ, \lambda)$  на рис. 4. Допустим, что дисперсия оптических характеристик чистой кремниевой подложки (кривые 1) задается выражениями (15) и (16). Тогда несовпадение кривых 1 и 3 на рис. 3 можно объяснить различием структуры переходной и объемной областей подложки. Ее оптические параметры  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  (кривые 3), рассчитанные в приближении модели идеальной границы раздела слой—подложка, являются эффективными. Это подтверждает сделанный выше вывод о наличии переходного слоя между слоем диоксида кремния и подложкой КДБ 12.

**Заключение.** Численное моделирование и экспериментальное исследование структуры диэлектрический слой  $\text{SiO}_2$ —полупроводниковая подложка КДБ12 показывают, что определение толщины слоя и оптических спектров слоя и подложки можно выполнить аналитически, если исследуемая структура не имеет поверхностных и переходных слоев. Для этого достаточно использовать огибаю-

щие максимумов и минимумов спектра  $R_s(\varphi, \lambda)$  и огибающие минимумов спектральных зависимостей  $\tan\psi(\varphi, \lambda)$  и  $\cos\Delta(\varphi, \lambda)$  структуры. При погрешностях определения отражательной способности  $\delta R(\lambda)/R(\lambda) = 0.1\%$ , поляризационных углов  $\delta\psi(\varphi, \lambda) = \pm 0.01^\circ$  и  $\delta\Delta(\varphi, \lambda) = \pm 0.01^\circ$ , а также угла падения  $\delta\varphi_{01} = \pm 0.1^\circ$ , которые свойственны современным спектральным эллипсометрам, относительные погрешности определения показателей преломления слоя и подложки и показателя поглощения подложки не превышают 0.5 и 15 %. Для структур с переходными слоями, таких как слой диоксида кремния на кремниевой подложке КДБ 12, оптические характеристики  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$ , рассчитанные аналитически с использованием огибающих минимумов спектральных зависимостей  $\tan\psi_e(\lambda)$  и  $\cos\Delta_e(\lambda)$  в приближении идеальных границ раздела, оказываются эффективными. Аналитические решения обратной задачи спектральной эллипсометрии предлагаем использовать в качестве первых приближений при численном определении параметров более сложных электродинамических моделей, которые учитывают переходные слои в реальных структурах.

Авторы выражают благодарность заведующему лабораторией нелинейной оптики поверхности ИПЛИТ Российской АН (г. Троицк) канд. физ.-мат. наук В. И. Соколову за помощь при измерениях и обработке спектров на эллипсометре Horiba UVISEL.

- [1] Р. Аззам, Н. Башара. Эллипсометрия и поляризованный свет, Москва, Мир (1981)
- [2] М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики, пер. с англ., Москва, Наука (1970)
- [3] В. В. Филиппов. Опт. и спектр., **78**, № 5 (1995) 798—801
- [4] В. В. Филиппов, В. П. Кутавичюс. Журн. прикл. спектр., **70**, № 1 (2003) 116—123 [V. V. Filippov, V. P. Kutavichus. JAS, **70** (2003) 122—129]
- [5] В. В. Филиппов. Опт. и спектр., **101**, № 3 (2006) 489—495
- [6] Б. М. Комраков, Б. А. Шапочкин. Измерение параметров оптических покрытий, Москва, Машиностроение (1986)
- [7] Д. И. Биленко, В. П. Полянская, М. А. Гецьман, Д. А. Горин, А. А. Невешкин, А. М. Ященко. ЖТФ, **75**, № 6 (2005) 69—76
- [8] В. И. Пшеницын, М. И. Абаев, Н. Ю. Лызлов. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях, Ленинград, Химия (1986)
- [9] E. D. Palik. Handbook of Optical Constants of Solids, Academic Press (1988)
- [10] <http://www.horiba.com/scientific/products/ellipsometers/spectroscopic-ellipsometers/uvisel/uvisel-spectroscopic-ellipsometer-covering-a-range-from-fuv-to-nir-640/>
- [11] В. И. Ковалев, А. И. Руковишников. ПТЭ, № 2 (2003) 1—2
- [12] В. И. Ковалев, П. И. Кузнецов, В. А. Житов, Л. Ю. Захаров, А. В. Руковишников, А. В. Хомич, Г. Г. Якушева, С. В. Гапоненко. Журн. прикл. спектр., **69**, № 2 (2002) 258—263 [V. I. Kovalev, P. I. Kuznetsov, V. A. Zhitov, L. Yu. Zakharov, A. I. Rukovishnikov, A. V. Khomich, G. G. Yakushcheva, S. V. Gaponenko. JAS, **69** (2002) 298—304]