

УДК 535.39

С. Н. Свиташева

(Новосибирск)

ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ  
ДЛЯ СИЛЬНО ПОГЛОЩАЮЩИХ ПЛЕНОК

Показана степень неоднозначности решения обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ) при восстановлении параметров поглощающей пленки в системе пленка — подложка из одной пары углов  $\Psi$  и  $\Delta$ . Впервые найден вид пространственной кривой (в пространстве искоемых параметров пленки  $(n_1 - k_1 - d_1)$ ), все точки которой являются точными решениями основного уравнения эллипсометрии для поглощающей пленки, а также получено аналитическое выражение для устранения неоднозначности как для поглощающих, так и для прозрачных пленок. Разработана компьютерная программа с использованием нового типа функционала. Приведен пример, иллюстрирующий предложенный алгоритм решения ОЗЭ для пленок HgTe, синтезированных молекулярно-лучевой эпитаксией на CdTe.

**Введение.** Развитие молекулярно-лучевой эпитаксии как новой технологии для создания полупроводниковых приборов требует развития методик, в том числе и эллипсометрических, однозначного определения как состава и структурных свойств, так и толщины эпитаксиальных пленок. Как правило, эти пленки оптически непрозрачны в видимом диапазоне и, следовательно, описываются тремя параметрами: толщиной  $d_1$ , показателем преломления  $n_1$  и коэффициентом поглощения  $k_1$ .

1. **Метод.** Цель данной работы — найти точное решение обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ) в трехмерном пространстве  $(n_1 - k_1 - d_1)$  для однослойной системы пленка — подложка.

Прямая задача эллипсометрии однозначна: любая система с известными оптическими параметрами может быть описана парой поляризационных углов  $\Psi$  и  $\Delta$ , т. е. всегда может быть найдена соответствующая ей точка на плоскости  $\Psi - \Delta$ . Для описания простейшей однослойной системы необходимо девять параметров. Таким образом, прямая задача устанавливает соответствие между точкой в  $n$ -мерном пространстве параметров системы и точкой на плоскости  $\Psi - \Delta$  либо  $Re\rho - Im\rho$ . Суть обратной задачи: *по известной точке на плоскости  $\Psi - \Delta$  восстановить точку в  $n$ -мерном пространстве искоемых параметров исследуемой системы.*

Из одного эллипсометрического измерения (по одной паре значений  $\Psi$  и  $\Delta$ ) получим два уравнения, из которых можно аналитически определить не более двух параметров. Для восстановления большего числа параметров необходимо иметь большее число уравнений, для этого обычно варьируют один из параметров  $n$ -мерного пространства параметров системы. Самый простой способ — варьирование угла падения света  $\varphi_0$ .

Из-за невозможности аналитического решения системы уравнений относительно трех параметров пленки, в нашем случае  $(n_1, k_1, d_1)$ , обратная задача решается численными методами путем перебора точек из трехмерного пространства  $(n - k - d)$  для решения прямой задачи и сравнения результатов вычислений  $(\Psi_c, \Delta_c)$  с экспериментальными значениями  $(\Psi_e, \Delta_e)$ . Перебор точек из трехмерного пространства идет до тех пор, пока разница между вычис-

ленными и экспериментальными значениями не уменьшится до некоторой заданной величины.

Существует теория выбора вида (формы) функционала, минимум которого соответствует найденному решению, и методы поиска этого минимума с оптимизацией числа переборов точек [1—3].

**2. Развитие метода. 2.1. Неоднозначность решения ОЗЭ для одного угла падения.**

2.1.1. Поглощающие пленки. Рассмотрим подробно решение обратной задачи для однослойной системы, исходя из измерений для одного угла падения света  $\varphi_0$ .

Пусть в исследуемой системе неизвестны только параметры пленки, тогда основное уравнение эллипсометрии, представленное в виде [4—6]

$$\operatorname{tg}\Psi e^{i\Delta} \equiv \rho = (A + BX + CX^2)/(D + EX + FX^2), \quad (1)$$

содержит коэффициенты  $A, B, C, D, E, F$ , зависящие только от оптических констант пленки, и параметр  $X$ , зависящий от трех неизвестных величин:  $N_1 = n_1 - ik_1, d_1$ ,

$$X = \exp[-i4\pi d_1 N_\varphi / \lambda], \quad (2)$$

где  $N_\varphi$  — комплексный показатель преломления пленки с учетом наклонного угла падения света, равный

$$N_\varphi = n_\varphi - ik_\varphi = [N_1^2 - N_0^2 \sin^2 \varphi_0]^{1/2}. \quad (3)$$

Решая уравнение (1) относительно  $X$ , получим два комплексных значения корня  $X_1, X_2$ :

$$X_{1,2} = \frac{-(B - \rho E) \pm [(B - \rho E)^2 - 4(C - \rho F)(A - \rho D)]^{1/2}}{2(C - \rho F)} \equiv |X_{1,2}| e^{-i\theta_{1,2}}. \quad (4)$$

Затем, используя значения найденных корней, из уравнения (2) находим толщину пленки:

$$d_1 = [\theta_{1,2} + i \ln |X_{1,2}|] \lambda / 4\pi N_\varphi, \quad (5)$$

которая должна быть действительной. Приравнивая к нулю мнимую часть уравнения (5) и подставляя выражение (2), получим два уравнения: 1) для  $d_1$ , не содержащей комплексных чисел:

$$d_1 = (n_\varphi \theta_{1,2} - k_\varphi \ln |X_{1,2}|) \lambda / 4\pi |N_\varphi|^2, \quad (5a)$$

2) правило отбора корней  $X_{1,2}$ , опубликованное ранее [7]:

$$-\frac{\ln |X_{1,2}|}{k_\varphi} = \frac{\theta_{1,2}}{n_\varphi}. \quad (6)$$

Уравнение (6) при фиксированном  $N_1$  является уравнением логарифмической спирали на плоскости  $\operatorname{Re}X - \operatorname{Im}X$ . Каждая из частей этого уравнения тождественно равна  $4\pi d_1 / \lambda$ , поэтому оно является решением основного уравнения эллипсометрии (1) для любого произвольного значения толщины  $d_1$ , кроме  $d_1 = 0$ . Таким образом, любая пара значений  $(n_1, k_1)_i$  — решение уравнения (1), если для него выполняется соотношение (6), причем

$$\begin{cases} 0 < |X_{1,2}| < 1, & \text{если } k_1 > 0, \\ |X_{1,2}| > 1, & \text{если } k_1 < 0, \\ |X_{1,2}| = 1, & \text{если } k_1 = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Следует помнить, что решается не одно уравнение (1), а с каждой парой  $(n_1, k_1)$ : новое уравнение с новыми коэффициентами  $(A, B, C, D, E, F)$ ; и каждая точка решения принадлежит своей собственной логарифмической спирали на плоскости  $\text{Re}X - \text{Im}X$ .

Полная совокупность решений уравнения (1) образует на той же комплексной плоскости согласно (6а) логарифмическую левую спираль с непостоянным коэффициентом роста  $q$ :

$$|X_{1,2}| = q^{\theta_{1,2}/2\pi}, \quad q = \exp(-2\pi k_\varphi/n_\varphi). \quad (6a)$$

Как будет показано ниже, коэффициент роста  $q$  зависит от толщины пленки  $d_1$ . На рис. 1 приведен расчет полного решения  $X$  для поглощающей пленки HgTe на подложке CdTe:  $\varphi_0 = 75^\circ$ ,  $\Psi = 12,53^\circ$ ,  $\Delta = 103,01^\circ$ ,  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$  — и показана зависимость  $k_\varphi/n_\varphi$  от толщины  $d_1$ .

Величины, входящие в (6), не зависят от  $d_1$ , поэтому ее можно представить на плоскости  $n_1 - k_1$ , получив при этом одну из проекций общего решения в виде искаженной (из-за нелинейности перехода  $X \rightarrow N_1$ ) логарифмической спирали. Итак, на плоскости  $n_1 - k_1$  для любого произвольного  $(d_1)_i > 0$  всегда существует такая точка  $(n_1, k_1)_i$ , для которой выполняются равенства (1) — (6), однако обратное утверждение несправедливо. Более того, на плоскости  $n_1 - k_1$  существуют области, где не выполняются условия (6), а следовательно, нет решений уравнения (1).

2.1.2. Оценка границ поиска в пространстве  $(n_1 - k_1 - d_1)$ . Полезно оценить пределы величин  $n_1, k_1$  и отношения  $k_\varphi/n_\varphi$  для решения в областях очень малых и очень больших толщин  $d_1$ .

В области  $d_1 \rightarrow 0$ , как видно из (2),  $X \rightarrow 1$  и основное уравнение эллипсометрии преобразуется в линейное уравнение Друде. Запишем уравнение Друде [4] в принятых нами обозначениях:

$$\frac{\delta \rho}{\rho} = -i \frac{4\pi}{\lambda} d_1 N_\varphi R, \quad (8)$$

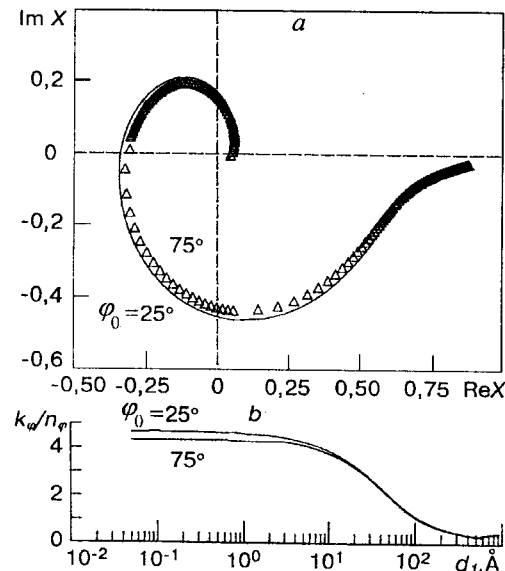


Рис. 1. Расчет полного решения  $X$  для поглощающей пленки при двух углах падения  $\varphi_0 = 25$  и  $75^\circ$  (а) и зависимость показателя степени коэффициента роста  $q$  в уравнении (6а) логарифмической спирали на плоскости  $\text{Re}X - \text{Im}X$  от толщины пленки  $d_1$  для  $\varphi_0 = 25$  и  $75^\circ$  (б)

где  $R$  — величина, определяемая коэффициентами Френеля на границах пленки. Разделив уравнение (8) на два действительных, вычислим предел, к которому стремится отношение  $k_\varphi/n_\varphi$  при малых  $d_1$ :

$$\frac{k_\varphi}{n_\varphi} = \frac{k_{\varphi 1} - T \cos(\bar{\Delta} - \Delta)}{T \sin(\bar{\Delta} - \Delta)}, \quad (9)$$

где  $T = \operatorname{tg} \bar{\Psi} / \operatorname{tg} \Psi$ ;  $\bar{\Psi}$ ,  $\bar{\Delta}$  — эллипсометрические углы, характеризующие чистую подложку. Из уравнения Друде (8) следует еще один важный вывод: чем меньше толщина  $d_1$  найденного решения, тем больше значение, принимаемое  $N_\varphi$ , при постоянной левой части (8); поскольку  $R$  — мало меняющаяся величина:

$$N_\varphi = i \frac{\delta \rho}{\rho} \frac{4\pi}{\lambda R} \frac{1}{d_1}, \quad (8a)$$

тогда

$$d_1 \rightarrow 0, \quad n_1 \gg 1, \quad k_1 \gg 1. \quad (8b)$$

Следует напомнить, что не может быть решения обратной задачи для толщины  $d_1 = 0$ , поскольку экспериментальные значения  $\Psi$  и  $\Delta$  не равны  $\bar{\Psi}$  и  $\bar{\Delta}$ , полученным при отражении от поверхности подложки в отсутствие пленки, иными словами,  $\delta \rho \neq 0$ .

В области больших толщин  $d_1$  ( $d_1 \rightarrow \infty$ ), где  $|X| \rightarrow 0$ , уравнение (1) принимает вид

$$\rho \equiv \operatorname{tg} \Psi e^{iA} \rightarrow A/D \quad (1a)$$

и  $N_\varphi$  преобразуется в соотношение

$$N_\varphi \rightarrow N_{\varphi \text{ef}} = \frac{1-\rho}{1+\rho} N_0 \sin \varphi_0 \operatorname{tg} \varphi_0. \quad (10)$$

После решения биквадратного уравнения относительно  $n_1$ ,  $k_1$  получим значения оптических констант пленки, соответствующие эффективным, вычисленным из предположения, что экспериментальные эллипсометрические углы  $\Psi$  и  $\Delta$  измерены при отражении света от пленки, как от полубесконечной среды:

$$\begin{aligned} n_1 &\rightarrow n_{1\text{ef}}, \\ k_1 &\rightarrow k_{1\text{ef}}, \quad N_{1\text{ef}} = N_0 \sin \varphi_0 \left[ 1 + \left( \frac{1-\rho}{1+\rho} \right)^2 \operatorname{tg}^2 \varphi_0 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (11)$$

Из уравнения (10) легко получить предел отношения  $k_\varphi/n_\varphi$  для больших  $d_1$ :

$$k_\varphi/n_\varphi = \operatorname{tg} 2\Psi \sin \Delta. \quad (12)$$

Таким образом, исходные данные системы определяют пределы изменения показателя степени коэффициента роста  $q$  логарифмической спирали, как было показано на рис. 1. На рис. 2 приведены еще две проекции общего решения —  $n_1(d_1)$  и  $k_1(d_1)$ , иллюстрирующие выводы, полученные из (8) — (12): оптические константы пленки уменьшаются от очень больших значений до  $n_{1\text{min}}$  и  $k_{1\text{min}}$  и затем колеблются каждая около своей оси  $n_{1\text{ef}}$  или  $k_{1\text{ef}}$  соответственно.

Таким образом, в обратной задаче эллипсометрии для системы *поглощающая пленка — подложка* для пары эллипсометрических углов  $\Psi$  и  $\Delta$  точным решением уравнения (1) является любая точка на пространственной кривой в  $(n_1 - k_1 - d_1)$ -пространстве. Эта кривая, похожая на смерч, который возника-

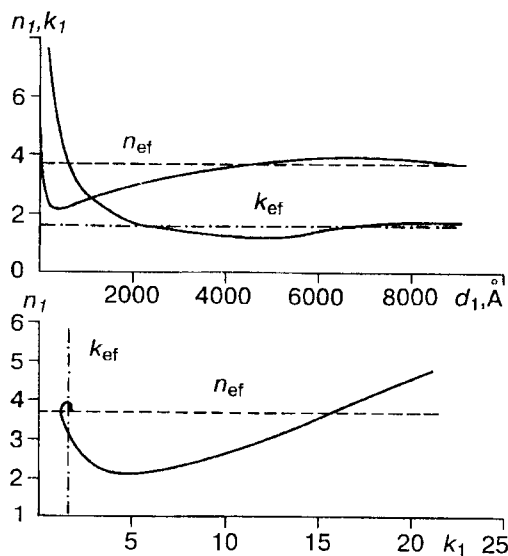


Рис. 2. Взаимная зависимость параметров полного решения уравнения (1) поглощающей пленки для  $\varphi_0 = 25^\circ$

ет вблизи плоскости  $n_1 - k_1$  при очень больших значениях  $n_1$  и  $k_1$  ( $n_1 \gg 1$ ,  $k_1 \gg 1$ ), закручивается вокруг оси, перпендикулярной плоскости  $n_1 - k_1$  в точке  $(n_{1ef}, k_{1ef})$ , и устремляется к бесконечно большому  $d_1$ , асимптотически приближаясь к этой оси, как показано на рис. 3.

2.2. Устранение неоднозначности решения ОЗЭ. 2.2.1. Поглощающие пленки. Неоднозначность восстановления трех параметров пленки по паре измеренных эллипсометрических углов очень велика, и чтобы избавиться от нее, необходимо использовать дополнительные измерения, например многоугловые. Измерения при двух углах падения  $\varphi_{01}$  и  $\varphi_{02}$  дадут две пары  $\Psi_1, \Delta_1$  и  $\Psi_2, \Delta_2$ , по каждой из которых можно построить две пространственные кривые  $d_1(n_1, k_1)$  и  $d_2(n_1, k_1)$ , а в точке пересечения этих кривых получить искомое решение. В этом случае правило отбора корней (6) уравнения (1) усложнится:

$$-\frac{\ln |X_{\varphi 1}|}{k_{\varphi 1}} = \frac{\theta_{\varphi 1}}{n_{\varphi 1}}, \quad -\frac{\ln |X_{\varphi 2}|}{k_{\varphi 2}} = \frac{\theta_{\varphi 2}}{n_{\varphi 2}}, \quad \frac{\ln |X_{\varphi 1}|}{\ln |X_{\varphi 2}|} = \frac{\theta_{\varphi 2}}{\theta_{\varphi 1}}. \quad (13)$$

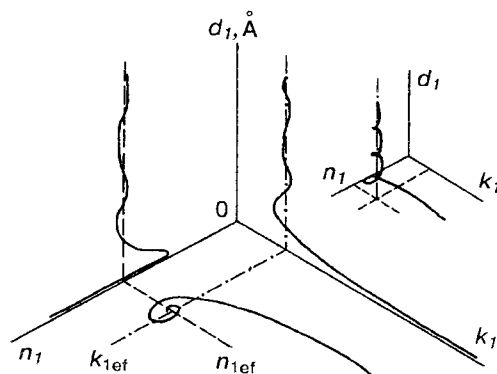


Рис. 3. Полное решение уравнения (1) в пространстве  $(n_1 - k_1 - d_1)$  для однослойной поглощающей пленки при  $\varphi_0 = 75^\circ$

Аналогичные правила могут быть получены из спектральных измерений в области отсутствия дисперсии оптических констант пленки и подложки:

$$\frac{\lambda_1 \ln |X_{\lambda_1}|}{k_{\varphi_1}} = \frac{\lambda_2 \ln |X_{\lambda_2}|}{k_{\varphi_2}}, \quad \frac{\lambda_1 \theta_{\lambda_1}}{n_{\varphi_1}} = \frac{\lambda_2 \theta_{\lambda_2}}{n_{\varphi_2}}. \quad (13a)$$

В области дисперсии пространственные кривые  $d_1(n_1, k_1)$  и  $d_2(n_1, k_1)$  не пересекаются. Соотношения (13), (13a) позволяют однозначно восстановить параметры поглощающей пленки или найти точное соответствие между двумя точками на плоскости  $\Psi - \Delta$ :  $(\Psi_1, \Delta_1)_{\varphi_1}$  и  $(\Psi_2, \Delta_2)_{\varphi_2}$  или  $(\Psi_1, \Delta_1)_{\lambda_1}$  и  $(\Psi_2, \Delta_2)_{\lambda_2}$  — и точкой в пространстве  $(n_1 - k_1 - d_1)$ . Из соотношений (13), (13a) ясно, что общим решением двух уравнений (1) не является точка пересечения кривых  $X_{\varphi_1}$  и  $X_{\varphi_2}$  или  $X_{\lambda_1}$  и  $X_{\lambda_2}$  на плоскости  $\text{Re}X - \text{Im}X$ ; эти кривые не пересекаются, а как бы вложены друг в друга (см. рис. 1).

2.2.2. Прозрачные пленки. В случае прозрачной пленки уравнение логарифмической спирали превращается в уравнение единичной окружности на плоскости  $\text{Re}X - \text{Im}X$ :

$$(\text{Re}X_{1,2})^2 + (\text{Im}X_{1,2})^2 = 1, \quad (14)$$

поскольку  $N_{\varphi} = n_{\varphi}$ ,  $|X_{1,2}| = 1$  и  $\theta_1 = \theta$ ,  $\theta_2 = \pi - \theta$ . Тогда из (5)

$$d_1 = \begin{cases} (\lambda/4n_{\varphi})\theta/\pi, \\ (\lambda/4n_{\varphi})[1 - \theta/\pi]. \end{cases} \quad (56)$$

Таким образом, вопрос неоднозначности возникает не только для поглощающих пленок. Ранее в [6] было графически показано, что, полагая  $k_1 = 0$  и варьируя  $n_1$  в широком диапазоне значений, легко получить семейство пересекающихся линий с равным показателем преломления. Следовательно, для прозрачной пленки на плоскости  $\Psi - \Delta$  (или  $\text{Re}\rho - \text{Im}\rho$ ) одной и той же точке могут соответствовать, по крайней мере, два решения с разными значениями показателей преломления и толщин соответственно. Кроме того, для каждого найденного значения показателя преломления пленки существует набор дискретных решений:

$$d_{1i} = \lambda/2n_{\varphi}(\theta_i/2\pi + m), \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

Необходимы дополнительные измерения, например, при другом угле падения света  $\varphi_0$  для того, чтобы устранить неоднозначность решения для любой толщины пленки, используя правило отбора корней (16):

$$|X_{\varphi_1}| = |X_{\varphi_2}| = 1, \quad \frac{\theta_{\varphi_1} + m2\pi}{\theta_{\varphi_2} + m2\pi} = \frac{n_{\varphi_1}}{n_{\varphi_2}}. \quad (16)$$

2.3. Оценка адекватности модели. Правила отбора корней (13), (13a) и (16) позволяют проверить адекватность модели системы, используемой для решения обратной задачи, и реальной исследуемой структуры. Этот вывод можно пояснить примером: если исследуемая структура содержит поглощающую пленку, то при решении обратной задачи для данной структуры по модели с прозрачной пленкой легко получить набор дискретных решений для любого угла падения, не содержащий, однако, ни одного общего решения для двух или нескольких углов падения. Значит, выбранная модель не соответствует исследуемой системе.

3. Пример. По полученным в данной работе соотношениям была разработана совместно с И. И. Воробьевой программа, с помощью которой проведены расчеты и изготовлены рисунки к этой статье.

В качестве примера на рис. 4 приведем результаты определения однородности по площади пластины пленок HgTe, синтезированных методом МЛЭ, для  $\lambda = 0,6$  мкм. Несовпадение между комплексным показателем прелом-

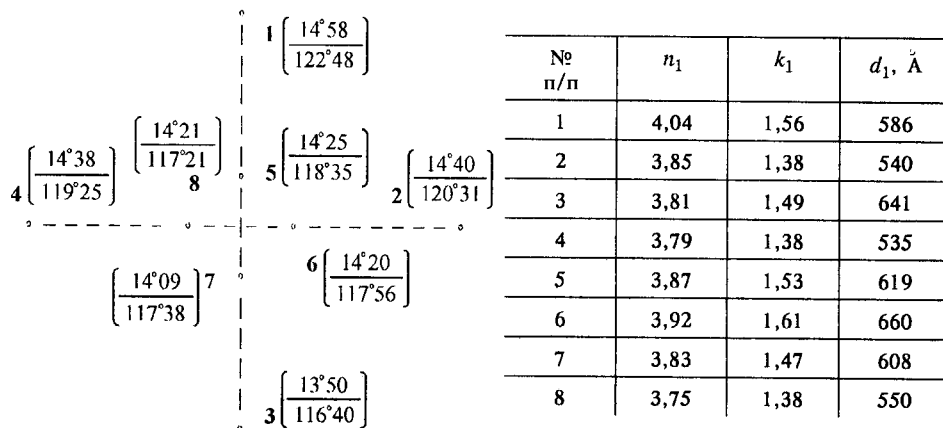


Рис. 4. Карта измеренных углов  $\Psi$  и  $\Delta$  и таблица параметров пленки HgTe для определения однородности пленки по площади

ления  $N = n - ik$  пленки и известным  $N$  объемного материала указывает на нарушение стехиометрического состава структуры пленки либо на наличие дефектов роста; кроме того, можно составить карту толщин синтезированной пленки, чтобы рассмотреть равномерность осаждения пленки по поверхности подложки. Располагая такой информацией, можно управлять процессами роста пленок, получаемых молекулярно-лучевой эпитаксией.

#### ВЫВОДЫ

На основе подробного рассмотрения точного решения обратной задачи эллипсометрии для однослойных поглощающих пленок в данной работе получены следующие результаты:

- показана многозначность решения при одном измерении как для поглощающих пленок, так и для прозрачных;
- определен вид полного решения в форме пространственной спирали;
- найдены соотношения для устранения неоднозначности;
- предложен способ проверки адекватности исследуемой системы и выбранной модели расчета.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Ч. I. // Автометрия. 1992. № 4. С. 76.
2. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Ч. II // Там же. С. 81.
3. Воскобойников Ю. Е., Лантюхова Е. В., Свиташева С. Н. Однозначность, устойчивость и независимость решений обратной задачи эллипсометрии // Автометрия. 1994. № 4. С. 91.
4. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981.
5. Azzam R. M. A., Zaghoul A.-R. M., Bashara N. M. // JOSA. 1975. 65. P. 252.
6. Azzam R. M. A., Zaghoul A.-R. M., Bashara N. M. // Ibid. P. 1464.
7. Свиташева С. Н. Точное решение обратной задачи эллипсометрии для поглощающих пленок // ДАН СССР. 1991. 318, № 5. С. 1154.

Поступила в редакцию 25 марта 1996 г.