

УДК 621.383.4

## О ВЫБОРЕ ДИАПАЗОНОВ ИЗМЕРЕНИЯ ОТРАЖАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ ПРИЗМЫ СВЯЗИ ПРИ ВОЛНОВОДНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК

© 2016 г. А. Б. Сотский<sup>1</sup>, Л. М. Штейнгант<sup>2</sup>, С. О. Парашков<sup>1</sup>, Л. И. Сотская<sup>3</sup>

E-mail: ab\_sotsky@mail.ru

Предложен критерий оптимального выбора диапазонов измерений отражательной способности призмы связи, основанный на минимизации погрешностей восстановления параметров тонких пленок методом наименьших квадратов. Эффективность критерия продемонстрирована на примере решения обратной оптической задачи для пленки SiO<sub>x</sub>, нанесенной на кремниевую подложку.

DOI: 10.7868/S036767651604030X

Одним из эффективных методов оптического контроля параметров тонких пленок является волноводная спектроскопия [1]. В данном методе сочетаются туннельное возбуждение мод пленок посредством призмы связи (ПС) и регистрация мощности отраженного лазерного пучка. При указанном способе возбуждения пленок зондирующее оптическое излучение проникает в них в виде волноводных мод и взаимодействует с ними на наибольшем, по сравнению с альтернативными измерительными схемами, расстоянии. Этим определяется максимальная чувствительность метода волноводной спектроскопии к параметрам пленок.

В последнее время получил развитие подход, в котором осуществляется непосредственное (без обращения к дисперсионным уравнениям для возбуждаемых мод) восстановление параметров пленок за счет обработки угловой зависимости отражательной способности ПС методом наименьших квадратов (МНК) [2–7]. При таком подходе возникает проблема оптимального выбора углового диапазона названной зависимости, которая и рассматривается в настоящей работе.

В дальнейшем вместо угла падения светового пучка на входную грань призмы связи  $\gamma$  мы будем использовать более удобную для выкладок переменную  $\beta = k_z k_0^{-1}$ , где  $k_z$  – проекция волнового вектора оси пучка в призме на основание призмы,  $k_0 = 2\pi\lambda^{-1}$  – волновое число вакуума. Эта переменная связана с  $\gamma$  соотношением

$$\beta = \sin \theta \sqrt{n_p^2 - n_a^2 \sin^2 \gamma} - n_a \cos \theta \sin \gamma,$$

где  $\theta$  – угол при основании ПС,  $n_p$  и  $n_a$  – показатели преломления ПС и воздуха.

В МНК используется целевая функция невязки теории и измерений

$$I(p_1, p_2, \dots, p_n) = \sum_{j=1}^m [\varphi(\beta_j) - f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n)]^2. \quad (1)$$

Здесь  $\varphi(\beta)$  – экспериментальная отражательная способность основания ПС, которая находится делением отражательной способности ПС, контактирующей с исследуемой слоистой структурой на отражательную способность ПС, окруженной со всех сторон воздухом,  $m$  – число экспериментальных точек, которым соответствуют значения  $\beta = \beta_j$ , равномерно покрывающие диапазон  $(\beta_{min}, \beta_{max})$ ,  $f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n)$  – теоретическая модель отражательной способности основания ПС, зависящая от параметров исследуемой структуры  $p_i$  ( $i = \overline{1, n}$ ). В частности, при рассмотрении однородной пленки на подложке  $n = 4$ ,  $p_1 = d_f$ ,  $p_2 = g$ ,  $p_3 = n_f$ ,  $p_4 = k_f$ , где  $d_f$  – толщина пленки,  $g$  – толщина воздушного буферного слоя между ПС и пленкой,  $n_f$  и  $k_f$  – показатели преломления и поглощения пленки.

Оптимальные значения  $p_i$  ( $i = \overline{1, n}$ ) находятся численно из условия минимума суммы (1). Они удовлетворяют системе  $n$  нелинейных уравнений

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial f}{\partial p_i} [\varphi(\beta_j) - f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n)] = 0 \quad (i = \overline{1, n}). \quad (2)$$

Обозначим через  $\varphi^{(0)}(\beta_j)$  точные значения  $\varphi(\beta_j)$ , полученные в гипотетическом идеальном эксперименте. Для них из (2) найдем  $p_i = p_i^{(0)}$ . Однако в этом случае минимум функции  $I(p_1, p_2, \dots, p_n)$  не означает, что  $\varphi^{(0)}(\beta_j) - f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n) = 0$ , так

<sup>1</sup> Могилевский государственный университет им. А.А. Кулешова, Могилев, Беларусь.

<sup>2</sup> Metricon Corporation, Pennington, New Jersey, USA.

<sup>3</sup> Белорусско-Российский университет, Могилев, Беларусь.



как пленочная модель не может быть полностью адекватна эксперименту (например, она не учитывает переходные слои, неоднородность сред, и т.п.).

В реальном эксперименте величины  $\varphi(\beta_j)$  задаются с погрешностями  $\delta\varphi_j = \varphi(\beta_j) - \varphi^{(0)}(\beta_j)$ . Из (2) следует, что этим погрешностям соответствуют погрешности параметров  $\delta p_i = p_i - p_i^{(0)}$ , которые в линейном относительно погрешностей приближении можно рассчитать по формуле

$$\delta p_k = -\sum_{j=1}^m \delta\varphi_j \sum_{i=1}^n M_{ki}^{-1} \frac{\partial f}{\partial p_i}, \quad (3)$$

где  $M^{-1}$  – матрица, обратная матрице  $M$  с элементами

$$M_{ik} = \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial p_i \partial p_k} \times \right. \\ \left. \times [\varphi(\beta_j) - f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n)] - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial p_k} \right\}. \quad (4)$$

Правые части в (3) и (4) вычисляются при значениях  $p_1, p_2, \dots, p_n$ , полученных в результате минимизации функции  $I(p_1, p_2, \dots, p_n)$ . При использовании рекуррентных соотношений для расчета функции  $f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n)$  [8] производные данной функции, фигурирующие в (2)–(4), могут быть найдены аналитически. Соответствующие формулы, однако, довольно громоздки и здесь из соображений экономии места не приводятся.

Условимся считать, что оптимальными являются значения параметров модели, равные указанным выше  $p_i^{(0)}$ . Если погрешности  $\delta\varphi_j$  известны, то, используя (3), мы без труда рассчитаем  $p_i^{(0)} = p_i - \delta p_i$ . Но в реальном эксперименте  $\delta\varphi_j$  неизвестны. В такой ситуации естественно принять, что  $p_i^{(0)} \approx p_i$ , минимизировав условиями эксперимента  $|\delta p_i|$ . Эта идея является основой для дальнейшего рассмотрения.

Принципиально возможны два способа анализа  $|\delta p_i|$ . В первом из них  $\delta\varphi_j$ , относящиеся к разным  $j$ , считаются независимыми случайными числами с одинаковой статистикой и нулевыми средними значениями. В этом случае погрешность  $\delta p_i$  также будет иметь нулевое среднее значение и среднеквадратичное отклонение, равное

$$\sigma(p_i) = \sigma(\varphi_j) S_i, \quad (5)$$

где  $\sigma(\varphi_j)$  – среднеквадратичное отклонение  $\varphi_j$ ,

$$S_i = \sqrt{\sum_{j=1}^m \left( \sum_{i=1}^n M_{ki}^{-1} \frac{\partial f_j}{\partial p_i} \right)^2}.$$

При таком подходе в качестве оценки  $|\delta p_i|$  можно выбрать  $\sigma(p_i)$ .

Однако в реальных экспериментах, где имеют место коррелированные при разных номерах  $j$  ошибки округления, связанные с аналого-цифровым преобразованием, а также некоторые систематические погрешности, вызванные нестабильностью точки ввода светового пучка в пленку при вращении призмы, дифракцией излучения возбужденной моды на выходном ребре ПС и другими причинами, формула (5) будет давать заниженную оценку погрешности. Здесь более адекватным физической ситуации представляется второй подход, который основан на оценке  $|\delta p_i|$  сверху.

В соответствии с (3) одна из таких оценок имеет вид

$$|\delta p_i| \leq \max |\delta\varphi_j| E_i, \quad (6)$$

где

$$E_i = \sum_{j=1}^m \left| \sum_{i=1}^n M_{ik}^{-1} \frac{\partial f_j}{\partial p_k} \right|. \quad (7)$$

Если в (3) воспользоваться неравенством Гельдера [9], то можно также записать

$$|\delta p_i| \leq \max |\delta\varphi_j| \sqrt{m} S_i. \quad (8)$$

Однако, поскольку

$$\sum_{j=1}^m \left| \sum_{i=1}^n M_{ki}^{-1} \frac{\partial f_j}{\partial p_i} \right| \leq \sqrt{m \sum_{j=1}^m \left( \sum_{i=1}^n M_{ki}^{-1} \frac{\partial f_j}{\partial p_i} \right)^2},$$

оценке (6) следует отдать предпочтение по сравнению с (8).

Из (5) следует, что независимо от значения  $\max |\delta\varphi_j|$  минимизация  $|\delta p_i|$  будет достигнута при таком выборе условий эксперимента, который обеспечит минимум величины  $E_i$ , которую в дальнейшем мы будем называть коэффициентом ошибки  $i$ -го параметра. Покажем, что этого минимума можно достичь за счет оптимального задания ширины экспериментального диапазона  $\Delta\beta = \beta_{\max} - \beta_{\min}$ .

На рис. 1 представлены экспериментальные данные для функций  $\varphi(\beta)$ , полученные нами в результате исследования пленки  $\text{SiO}_x$  толщиной около 3000 нм, нанесенной методом ВЧ-распыления на подложку из кристаллического кремния. Измерения были выполнены на автоматизированной измерительной установке “Model 2010/M Prism Coupler”<sup>1</sup>. Использовались световые пучки ТЕ- и ТМ-поляризации  $\lambda = 632.8$  нм, излучаемые гелий-неоновым лазером. Диаметр пучков составлял 1.5 мм, что позволяло рассчитывать функции  $f(\beta_j, p_1, p_2, p_3, p_4)$  в плосковолновом приближении. Показатели преломления призмы связи  $n_p = 1.96421$  и подложки  $n_s = 3.882 - i \cdot 0.019$

<sup>1</sup> <http://www.metricon.com>



были определены предварительно. Угол при основании ПС и шаг сканирования угла  $\gamma$  были равны  $\theta = 49.993^\circ$  и  $\Delta\gamma = 0.015^\circ$ , соответственно.

Минимумы функций  $\varphi(\beta)$  на рис. 1 соответствуют резонансному возбуждению вытекающих мод пленки [1]. Как известно, наиболее чувствительной к параметрам пленки является ее основная мода, имеющая максимальную постоянную распространения [1], которая приближенно равна  $\beta_0$ , где  $\beta_0$  – координата крайнего правого минимума зависимостей  $\varphi(\beta)$ , представленных на рис. 1 ( $\beta_0 = 1.45440$  и  $\beta_0 = 1.45528$  для ТЕ- и ТМ-волн соответственно). В такой ситуации естественно принять  $\beta_{min} = \beta_0 - 0.5\Delta\beta$ ,  $\beta_{max} = \beta_0 + 0.5\Delta\beta$ , что и сделано в дальнейших расчетах.

Рисунок 2 иллюстрирует зависимость решения обратной оптической задачи по восстановлению параметров пленки  $\text{SiO}_x$  от ширины экспериментального диапазона  $\Delta\beta$ . Представленные данные получены в результате минимизации функции (1) градиентным методом [9] и расчета коэффициентов ошибок (7) с использованием рекуррентных соотношений [8].

Из рис. 2 следует, что выбор значения  $\Delta\beta$  существенно сказывается на решении обратной оптической задачи. В такой ситуации в качестве критерия оптимального выбора  $\Delta\beta$  естественно принять условие достижения минимума коэффициента ошибки восстанавливаемого параметра.

Сопоставление кривых 2 и 4 на рис. 2 в окрестности их минимумов позволяет заключить, что при использовании волн ТЕ-поляризации следует ожидать более низких погрешностей при восстановлении  $d_f$ ,  $n_f$  и  $k_f$ , чем при использовании волн ТМ-поляризации. Этот результат подтверждается видом кривых 1 и 3 на рис. 2 (кривые 1 гораздо более стабильны в указанных окрестностях, нежели кривые 3).

Минимумы функций  $E_1(\Delta\beta)$  имеют место при  $\Delta\beta = \Delta\beta_d = 0.107$  и  $\Delta\beta = \Delta\beta_d = 0.07$  для ТЕ- и ТМ-волн соответственно. Указанные диапазоны отмечены на рис. 1а, 1б штриховыми линиями. Между этими линиями заключены минимумы функций  $\varphi(\beta)$ , соответствующие возбуждению трех мод низшего порядка. Таким образом, можно утверждать, что обработка функций  $\varphi(\beta)$  в окрестности этих минимумов достаточно для надежного восстановления толщины пленки. Расширение диапазона  $\Delta\beta$  за указанные оптимальные значения практически не дает новой информации о толщине пленки, но добавляет экспериментальные погрешности и поэтому нецелесообразно. Противоположный выбор  $\Delta\beta < \Delta\beta_d$  снижает устойчивость решения обратной задачи к погрешностям измерения функций  $\varphi(\beta)$ . В результате при достаточно

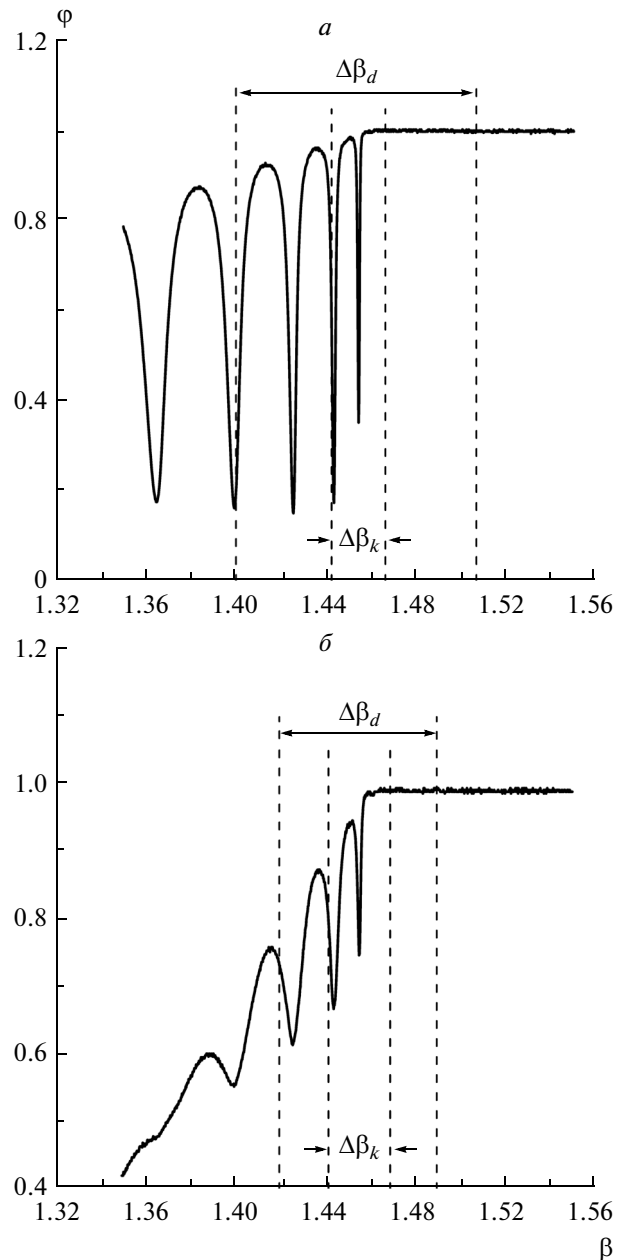
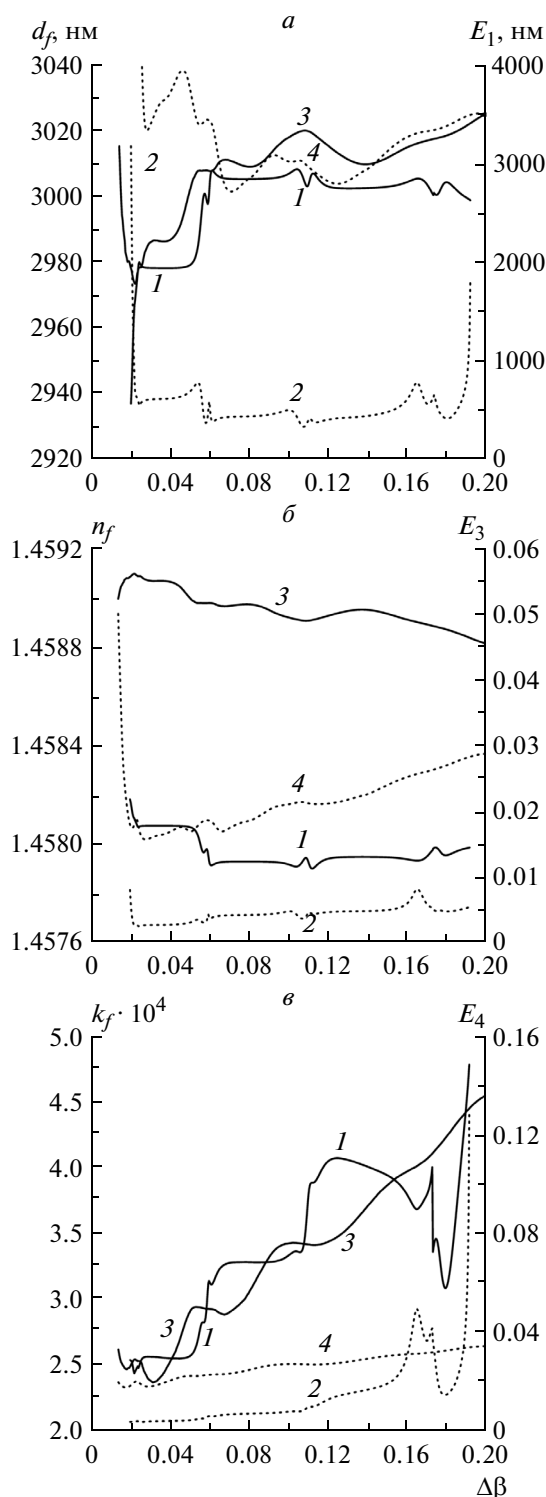


Рис. 1. Отражательные способности основания призмь связи для волн ТЕ- (а) и ТМ-поляризации (б).

малых значениях  $\Delta\beta$  наблюдается резкий рост коэффициентов ошибок  $E_1$ , а решение обратной задачи выходит из физически приемлемого диапазона. Такая ситуация возникает в случае, когда диапазон  $\Delta\beta$  содержит менее двух резонансных минимумов функции  $\varphi(\beta)$ , т.е. при  $\Delta\beta < 0.018$  в при использовании ТЕ-волн и при  $\Delta\beta < 0.013$  в при использовании ТМ-волн (см. рис. 1, 2а).

Минимумы обеих функций ошибок  $E_3(\Delta\beta)$  и  $E_4(\Delta\beta)$ , соответствующих ТЕ-волнам, достигаются при практически одинаковых значениях





**Рис. 2.** Результаты решения обратной оптической задачи (сплошные кривые) и расчета коэффициентов ошибок (пунктирные кривые) при восстановлении толщины (а), показателя преломления (б) и показателя поглощения (в) пленки  $\text{SiO}_x$ . Кривые 1 – зависимости  $d_f(\Delta\beta)$ ,  $n_f(\Delta\beta)$ ,  $k_f(\Delta\beta)$ , 2 –  $E_1(\Delta\beta)$ ,  $E_3(\Delta\beta)$ ,  $E_4(\Delta\beta)$ , относящиеся к волнам ТЕ-поляризации; 3 –  $d_f(\Delta\beta)$ ,  $n_f(\Delta\beta)$ ,  $k_f(\Delta\beta)$ , 4 –  $E_1(\Delta\beta)$ ,  $E_3(\Delta\beta)$ ,  $E_4(\Delta\beta)$ , относящиеся к волнам ТМ-поляризации.

$\Delta\beta = \Delta\beta_k = 0.024$  (рис. 2б, 2в). При использовании ТМ-волн аналогичные значения  $\Delta\beta$  равны  $\Delta\beta_k = 0.02$  (рис. 2б, 2в). Указанные диапазоны  $\Delta\beta_k$  также отмечены на рис. 1а, 1б штриховыми линиями. В них имеются два резонансных минимума функций  $\varphi(\beta)$ , которые соответствуют возбуждению основной и первой высшей мод пленки.

Присутствие минимума для основной моды вполне объяснимо, так как основная информация о показателях преломления и поглощения пленки содержится в характеристиках основной моды, излучение которой взаимодействует с материалом пленки на максимальной по сравнению с другими модами протяженности. Наличие в диапазонах  $\Delta\beta_k$  минимума для первой высшей моды связано с корреляцией ошибок восстановления всех параметров пленки (матрица  $M$  не имеет нулевых элементов) и с тем, что для получения достоверной информации о толщине пленки требуется возбуждение как минимум двух ее мод (см. выше). Существование найденных оптимальных диапазонов  $\Delta\beta_k$  означает также, что обеспечение неравенства  $\Delta\beta > \Delta\beta_k$  практически не дает новой информации о показателях преломления и поглощения пленки, но повышает роль экспериментальных погрешностей.

Результаты решения обратной оптической задачи, полученные при использовании полного диапазона  $\Delta\beta = 0.2$  (рис. 1) и указанных выше оптимальных значениях  $\Delta\beta$  представлены в таблице.

Согласно таблице, выбор диапазона  $\Delta\beta$  наиболее существен при восстановлении коэффициента поглощения пленки. При оптимальных  $\Delta\beta = \Delta\beta_k$  результаты восстановления  $k_f$  с использованием волн ТЕ- и ТМ-поляризации практически совпадают. Однако аналогичные результаты для  $n_f$  различаются в третьем знаке после запятой. Это указывает на некоторую анизотропию показателя преломления пленки. Данная анизотропия при расчете функции  $f(\beta_j, p_1, p_2, \dots, p_n)$  не учитывалась. По-видимому, этим обстоятельством объясняется слабо выраженная зависимость восстановленных значений  $d_f$  от поляризации света (см. таблицу).

Итак, предложен критерий оптимального выбора диапазонов измерений отражательной способности призмы связи  $\Delta\beta$ , основанный на минимизации погрешностей восстановления параметров тонких пленок при использовании метода наименьших квадратов. Критерий применен к решению обратной задачи волноводной спектроскопии для пленки  $\text{SiO}_x$ , нанесенной на кремниевую подложку. При этом установлено, что оптимальные диапазоны  $\Delta\beta$  при восстановлении толщины и показателя преломления пленки существенно различаются, а при восстановлении показателей

Восстановление параметров пленки  $\text{SiO}_x$ 

Поляризация	$\Delta\beta$	$d_f$ , нм	$n_f$	$k_f \cdot 10^4$
TE	0.200	2999.3	1.45799	4.77
	0.107	3005.5	1.45794	3.38
	0.024	2979.4	1.45808	2.51
TM	0.200	3025.9	1.45882	4.54
	0.070	3011.2	1.45897	2.90
	0.020	2981.8	1.45908	2.46

преломления и поглощения пленки эти диапазоны практически совпадают. Показано, что данные диапазоны существенно зависят от поляризации излучения и что для восстановления параметров пленки предпочтительно использовать волны ТЕ-поляризации.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Khomchenko A.V.* Waveguide spectroscopy of thin films. New York: Acad. Press, 2005. 220 p.
2. *Jacek M., Kubica* // J. Lightwave Technol. 2002. V. 20. № 1. P. 114.
3. *Schneider T., Leduc D., Cardin J., Lupi C., Gundel H.* // Ferroelectrics. 2007. V. 352. № 1. P. 50.
4. *Schneider T., Leduc D., Lupi C. et al.* // J. Appl. Phys.. 2008. V. 103. № 6. P. 063110.
5. *Cardin J., Leduc D.* // Appl. Opt. 2008. V. 47. № 7. P. 894.
6. *Сотский А.Б., Steingart L.M., Jackson J.H. и др.* // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 11. С. 105.
7. *Соколов В.И., Марусин Н.В., Панченко В.Я., Савельев А.Г. и др.* // Квант. электрон. 2013. Т. 43. № 12. С. 1149.
8. *Сотский А.Б.* Теория оптических волноводных элементов. Могилев: МГУ им. А.А. Кулешова, 2011. 450 с.
9. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. М.: Наука, 1977. 831 с.

