РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

на правах рукописи

Свиташева Светлана Николаевна

ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ШЕРОХОВАТЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

специальность: 01.04.07- физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный консультант:

доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН,

профессор Чаплик Александр Владимирович

Новосибирск-2009

Список обозначений

СТМ - сканирующая туннельная микроскопия

схеме PKSA-Поляризатор Компенсатор Образец Анализатор

- ЛЭФ-3М лазерный эллипсометр фотометрический с оптической схемой PKSA поляризатор компенсатор- образец- анализатор.
- UVISEL -спектральный фазово-модуляционный эллипсометр с пьезооптической модуляцией сигнала.
- Спекловая картина-суперпозиция дифракционных картин большого числа хаотически расположенных рассеивателей.

$$\rho \equiv tg \Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p e^{i\delta_p}}{R_s e^{i\delta_s}}$$
-основное уравнение эллипсометрии, которое связывает относительный

амплитудный коэффициент отражения р с эллипсометрическими углами Ч и Д.

Френеля для света, поляризованного в плоскости падения и перпендикулярно к ней.

$$\Psi = \operatorname{arctg} \left| \frac{R_p}{R_s} \right|.$$

- Δ эллипсометрический угол, равный разности фаз комплексных коэффициентов Френеля $\Delta = \delta_p \delta_s \,.$
- φ_Б угол Брюстера это угол полной поляризации, когда от поверхности диэлектрика отражается только *S*-компонента поляризованного света.
- ϕ_P главный угол падения -это угол падения света, при котом $\Delta = \pi/2$.
- δν Рамановский сдвиг в спектроскопии комбинационного рассеяния [см⁻¹] для определения структуры молекул.

содержание

Введение
ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР
§ 1.1. ОБЗОР СПОСОБОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ 17
1.1.1. Аналитические методы17
1.1.2. Метод касательной плоскости (метод Кирхгофа)18
1.1.3. Метод возмущений19
1.1.4. Двух масштабная модель
1.1.5. Метод Вороновича20
1.1.6. Метод квантовой аналогии21
§ 1.2. ОБЗОР МЕТОДОВ КОНТРОЛЯ НЕОДНОРОДНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ22
§ 1.3. ТОЧНОСТЬ И ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА 24
1.3.1. Точность выбранного метода исследования
1.3.2. Чувствительность метода
ГЛАВА 2. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ЗЕРКАЛЬНО-ГЛАДКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ27
§ 2.1 Оптические свойства зеркально-гладких поверхностей, полученных
механической обработкой28
2.1.1 Интерпретация эллипсометрических измерений с помощью кажущихся
оптических констант
2.1.2 Интерпретация эллипсометрических измерений с помощью инвариантов
Кеттелера32
2.1.3 Интерпретация эллипсометрических измерений с помощью метода
Кирхгофа34
§ 2.2.Корреляция между оптическими свойствами МЛЭ пленок нитрида алюминия
и морфологией их поверхности

Выводы к главе 240
ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЭКВИВАЛЕНТНОЙ
ПЛЕНКОЙ41
§ 3.1. Принцип аддитивности42
§ 3.2. Оптические свойства эквивалентных пленок
Основные выводы по оптическим свойствам эквивалентных пленок к § 3.251
§ 3.3. Графо-аналитический метод определения параметров неровностей
зеркально-гладких поверхностей52
§ 3.4. Применимость метода эквивалентной ленки
3.4.1 Расчет осцилляций эллипсометрических углов Y и ∆ при
эпитаксиальном росте германия на германиевой подложке
3.4.2 Эквивалентная пленка при интерпретации спектральных измерений
на примере окисления титана62
ГЛАВА 4. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ С ВЫТРАВЛЕННЫМ РЕЛЬЕФОМ
§ 4.1. Случайная фазовая маска как модель шероховатой поверхности
4.1.1. Описание случайной фазовой маски
§ 4.2. Отражение света от поверхности с трапециидальным рельефом
§ 4.3. Расчет угловой зависимости эллипсометрических параметров Ү и ∆ при
отражении поляризованного света от элементарной трапециидальной
ячейки СФМ75
4.3.1. Расчет условий интерференции в области малых углов
падения света75
4.3.2. Расчет условий интерференции в области рассеяния света
тремя гранями76
4.3.3. Расчет условий интерференции в области рассеяния

двумя гранями81
4.3.4. Расчет условий интерференции в области больших
углов падения853
4.3.5. Расчет условий интерференции при наличии треугольной
царапины
4.3.6. Влияние параметров ячейки трапециидального рельефа на
расчетные зависимости $\Delta(\phi_0)$ и $\Psi(\phi_0)$
§ 4.4 Отражение света от ячейки случайной фазовой маски с
цилиндрическими боковыми гранями
4.4.1. Анализ условий максимального влияния рассеянного света
4.4.2. Расчетные зависимости поляризационных характеристик от угла
падения света для поверхности меди с вытравленным рельефом106
Основные выводы к § 4.4112
ГЛАВА 5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНОСТИ С ВЫТРАВЛЕННЫМ РЕЛЬЕФОМ СФМ 113
§ 5.1. Экспериментальные результаты: зависимости поляризационных
углов $\Psi(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$ от параметров рельефа116
§ 5.2 Сравнение поляризационных характеристик диэлектрика и металла с
вытравленным рельефом случайной фазовой маски 25×25 мкм120
§ 5.3 Сравнение поляризационных характеристик диэлектрика и металла с
вытравленным рельефом случайной фазовой маски 2.5×2.5 мкм126
§ 5.4. Поверхностная анизотропия рельефной поверхности130
§ 5.5 Наблюдение аномальных эффектов в наноструктурных системах131
5.5.1. Описание нановискеров; их параметры и свойства
5.5.2. Аномальное поглощение в области прозрачности кремния
5.5.3. Учет рассеяния света и фазовые соотношения

Выводы к ГЛАВЕ 5133
ГЛАВА 6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ
КАЛИБРОВАННЫХ ЧАСТИЦ135
§ 6.1. Описание исследуемой системы (Моделирование загрязнений)136
6.1.1. Выбор веществ, загрязняющих поверхность
6.1.2. Выбор подложки138
6.1.3. Методика проведения эксперимента139
§ 6.2. Фаза относительного коэффициента <i>p</i> – случайная величина,
характеризующая неоднородную поверхность140
6.2.1. Сравнение эмпирического и теоретического распределения
случайной величины Δ 141
6.2.2. Оценка необходимого числа измерений по правилу сигмы142
§ 6.3. Основные экспериментальные результаты144
6.3.1. Цель и задачи144
6.3.2. Выбор измерительной ситуации144
6.3.3. Зависимость поляризационных характеристик от концентрации
загрязнений различного типа146
6.3.4. Зависимость поляризационных характеристик от геометрии частиц148
6.3.5. Зависимость поляризационных характеристик от материала_частиц149
§ 6.4. Математические модели описания поверхности, покрытой частицами150
6.4.1. Модель эффективной подложки 150
6.4.2. Модель однородной изотропной пленки151
6.4.3. Модель эффективной среды152
§ 6.5. Выбор характеристики для оценки загрязнений
Основные выводы к ГЛАВЕ 6157
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ158

Заключение161
Приложение I к разделу 4.3.6. Влияние размера <i>а</i> , глубины рельефа <i>d</i> и наклона
боковой грани α трапециидальной ячейки на расчетные поляризационные
характеристики рельефной поверхности кварца165
Приложение II к разделу 4.4.2. Расчетные зависимости поляризационных
характеристик от угла падения света для поверхности меди с рельефом СФМ,
с учетом кривизны боковых граней169
Приложение III к разделу 5.2. Экспериментальные поляризационные характеристики
поверхности кварца с вытравленным рельефом СФМ 25×25 мкм175
Приложение IV к разделу 5.2. Экспериментальные поляризационные характеристики
поверхности алюминия с вытравленным рельефом СФМ 25×25 мкм181
Приложение V к разделу 5.3. Экспериментальные поляризационные характеристики
поверхности кварца с вытравленным рельефом СФМ 2.5×2.5 мкм185
Приложение VI к разделу 5.3. Экспериментальные поляризационные характеристики
поверхности алюминия с вытравленным рельефом СФМ 2.5×2.5 мкм189
Литература193

введение

Современные успехи в физике полупроводников невозможно представить без аналитических методов исследования структуры и морфологии, таких как электронная, рентгеновская и туннельная микроскопия; дифракция электронов или рентгеновских лучей. Для создания современных полупроводниковых приборов широко используются не только хорошо известные монокристаллы, но и синтезируются материалы с заданными свойствами, не существующие в природе. Особое место среди этих методов занимает (одноволновая, многоугловая, модуляционная и спектральная) эллипсометрия, бурное развитие которой обеспечивает изучение многообразных свойств пленок [1, 2].

Наличие микрорельефа на поверхности, как известно, изменяет электрические, механические и оптические свойства этой поверхности. Измерения неровностей является очень важной поверхностей задачей при подготовке зеркально-гладких И на разных этапах технологического процесса изготовления тонкопленочных структур. Из существующих методов оценки микронеровностей можно выделить две большие группы: а) механические (измерение рельефа с помощью зонда атомно силового микроскопа или профилометра) и б) оптические (регистрация интенсивности диффузного или полного интегрального рассеяния, интерферометрической или спекловой картины; измерение поляризационных характеристик индикатрисы рассеянного света).

Большая чувствительность поляризационных характеристик отраженного света к наличию неровностей позволила использовать эллипсометрический метод для оценки качества поверхности. Однако аналитические соотношения между статистическими параметрами неровностей поверхности и эллипсометрическими углами, измеренными на той же поверхности [2], не получили практического применения, прежде всего, из-за трудности статистического описания шероховатой поверхности [3, 4]. Задачи отражения от неровных поверхностей делятся, прежде всего, на прямые и обратные. Прямая задача - определение параметров отраженного электромагнитного излучения для поверхности, высота, форма, плотность и закон распределения неровностей которой известны. Обратная задача - это нахождение параметров неровной поверхности по измеренным поляризационным характеристикам отраженного сигнала. В любом случае, если поверхность статистически неоднородна, то необходимо решить задачу ее описания, т.е. выбрать достаточное число параметров, однозначно ее описывающих. Способы решения обратной задачи эллипсометрии делятся на два класса: а) аналитические на основе формул Френеля, учитывающих тип поляризации света; и б) физические, использующие моделирование шероховатой поверхности для установления корреляционной связи между *известными* параметрами модели и состоянием поляризации отраженного света.

Неоднократно предпринимались попытки моделировать шероховатую поверхность с помощью периодического рельефа с известной геометрией: дифракционных решеток прямоугольного [5] и синусоидального [6], и треугольного (эшелетт) профиля [7, 8] и т.д.

Для описания статистически неровной поверхности, распределение высот ξ неровностей которой подчиняется нормальному закону, достаточно следующего набора параметров: дисперсии **S**, среднего угла наклона микронеровностей γ , радиуса корреляции *l* и типа корреляционной функции W. Корреляционная функция W(x₁, x₂) определяется как среднее от произведения высот неровностей в двух различных пространственно разнесенных точках поверхности и в простейшем случае для гауссовой корреляции равна W(ξ)=exp[- ξ^2/l]. Шероховатая поверхность описывается, как правило, совокупностью случайной и периодической функций, соотношение между которыми определяется целым набором технологических факторов [4, 6, 9]. В этом случае приведенные статистические параметры дают очень приблизительное описание поверхности [3]. Автором был предложен другой метод оценки качества обработки поверхности, использующий инвариантность оптических

9

констант идеальной поверхности. Показано, что нельзя однозначно связать изменение параметров произвольной шероховатой поверхности с изменениями эллипсометрических углов Y и Δ и/или оптических констант n и k. В рамках модели эквивалентной пленки были проанализированы их оптические свойства и обнаружено, что комплексный показатель преломления может иметь экстремумы: вычислены условия "концентрационного резонанса" для поглощающих материалов.

Большая часть работы посвящена моделированию шероховатой поверхности а) с помощью вытравленного рельефа разной глубины и б) с помощью калиброванных частиц, нанесенных на поверхность. Впервые для создания двумерного рельефа шероховатой поверхности автором была предложена в качестве модели случайная фазовая маска (СФМ), представляющая двумерную ортогональную решетку со случайным законом распределения высоких и низких квадратных ячеек со стороной *а*. Экспериментальные результаты подтвердили теоретически полученные соотношения.

Цель работы заключалась в установлении закономерностей изменения состояния поляризации света, отраженного от шероховатых поверхностей с размером неровностей разного масштаба: от 10 -40 нм до 5 мкм. Для этого необходимо было выполнить измерения на зеркально гладких поверхностях ($R_z \ge 10$ нм), на МЛЭ пленках (высота дефектов- "хилоков" составляла ≈ 30 -40 нм), на наноструктурах (высота вискеров 0.2-0.9 мкм), на поверхностях с вытравленным рельефом (глубина рельефа от 20 нм до 1005 нм), на поверхностях с калиброванными частицами (со средним размером от 0.5 мкм до 5 мкм). При этом диэлектрическая функция и поглощение изучаемого материала изменялась в широких пределах.

Для достижения поставленной цели решались следующие основные задачи

10

- Поиск методов интерпретации эллипсометрических измерений на зеркально гладких поверхностях, основанной на законах физической оптики.
- Определение возможности количественного определения параметров шероховатой поверхности в рамках модели эквивалентной пленки.
- Оценка границ применимости модели эквивалентной пленки для интерпретации эллипсометрических измерений на металлах, полупроводниках и диэлектриках.
- Изучение корреляционной зависимости между параметрами рельефа и поляризационными характеристиками света, отраженного от модельной шероховатой поверхности.
- Определение роли каждого из параметров рельефа модельной шероховатой поверхности.
- Расчет условий максимального влияния шероховатости на поляризационные характеристики света, отраженного от модельной шероховатой поверхности.

<u>Научная новизна работы</u> заключается в разработке нового направления моделирования шероховатой поверхности, открывающего новые возможности аналитического рассмотрения проблемы. В диссертационной работе впервые осуществлено следующее:

- Использованы инварианты Кеттелера для оценки шероховатости поверхности.
- Использовано кажущееся поглощение как количественный критерий гладкости поверхности диэлектрика.
- Проанализированы оптические свойства эквивалентных пленок и объяснена в рамках модели возможность разрушения зеркально гладкой поверхности при отражении от нее пучка света высокой интенсивности. Получено аналитическое выражение концентрационного резонанса для поглощающих материалов. Оценена область применимости модели эквивалентной пленки.

- Предложен параметр поверхностной морфологии γ_s как критерий наличия поверхностных дефектов для пленок, осажденных молекулярно лучевой эпитаксией.
- Предложен графо-аналитический метод решения ОЗЭ для четырех неизвестных параметров, основанный на построении номограмм на плоскости Ψ-Δ для двух из них, являющихся независимыми.
- В качестве модели шероховатой поверхности предложена непериодическая структура случайной фазовой маски, все параметра которой *априори* известны.
- Вычислено состояние поляризации света в нулевом порядке дифракции для света, отраженного от СФМ, методом сложения отраженных и рассеянных парциальных волн с учетом затенения. Обнаружено, что поверхностная анизотропия, определяемая углом поворота строки СФМ относительно плоскости падения, сильно зависит от глубины рельефа.
- Предложено объяснение аномально высокого поглощения кремниевых наноструктур в области относительной прозрачности кремния, используя интерференционные соотношения.
- Экспериментально установлены и сформулированы для диэлектрика и металла основные *общие* закономерности и *отличия* в состоянии поляризации света, отраженного от СФМ поверхности.
- Для моделирования шероховатой поверхности предложено использование калиброванных частиц (алмазных синтетических порошков, окиси хрома и окиси церия). Обоснована и проведена статистическая обработка эллипсометрических измерений по методу Пирсона.
- Обнаружена линейная зависимость среднего значения фазового угла ∆ от размера частиц в пределах одной концентрации. Предложен универсальный критерий чистоты

поверхности и проведена оценка пороговой чувствительности фазового угла Δ для определения минимальной обнаруживаемой концентрации частиц.

<u>Научная и практическая значимость работы</u> состоит в разработке нового подхода к моделированию шероховатой поверхности, к анализу экспериментальных исследований, к теоретическому рассмотрению свойств нескольких моделей. Полученные результаты могут быть применимы к совершенно различным объектам.

Работа выполнена с использованием одноволновой многоугловой эллипсометрии на длине волны 0.63 мкм и спектральной эллипсометрии в диапазоне энергии фотонов от 1.5 эВ до 4.8 эВ, дающих прямую информацию об изменении состояния поверхности. В качестве комплементарных методов исследования использовались результаты сканирующей электронной микроскопии, атомно силовой микроскопии, высокоразрешающей интерференционной микроскопии.

Использование высокочувствительных современных приборов сочеталось как с разработкой методик, так и с построением физических и математических моделей для описания экспериментальных результатов и разработкой оригинального программного обеспечения.

С помощью такого подхода были получены результаты, имеющие важное **<u>практическое</u>** значение:

Найден экспрессный бесконтактный неразрушающий метод оценки шероховатости зеркально гладких поверхностей, пригодный для диэлектриков, полупроводников и металлов, высота неровностей которых составляет сотые доли микрометра.

Развит метод эквивалентной пленки, широко используемый для интерпретации эллипсометрических измерений. Выявлена возможность неоднозначности такой модели и указаны способы ее устранения. Найден концентрационный резонанс в свойствах эквивалентной пленки, который может быть причиной разрушения поверхности. Определены условия его возникновения.

Показано теоретически и экспериментально влияние параметров рельефной поверхности, вытравленной с помощью двухуровневой случайной фазовой маски, на состояние поляризации света, отраженного в нулевой порядок дифракции. Эти результаты могут быть полезным для определения размеров тестовых структур.

Оценена чувствительность эллипсометрических измерений к наличию посторонних частиц и определена их предельная концентрация.

Показана возможность определения наличия ростовых дефектов на пленках, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией, используя эллипсометрию как неразрушающий метод исследования.

На защиту выносятся следующие основные научные положения:

- Разработка нескольких вариантов решения обратной задачи эллипсометрии для шероховатых поверхностей, т. е. восстановление параметров исследуемого объекта из измеряемого состояния поляризации; параметры шероховатости колебались в пределах от 0.002 мкм до 1 мкм, отражательная способность поверхности – от 4% до ~80%.
- Применение метода инвариантности оптических констант (по Кеттелеру), который наиболее эффективен при решении ОЗЭ для зеркально гладких поглощающих поверхностей.
- 3. Развитие метода эквивалентной пленки: показана возможность решения ОЗЭ методом графической интерпретации для диэлектриков, полупроводников и металлов, основанного на построении номограмм для двух независимых параметров (d_e, q) эквивалентной пленки из четырех (n_e, k_e, d_e, q), полностью описывающих шероховатую поверхность. Метод хорошо работает независимо от предыстории поверхности,

полученной в результате полировки, осаждения из газовой фазы (поликристаллический кремний с варьируемым размером зерна), осаждения методом монослойных покрытий из молекулярного пучка (Ge-Ge) или кумулятивного отжига (Ti-O₂).

- 4. Исследование корреляционной зависимости между параметрами *вытравленного нерегулярного* рельефа и состоянием поляризации отраженного света, которое выявило основные закономерности и существенные отличия для диэлектриков и металлов.
- 5. Теоретическое модельное описание поверхности с *вытравленным нерегулярным* рельефом и расчет состояния поляризации в нулевом порядке дифракции света, отраженного от СФМ поверхности, с учетом рассеянного света и эффектов затенения, которое хорошо объясняют наблюдаемые в эксперименте аномалии.
- Применение фазовых соотношений для объяснения аномально высокого поглощения кремниевых наноструктур (с высотой вискеров ~ 1 мкм) в области слабого поглощения кремния.
- Определение необходимого числа эллипсометрических измерений (репрезентативной выборки для средних значений <u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u>и<u><u></u><u></u><u></u><u></u>) на шероховатых поверхностях путем статистической обработки измерений.
 </u></u>
- Универсальным критерием чистоты поверхности является произведение [Nd²(ε_p 1)] концентрации, размера частиц и диэлектрической функции. Размер частиц *однозначно* определяет изменение фазы Δ относительного коэффициента отражения только при одной и той же их концентрации на поверхности.

Итогом работы явилось получение совокупности новых знаний, которые можно квалифицировать как крупное <u>научное достижение</u> в направлении изучения поляризационных характеристик шероховатых поверхностей.

ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

Наличие микрорельефа на поверхности, как известно, изменяет электрические, механические и оптические свойства этой поверхности. Задача измерения неровностей является очень важной при подготовке зеркально-гладких поверхностей, при изучении износоустойчивости и отражающих свойств поверхности, при радиолокации Мирового океана. Задача измерения неровностей тесно связана с проблемой рассеяния радиоволн, света и звука на поверхности моря, суши, планет, кристаллических тел; рассеяния электронов и фононов на границах твердого тела и т.д. Существующие методы оценки микронеровностей можно разделить на

механические (измерение рельефа с помощью зонда или профилометра),

оптические (регистрация диффузного или полного интегрального рассеяния, интерферометрической или спекловой картины; измерение поляризационных характеристик отраженного света) и

радиофизические (измерение частоты и амплитуды рассеяния отраженных радиоволн). Многие из перечисленных методов, за исключением радиофизических [17], находят лишь ограниченное применение в силу методической сложности, недостаточной надежности и малой разрешающей способности [4, 6, 18-19].

В настоящей работе будем касаться только задачи измерения неровностей на поверхности твердых тел. Большая чувствительность поляризационных характеристик отраженного света к наличию неровностей позволила использовать эллипсометрический метод для оценки качества поверхности. Однако аналитические соотношения между статистическими параметрами неровностей поверхности и эллипсометрическими углами, измеренными на той же поверхности [2], не получили практического применения, прежде всего, из-за трудности статистического описания шероховатой поверхности [3, 4]. Для описания статистически неровной поверхности, распределение высот ξ неровностей которой

16

подчиняется нормальному закону, достаточно следующего набора параметров: дисперсии S,

среднего угла наклона микронеровностей γ , радиуса корреляции l и типа корреляционной функции W. Корреляционная функция W(x₁, x₂) определяется как среднее от произведения высот неровностей в двух различных пространственно разнесенных точках поверхности и в простейшем случае для гауссовой корреляции равна W(ξ)=exp[- ξ^2/l]. Как показала практика, шероховатая поверхность описывается, как правило, совокупностью случайной и периодической функций, соотношение между которыми определяется целым, набором технологических факторов [4, 6, 9]. В этом случае приведенные статистические параметры дают очень приблизительное описание поверхности [3]. При изучении зависимости эллипсометрических параметров от механической обработки поверхности нами был предложен другой метод оценки качества обработки поверхности [20-21]. Сущность этого метода заключается в следующем: поскольку процесс полировки относится к случайным процессам, а коэффициенты Френеля шероховатой поверхности становятся функциями углов наклона микроучастков γ , то изменение состояния поляризации света, отраженного от статистически неоднородной поверхности, подчиняется также случайному закону.

Следовательно, можно ввести случайные функции Y(x) и $\Delta(x)$, значения которых будут зависеть от координаты поверхности x, в отличие от постоянных значений Y_0 и Δ_0 для идеально гладкой поверхности, тогда δY и $\delta \Delta$ будут характеризовать высоту неровностей. В этой же работе показано, что нельзя однозначно связать изменение параметров произвольной шероховатой поверхности с изменениями эллипсометрических углов Y и Δ , главного угла падения ϕp , и оптических констант n и k. Все перечисленные величины могут изменяться и в положительную и в отрицательную сторону при одних и тех же значениях неровностей.

§ 1.1 Обзор способов моделирования шероховатых поверхности



Реальная поверхность всегда остается неровной. Высота неровностей для большей части практических задач является случайной функцией координат поверхности, поэтому теория рассеяния волн статистически неровной поверхностью является синтезом теории дифракции и теории вероятностей. Методика решения задач не зависит от физической природы неровностей.

Например, распространение звуковых и электромагнитных волн над статистически неоднородной поверхностью имеет ряд общих черт, поэтому вначале решается, как правило, более простая скалярная задача рассеяния звуковых волн. При всем многообразии задач аналитический подход к проблеме ограничивается двумя методами: методом касательной плоскости (методом Кирхгофа) и методом возмущений для двух предельных случаев, когда неровности много больше и много меньше длины волны падающего поля.

1.1.2. Метод касательной плоскости (метод Кирхгофа)

Метод касательной плоскости применим, когда характерные размеры неровностей на поверхности значительно превышают длину волны, дифрагирующего поля и волновое поле может быть представлено в виде суммы падающего поля и отраженного по законам геометрической оптики от плоскости, касательной к неровной поверхности в данной точке. Способ задания граничных условий для поля на поверхности аналогичен методу Кирхгофа, который широко используется для решения задач дифракции на плоских экранах. На касательной плоскости можно выделить площадку с линейными размерами (AE) больше длины волны λ , близко отстоящую от неровной поверхности S, так чтобы удовлетворилось неравенство соs $\varphi \gg (\vec{k}R)^{-1/3} = (2\pi R/\lambda)^{-1/3}$. Следовательно, чтобы отражение от неровной поверхности можно было рассматривать в приближении касательной плоскости, необходимо,

1.1.1. Аналитические методы

чтобы локальные радиусы кривизны поверхности превышали длину волны: $R \gg \lambda$ (Рис. 1). Существенное ограничение метода Кирхгофа связано с тем, что он не учитывает возможные затенения поверхности и многократные отражения. Для учета затенений вводят условную эффективную функцию плотности распределения высот и тангенсов углов наклона освещенной части поверхности, зависящую от угла падения, как от параметра. Эта функция имеет простой геометрический смысл - выражает отношение суммарной площади проекций на среднюю плоскость z =0 освещенных участков поверхности к площади проекции всей поверхности на эту же плоскость. Для метода касательной плоскости сложно оценить точность решения в отличие от метода малых возмущений.

1.1.3. Метод возмущений

Влияние отдельной неровности сводится к тому, что часть энергии падающей на нее волны рассеивается во всех направлениях. Энергия рассеяния черпается из энергии среднего поля, вследствие чего среднее поле ослабляется. Если неровность мала, то это ослабление незначительно. Однако, при рассеянии на многих неровностях при достаточной длине трассы ослабление среднего поля может быть значительным. Наличие большого количества неровностей приводит к появлению волн, рассеянных в незеркальном направлении, и к ослаблению среднего поля, особенно, в случае хорошо проводящей поверхности. Влияние отдельной неровности можно считать малым, согласно критерию Рэлея, если разность фаз δ между волнами, отразившимися от подножия и вершины неровности, будет меньше **р**/2.

Из Рис. 2. видно, что $\delta = 2\vec{k}h\cos\varphi, k = 2\pi/\lambda$, откуда следует условие применимости метода малых возмущений $h \ll \lambda/8\cos\varphi_{\rm ИЛИ}$ $h \ll \lambda$. Пользуясь этим методом, для полей, удовлетворяющих граничному условию

Рис.2

Леонтовича (тангенциальные составляющие электрического и магнитного полей непрерывны на границе $[nE] = \eta[n[\mu H]]$, где n -нормаль к отражающей поверхности, a h -ee импеданс) можно получить поправку к коэффициенту отражения в виде эффективного импеданса, описывающего рассеивающие свойства поверхности и зависящего как от угла падения так и от азимутального угла. Однако, в общем случае для произвольных полей, когда не выполняется условие Леонтовича, эффективный импеданс ввести нельзя.

1.1.4. Двух масштабная модель

Двух масштабная модель для решения дифракционной задачи на шероховатой поверхности, средняя поверхность которой является также случайной, была предложена Курьяновым Б. Ф. [22]. Двух масштабная модель поверхности рассматривается как совокупность мелкой ряби, к которой применима теория возмущений, и крупных неровностей, рассеяние от которых можно считать методом Кирхгофа. Аналогичная модель использовалась в работе [23] для анализа аномального поглощения ИК излучения шероховатой поверхностью металлических зеркал. Анализ сведен к рассмотрению процесса рассеяния электронов шероховатой поверхностью и к описанию микро-шероховатости поверхности с помощью сложного эффективного граничного условия для электронов, рассеивающихся на многомасштабных шероховатостях поверхности металла. Для нескольких периодического рельефа поверхности (синусоидального, типов гофрированного, пилообразного) показано увеличение поглощения мощности в 2 раза на неровностях, среднеквадратичная высота которых h=30-100 Å и много меньше глубины скин-слоя, по сравнению с максимально теоретически возможным. Недостатком двух масштабной модели является условность разбиения неровностей на два типа, что вводит в теорию, как минимум еще один параметр, выбор которого остается произвольным.

1.1.5. Метод Вороновича

20

В работе [24] предложен единый подход к решению задачи о рассеянии волн на неровных границах, объединяющий метод возмущений (брэгговское рассеяние) и метод Кирхгофа, применимый при произвольной высоте неровностей по отношению к длине волны. Предлагаемый метод свободен от указанного выше недостатка и использует малость одного лишь параметра - угла наклона. В статистическом случае он сводится к переопределению корреляционной функции к виду, зависящему от параметров падающей и рассеянной волн.

1.1.6. Метод квантовой аналогии



От классической задачи о рассеянии электромагнитных волн неровной поверхностью можно перейти к квантовой аналогии: взаимодействию частиц, для которых выполняются законы сохранения импульса и энергии
[25]. Падающая электромагнитная волна с импульсом hq и энергией hΩ взаимодействует с колебаниями морской поверхности с импульсом hk и энергией hω:

 $hq' = hk + hq_{\rm H} h\Omega(q') = h\Omega(q) + h\omega(k)$, как показано на Рис.3. Из этого следует, что частоты

рассеянного и падающего излучения отличатся па величину $\delta \Omega = \omega (q - q')$.

Из законов сохранения следует один очень важный вывод: хотя морское волнение представляет собой сумму большого количества гравитационно-капиллярных волн, рассеяние электромагнитной волны происходит лишь на одной из них, с волновым числом и частотой, определяемыми законами сохранения.

В работе [26] показан вклад поверхностных плазмонов в рассеяние и поглощение электромагнитного излучения для шероховатых металлических поверхностей в области

частот ниже $\omega_p/\sqrt{2}$, ω_p - плазменная частота объемного материала.

В заключение можно сказать, что сущность аналитических методов сводится к точному вычислению парциальных волн, отраженных ограниченными областями поверхности, и затем

нахождению суперпозиции этих волн. Способ решения зависит от свойств поверхности, определяющей вид граничных условий.

§ 1.2. Обзор методов контроля неоднородных поверхностей

Существующие методы оценки микро-шероховатостей можно разделить на:

a) механические (измерение рельефа с помощью зонда или профилометра [4]);

б) оптические (регистрация диффузного или полного интегрального рассеяния [6], регистрация интерферометрической или спекловой картины [19]) и

в) радиофизические (измерение частоты и амплитуды рассеяния отраженных радиоволн[17]).

Многие из перечисленных методов, за исключением радиофизических, находят лишь ограниченное применение в силу методической сложности, недостаточной надежности и малой разрешающей способности [27].

Контроль поверхностей оптических деталей на их соответствие заданному параметру шероховатости согласно ГОСТ 2789-73 в условиях оптического производства осуществляется путем визуального сравнения с образцами шероховатости, заранее аттестованными с помощью какого-либо измерительного прибора [14], очевидно, что он ненадежен.

В обзоре Рыбалова М.А. [27] представлены известные в настоящее время методы измерения светопоглощения, учитывавшие как собственное поглощение среды, так и диффузное рэлеевское рассеяние в объеме или на поверхности за счет неоднородности или флуктуации плотности оптических деталей и элементов лазеров: фотометрические, калориметрические, интерференционные, внутрирезонаторные и радиометрические. В указанном обзоре сделаны следующие выводы:

I. Фотометрические методы отличаются своей очевидностью, наглядностью, простотой в практической реализации. Однако, определенные трудности использования фотометрических методов создают несколько обстоятельсв: а) необходимость измерения малых ослаблений интенсивности лазерного излучения, составляющих £10⁻⁴ от интенсивности падающего

22

излучения, б) присутствие френелевских потерь на зеркальное и диффузное отражение от торцов и рабочих поверхностей оптических деталей и элементов лазеров, и рэлеевских потерь внутри их, а также в) невозможность разделения объемного и поверхностного поглощения [28-29].

2. Самым распространенными и хорошо изученными способами настоящее время являются калориметрические методы. Они обеспечивают достаточно высокую точность измерений, позволяют исключить влияние френелевских потерь на диффузное и зеркальное отражения рэлеевского рассеяния внутри образцов, разделить объемное и поверхностное поглощение и обладают работоспособностью в широком спектральном диапазоне оптического излучения [30-35].

Недостатками калориметрических методов измерения являются: большая длительность измерений, необходимость использования лазеров большой мощности (>> 10 Вт), обеспечения непосредственного и надежного контакта термодатчика с образцами, создания особых условий эксперимента, связанных с обеспечением максимального термостатирования образца. Указанные выше недостатки ограничивают возможности применения калориметрических методов и препятствуют их практическому использованию.

Интерференционные методы не отличаются ΗИ высокой точностью, ΗИ универсальностью. Так же, как фотометрические методы, не позволяют разделить объемное и поверхностное поглощения отличаются сложностью практической реализации, И трудоемкостью проведения измерений и громоздкостью измерительной аппаратуры, создаваемой на их основе [36].

Внутрирезонаторные методы контроля неоднородных поверхностей обеспечивают повышение точности измерений, но возможности их всегда ограничены угрозой роста нестабильности генерации лазера или даже ее срыва. Кроме того, внутрирезонаторные методы обладают всеми недостатками тех методов, которые сочетаются с ними [37-38].

23

Наиболее перспективными в настоящее время представляются радиометрические методы, обладающие высокой чувствительностью, способностью работать без непосредственного контакта с образцом и возможностью измерения объемного и поверхностного поглощения раздельно и отличать их от других потерь. Возможности этих методов могут быть расширены путем сочетания их с другими методами, например, с внутрирезонаторными и калориметрическими [39-41].

В настоящее время исследование методов измерения светопоглощения проводится довольно широко. Однако в большинстве случаев оно носит теоретический характер. Ряд физических явлений остается недостаточно хорошо изученным. Расширение объема званий позволит в ближайшее время разработать методы и создать на их основе измерительную аппаратуру, способную с высокой точностью и достоверностью просто и быстро измерять требуемые параметры оптических деталей и элементов лазеров.

§ 1.3. Точность и чувствительность эллипсометрического метода

Метод эллипсометрии, используемый для исследования оптических характеристик материалов и поверхностных покрытий, очень чувствителен к изменению поляризационных параметров отражающей системы [1, 2]. Наличие на поверхности микрорельефа или загрязнений, как известно, изменяет электрические, механические и оптические свойства этой поверхности [18, 23].

Были предприняты попытки решения обратной задачи, т. е. восстановления параметров неоднородной поверхности по измеренным эллипсометрическим характеристикам, для этого решалась сначала прямая задача - нахождения связи поляризационных характеристик поверхности с известными параметрами рельефа, причем использовались поверхности с периодическим рельефом, такие как дифракционная решетка (эшелон) [7] или элементы ИС [5, 42-48].

1.3.1. Точность выбранного метода исследования

Вопрос о точности важен при дальнейшем обсуждении экспериментальных результатов. Точность определения неизвестных параметров отражающей системы зависит не только от точности измерения поляризационных углов Y и Δ (δY и δΔ), которые определяются точностью отсчета азимутальных углов поляризатора и анализатора (P_i, A_i), но и от значений самих параметров отражающей системы, как следует из основного уравнения эллипсометрии. Вопрос о точности подробно рассмотрен в [1], где показано, что основное уравнение

$$\tan \Psi e^{i\Delta} = f(p_1, p_2, p_3, \dots p_n)$$
(1)

при разделении на действительную и мнимую части сводится к двум действительным уравнениям:

эллипсометрии, являющееся комплексной функцией нескольких параметров

$$\Psi = \psi(p_1, p_2, p_3, \dots p_n),$$
(2)

$$\Delta = \Delta(p_1, p_2, p_3, \dots p_n) \quad (3)$$

Ошибки в определении искомых параметров p_1 и p_2 - δp_{1T} и δp_{2T} определяются соотношениями:

$$\delta p_{1T} = \frac{\delta p_1}{\delta \Psi} (\delta \Psi_{\text{exp}} - \delta \Psi_T) + \frac{\delta p_1}{\delta \Delta} (\delta \Delta_{\text{exp}} - \delta \Delta_T), \qquad (4)$$

$$\delta p_{2T} = \frac{\delta p_2}{\delta \Psi} (\delta \Psi_{\exp} - \delta \Psi_T) + \frac{\delta p_2}{\delta \Delta} (\delta \Delta_{\exp} - \delta \Delta_T), \qquad (5)$$

где

$$\delta \Psi_{T} = -\sum_{i=3}^{n} \frac{\partial \Psi}{\partial p_{1}} \partial p_{iT}, \quad \frac{\partial p_{1}}{\partial \Psi} = -\frac{1}{J} \frac{\partial \Delta}{\partial p_{2}}, \quad \frac{\partial p_{1}}{\partial \Delta} = \frac{1}{J} \frac{\partial \Psi}{\partial p_{2}},$$

$$\delta \Delta_{T} = -\sum_{i=3}^{n} \frac{\partial \Delta}{\partial p_{1}} \partial p_{iT}, \quad \frac{\partial p_{2}}{\partial \Psi} = \frac{1}{J} \frac{\partial \Delta}{\partial p_{2}}, \quad \frac{\partial p_{2}}{\partial \Delta} = -\frac{1}{J} \frac{\partial \Psi}{\partial p_{1}},$$

$$J = \frac{\partial \Delta}{\partial p_{1}} \frac{\partial \Psi}{\partial p_{2}} - \frac{\partial \Delta}{\partial p_{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial p_{1}}, \quad \delta \Psi_{e} - \delta \Delta_{e} = 1'$$
(6)

Как следует из анализа (4)-(6), увеличения точности определения искомого параметра можно достигнуть без увеличения точности отсчета азимутальных углов A_i и P_i , если уделить особое внимание выбору измерительной ситуации, т.е. говоря языком формул (2) - (6), соответствующей комбинации параметров p_1 . При выборе измерительной ситуации необходимо помнить, что частные производные углов Y и Δ периодичны по d; и при толщине, равной периоду, меняют знак. Особое внимание нужно обратить на точность задания угла падения света.

1.3.2. Чувствительность метода

Чувствительность метода тесно связана с точностью и при ее определении имеет смысл говорить о минимальных величинах измеряемых углов δ**Y**_{min} и δΔ_{min}

$$\delta \mathbf{Y}_{\min} = \delta \gamma_{A\min} \, \mathbf{u} \, \delta \Delta_{\min} = 2 \delta \gamma_{P\min}, \tag{7}$$

где δγ_{Pmin} и δγ_{Amin} - минимальные изменения азимутальных углов - анализатора и поляризатора эллипсометра, работающего по схеме PKSA, которые еще могут быть зафиксированы в окрестности положений гашения. Значения δγ_{Pmin} и δγ_{Amin} могут определяться двумя типами эффектов:

1. Эффектами типа люфтов в механических системах вращения поляризационных призм или недостаточной точностью соответствующих угломерных устройств;

 Эффектами, связанными с изменением сигнала на индикаторе регистрирующего блока эллипсометра при измерении интенсивности рабочего светового пучка на выходе эллипсометра.

Если чувствительность определяется только эффектами второго типа, то получим [1]:

$$\delta \Psi_{\min} = \sqrt{4P_{np} / J_0(R_p^2 + R_s^2)}, \qquad (8)$$

$$\delta\Delta_{\min} = \sqrt{P_{np}(R_p^2 + R_s^2)/J_0}, \qquad (9)$$

где P_{np} - пороговая чувствительность приемника света в эллипсометре, J_0 -интенсивность падающего излучения, R_p и R_s -коэффициенты Френеля. Из (7) - (9) следует, что величины δY_{min} и $\delta \Delta_{min}$ не зависят от Δ и Y, но определяются модулями амплитудных коэффициентов отражения R_p и R_s .

Из формул (7) - (9) для эллипсометра ЛЭФ-ЗМ при интенсивности лазера $J_0 \approx 10 \text{ мBt}$, пороговой чувствительности ФЭУ $P_{np} \approx 10^{-12} \text{ Bt}$ и $R_p \approx R_s = 0.5$

$$\delta \mathbf{Y}_{\min} \approx \delta \Delta_{\min} \approx 10'. \tag{10}$$

Наличие деполяризованного света на выходе эллипсометра снижает порог чувствительности Р_{пр}, до практического порога чувствительности

$$P_{npakt} = P_{np} + \alpha s J_D \tag{11}$$

При достаточно сильной неоднородности отражающей система, когда $\alpha s J_D >> P_{np}$, δY_{min} и $\delta \Delta_{min}$ определяются этой неоднородностью δp_1 и чувствительностью поляризационных углов к этой неоднородности. Минимальное значение параметра δp_{1min} прямо пропорционально неоднородности и не зависит ни от параметров отражающей системы, ни от параметров эллипсометра.

В заключение необходимо отметить, что перед исследователем всегда стоит непростая задача *выбора оптимальных условий измерения*, обеспечивающих высокую пороговую чувствительность и достаточную точность эллипсометра.

ГЛАВА 2. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ЗЕРКАЛЬНО-ГЛАДКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

Большая чувствительность поляризационных характеристик отраженного света к наличию неровностей позволила использовать эллипсометрический метод для оценки качества зеркальных поверхностей металлов и диэлектриков [20, 49-57]. Все эллипсометрические измерения, приведенные в § 2.1, относятся только к процессу полировки поверхности и

выполнены на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ с рабочей длиной волны 0.633 мкм, использующим нуль-метод. Точность отсчета углов азимутальных углов поляризатора, анализатора, компенсатора и угла падения светового пучка во всех экспериментах равна 0.5 угловых минут [1] Быстрое развитие спектральной эллипсометрии привело к расширению круга задач и объектов исследования от тонких пленок металлов и диэлектриков до биологических объектов [54-67], где также необходимо учитывать и оценивать шероховатость.

§ 2.1 Оптические свойства зеркально-гладких поверхностей, полученных механической обработкой



Введем основные обозначения и формулы для геометрических законов отражения и преломления на границе поглощающих сред. При падении на плоскую границу поглощающей среды возникают две волны: однородная отраженная с вектором k₁' и неоднородная преломленная волна с

комплексным вектором k = k' - ik'', являющаяся суперпозицией двух волн. Прошедшая волна затухает в направлении вектора k'', который перпендикулярен плоскости равных амплитуд и составляет вещественный угол преломления χ с вектором k'.

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k}_1 \frac{\sin \varphi}{\sin \chi} = \frac{\omega}{c} n_{\varphi}, \quad \mathbf{k}'' = \frac{\omega}{c} k_{\varphi}, \tag{12}$$

где n_{φ} - показатель преломления и k_{φ} - коэффициент поглощения, определяющий глубину проникновения света в поглощающую среду h_{φ} , на которой интенсивность света прошедшей волны убывает в *e* раз, согласно закону Бугера-Ламберта:

$$I = I_0 e^{-i\alpha z}, \quad I = I_0 / e \Big|_{z=h_{\varphi}}, \text{ где } h_{\varphi} = \lambda_0 / 4\pi k_{\varphi} \equiv 1/\alpha$$
(13)

и где α- коэффициент затухания.

Главные уравнения распространения световых волн в металлах и поглощающих средах, впервые полученные Кеттелером, показывают, что величины а и b, называемые <u>инвариантами Кеттелера</u>, не зависят от угла падения света, а определяются только длиной волны света и природой отражающей полубесконечной среды:

$$a \equiv n_{\varphi}^2 - k_{\varphi}^2 \quad b \equiv 2n_{\varphi}k_{\varphi}\cos\chi . \tag{14}$$

Зная угол падения ϕ и инварианты Кеттелера можно определить n_{ϕ} и k_{ϕ} :

$$n_{\varphi}^{2} = \frac{1}{2} \bigg[\sqrt{\left(a - \sin^{2}\varphi\right)^{2} + b^{2}} + a + \sin^{2}\varphi \bigg], \quad k_{\varphi}^{2} = \frac{1}{2} \bigg[\sqrt{\left(a - \sin^{2}\varphi\right)^{2} + b^{2}} - a + \sin^{2}\varphi \bigg].$$
(15)

Используя инвариантность оптических констант от угла падения света, нами был предложен метод оценки качества обработки твердых зеркально-гладких поверхностей, основанный на анализе изменения состояния поляризации света при отражении от таких поверхностей [20-21]. Непосредственно измеряемыми с помощью эллипсометра величинами являются два поляризационных (эллипсометрических) угла Ү и ∆, определяемые соотношениями:

$$\rho \equiv tg\Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p e^{i\delta_p}}{R_s e^{i\delta_s}}, \quad tg\Psi = \left|\frac{R_p}{R_s}\right|, \quad \Delta = arctgR_p - arctgR_s, \quad (16)$$

где *R_p* и *R_s* - комплексные амплитудные коэффициенты отражения Френеля для светового пучка, линейно поляризованного в плоскости падения и перпендикулярно к ней, соответственно.

$$R_{p} = \frac{tg(\varphi - \chi)}{tg(\varphi + \chi)}, \quad R_{s} = \frac{\sin(\varphi - \chi)}{\sin(\varphi - \chi)}$$
(17)

Для иллюстрации возможностей эллипсометрического метода были проведены измерения поляризационные характеристики серии образцов, изготовленных из материалов с различными значениями инвариантов *a* и *b*: из меди- a<0, |a|>>b, b<1; из молибдена- a \approx 0, т.е. $n_{\varphi} = k_{\varphi}$, b>>1; и плавленого кварца- a>0, b=0.

2.1.1. Интерпретация эллипсометрических измерений с помощью кажущихся оптических констант

На Рис. 5-6 приведены типичные результаты измерений эллипсометрических углов Ү и

 Δ , полученные на исследуемых образцах в процессе полировки абразивами различных фракций на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ с рабочей длиной волны 0,63 мкм [21] и соответствующая эволюция оптических констант каждого материала на плоскости n-k. После каждого этапа полировки исследуемый образец устанавливался на предметный столик прибора таким образом, чтобы падающий на образец пучок света диаметром 1,5 мм попадал в одно и то же место поверхности образца с точностью 0,1-0,2 мм, т.е. наблюдение за результатом полировки было ограничено малой областью, произвольно выбранной на большой поверхности образца. Такая мера необходима, так как на начальных стадиях полировки поверхность образца сильно неоднородна и результаты измерения углов в разных точках на поверхности образца различны и разброс по Y составляет 1°, а по Δ - 3°.

На конечной стадии наряду с улучшением, качества поверхности увеличивается ее однородность, которая составляет З' и 8' по Y и Δ , соответственно, при точности измерения углов 1'. Максимальная чувствительность Y и Δ к наличию рельефа для любых образцов определяется главным углом падения ϕ_p , когда фаза Δ относительного коэффициента ρ равна 90°. Как правило, ϕ_p близок к углу Брюстера (или псевдо - Брюстера для поглощающих материалов). Следовательно, при проведении экспрессного контроля следует выбирать угол падения вблизи ϕ_p .

В данном случае мы имеем дело с кажущимися оптическими константами, так как приведенные на Рис. 6 значения *n* и *к* вычислены из экспериментально измеренных величин **Y**

и ∆ по следующим формулам при условии замены реальной поверхности на идеальную, т.е. без учета неровностей и наличия какой-либо пленки на поверхности:



Рис. 5. Зависимость поляризационных углов Y и Δ от угла падения света φ₀, как параметра, для **меди** (Re e<0), **молибдена** (Re e≈0, т.е. вблизи плазменной частоты ω_p) и плавленого **кварца** (Re e >0) на начальной (1) и конечной (2) стадиях полировки.

$$n_{a} = \sqrt{\frac{a + \sqrt{A^{2} + B^{2}}}{2}}, \quad k_{a} = \frac{B}{2n_{a}}, \quad (18)$$

$$A = \sin^{2} \varphi \left[1 + tg^{2} \varphi \frac{\cos^{2} 2\Psi - \sin^{2} 2\Psi \cos^{2} \Delta}{(1 + \sin 2\Psi \cos \Delta)^{2}} \right], \quad B = \sin^{2} \varphi \left[tg^{2} \varphi \frac{\cos^{2} 2\Psi - \sin 4\Psi \sin \Delta}{(1 + \sin 2\Psi \cos \Delta)^{2}} \right]. \quad (19)$$

$$\overset{k_{a}}{=} \frac{1}{0,3} = \frac{4,0}{0,3} = \frac{4,0}{3,0} = \frac{4,0$$

Рис. 6. На комплексной плоскости *n-ik* показаны изменения **кажущихся** оптических констант n_a и k_a меди, молибдена и плавленого кварца на различных последовательных этапах уменьшения размера шероховатости при фиксированном $\phi_0=72^\circ$. Точкой N₀ отмечены оптические константы, соответствующие чистым поверхностям, взятые из работ других авторов [10-11, 68-69]; I =0.633 мкм.

2.1.2. Интерпретация эллипсометрических измерений с помощью инвариантов Кеттелера Для идеальной поверхности *n* и *κ* не зависят от угла падения света φ₀ и на Рис.7 мы бы получили две прямые горизонтальные линии. Как видно из Рис. 7, действительная часть

комплексного показателя преломления в процессе полировки уменьшилась более, чем в 2 раза, а мнимая часть возросла примерно на 25%, при этом зависимость *n* и *к* от угла падения света φ_0 сохранилась. Следовательно, обрабатываемая поверхность не достигла состояния идеальной, хотя кажущиеся оптические константы вплотную приблизились к области истинных значений, показанных на предыдущем графике. Значения n_a и k_a в начале полировки на Рис. 7 для углов падения света в области 45-50° резко отличаются от их средних значений. Причины отклонения значений n_e и κ_e могут быть объяснены погрешностями поляризационных углов Y и Δ , возникающими в результате дифракции и рассеяния света на микрорельефе шероховатой поверхности после первых стадий полировки.



Рис.7. Оптические константы n_e и k_e как функции угла падения света φ_0 для двух образцов, изготовленных из **меди** на начальной и конечной стадиях полировки. Стрелки указывают на значения n_e и k_e для максимально достижимой гладкости поверхности.

Экспериментальные доказательства существования дифракционных эффектов были получены в работах [5, 7, 42-46] при исследованиях изменения поляризации пучка света, отраженного от поверхности с периодическим рельефом. Условие рассеяния выполняется, как легко показать, для каждого угла падения света φ₀ только для тех участков микрорельефа, углы наклона которых α₁ и α₂ удовлетворяют равенству

$$\alpha_1 + \alpha_1 == \pi/2 \pm \varphi \,. \tag{20}$$

2.1.3 Интерпретация эллипсометрических измерений с помощью метода Кирхгофа

Еще один подход для оценки вклада в зеркальную компоненту рассеянного света из-за наличия неровностей был предпринят нами в работе [53], где использован формализм, предложенный Басом и Фуксом [3] для малых высот неровностей с малыми углами наклона. Полагая, что неровности изотропны, получено выражение для измеренной диэлектрической функции е, учитывающее вклад рассеянного света в зеркальную компоненту, который определяется четырьмя интегралами, содержащими Фурье-компоненту корреляционной функции неровностей W(r). Однако, сама эта корреляционная функция W(r) является неизвестной величиной. В работе [6] авторы пытались определить корреляционную функцию по профилю неровностей на поверхности, который снимался с помощью зонда. К сожалению, по условиям эксперимента [6] корреляционная функция W(r) фактически могла измеряться только для достаточно больших корреляционных радиусов (~ 10 мкм и больше). Таким образом, из наших расчетов в работе [53] можно заключить, что эллипсометрические параметры света, отраженного металлами, качественно удовлетворительно описываются моделью случайных, малых, пологих (как в методе Кирхгофа) и изотропных неровностей, радиус корреляции которых меньше длины волны света. Отметим также, что попытка моделировать W(r) простой гауссовой функцией и подбирать ее параметры таким образом, чтобы теоретическая и экспериментальная величины $\theta_{\rm изм}$ для кварца совпали, не привела к

удовлетворительному результату.

§ 2.2 Корреляция между оптическими свойствами пленок нитрида алюминия, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией, и морфологией их поверхности.

В этой работе мы показали корреляцию между присутствием поверхностных дефектов и особенностями в эллипсометрических спектрах и, следовательно, в оптических свойствах пленок AIN, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией в присутствии аммиака. Мы предлагаем использовать этот факт для быстрой и неразрушающей проверки качества пленки. Основные критерии качества пленок AlN были как величина сдвига по фазе в максимуме и величина кажущегося (эффективного) поглощения в области прозрачности AlN, вычисленного в соответствии с нашей моделью. Наши эксперименты были выполнены с использованием спектрального эллипсометра (UVISEL фирмы Jobin Yvon). Силовая атомная микроскопия (AFM), как комплементарная методика, использовалась для определения геометрического размера шероховатости поверхностного слоя. Количественный параметр, связанный с поверхностной морфологией γ_s был предложен, и влияние поверхностных дефектов на фазу отраженного света было изучено, для того чтобы оценить качество поверхности из эллипсометрических спектров сразу, то есть без каких-либо вычислений. Кроме того, воздействие поверхностных дефектов на коэффициент поглощения пленки демонстрируется в случае, когда шероховатость не учитывается расчетной моделью. Этот подход мог быть полезен для того, чтобы сортировать идентичные пленки, выращенные в стандартной процедуре роста.

Как правило, коэффициент отражения R или коэффициент пропускания T обычно принимается во внимание некоторыми авторами, чтобы найти диэлектрическую постоянную в оптическом диапазоне, ширину запрещенной зоны и состав в реальном режиме времени для GaN, AlN и сплавов Al_xGa_{1-x}N. Поскольку сигналы R и T зависят от показателя преломления и коэффициента поглощения и следовательно зависят от состава слоя [70-72]. Эллипсометрия широко используется теперь [73-75], и эта техника полезна для быстрой и неразрушающей характеризации как атомарно-чистых поверхностей, так и многослойных структур. Кроме того, спектральная эллипсометрия использовалась в диапазоне от ближнего инфракрасного до вакуумного ультрафиолета (с источником синхротронного излучения 20 эВ и более); для того, чтобы определить, например, температурную зависимость критических точек в спектрах AlN в глубоком ультрафиолете [76].

Цель этого раздела состоит в том, чтобы найти из спектров СЭ корреляцию между присутствием поверхностных дефектов и оптическими свойствами МЛЭ тонких пленок AlN и затем использовать это для сортировки пленок без повреждения образцов.

Серия образцов AlN была выращена методом МЛЭ в установке Riber CBE-32, используя обычную эффузионную ячейку для алюминия и поток NH₃ как источник активного азота. В эксперименте варьировался только режим начальной обработки подложки, все остальные параметры - температура подложки, вакуум в камере, парциальное давление аммиака- были неизменны [77-78].

Спектральная Эллипсометрия - мощный инструмент исследования пленок, позволяющий определить не только толщину, но дисперсию комплексного показателя преломления, энергетическое положение критических точек, а также ширину запрещенной зоны и их зависимость от состава. Если же эта зависимость известна *a priori*, то тогда можно решить обратную задачу: по измеренным спектрам определить состав пленки.

Напомним, что *основное уравнение эллипсометрии* связывает эллипсометрические углы ∆ и Y с коэффициентами Френеля, которые зависят от энергии фотона Е в эВ (или длины волны света I), следовательно, и сами углы становятся функциями длины волны света:

$$\rho(\lambda) \equiv R_p(\lambda) / R_s(\lambda) = t g \Psi(\lambda) \exp[i\Delta(\lambda)], \qquad (21)$$

Причем, именно фазовый угол ∆ наиболее чувствителен к присутствию поверхностных дефектов или пленки. Как правило, при решении обратной задачи эллипсометрии, т. е. для нахождения неизвестных параметров исследуемой системы, используются численные методы минимизации некоторого функционала. При этом выбор вида функционала и модели, описывающей исследуемую структуру, являются ключевыми факторами СЭ характеризации.
Модель становится громоздкой, если необходимо учесть влияние переходных слоев на границах с воздухом и подложкой или их негомогенность, возникающую в процессе роста пленок.

На Рис.9а приведены спектры эллипсометрических углов для четырех образцов, детали поверхностной морфологии которых определены атомно-силовым микроскопом (SOLVER P47H in tapping mode). Кроме того, изменение морфологии пленок контролировалось *in-situ* в процессе роста с помощью отражательной дифракции электронов высоких энергий (RHEED). В исследуемом диапазоне энергий фотонов толщины пленок AlN таковы (около 0.2 мкм), что позволяют записать несколько интерференционных экстремумов спектрах $\Delta(1)$ и Y(1). Для

того, чтобы связать значение $d\Delta_{max}$ в интерференционном максимуме с поверхностными дефектами пленок, возьмем γ_s в качестве параметра поверхностной плотности дефектов, равной отношению (в процентах) суммарной площади, занимаемой дефектами, к общей площади в поле зрения.



Рис. 8. AFM изображение поверхности четырех образцов AlN, выращенных при варьировании режимов начальной подготовки поверхности подложки.

Высота дефектов, называемых хилоками, 30-40 нм, а их плотность уменьшается почти в 30 раз от первого до четвертого образца. Поле зрения 1×1 мкм².

На Рис. 9 b показана экспериментальная зависимость этих двух величин, из графика можно записать уравнение и определить коэффициенты для <u>данных</u> образцов.

$$\gamma_s = \sum_i S^i_{deffect} / S_{AIN}, \quad then \quad d\Delta_{max} = -34.15 + 0.77 \times \gamma_s. \tag{22}$$

Такое уравнение будет полезным для экспрессного контроля и разбраковки образцов в режиме, когда технологические параметры мало меняются.



Рис. 9. а) Спектры эллипсометрических углов Ү и Δ, измеренных на образцах 1-4,

показанных на Рис.8. Для сравнения добавлен спектр AlN, рассчитанный с учетом показателя преломления из работы [66], где авторы полагали k=0.

b) Изменение угла Δ в интерференционном пике как функция параметра поверхностной морфологии γ_s. Около экспериментальных кривых показаны значения энергии фотонов, при которой dΔ_{max} зарегистрированы.

В этой работе кажущиеся (псевдо-константы) оптические свойства (23) и толщина пленок AlN были вычислены с использованием классической осцилляторной модели Лоренца (24), описывающей искомую диэлектрическую функцию. Поскольку известно, что ширина

запрещенной зоны AlN равна 6.2 эВ, т.е. край поглощения лежит за пределами области измерений, то достаточно одного осциллятора в этой модели для описания e(λ) наших пленок.

$$\varepsilon_{pseudo} = \varepsilon_{anbient} t g^2 \varphi_0 \left[1 - \frac{4\rho \sin^2 \varphi_0}{(1+\rho)^2} \right], \quad \rho = \frac{R_p}{R_s}, \quad \rho = \Phi \left[\Delta(\lambda), \Psi(\lambda) \right] \quad (23)$$
$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0 \omega} \tag{24}$$

Сначала, используя модель Лорентца, найдем ее параметры для достоверно <u>известной</u> пленки AlN, затем из спектров $\Delta(\lambda)$ и $Y(\lambda)$ найдем толщину наших пленок, полагая, что их состав соответствует AlN. С помощью нескольких последовательных итераций, минимизируя функционал (или функцию ошибки), получим спектральные зависимости $n(\lambda)$ и $k(\lambda)$, показанные на рисунке ниже, и уточненную толщину пленки.



Рис. 10. а) Спектральные зависимости кажущегося показателя преломления n и кажущегося (ложного) показателя поглощения k для пленки AlN в видимой области спектра от 1.5 до 4.2 эВ; b) кажущийся (ложный) коэффициент поглощения k для пленки AlN как функция параметра поверхностной морфологии γ_s, выраженной в процентах.

Как видно из Рис.10 б , наличие дефектов на поверхности проявляется в возникновении <u>кажущегося</u> (ложного) поглощения, которое тем больше (оставаясь достаточно малым), чем больше плотность поверхностных дефектов. Из этого рисунка для <u>данных</u> образцов при энергии фотона 4 эВ можно записать уравнение прямой:

$$k_{E=4eV} = 0.02691 + 0.00517 \times \gamma_s, \qquad (25)$$

Оказалось, что в области от 2.3 до 2.7 эВ поверхностные дефекты весьма слабо влияют на модуль относительного коэффициента ρ , равный tgY, и следовательно, на реальную часть вычисленного комплексного показатель преломления.

Выводы к главе 2.

- При уменьшении микрорельефа значения Y и ∆ заметно изменяются, но и величина и характер этих изменений различны для различных материалов. Углы Y и ∆ в процессе полировки не являются плавными (монотонными) функциями времени обработки, а изменяются случайным образом, хотя для каждого материала существует совершенно определенная тенденция их изменения.
- 2. Параметры поляризации света, отраженного от шероховатой поверхности, характеризуются случайными функциями Y(x) и ∆(x), зависящими от координат поверхности x. Средние отклонения этих функций бY и б∆ являются легко измеряемыми и непосредственными характеристиками шероховатой поверхности. Критерием

окончания процесса полировки могут служить минимальные значения δΥ и δΔ.

3. Характер изменений главного угла падения фр, и оптических констант *n* и к определяется самим материалом; при уменьшении рельефа они могут как уменьшаться, так и возрастать. 4. Предлагаемый эллипсометрический метод оценки качества поверхности состоит в сравнении измеренных значений с истинными значениями Y₀ и Δ₀ идеальной поверхности для данного материала и в определении средних отклонений δY и δΔ

функций $\mathbf{Y}(\mathbf{x})$ и $\Delta(\mathbf{x})$ по нескольким измерениям на полированной поверхности.

- 5. Теоретические расчеты, требующие знания корреляционной функции неровностей, для зеркальных поверхностей, неровности которых относятся к субмикронной области, пока не дают надежных результатов, чтобы их можно было использовать на практике.
- 6. Для пленок, полученных МЛЭ, для количественной оценки качества поверхности AIN был предложен параметр поверхностной морфологии γ_s, и получены два эмпирических выражения, связывающих γ_s с измеряемыми поляризационными углами (Y и Δ) и с вычисленными оптическими псевдо-константами. Эти выражения в дальнейшем может служить основными критериями оценки наличия дефектов, используя спектральную эллипсометрию как экспрессную неразрушающую бесконтактную и очень надежную методику.

ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЭКВИВАЛЕНТНОЙ ПЛЕНКОЙ

Метод эквивалентной среды впервые предложен, по-видимому, Гарнеттом (1904 г.) [79] для объяснения цветов двухкомпонентных смесей: металлических стекол и коллоидных растворов благородных металлов и металлических пленок. Гарнетт использовал формулу Лоренц – Лорентца (1880 г.), которая связывает показатель преломления среды с электронной поляризуемостью α_{эл} для *N* составляющих его частиц:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} \equiv \alpha = \frac{4\pi}{3} N \alpha_{_{\mathfrak{M}}}.$$

В случае смеси *k* веществ, правая часть заменяется суммой *k* членов, каждый из которых относится лишь к одному из веществ:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \equiv \sum_{i}^{k} \alpha_{\text{sn}}^{i} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i}^{k} N_{i} \alpha_{\text{sn}}^{i}.$$

Позднее Бруггеман (1935 г.) [80] расширил рамки применения этого метода для описания оптических свойств гетерогенных кристаллических структур, содержащих *i*-компонент.

Для шероховатой поверхности Фейнбергом [81] была осуществлена замена оптически неровной поверхности на эквивалентную ей идеальную поверхность с эффективным импедансом, определяемым параметрами неровной поверхности.

В настоящее время существует большое число работ, где используется метод эквивалентной среды или эквивалентной пленки, например, [2, 82-85] для описания субмонослойных и несплошных (островковых) пленок, поликристаллических пленок и неровных поверхностей.

§ 3.1. Принцип аддитивности

Метод эквивалентной среды (пленки) основан на принципе аддитивности: поляризуемость единичного объема вещества α_{AC} , состоящего из частиц (молекул) двух сортов, равна сумме поляризуемостей единичных объемов этих частиц α_A и α_C . Гарнегт [79] полагал, что распределение частиц сорта A в среде, состоящей из частиц C, является случайным и однородным, и поэтому считал независимыми от координаты концентрации μ_A и μ_C , а расстояние между частицами предполагал много меньше длины волны света.

Поляризуемость двухкомпонентного вещества, согласно принципу аддитивности, выражается формулой (26):

$$\alpha_{AC} = \alpha_A q_A + \alpha_C q_C , \quad q_A + q_C = 1, \tag{26}$$

где q_A и q_C - объемные доли частиц A и C.

Основной смысл метода, предложенного Гарнеттом, состоит в замене неоднородной среды или пленки на однородную среду или пленку с оптическими свойствами, определяемыми статистическим характером распределения, размером и оптическими свойствами частиц.

Правомерность замены шероховатого слоя на неоднородную изотропную эквивалентную пленку можно обосновать тем, что исследуемые поверхности имеют существенно анизотропную диаграмму рэлеевского рассеяния (отношение зеркальной, т.е. когерентной, к диффузной, т.е. некогерентной, компоненте в отраженной волне составляет $10^2 - 10^4$). Из этого сразу следует, что высота неровностей *h*<I и расстояние между неровностями *l* сравнимо с высотой *h* [86]. Другими словами, такие поверхности заведомо удовлетворяют критерию шероховатости Рэлея для разности фаз $\delta = \frac{4\pi h \cos \varphi}{\lambda} < \pi/2$.

Очевидно, что при косом падении разброс по фазам будет гораздо меньше, чем при нормальном падении света, благодаря малости соз φ , следовательно, детали поверхности будут мало различимы и их влияние на отражение уменьшится [87-88]. При изменении φ от 45° до 85° для I =0.633 мкм из условия Рэлея $h < \frac{\lambda}{8\cos\varphi}$ получим, что оно

будет выполняться для высот h от 0.112 мкм до 0.908 мкм, соответственно.

При диаметре светового луча 1 мм зондируемая площадь поверхности составляет несколько мм² и содержит более 10⁶ случайно распределенных дефектов, что позволяет допустить слабую зависимость отражающих свойств поверхности от координаты [21], следовательно, нет необходимости абсолютно подробного описания шероховатого слоя поверхности, достаточно приписать ему некоторые средние свойства, определяемые лишь небольшим числом параметров [88].

§ 3.2 Оптические свойства эквивалентных пленок

Шероховатый слой можно заменить эквивалентной пленкой (Рис. 11), описываемой двумя независимыми параметрами: некоторой усредненной толщиной d_e и объемным коэффициентом заполнения q, характеризующим, какую часть объема пленки занимают "дефекты", состоящие из материала подложки. Оптические параметры эквивалентной пленки n_e и k_e однозначно определяются коэффициентом q и моделью, связывающей поляризуемость эквивалентной пленки с поляризуемостью составляющих ее частиц.

Остановимся на физической сути принятой модели и оптических свойствах эквивалентной пленки. Параметр q, с одной стороны, описывает макроскопические свойства эквивалентной пленки, такие как: число дефектов на единицу площади, некоторый усредненный профиль шероховатого слоя; а с другой стороны, q описывает микроскопические свойства пленки: плотность, поляризуемость единичного объема пленки, и определяет параметры волнового вектора электромагнитной волны в пленке.



Рис. 11. Схема замены шероховатого слоя эквивалентной пленкой

Заметим, что эквивалентная толщина d_e не равна толщине шероховатого слоя, определяемого максимальной высотой неровности R_{max}, поэтому d_e нельзя непосредственно сравнивать с результатами интерферометрической оценки [89] без статистической обработки. Параметр q характеризует плотность дефектов на единицу зондируемой площади и позволяет судить о некотором усредненном профиле шероховатой поверхности

Поэтому с точки зрения макро представлений, пленка есть совокупность пустот и некоторого числа частиц произвольной формы с характерными размерами меньше длины волны. Одновременно, с точки зрения микро представлений эта же пленка является

изотропной смесью частиц двух типов (воздуха и вещества подложки), поляризуемость которых α_v и α_s постоянна и не зависит от плотности вещества, а для поляризуемости единичного объема эквивалентной пленки α_e выполняется условие аддитивности (26): $\alpha_e = q\alpha_s + (1-q)\alpha_v$. Если пустоты заполнены воздухом, то $\alpha_v \approx 0$ и $\alpha_e = q\alpha_s$, т.е. поляризуемость эквивалентной пленки линейно зависит от q, т.к. $\alpha_s = \text{const.}$ Вспомогательные параметры описания эквивалентной пленки — это оптические константы n_e и κ_e ; вычисленные из условия аддитивности поляризуемости пленки (26).

Рассмотрим две модели, основанные на двух способах определения поляризуемости вещества: первая с поправкой Г. А. Лорентца - $\alpha = 3 \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}$ и вторая без поправки - $\alpha = e-1$.

Поправка Лорентца учитывает влияние электрического поля, создаваемого окружающими частицами. Во второй модели действующее на частицу поле равно падающему. Исходя из двух способов определения поляризуемости, будем рассматривать две модели шероховатого слоя. Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_e = \varepsilon'_e - i\varepsilon''_e$ и комплексный показатель преломления $N_e = n_e - ik_e$ для первой модели определяются следующим образом:

$$\frac{\varepsilon_e - 1}{\varepsilon_e + 2} = q \frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_s + 2} \equiv q \alpha_s, \qquad (27)$$

$$N_e = n_e - ik_e = \sqrt{\frac{1 + 2q\alpha_s}{1 - q\alpha_s}} = \sqrt{\frac{1 + 2q\frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon + 2}}{1 - q\frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon + 2}}}$$
(27 a)

и для второй модели:

$$\varepsilon_e = q(\varepsilon_s - 1) + 1 \equiv q\alpha_s + 1, \qquad (28)$$

$$N_e = \sqrt{1 + q\alpha_s} = \sqrt{1 + q(\varepsilon_s - 1)} , \qquad (28 a)$$

где ε_s и α_s – диэлектрическая проницаемость и поляризуемость единичного объема материала подложки.

Анализ уравнений (27, 27а и 28, 28а) показывает, что в диэлектриках (k_s=0) никогда не будет наблюдаться явление резонанса от концентрации. Концентрационный резонанс

возможен только для поглощающих материалов при выполнении следующих условий для материала подложки:

1) если показатель преломления $0 < n_s < 1$ и $n_s < k_s$. но $k_s > 2$, как, например, для меди,

$$q = q^*, \quad n_s > \frac{1}{k_s},$$
 (29)

2) если $n_s>1$ и $n_s\leq k_s$. но $k_s>2$, как, например, для молибдена,

$$q = q^*, \quad \sqrt{k_s^2 - 2} > n_s > \sqrt{k_s^2 - 4}.$$
 (30)

Наиболее яркий резонанс может наблюдаться при выполнении условия (29) для таких материалов, как медь, серебро, золото.

Известно аналогичное явление концентрационной зависимости оптических свойств в неупорядоченных металлических сплавах [90, §20-21] и явление опалесценции, сопровождающееся резким усилением рассеяния света чистыми веществами, находящимися в критической точке газ-жидкость [91].

Для иллюстрации особенностей оптических свойств эквивалентных пленок были проведены эллипсометрические измерения серии образцов, изготовленных из материалов с различными значениями действительной ε'_{s} и мнимой ε''_{s} частей диэлектрической функции:

из меди- $\varepsilon'_s < 0$, $\varepsilon''_s < 1$ или $n_s < k_s$ и $n_s < 1$;

из молибдена- $\varepsilon'_s \approx 0$, $\varepsilon''_s > 1$ или $n_s \approx k_s$ и $n_s > 1$; $k_s > 1$, т. е. вблизи плазменной частоты ω_p ;

и из плавленого кварца- $\varepsilon'_s >0$, $\varepsilon''_s =0$ или $n_s >1$ и $k_s =0$.

На рисунках 12 и 13 приведены расчетные зависимости действительной ε'_e и мнимой ε''_e частей диэлектрической проницаемости и комплексного показателя преломления эквивалентной пленки для трех материалов: меди молибдена и кремния, используя формулы для первой модели (27, 27а) и для второй модели (28, 28а). Оптические свойства любой эквивалентной пленки определяются свойствами только параметрами воздуха при q=0: $\varepsilon'_e = n_e^2 = 1$ и $\varepsilon''_e = k_e^2 = 0$; и параметрами только подложки при q=1: $\varepsilon'_e = \varepsilon'_s$, $\varepsilon''_e = \varepsilon''_s$ и ne=ns, ke=ks. Для расчетов оптические константы материалов на длине волны 0.633 мкм взяты из работ [10, 11, 92].

Как видно из рисунков 12 и13, для первой модели в эквивалентной пленке может возникать концентрационный резонанс, т.е. зависимости $n_e(q)$ и $k_e(q)$ могут принимать экстремальные значения при некотором значении q^* , величина которого находится из уравнений (27 и 27а) для каждого материала. Особенно важно отметить, что вещественная часть диэлектрической функции меди не только имеет близко расположенные минимум и максимум, но и при этом проходит через ноль, так, как если бы в пленке все электроны были свободны.

Для второй модели резонансов не наблюдается. Действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости эквивалентной пленки $\varepsilon'_e(q)$ и $\varepsilon''_e(q)$ линейно зависят от коэффициента заполнения q, как следует из (28), а n_e(q) и k_e(q) монотонно возрастают для всех материалов, кроме меди.

Чтобы понять, как распространяется свет в эквивалентной пленке, рассмотрим параметры волнового вектора электромагнитной волны. На Рис. 4 было показано, что световая волна в поглощающей среде неоднородна и для нее вводится комплексный волновой вектор и вещественный угол преломления χ [93], а также показатель преломления n_{φ} и коэффициент поглощения k_{φ} , определяющий глубину проникновения света в поглощающую среду h_{φ} , которые вычисляются согласно выражению (31).

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{k}' - i\mathbf{k}'', \\ \mathbf{k}' &= \mathbf{k}_{1}n_{\varphi}, \quad \mathbf{k}'' &= \mathbf{k}_{1}k_{\varphi}, \\ \chi &= \arcsin[\sin\varphi/n_{\varphi}], \\ h_{\varphi} &= \lambda_{0}/4\pi k_{\varphi} \equiv 1/\alpha, \quad I = I_{0}e^{-i\alpha z}, \quad I|_{z=h_{\varphi}} = I_{0}/e, \\ n_{\varphi} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\left(\varepsilon_{e}' - \sin^{2}\varphi\right)^{2}} + \varepsilon_{e}' + \sin^{2}\varphi \right]^{1/2} \\ k_{\varphi} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\left(\varepsilon_{e}' - \sin^{2}\varphi\right)^{2}} - \varepsilon_{e}' + \sin^{2}\varphi \right]^{1/2} \end{aligned}$$
(31)

Показатель преломления n_{φ} и коэффициент поглощения k_{φ} , а также вещественный угол преломления χ вычислены, используя значения ε'_e и ε''_e , найденные по формулам (27, 27а) и (28, 28а). Результаты расчетов параметров, определяющих распространение преломленной волны в эквивалентной пленке, приведены на рисунке 14 для трех материалов и для двух моделей при условии падения волны с вектором k_1 под углом $\varphi=70^{\circ}$ к нормали поверхности, как показано на Рис 4.



Рис. 12. . Зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической функции ε'_e и

 ε_{e}'' эквивалентной пленки от объемной доли q материала меди, молибдена или поликристаллического *кремния*, рассчитанные по двум моделям: 1- первая модель, $N_{e} = \left[(1+2q\alpha_{s})/(1-q\alpha_{s})\right]^{1/2}$, где в ε_{e}' и ε_{e}'' для меди возникает концентрационный резонанс при q=0,72 и q=0,76, соответственно; 2-вторая модель, $N_{e} = (1+q\alpha_{s})^{1/2}$. Длина волны 0.633 мкм.



Рис. 13. Зависимость оптических констант n_e и k_e эквивалентной пленки от объемной доли q материала меди, молибдена или поликристаллического кремния, рассчитанные по двум моделям: 1- первая модель, $N_e = \left[(1 + 2q\alpha_s)/(1 - q\alpha_s) \right]^{1/2}$; 2-вторая модель, $N_e = (1 + q\alpha_s)^{1/2}$. Длина волны 0.633 мкм.

По первой модели в окрестности q≈q^{*}для меди затухание света в эквивалентной пленке может быть больше, чем в материале подложки, а глубина проникновения света (скин-слой) гораздо меньше, вещественный угол преломления при этом очень мал, что означает распространение волны в пленке почти перпендикулярно поверхности.



Рис. 14а. Параметры волнового вектора n_{ϕ} и k_{ϕ} эквивалентной пленки от коэффициента заполнения q <u>для первой модели (с поправкой Г. А. Лорентца)</u> при угле падения света $\phi_0=70^{\circ}$ для трех материалов подложки. Ниже те же параметры <u>для второй модели.</u>



Рис. 14б. Параметр волнового вектора χ эквивалентной пленки от коэффициента заполнения q <u>для первой модели (слева)</u> при угле падения света φ₀=70° для трех материалов подложки и <u>для</u> <u>второй модели (справа).</u>

Следует обратить внимание еще на одну особенность: во второй модели поглощение для меди в эквивалентной пленке не превышает величину исходного материала, но при этом возникает волна, распространяющаяся почти вдоль поверхности. Вещественный угол преломления при этом близок к 90°.

Параметры волнового вектора в эквивалентной пленке для кремния слабо зависят от выбора модели.

Основные выводы по оптическим свойствам эквивалентных пленок § 3.2 Проведенный анализ позволяет сделать следующие выводы:

- Действительная є_e' и мнимая є_e" составляющие комплексной диэлектрической проницаемости эквивалентной пленки линейно зависят от q, без учета поправки Г.А. Лоренца (вторая модель) для действующего на частицу электрического поля. С учетом поправки Лорентца (первая модель) эти же величины существенно нелинейны и є_e' может менять знак, а диэлектрические потери є_e" могут иметь ярко выраженный максимум.
- 2. Комплексный показатель преломления эквивалентной пленки можег иметь экстремумы в зависимостях n_e(q) и k_e(q), особенно ярко проявляющиеся в первой модели для сильно-поглощающих материалов. Концентрационный резонанс может наблюдаться не для любых материалов, а только, когда k_s > 2, a n_s < k_s.
- Наличие аномально-высокого поглощения в тонком слое эквивалентной пленки на зеркально-гладкой поверхности может приводить к коллапсу при отражении от такой поверхности.
- Особенно интересно поведение вещественного угла преломления χ, определяющего угол между векторами k' и k". Для меди χ может быть меньше, равным и большим, чем угол падения света φ₀.

§ 3.3. Графо-аналитический метод определения параметров неровностей зеркально-гладких поверхностей

Задача настоящего раздела рассмотреть возможности графического решения обратной задачи эллипсометрии, т.е. восстановление параметров шероховатости зеркально-гладкой поверхностей по измеренным эллипсометрическим углам Y и Δ, используя две модели (27, 27а) и (28, 28а), основанные на разных способах определения поляризуемости эквивалентной пленки α_e, и рассмотреть также область применимости модели эквивалентной пленки.

В общем случае графическое решение обратной задачи эллипсометрии с помощью номограмм на плоскости $Y - \Delta$ для системы «однородная поглощающая пленка - поглощающая подложка» невозможно, поскольку номограммы будут состоять из семейства трех (d=const, n=const, k=const) взаимно пересекающихся линий, не дающих однозначного значения параметров пленки для любой пары экспериментальных значений эллипсометрических углов

Преимущество предлагаемого метода графического решения обратной задачи по определению параметров шероховатого слоя состоит в том, что он дает возможность однозначного решения, поскольку из четырех параметров эквивалентной пленки только два — d_e и q — являются независимыми, a n_e и k_e однозначно связаны с q в рамках выбранных моделей.

Таким образом, эквивалентная пленка характеризуется в нашей модели четырьмя параметрами *d_e*, *n_e*, *κ_e* и *q*, каждый из которых несет информацию о свойствах шероховатой поверхности.

Построение номограмм на плоскости для однослойной системы «однородная поглощающая пленка-поглощающая подложка» состоит из ряда последовательных вычислений значений пары эллипсометрических углов Y и Δ для различных комбинаций

двух параметров эквивалентной пленки: толщины *d_e*, и коэффициента заполнения *q*, , согласно основному уравнению эллипсометрии:

$$\rho \equiv \frac{R_p}{R_s} = tg\Psi e^{i\Delta} = \frac{r_{01p} + r_{12p}e^{-2i\delta}}{1 + r_{01p}r_{12p}e^{-2i\delta}} \cdot \frac{1 + r_{01s}r_{12s}e^{-2i\delta}}{r_{01s} + r_{12s}e^{-2i\delta}},$$
(32)

где r_{01} , r_{12} -коэффициенты отражения Френеля *p*- и *s*-поляризованного света на границах «воздух-пленка» и «пленка-подложка», соответственно, а δ - разность фаз *p*- и *s*-компонент. В этом случае на плоскости **Y** - Δ получим два семейства линий: равной толщины (d_e = const) и равного коэффициента заполнения (q = const). В рамках выбранной модели параметры n_e и κ_e связаны соотношениями - 27, 27а, и 28, 28а с коэффициентом заполнения q (Рис.13).

Для меди (см. Рис. 15), молибдена (см. Рис. 16) и для кремния (см. Рис. 17) приведены номограммы, для построения которых варьировались два независимых параметра d_e и q эквивалентной пленки. Сплошные линии на номограммах соответствуют показанным на них значениям постоянных коэффициентов заполнения q, а пунктирные — постоянным значениям толщины пленки d_e в ангстремах. Точки q = 0 и q = 1 совпадают, так как соответствуют отсутствию пленки на идеально гладкой исследуемой поверхности.

На Рис. 16-II, показана неоднозначность решения по второй модели для молибдена: линии равной толщины для q < 0,1 и для q > 0,2 образуют два семейства взаимно пересекающихся кривых. Линии равного коэффициента заполнения также образуют два семейства взаимно пересекающихся кривых. Все экспериментальные точки ложатся на линию $d_e = 1000$ Å, что не отражает реальную ситуацию, так как в процессе полировки высота неровностей шероховатого слоя должна уменьшаться. Учитывая эти соображения, на рис. 16-IIa, приведена часть номограммы для q < 0,2.

На номограммы рис. 15 и 16 нанесены результаты экспериментальных измерений эллипсометрических углов Y и Δ, выполненных на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ с рабочей длиной волны 0,63 мкм на разных стадиях полировки меди и молибдена. Начальная стадия

полировки в нашем случае (точка 1) относится к поверхности, уже имеющей зеркальный блеск, конечная стадия близка к предельно достижимому качеству полировки исследуемого материала.

На рис. 17 нанесены результаты измерений на шероховатых поверхностях пленок (4—6 мкм) поликристаллического кремния, осажденного из газовой фазы в реакторе пониженного давления при постоянной температуре синтеза 700° С и варьируемом давлении от 1,5 до 3 торр, в результате чего сильно меняется размер зерна пленок кремния.

Определенные из номограммы параметры эквивалентной пленки d_e и q, а также значения n_e и κ_e , соответствующие найденному q, для всех исследуемых образцов приведены в одной таблице для первой и для второй модели. Точность определения параметров в силу нелинейности системы зависит от величины этих параметров и составляет 0,001 по q и 0,1 Å по d_e .



Рис. 15. Номограммы для меди. Экспериментальные точки № 1-№5 получены: 1- в начале и 5в конце полировки типичного образца, имеющего зеркально-гладкую поверхность; І-первая модель, ІІ-вторая модель; угол падения света φ₀=65°; $\lambda = 0,63$ мкм.

Согласно результатам измерений, толщина *d_e* последовательно уменьшается по мере улучшения качества полировки металлов, тогда как коэффициент заполнения пленки обнаруживает только слабую тенденцию роста, что может указывать на сохранение профиля шероховатости поверхности при уменьшении общей толщины шероховатого слоя в данном процессе полировки.



Рис. 16. Номограммы для **молибдена**. Экспериментальные точки ☆1-☆3 получены: 1- в начале и 3- в конце полировки типичного образца, I-первая модель, II-вторая модель, угол падения света φ₀=65°; λ = 0,63 мкм; IIa- часть номограммы II для q £ 0.2.



Рис.17. Номограммы для поликристаллического **кремния**. Экспериментальные точки- ☆☆образцы с различными размерами зерна; 1-первая модель, 2-вторая модель, угол падения света φ₀=70°; I = 0.633мкм.

Парамет ры пленки	Cu				Мо			p-Si										
n/n	1	2	3	4	5	1	2	3	2	4	6	8	9	12	13	15	17	19
d _e , Å	21/	16/	6/	7/	1/	95/	15/	2/	140/	400/	280/	340/	450/	430/	210/	260/	330/	280/
	18	13	5	6	1	115	25	1	140	380	280	340	460	430	220	260	330	280
q	0.71/	0.71/	0.73/	0.72/	0.72/	0.84/	0.9/	0.91/	0.85/	0.85/	0.87/	0.88/	0.81/	0.8/	0.89/	0.9/	0.9/	0.83/
	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.04	0.04	0.04	0.5	0.5	0.55	0.56	0.42	0.41	0.58	0.62	0.6	0.45
n _e	6.26/	6.46/	7.01/	6.85/	6.68/	3.62/	3.99/	4.02/	2.83/	2.83/	2.97/	2.97/	2.65/	2.6/	3.03/	3.12/	3.06/	2.73/
	0.18	0.17	0.2	0.19	0.19	1.04	1.02	1.04	2.82	2.82	2.94	2.97	2.61	2.57	3.01	3.1	3.06	2.63
k _e	1.95/	2.24/	3.47/	3.01/	2.55/	1.19/	1.94/	2.12/	0.008/	0.008/	0.011/	0.011/	0.008/	.007/	.011/	.012/	0.012/	0.007/
	0.36	0.38	0.31	0.34	0.32	0.49	0.43	0.49	0.015	0.015	0.016	0.017	.014	.017	.017	.018	0.017	0.015
	N _{Cu} =0.21+i 3.31 N _{Mo} =3.63+i 3.86					N _{Si} =3.865+i 0.023												

Таблица 3.1. Экспериментально определенные параметры эквивалентной пленки для трех материалов: Си, Мо, p-Si из номограмм,

приведенных на Рис. 15, Рис. 16 и Рис. 17. Результаты приведены по двум моделям: *И модель / И модель*.

§ 3.4. Применимость метода эквивалентной пленки

Следует отметить, что принятая модель не учитывает эффектов адсорбции и влияния случайных загрязнений поверхности, которые могут вносить существенные погрешности в результаты измерений. Для их уменьшения необходима стандартизация температуры и состава газовой смеси атмосферы при проведении измерений, а также защита от попадания пыли и других загрязнений поверхность.

- Сравнение результатов расчета по двум моделям для металлов показало, что и для первой и для второй модели толщины пленок d_e получаются очень близкими по значению; а значения q существенно отличаются: по первой модели = 0,7-0.9, тогда как по второй модели q <0,1. По-видимому, следует отдать предпочтение первой модели, так как трудно представить профиль шероховатого слоя со столь малым коэффициентом заполнения. Малые значения q можно интерпретировать как одиночные выпуклые дефекты на гладкой поверхности, а большие (близкие к единице) значения q можно рассматривать как ямки на гладкой поверхности.
- Для полупроводника обе модели дают практически равноценные результаты: толщины d_e с хороший точностью совпадают, а коэффициент заполнения по первой модели несколько выше, чем по второй, но оба значения вполне приемлемы, хотя, несомненно, предпочтительнее большее значение q. Для кремния расчетная величина d_e хорошо коррелирует со средним размером зерна поликристаллического кремния, определенного независимым методом.
- Оптические константы n_e и κ_e эквивалентной пленки характеризуют комплексный волновой вектор k = k' - ik'' неоднородной электромагнитной волны, распространяющейся в ней. Вещественный угол преломления χ , образованный векторами k' и k'', равный согласно (31) $\chi = \arcsin[\sin\varphi/n_{\varphi}]$, как было показано, для всех материалов по первой модели и для кремния по второй модели всегда

меньше, угла падения φ. По второй модели для меди χ≈90°, поскольку n_φ меньше единицы; а в случае кремния и молибдена для обеих моделей волна затухает в пленке медленнее, чем в материале подложки.

Полученные данные свидетельствуют о пригодности графического метода и выше приведенных моделей для количественного описания степени шероховатости зеркально-гладких поверхностей. Интересно отметить, что наши данные хорошо коррелируют с результатами статистической обработки интерферограмм и профилограмм полированных поверхностей ряда материалов, в том числе и меди, полученными в работе [6].

В то же время предлагаемый нами метод контроля не требует сложного аппаратурного оснащения и отличается незначительной трудоемкостью. Это позволяет рекомендовать эллипсометрический метод измерений в сочетании с предложенной графической методикой обработки результатов для массового контроля шероховатости полированных поверхностей. Однако, следует отметить случаи, когда возникает неоднозначность решения. Эта неоднозначность может быть устранена проведением анализа решений с точки зрения их физического смысла.

§ 3.4.1. Расчет осцилляций эллипсометрических углов Y и Δ при эпитаксиальном

росте

Приведем пример применения метода эквивалентной пленки для интерпретации изменения эллипсометрических углов в процессе роста монослойных покрытий методом молекулярно-лучевой эпитаксии, когда шероховатость поверхности очень мала. На рис.18 показано изменение углов Y и Δ на плоскости δY - δΔ при молекулярно-эпитаксиальном росте одного монослоя германия на германиевой подложке. Температура подложки 400°С. Оптические константы для атомарно-чистой поверхности германия взяты из работы [92]. Кривая 1 построена из предположения, что монослойная пленка толщиной равной 5.65 А

растет путем последовательного заполнения вакантных узлов кристаллической решетки германия, т.е. d_e=const, а q изменяется от нуля до единицы. Кривая 2 построена для пленки с учетом образования дефектов роста. При этом толщина пленки связана с коэффициентом заполнения q соотношением d_e =5.65 q. Если считать, что коэффициент заполнения q пропорционален времени при постоянном потоке частиц, то зависимости Y(q) и $\Delta(q)$ будут аналогичны зависимостям Y(t) и $\Delta(t)$, которые наблюдались в эксперименте [12]. На Рис.19 для плоскости ($\delta Y - q$) и для плоскости ($\delta \Delta - q$) приведены зависимости $\delta Y(q) = Y(0) - Y(q_i)$ и $\delta\Delta(q) = \Delta(0) - \Delta(q_i)$, соответственно, в процессе роста одного монослоя пленки. Из этих зависимостей следует вывод, что в процессе эпитаксиального роста можно наблюдать осцилляции эллипсометрических углов Ү и Д. Характер осцилляций слабо зависит от выбранных моделей роста пленки при том, что диапазон изменений составляет $\approx 1.5^{\circ}$ для $\delta\Delta$ и несколько угловых минут для δΥ. Именно поэтому в эксперименте регистрируется только осцилляции эллипсометрического угла Д. Осцилляции Y и Д могут уменьшиться и даже совсем исчезнуть, как показано на вставке из экспериментальной работы [12], если формирование каждого следующего монослоя пленки будет идти с накоплением дефектов роста, что приведет к несовпадению начальной точки q=0 с точкой q=1 и к уменьшению амплитуд $\delta \mathbf{Y}(\mathbf{q})$ и $\delta \Delta(\mathbf{q})$.



Рис. 18. Изменения эллипсометрических углов Y и Δ , вычисленные по двум моделям, на плоскости δY - $\delta \Delta$ в процессе роста одного монослоя германия, выращенного эпитаксией из молекулярного пучка на Ge. Цифры около кривых соответствуют различным значениям q. δY и $\delta \Delta$ выражены в угловых минутах. На вставке показаны экспериментальные осцилляции угла Δ (t), полученные в работе [90].



Рис. 19. Приращения δ**Y** и δ∆ эллипсометрических углов **Y** и ∆ за счет роста эпитаксиального слоя Ge как функции коэффициента заполнения q. Показаны два варианта расчета: 1-толщина пленки постоянна d_e=const; 2- с учетом дефектов роста - d_e =5.65 q.

§ 3.4.2. Эквивалентная пленка при интерпретации спектральных измерений

Применение модели эквивалентной пленки в спектральных измерениях стало мощным инструментом изучения структуры конденсированных сред [94-95]. Покажем это на примере изучения свойств термически окисленной пленки титана [94], где ожидалось получение пленки двуокиси титана – рутила.

После вакуумного напыления металлической пленки титана, она ожигалась в кумулятивном процессе: на первом этапе в течение 7 часов, затем дополнительно еще 18 часов. Результаты спектральных эллипсометрических измерений показаны на Рис. 20, из которого ясно видна существенная разница оптических свойств пленок из двух серий.

Диэлектрическая функция пленки представлялась суммой трех осцилляторов:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0\omega} + \sum_{j=1}^2 \frac{f_j \omega_{0j}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\gamma_j \omega},$$
(33)

где ε_{∞} и ε_{s} – высокочастотная и статическая величины диэлектрической пленки, соответственно; Γ_{0} , γ_{j} – положительные факторы затухания; f_{j} и ω_{0j} –сила и частота *i*-осциллятора Лорентца;, ω_{T} –энергия переходов в эВ.

Однако, оказалось, что пленка состоит из смеси ругила и ругило-подобного вещества, которое назовем Модифицированный ругил, также представляемый формулой (33), но с другими параметрами осцилляторов. Кроме того, учтем переходный слой на границе пленкаподложка и всю пленку разобьем на 4 слоя, диэлектрическую функцию каждого из них будем представлять ЕМА- моделью по Бруггеману:

$$\frac{\varepsilon_e - \varepsilon_2}{\varepsilon_e + 2\varepsilon_2} = q \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2}, \tag{34}$$

где для *i*-слоя ε_e . ε_1 и ε_2 – диэлектрические функции эквивалентной пленки и двух составляющих его компонент, соответственно. Компоненты могут варьироваться. На Рис. 21 показаны результаты расчета для трех образцов, имеющих разную историю кумулятивного окисления. Самое главное- сдвиг края поглощения в Модифицированном рутиле. Изменение состава пленки было подтверждено сдвигом δv комбинационного рассеяния Рамана [94].



Рис. 20. Реальные и мнимые части псевдо-диэлектрической функции Si-Ti образцов, выдержанных на воздухе в течение 7 часов (1, 2, 3) и 25 часов кумулятивного отжига (10х, 20х, 30х), в спектральном диапазоне 1.5-4.8 эВ.



Рис. 21. Оптические свойства Рутила (E_g =3.53 эВ) и Модифицированного рутила для трех образцов, окисленных в различных условиях, и имеющих различную энергию края поглощения: 2.89 эВ, 3.28 эВ и 3.14 эВ для 10х, 20х, и 30х образцов, соответственно.

В заключение можно отмстить, что хотя метод эквивалентной пленки и не является универсальным, но может быть очень полезен для количественной оценки некоторых процессов, таких как, оценка степени шероховатости поверхности, объяснения наблюдаемых в эксперименте осцилляций эллипсометрического угла Δ во время эпитаксиального роста пленок. Важное значение модель эквивалентной пленки имеет при интерпретации эллипсометрических спектров, позволяя находить состав довольно сложных пленок, как например, в [94]. **Таблица 3.2.** Экспериментальные данные и параметры модели пленки TiO₂, полученной окислением на воздухе при температуре 750°С.

Экспер	иментальные ,	данные	Параметры модели						
Номер	Число	Время	слой	Толщина	Состав слоя				
образца	напылений	отжига,		вÅ		χ^2			
	слоев Ті	час							
			1	74.4	85.41%Ti+14.59%Si				
	1	5	2	811.0	75% Rutile-o +25% Anatase-e				
1	+2	+7	3	+455.1	Rutile-Modified				
			4	+251.0	Anatase-Modified				
			Σ	=1517.1		41.15			
	1	5	1	124.3	86.15%Ti+13.85%Si				
1ox	+2	+7	2	511.2	Rutile-e				
		+18	3	+210.3	Rutile-Modified				
			Σ	=721.5		0.895			
			1	61.2	76.84%Ti+23.16%Si				
2	1	7	2	625.6	Rutile-o				
			3	+205.6	Rutile-Modified				
			4	+237.7	Anatase-Modified				
			Σ	=1068.9		13.14			
			1	160.2	98.13%Ti+1.87%Si				
2ox	1	7	2	250.6	97.3% Rutile-e+2.7% Anatase-o				
		+18	3	+241.6	99% Rutile-Modified				
			Σ	=492,2	+1% Anatase-Modified	1.176			
			1	47.4	96.18%Ti+3.82%Si				
3	1	7	2	636.3	74.5% Rutile-o +25.5% Anatase-e				
			3	+133.6	Rutile-Modified				
			4	+235.1	Anatase-Modified				
			Σ	= 1005		15.83			
			1	123.4	98.13%Ti+1.87%Si				
3ox	1	7	2	256.6	71.1% Rutile-e +28.9% Anatase-o				
		+18	3	+212.8	99%Rutile-Modified				
			Σ	= 469,4	+1% Anatase-Modified	2.035			

ГЛАВА 4. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ С ВЫТРАВЛЕННЫМ РЕЛЬЕФОМ

Трудности решения обратной задачи - нахождения параметров шероховатой поверхности по измеренным характеристикам отраженного от нее излучения – были преодолены в радиочастотном диапазоне [3]; однако, в оптическом диапазоне не найдено однозначного решения этой задачи. Известны многочисленные попытки обойти трудности решения обратной задачи путем нахождения корреляционных зависимостей между параметрами шероховатости и оптическими характеристиками света, отраженного от шероховатой поверхности. Для этого решалась прямая задача - измерения оптических характеристик для поверхности, параметры неровностей которой хорошо известны. В первую очередь, изучались свойства отраженного света от поверхности с периодическим рельефом. Моделью шероховатой поверхности служили: синусоидальная решетка [9], эшелетт [7, 8] и дифракционная решетка [5, 97].

В данной главе в качестве модели шероховатой поверхности выбрана случайная фазовая маска. Случайная фазовая маска (СФМ) используется для увеличения плотности голографической записи цифровой информации и улучшения качества восстанавливаемого изображения, а также как кодер-декодер изображения [98-100]. СФМ – прозрачна и вносит только фазовые изменения в пучки света, проходящие через различные ее участки.

§ 4.1. Случайная фазовая маска как модель шероховатой поверхности

§ 4.1.1. Описание случайной фазовой маски

Для создания двумерного рельефа шероховатой поверхности в нашей работе использовался фотошаблон двухуровневой фазовой маски (СФМ), представляющий двумерную ортогональную решетку со случайным законом (2⁻ⁿ) распределения черных и белых квадратных ячеек стороной *а*. Поле фотошаблона СФМ формируется с помощью генератора случайных чисел построчно и вероятность появления в строке прямоугольника

66

а×па. равняется 2⁻⁽ⁿ⁺¹⁾. Прямоугольники одного цвета в горизонтальных строках формируют на поле фотошаблона разнообразной конфигурации массивы черного и белого цвета (Рис.22).

Очевидно, квадраты со стороной *а* являются наиболее вероятными и площадь, занимаемая ими равна четверти от общей площади. На Рис.23 и 24 показаны вероятности появления в строке черных (или белых) прямоугольников *а×na* и их площадей *na*². Суммарные площади черного и белого полей равны.

Технология изготовления образцов, на которых проводились измерения, широко применяется при изготовлении СФМ на кварце [97-99]. На полированную поверхность плавленного кварца в вакууме напыляется пленка хрома толщиной ~ 3000 Å, с помощью

фотолитографии на нее переносится изображение с фотошаблона и далее кварц травится через хромовую маску на заданную глубину в буферном травителе (смеси HF,H₂O и NH₄F) при регулируемой температуре. Скорость травления плавленого кварца можно варьировать от

10 А/мин до 100 А/мин. По окончании травления кварца маскирующая пленка хрома

удаляется. Глубина вытравленного фазового рельефа контролируется на МИИ-11. Профиль вытравленного рельефа в идеальном случае должен быть прямоугольным, однако, как показано в [100, 101] профиль травления изотропного материала, каким является плавленый кварц, представляет собой сферическую поверхность с радиусом равным глубине травления. Наличие хромовой маски на поверхности плавленого кварца нарушает изотропность травления и приводит к зависимости профиля от глубины травления. В нашей работе проводилось специальные исследования по изучению профиля травления, которые подтвердили анизотропность травления и наличие цилиндрических боковых граней [102]. Однако, сначала мы рассмотрели более простую задачу, где полагали боковые грани рельефа плоскостями, наклоненными под углом α к нижней грани (донышку) рельефа [49, 51-52]. Условия травления боковых граней абсолютно одинаковы, поэтому основное внимание уделим симметричному рельефу, хотя для общности подхода рассматриваем рельеф, боковые грани которого наклонены под разными углами α₁ и α₂.

Поскольку наши измерения на таких поверхностях проводятся на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ при косом падении света, то следует рассматривать особенности дифракция когерентного света на случайной фазовой маске с произвольным фазовым сдвигом. Отраженное поле СФМ представляет собой суперпозицию дифракционных картин, получающихся в результате дифракции на квадратном отверстии, наиболее вероятные размеры которого *а*. Картина отражения от наших образцов очень похожа на дифракционную картину Фраунгофера от 56 одинаковых отверстий в плоском экране с упорядоченной ориентировкой [13, стр. 436]. Все наши измерения относятся только к нулевому порядку дифракции, т.е. к зеркально отраженным лучам. Поэтому целесообразно начать анализ отражения света от СФМ с рассмотрения отражения света от элементарной ячейки с трапециидальным рельефом в нулевом порядке дифракции.



Рис. 22. Поле двухуровневой случайной фазовой маски (СФМ). Высокие площадки -черного цвета; вытравленные углубления – белого цвета.



Рис. 23. Вероятность появления в строке подряд *n* черных или белых квадратов *a*×*a*.

Рис. 24. Распределение площадей в строке для прямоугольника *а×na*.

§ 4.2. Отражение света от поверхности с трапециидальным рельефом

Наличие рельефа на отражающей поверхности вызывает рассеяние света, когда часть света от отражается под углами, не равными углу падения. Рассмотрим отражение света от поверхности с трапециидальным рельефом (Рис. 25) и выясним условия, при которых свет, падающий на боковые грани может переотражаться в зеркальную компоненту. Свет, рассеянный на ребрах, образованных верхней и боковой гранями, рассматривать не будем.

На Рис. 25 показаны возможные случаи рассеяния падающего света в зеркальную компоненту с участием двух (а, в, г) или трех (б) граней и записаны условия попадания рассеянного света в зеркальную компоненту, определяемые геометрией рельефа. Если для симметричной ячейки угол падения $\phi_0 > 2\alpha - \pi/2$, то луч отражается только двумя боковыми гранями и при этом угол отражения $\phi'_0 = \pi/2 - \phi_0$. Легко показать, что при углах падения света в зеркальную компоненту. Рассеяния транециидальной ячейки не дадут вклада в зеркальную компоненту. Рассеяния в зеркальную компоненту (РЗК) появятся, если $\phi_0 < \alpha_2$ и здесь можно рассмотреть три основных случая для угла падения γ на нижнюю грань: $\gamma < \pi/2$, $\gamma = \pi/2$, $\gamma > \pi/2$, как показано на Рис. 25. Наиболее интересными являются случаи в) - когда в отражении участвует вся плоскость боковой грани, и случай б) - когда площадь боковых

граней, не участвующих в рассеянии, невелика, т.е. затенение мало. Заметим, что три грани могут рассеивать в зеркальную компоненту весь падающий свет, если выполняется условие отсутствия затенения tgγ-ctg $\alpha = a/d$, как видно из Рис. 26 при $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$.



Рис. 25. Отражение света от трапециидальной ячейки. *a*, d, α_1 и α_2 – параметры, определяющие геометрию ячейки; ϕ_0 - угол падения, γ - угол падения рассеянного света на нижнюю грань. На рисунке показаны две несимметричные ячейки: a) и г); и две симметричные ячейки: б) и в). Рассеяние в зеркальную компоненту выполняется для углов падения света ϕ_0 в следующих случаях: а) $\phi_0 = \alpha_1 + \alpha_2 - \pi/2$;

б) arc tg[a/2d+ctg α]+ π -2 α < ϕ_0 <2 α - $\pi/2$, с учетом затенения; в) ϕ_0 =2 α - $\pi/2$; и г) ϕ_0 = α_1 + α_2 - $\pi/2$.



Рис. 26. Затенение боковых граней: а) $x \le a/2$ - полное затенение; б) x > a/2 -тень на нижней части правой боковой грани; в) x = a - отсутствие тени; г) x > a - тень на верхей части правой боковой грани. Обозначения те же, что на Рис. 25. $x=d(tg \ \gamma - ctg \ \alpha)$. *x*-координата падения на нижнюю грань луча, отраженного от самого верхнего участка боковой грани; *a*-размер нижней грани элементарной трапецеидальной ячейки.

Таким образом, геометрия рельефа определяет область, где выполняется условие рассеяния (РЗК). Если *а* много больше d, то эта область мала, причем при одном и том же отношении *a*/d максимум рассеяния смещается в сторону бо'льших углов падения при увеличении угла наклона боковой грани α (Рис. 27).



Рис. 27. Зависимость области углов падения ϕ_0 , при которых выполняется условие рассеяния света в зеркальную компоненту, от отношения a/d и угла наклона боковой грани α , т.е. от геометрии элементарной трапециидальной ячейки СФМ. Сплошная линия соответствует максимальному значению рассеяния от трех граней.

Не рассматривая вопрос об индикатрисе рассеянного света, подробно остановимся на вопросе о величине площадей граней элементарной трапециидальной ячейки, участвующих в отражении и рассеянии света в зеркальную компоненту. Введем геометрические коэффициенты: k_1 для верхней грани, k_2 для нижней грани, k_3 и k_4 для боковых граней, учитывающие отражающие площади соответствующих граней. Площадь верхней грани уменьшается за счет растравливания и не зависит от угла падения света. Площадь нижней грани остается без изменения, однако, не вся ее поверхность участвует в отражении, благодаря затенению, поэтому коэффициент k_2 определяется из условий рассеяния и затенения.

Для боковой грани вводятся два коэффициента: k_3 (случай рассеяния тремя гранями, показанный на Рис. 25б) -для всей области углов падения φ_0 , показанных на Рис. 27. Коэффициент k_4 (случай рассеяния только двумя гранями, показанный на Рис. 25в) -для одного угла падения $\varphi_0=2\alpha$ - $\pi/2$.

Для случая, показанного на Рис. 256, построены зависимости k_2 . и k_3 как функции геометрии СФМ и угла падения света (Рис. 28). Из Рис. 28 видно, что чем меньше a/d, тем быстрее падает k_2 от 1 до 0 в области малых значений углов падения, при больших значениях коэффициент $k_2 > 0.8$, если $\varphi_0 < 80^\circ$.

При уменьшении α область существования тройных рассеяний сдвигается в сторону меньших значений углов падения света φ_0 . а значение k_3 в максимуме уменьшается. При больших значениях *a*/d, например, больше 3, максимальное значение k_3 практически не зависит от α и только сдвигается в сторону меньших φ_0 при уменьшении α , причем $k_{3max} \approx d/a$.



Рис. 28. Зависимость геометрического коэффициента k_3 от угла падения ϕ_0 для различных параметров рельефа: α и *a*/d. Коэффициент k_3 учитывает площади, отражающие свет в зеркальную компоненту, боковой гранью.
Для случая рассеяния только двумя гранями (Рис. 25в) построены зависимости геометрических коэффициентов от геометрии СФМ, как показано на Рис. 29. При увеличении угла α коэффициенты k_1 и k_4 возрастают, а коэффициент k_2 падает.



Рис. 29. Зависимость геометрических коэффициентов k_1 , k_2 и k_4 от параметров рельефа: *d/a* и α .

$$k_{1} = (1 - \frac{2d}{a}ctg\alpha), k_{2}^{2} = 1 - \frac{2d}{a}(tg\varphi - ctg\alpha) \bowtie k_{4}^{2} = \frac{d}{a}(1 - \frac{d}{a}ctg\alpha).$$

Коэффициент k_2 равен 1 для любых отношений d/a при углах наклона боковой грани α меньших 60°, это означает отсутствие затенения нижней грани, т.к. угол падения света при этом равен $\varphi_0=2\alpha-\pi/2\leq 30^\circ$. Коэффициент k_4 при малых значениях d/a примерно равен отношению d/a для любых углов α : $k_4 \approx d/a$, если d/a < 0.3. Коэффициент k_1 обращается в нуль, если d/a=0.5 tg α , т.е. боковая прямоугольная грань (k_1 =1) превращается сначала в трапецию ($k_1 < 1$), а затем в треугольник (k_1 =0), при этом верхняя грань уменьшается до точки, всегда оставаясь квадратом. Мы ограничимся рассмотрением только тех случаев, когда d/a<0.5 tg α , т.е. площадь верхней грани не равна нулю, $k_1 > 0$, поэтому коэффициенты k_4 построены только для значений d/a<0.5 tg α .

§ 4.3. Расчет угловой зависимости эллипсометрических параметров Y и ∆ при

отражении поляризованного света от элементарной трапециидальной ячейки СФМ

При рассмотрении угловой зависимости эллипсометрических параметров поляризованного света, отраженного от элементарной ячейки СФМ под углом, равным углу падения ϕ_0 , разобьем всю область значений ϕ_0 от 0° до 90° на несколько интервалов, каждый из которых будет характеризоваться наличием или отсутствием рассеянных лучей в зеркальной компоненте. Предыдущий анализ показал, что существует интервал значений углов падения, где возможно рассеяние света тремя гранями в зеркальную компоненту, а также существует один фиксированный угол для данной геометрии СФМ, при котором в зеркальную компоненту свет переотражается двумя боковыми гранями. В остальной области значений углов падения не выполняется условие попадания рассеянного света в зеркальную компоненту, куда попадает свет, отраженный только плоскими гранями: верхней и нижней. Совершенно очевидно, что интенсивность рассеянных лучей невелика и ее вклад в зеркальную компоненту мало заметен, кроме особых ситуаций, когда наблюдается минимум интерференции. Рассмотрим условия интерференции.

§ 4.3.1. Расчет условий интерференции в области малых углов падения

$0 < \phi_0 < 2\alpha + \operatorname{arc} \operatorname{tg} [a/2d + \operatorname{ctg} \alpha] - \pi$

В интервале малых значений углов падения света φ_0 от 0 до {2 α +arc tg [a/2d+ctg α]- π }, где не учитываются рассеянные лучи, суммарная волна E_{12} , будет являться результатом сложения двух гармонических колебаний E_1 и E_2 , отраженных верхней нижней гранями. Амплитудами этих колебаний не равны, т.к. в общем случае не равны геометрические коэффициенты k_1 и k_2 . Следовательно, минимум E_{12} не равен нулю при $\Delta_1 = \pi$.

$$\begin{split} E_{12} &= E_{1} + E_{2} = E_{0}R_{1}k_{1}e^{i(\delta_{1}+\omega t)} + E_{0}R_{2}k_{2}e^{i(\delta_{2}+\Delta_{1}+\omega t)} = \\ &= E_{0}R_{12}e^{i\omega t}\sqrt{k_{1}^{2} + k_{2}^{2} + 2k_{1}k_{2}\cos\Delta_{1}}\exp\left(iarctg\frac{k_{2}\sin\Delta_{1}}{k_{1}+k_{2}\cos\Delta_{1}}\right) = E_{0}R_{12}k_{12}e^{i\theta_{12}}e^{i\omega t}, \\ k_{12} &= \sqrt{k_{1}^{2} + k_{2}^{2} + 2k_{1}k_{2}\cos\Delta_{1}}, \\ \theta_{12} &= arctg\frac{k_{1}\sin\delta + k_{2}\sin(\delta + \Delta_{1})}{k_{1}\cos\delta + k_{2}\cos(\delta + \Delta_{1})}, \quad \delta_{1} = \delta_{2} = \delta, \\ R_{12} &= R_{1} = R_{2}, \end{split}$$

$$(35)$$

где E₀ -амплитуда падающего поля, R₁, R₂ и R₁₂ - коэффициенты Френеля, зависящие от угла падения ϕ_0 , в общем случае, коэффициенты Френеля R= $Re^{i\delta}$ –комплексные величины; k_1 и k_2 - геометрические коэффициенты, учитывающие площади граней, рассеивающих свет в зеркальном направлении (Рис. 29); Δ_1 - разность хода лучей, отраженных верхней и нижней гранями.

$$\Delta_{1} = 4\pi \frac{d}{\lambda} \cos \varphi_{0} \xrightarrow{k_{1}=k_{2}} \varphi_{unmep\phi} = \arccos \frac{\lambda n}{4d}, \quad n = 1, 3, 5...$$

$$\mathbf{k}_{12\min} = |\mathbf{k}_{1} - \mathbf{k}_{2}|.$$
(36)

Е₁₂ не обращается в нуль, поскольку $k_1 \neq k_2$. Для случая, когда $k_1 = k_2$, на рис.30 показано, на каких углах падения ϕ_0 можно наблюдать полное гашение света для данной глубины рельефа *d* при отражении только верхней и нижней плоскими гранями. При глубине рельефа меньше четверти длины волны (0.1582 мкм) полное гашение отсутствует.



Рис. 30. Зависимость угла падения $\phi_{интер\phi}$, при котором $\Delta_1 = \pi$, или 3π , от глубины рельефа *d*; $\lambda = 0.633$ мкм. На рисунке отмечены два угла $\phi_{интер\phi1}$ и $\phi_{интерф2}$ для глубины вытравленного рельефа *d*≈0.486 мкм без учета рассеянного света.

Состояние поляризации отраженной волны определяется отношением амплитуд *p*- и *s*-компонент электрического поля:

$$tg\Psi_{12}e^{i\Delta_{12}} = \frac{E_{12p}}{E_{0p}} \bigg/ \frac{E_{12s}}{E_{0s}} = \frac{R_{12p}k_{12}e^{i\theta_{12p}}}{R_{12s}k_{12}e^{i\theta_{12s}}} = \frac{R_{12p}}{R_{12s}}e^{i(\theta_{12p}-\theta_{12s})},$$
(37)

отсюда

$$\Psi_{12} = \Psi_0 e^{i(\delta_p - \delta_s)},$$

$$\Delta_{12} = \theta_{12p} - \theta_{12s}.$$
(38)

Следовательно, наличие рельефа *без учета рассеяния* приводит только к изменению условия интерференции E₁ и E₂ (35). Таким образом, в *отсутствие рассеянного света* наличие рельефа на поверхности вообще не изменяет состояние поляризации отраженного луча для модели трапециидальной ячейки.

4.3.2. Расчет условий интерференции в области рассеяний света *тремя* гранями arc tg $[a/2d+ctg \alpha]+\pi-2\alpha \le \phi_0 < \text{до } 2\alpha-\pi/2$

В интервале углов падения света от {arc tg $[a/2d+ctg \alpha]+\pi-2\alpha$ } до $2\alpha-\pi/2$, где существует волна, рассеянная тремя гранями в зеркальную компоненту, как показано на рисунке 256, суммарная отраженная волна будет суперпозицией волн E_{12} , отраженных верхней и нижней гранями, и волны E_3 . Запишем выражение для волны E_3 :

$$E_{3} = E_{0}R_{3}k_{3}e^{i(\Delta_{3}+\omega t)},$$

$$R_{3} = (R'_{3})^{2} \cdot R''_{3},$$
(39)

где k_3 – геометрический коэффициент, показанный на Рис. 28, R'_3 , -коэффициент отражения Френеля от боковых граней, угол падения на которые равен (α - ϕ_0), и R''_3 -то же самое для нижней грани, где угол падения равен [ϕ_0 +(π -2 α)], Δ_3 -разность хода рассеянных лучей по отношению к лучам, отраженным от верхней грани (Рис.31а). Нетрудно показать, разность фаз между лучом, отраженным от верхней грани, и лучом, рассеянным в зеркальную компоненту тремя гранями, не зависит от координаты падения луча. Для всех лучей, рассеянных тремя гранями, разность фаз постоянна и равна:

$$\Delta_3 = \frac{4\pi d}{\lambda} \bigg[\cos \varphi + \frac{a}{d} \sin \alpha \cos(\alpha - \varphi) \bigg]. \tag{40}$$

Тогда общее выражение суммарной волны E₁₃, отраженной от элементарной ячейки с трапециидальным рельефом для случая, показанного на Рис. 25б, запишется в виде в соответствующем диапазоне углов φ_0 :

$$E_{13} = E_{12} + E_3 = E_0 R_{12} k_{12} e^{i(\theta_{12} + \omega t)} + E_0 R_3 k_3 e^{i(\Delta_3 + \omega t)} =$$

$$= E_0 e^{i\omega t} (R_{12} k_{12} e^{i\theta_{12}} + R_3 k_3 e^{i\Delta_3}) = E_0 e^{i\omega t} R_{13} e^{i\theta_{13}},$$

$$R_{13} = \sqrt{(R_{12} k_{12})^2 + (R_3 k_3)^2 + 2R_{12} R_3 k_{12} k_3 \cos(\theta_{12} - \Delta_3))},$$

$$\theta_{13} = \operatorname{arctg} \frac{R_{12} k_{12} \sin \theta_{12} + R_3 k_3 \sin \Delta_3}{R_{12} k_{12} \cos \theta_{12} + R_3 k_3 \cos \Delta_3},$$

$$\pi - 2\alpha + \operatorname{arctg} \left[\frac{a}{2d} + \operatorname{ctg} \alpha\right] \leq \varphi_0 < 2\alpha - \frac{\pi}{2}.$$
(41)



Рис. 31. Определение разности хода рассеянных лучей, попадающих в зеркальную компоненту.

a)
$$\Delta_3 = \frac{2\pi}{\lambda} (BC + CD + DE + EF) = \frac{4\pi}{\lambda} [a \sin \alpha \cos (\alpha - \varphi) + d \cos \varphi]$$

6) $\Delta_4 = \frac{2\pi}{\lambda} (BC + CD + DE) = \frac{4\pi}{\lambda} [a \sin \alpha + 2d \cos \alpha] \sin \alpha$.

Используя (41), можно записать выражения для эллипсометрических углов как функции угла падения ϕ_0 и геометрии элементарной ячейки (*a*, *d*, α).

$$tg\Psi_{13} = \frac{E_{0}e^{i\omega t}R_{13p}}{E_{0}e^{i\omega t}R_{13s}} = \sqrt{\frac{\left(R_{12p}k_{12}\right)^{2} + \left(R_{3p}k_{3}\right)^{2} + 2R_{12p}R_{3p}k_{12}k_{3}\cos(\theta_{12} - \Delta_{3})}{\left(R_{12s}k_{12}\right)^{2} + \left(R_{3s}k_{3}\right)^{2} + 2R_{12s}R_{3s}k_{12}k_{3}\cos(\theta_{12} - \Delta_{3})}},$$

$$\Delta_{13} = \theta_{13p} - \theta_{13s} = arctg \frac{R_{12p}k_{12}\sin\theta_{12} + R_{3p}k_{3}\sin\Delta_{3p}}{R_{12p}k_{12}\cos\theta_{12} + R_{3p}k_{3}\cos\Delta_{3p}} - arctg \frac{R_{12s}k_{12}\sin\theta_{12} + R_{3s}k_{3}\sin\Delta_{3s}}{R_{12s}k_{12}\cos\theta_{12} + R_{3s}k_{3}\cos\Delta_{3s}},$$

$$\pi - 2\alpha + arctg \left[\frac{a}{2d} + ctg\alpha\right] \le \varphi_{0} < 2\alpha - \frac{\pi}{2}.$$

$$(42)$$

где R_{jp} и R_{js} -коэффициенты Френеля для *p* и *s* -поляризованного света. Выражения (42) можно использовать для расчета угловых зависимостей Ψ и Δ для света, отраженного от трапециидальной ячейки.

$$tg \Psi_{13} \xrightarrow{R_{13} = \min} = tg \Psi_{13\min},$$

$$tg \Psi'_{13} \xrightarrow{\varphi_{0} = \varphi_{E}} = tg \Psi_{13\min},$$

$$tg \Psi''_{13} \xrightarrow{k_{12} = \min} (24) = tg \Psi_{13\min},$$

$$tg \Psi'''_{13} = tg \Psi_{13\min} \xrightarrow{\theta_{12} - \Delta_{3} = \pi} \frac{R_{12p}k_{12} - R_{3p}k_{3}}{R_{12s}k_{12} - R_{3s}k}.$$
(42a)

В общем случае, $R_{12} < R_3$ [ср. (35) с (39)], поэтому вкладом рассеянных лучей в суммарную волну можно пренебречь, при этом уравнення (41) сведутся к виду (37) и (38). Интересно рассмотреть случаи, когда интенсивность рассеянных лучей сравнима с интенсивностью лучей, отраженных плоскими гранями (верхней и нижней). В рассматриваемом интервале углов падения влияние рассеянных лучей может быть заметным, только для значений *d*, сравнимых с *a*, т.е. когда геометрический коэффициент k_3 достаточно велик, а произведение $R_{12}k_{12}$ -мало. Как видно из анализа выражения (42), амплитуда Ψ_{13} принимает минимальное значение либо при условии (43), когда разность фазовых углов $\theta_{12} - \Delta_3 = \pi$ и R_{13} минимален; либо, либо вблизи угла Брюстера, где R_{12p} минимален или равен Кроме того, Ψ_{13}''' меняет знак вблизи $\phi_{\rm b}$ или $k_{12\rm min}$; а при $R_{12\rm s}k_{12} \approx R_{3\rm s}k_3$ угол Ψ_{13}''' устремляется к $\pi/2$.

$$\theta_{12} - \Delta_3 = \pi n, \quad n = 1, 2, 3,.$$
 (43)

Анализ выражения (42) в общем виде труден из-за громоздкости выражения для Δ₁₃. Легко показать, что фаза суммарной волны Δ₁₃ может иметь минимумы и максимумы:

$$tg\Delta_{13} = tg\left(\theta_{13p} - \theta_{13s}\right) = \frac{tg\theta_{13p} - tg\theta_{13s}}{1 + tg\theta_{13p} tg\theta_{13s}} = \\ = \frac{k_{12}k_{3}\sin(\theta_{12} - \Delta_{3})(R_{12p}R_{3s} - R_{12s}R_{3p})}{k_{12}^{2}R_{12p}R_{12s} + k_{3}^{2}R_{3p}R_{3s} + (R_{12p}k_{12}R_{3s} - R_{12s}R_{3p})\cos(\theta_{12} - \Delta_{3})}, \\ \begin{cases} tg\Delta_{13}' - \frac{\theta_{12} - \Delta_{3} = \pi/2}{k_{3}^{2}R_{12p}} = \frac{k_{12}k_{3}(R_{12p}R_{3s} - R_{12s}R_{3p})}{k_{12}^{2}R_{12p}R_{12s} + k_{3}^{2}R_{3p}R_{3s}}, \\ tg\Delta_{13}'' - \frac{\theta_{12} - \Delta_{3} = \pi/2}{k_{3}R_{3p}R_{3s} + R_{3p}R_{12s}\cos(\Delta_{3} - \theta_{12})} \\ k_{3}R_{3p}R_{3s} + R_{3p}R_{12s}\cos(\Delta_{3} - \theta_{12}), \\ tg\Delta_{13}'' - \frac{\theta_{12} - \Delta_{3} = \pi/2}{k_{12}p^{-0}} = -\frac{k_{12}R_{12s}}{k_{3}R_{3p}} \\ tg\Delta_{13}'' - \frac{\theta_{12} - \Delta_{3} = \pi/2}{k_{12p}^{-0}} = -\frac{k_{12}R_{12s}}{k_{3}R_{3s}}, \\ tg\Delta_{13}'' - \frac{\theta_{12} - \Delta_{3} = \pi/2}{k_{12p}^{-0}} = -\frac{k_{12}R_{12s}}{k_{3}R_{3s}}, \\ \pi - 2\alpha + arctg\left[\frac{a}{2d} + ctg\alpha\right] \le \varphi_{0} < 2\alpha - \frac{\pi}{2}, \end{cases}$$

$$tg\Delta_{13} = \frac{k_{12}k_{3}(R_{12p}R_{3s} - R_{12s}R_{3p})}{k_{12}R_{12p}R_{12s} + k_{3}R_{3p}R_{3s}}, \quad \varphi_{0} > \varphi_{E} \to \delta_{p} = \delta_{s} = \pi, \quad (44a)$$

$$tg\Delta_{13} = \frac{k_{12}k_{3}(R_{12p}R_{3s} + R_{12s}R_{3p})}{k_{12}R_{12p}R_{12s} - k_{3}R_{3p}R_{3s}}, \quad \varphi < \varphi_{E}, \delta_{p} = 0, \, \delta_{s} = \pi. \quad (446)$$

<u>Основные выводы к § 4.3.2</u>. Учет света, рассеянного тремя гранями, приводит к искажению угловых зависимостей $Y(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$.

1. Минимальное значение Y приходится на угол падения, не равный углу Брюстера,

поскольку в выражении (42) для tg Y_{13} минимум числителя равен (R_{12p} - R_{3p} k_3).

- Зависимость Y(φ₀) может иметь не один, а несколько экстремумов; когда амплитуды волн, отраженных плоскими гранями и рассеянных боковыми гранями, приблизительно равны по величине.
- Δ(φ₀) может иметь максимумы и минимумы только при малых отношениях a/d, т.е. для глубоких ячеек.
- Область существования рассеяния тремя гранями мала при больших отношениях a/d (Рис. 27) и может не содержать угол Брюстера.

§ 4.3.3. Расчет условий интерференции в области рассеяния света в зеркальном

направлении двумя боковыми гранями трапециидальной ячейки

$$\phi_0=2\alpha-\pi/2$$

Рассмотрим последний случай, показанный на Рис.25в, - угол падения света, равный $\phi_0=2\alpha$ - $\pi/2$, при котором наблюдается рассеяние двумя гранями в зеркальную компоненту.

Запишем для этого случая волну Е4, рассеянную двумя гранями:

$$E_{4} = E_{0}R_{4}^{2}k_{4}^{2}e^{i(\Delta_{4}+\omega t)},$$

$$\Delta_{4} = \frac{4\pi d\sin\alpha}{\lambda}(2\cos\varphi + \frac{a}{d}\sin\alpha],$$

$$\varphi_{0} = 2\alpha - \frac{\pi}{2},$$
(45)

где k_4 -геометрический коэффициент (Рис.29), R₄ коэффициент отражения от боковых граней, угол падения на которые равен ($\pi/2 - \alpha$), и Δ_4 - разность хода лучей (Рис.31б).

Суммарная волна, отраженная в зеркальную компоненту, Е₁₄ будет иметь вид:

$$E_{14} = E_{12} + E_4 = E_0 R_{12} k_{12} e^{i(\theta_{12} + \omega r)} + E_0 (R_4 k_4)^2 e^{i(\Delta_4 + \omega r)} =$$

$$= E_0 e^{i\omega r} (R_{12} k_{12} e^{i\theta_{12}} + (R_4 k_4)^2 e^{i\Delta_4}) = E_0 R_{14} e^{i(\theta_{14} + \omega r)},$$

$$R_{14} = \sqrt{(R_{12} k_{12})^2 + (R_4 k_4)^4 + R_{12} k_{12} (R_4 k_4)^2 \cos(\theta_{12} - \Delta_4))},$$

$$\theta_{14} = \operatorname{arctg} \frac{R_{12} k_{12} \sin \theta_{12} + (R_4 k_4)^2 \sin \Delta_4}{R_{12} k_{12} \cos \theta_{12} + (R_4 k_4)^2 \cos \Delta_4},$$

$$\varphi_0 = 2\alpha - \frac{\pi}{2}.$$
(46)

Эллипсометрические углы Y_{14} и Δ_{14} , характеризующие состояние поляризации волны E_{14} , запишем следующим образом:

$$tg \Psi_{14} e^{i\Delta_{14}} = \frac{R_{14p}}{R_{14s}} e^{i(\theta_{14p} - \theta_{14s})},$$

$$tg \Psi_{14} = \sqrt{\frac{\left(R_{12p}k_{12}\right)^2 + \left(R_{4p}k_4\right)^4 + R_{12p}R_{4p}^2k_{12}k_4^2\cos(\theta_{12p} - \Delta_4)\right)}{\left(R_{12s}k_{12}\right)^2 + \left(R_{4s}k_4\right)^4 + R_{12s}R_{4s}^2k_{12}k_4^2\cos(\theta_{12s} - \Delta_4)\right)}}$$

$$\Delta_{14} = \arctan g \frac{R_{12p}k_{12}\sin\theta_{12p} + \left(R_{4p}k_4\right)^2\sin\Delta_4}{R_{12p}k_{12}\cos\theta_{12p} + \left(R_{4p}k_4\right)^2\cos\Delta_4} - \arctan g \frac{R_{12s}k_{12}\sin\theta_{12s} + \left(R_{4s}k_4\right)^2\sin\Delta_4}{R_{12s}k_{12}\cos\theta_{12s} + \left(R_{4s}k_4\right)^2\cos\Delta_4},$$

$$\varphi_0 = 2\alpha - \frac{\pi}{2}.$$

$$(47)$$

Опуская подробный анализ (46-47) приведем только основные выводы к разделу 4.3.3.

- 1. Вся площадь двух боковых граней участвует в рассеянии.
- 2. Благодаря малости $(R_4k_4)^2$ вклад рассеянных лучей в суммарную волну заметен лишь только, когда $R_{12p}k_{12}$ мало и сравнимо по величине с $(R_{4p}k_4)^2$. Такая ситуация возникает, если:
 - а) осциллирующий множитель k_{12} =min при выполнении условия интерференции (36);
 - б) угол падения света равен или близок к углу Брюстера, т.е. R_{12p}≈ 0 или R_{12p}=R_{12pmin};
- 3. Вклад рассеянных лучей приводит к сдвигу Y_{min} от положения угла Брюстера и изменению самой величины Y_{min}. При малых глубинах рельефа *d* геометрический коэффициент k₄ мал и величина Y незначительно отличается от Y₀ для гладкой поверхности.
- 4. Если $\cos(\theta_{12s} \theta_{4s}) \approx -1$ и $\cos(\theta_{12p} \theta_{4p}) = \pm 1$, и в зависимости $\mathbf{Y}_{14}(\varphi_0)$ появляются экстремумы, аналогичные (44a, 44б).

5. Геометрические коэффициенты k_1 и k_4 , учитывающие величину площади рассеивающих граней, сильно зависят от отношения a/d, таким образом, что чем меньше это отношение, тем больше поправки к **Y** и Δ .

§ 4.3.4. Расчет условий интерференции в области больших углов падения

$\phi_0 > 2\alpha - \pi/2$

В диапазоне углов падения φ₀>2α-π/2 рассеяние в зеркальную компоненту *отсутствует* для трапециидальной ячейки и поляризационные характеристики света, отраженного СФМ поверхностью, будут аналогичны выражениям, полученным для интервала малых значений углов падения.

§4.3.5. Расчет условий интерференции при наличии ступеньки или треугольной царапины

От общей задачи с элементарной трапециидальной ячейкой можно перейти к некоторым частным случаям, например, рассмотреть влияние ступеньки или треугольной царапины.

Выше было показано, что *в отсутствие рассеянного света* наличие рельефа на поверхности вообще не изменяет состояние поляризации отраженного луча для модели трапециидальной ячейки. Наличие ступеньки на поверхности, согласно формулам (37) и (38), приведет к изменению только параметра Δ , но, если можно положить $k_1 \approx k_2$, то из (35 -36) следует: $\Psi_{12} \approx \Psi_0$. Следовательно, одиночная ступенька на большой гладкой поверхности вносит незначительные изменения и $\Delta_{12} \approx \Delta_0$.



Аналогичный результат получается и в случае треугольной царапины. Рассеянный свет попадет в зеркальную компоненту отраженного света только при условии, что угол падения равен

 $\varphi = \alpha_1 + \alpha_2 - \pi/2$ и $\alpha_2 > \pi/2 - \alpha_1$ (. Если k_1 -геометрический коэффициент для верхней грани, а k_2 учитывает площадь рассеивающих граней и $k_1 \gg k_2$, т.е. одиночная царапина на большой гладкой поверхности, тогда $k_{12} \approx k_1$ и из предыдущего анализа согласно выражениям (35) $E_{12} \approx E_1$. Из (45) $E_1 \gg E_4$, из (46) $E_{14} \approx E_1$, и $\Delta_{14} \approx \Delta_0$, т.е. влиянием одиночной царапины можно пренебречь, если глубина ее много меньше длины волны.

Однако, ситуация резко изменится, если царапин или ступенек будет достаточно много и величиной k_2 уже нельзя будет пренебречь.

§ 4.3.6. Влияние параметров ячейки трапециидального рельефа на *расчетные* зависимости

$\Delta(\phi_0)$ и $\Psi(\phi_0)$

Используя выражения (35) - (46), можно рассчитать эллипсометрические параметры Ψ и Δ рельефной поверхности для реального образца. Оговорим трудности, которые нас ожидают при расчете. Они связаны с точностью задания параметров рельефа: *a*, *d*, α . Технология изготовления образцов обеспечивает ширину ячейки, *a* с точностью ~0.2 мкм; глубина рельефа *d* измеряется с точностью ±0.02 мкм, угол α не измерялся. Поскольку при определении разности хода Δ_1 , Δ_2 , Δ_3 и геометрических коэффициентов k_1 , k_2 , k_3 , и k_4 используются отношения d/λ , a/λ , a/d или d/a и α , поэтому необходимо рассмотреть влияние этих параметров на результаты расчета. С этой целью были выполнены три серии расчетов для *кварцевой* поверхности, чтобы выяснить влияние небольших вариаций:

- размера ячейки а;
- глубины рельефа *d*,
- угла наклона боковой грани α.
- На Рис. 32 приведены расчетные зависимости $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ для образца на *кварце*, глубина рельефа которого d = 0.3060 мкм, угол $\alpha = 75^\circ$, а размер *а* варьируется от 2.0 до

2.5 мкм. Область углов φ_0 , где учитывается рассеянный свет, составляет примерно 15°, верхняя граница этой области равна ~60°, а нижняя граница изменяется от 44.2° до 47.1° для а =2,0 мкм и 2,5 мкм, соответственно. Расчетные Ψ и Δ меняются только в этой области, на границах области могут изменяться скачком, а вне этой области $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ не отличаются от поляризационных характеристик гладкой поверхности, не имеющей рельефа. На Рис. 32-с показано, что изменение *размера ячейки а* даже на 0,01 мкм приводит к изменению Δ на несколько градусов вблизи φ_6 .

- Варьирование параметра *d* в пределах точности его определения при расчете зависимостей Δ(φ₀) и Ψ(φ₀) для образца с размером *a*=2.5 мкм и углом наклона боковой грани α=75° приводит к изменению Δ на десятки градусов вблизи угла интерференции, который также зависит от *d*. На Рис. 33 приведены расчетные зависимости Δ(φ₀) и Ψ(φ₀) для *d*₁=0.2860 мкм (φ_{интерф1} =56.4°), *d*₂ =0.3060 мкм (φ_{интерф2} =58.8°) и *d*₃=0.3260 мкм ((φ_{интерф3} =60.9°). Ширина области углов падения, где учитывается рассеянный свет, и ее нижняя граница, как следует из (40) и (41), мало меняются. Верхняя граница углов падения постоянна. Внутри этой области изменяются не только величины Δ и Ψ, но и появляются дополнительные экстремумы. Изменяется величина и положение минимума угла Ψ.
- Влияние параметра α на расчетные Δ(φ₀) и Ψ(φ₀) видно из Рис. 34 для образца с размерами *a*=2.5 мкм и *d*=0.3060 мкм. Наклон боковой грани трапециидальной ячейки варьировался от α₁=73° до α₃=79°. Во-первых, ширина области, где учитывается рассеянный свет, слабо зависит от α и практически сохраняется для всех расчетных зависимостей. Нижние и верхние границы, соответствующие четырем образцам с различными углами наклона боковых граней, этой области смещаются, как показано на Рис. 34. Во-вторых, также как и в предыдущем случае, появляются дополнительные

экстремумы в $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$. Следует обратить внимание на тот факт, что в этой области наличие рельефа может очень мало менять поляризационные характеристики отраженного от него света для углов падения, удаленных от "особых точек" ($\varphi_{\rm b}$ и $\varphi_{\rm uhrep}$). Например, на Рис. 34 зависимость $\Psi(\varphi_0)$ для $\varphi > 63^\circ$ мало отличается от аналогичных зависимостей гладкой поверхности.

Фактически на Рис. 32 -Рис. 34 можно проследить влияние величины разности хода лучей Δ_3 на угловые зависимости Δ и Ψ , потому что Δ_3 наиболее чувствительна к изменению параметров геометрии рельефа трапециидальной ячейки, как видно из (40), где $a \gg \lambda$, и $d \leq \lambda$.

Из всех приведенных расчетных графиков к экспериментальному образцу (2.5 СФМ-9, показанному на Рис.7-5 из Приложения V), параметры которого заложены в основу расчета, ближе всего Рис. 32 (6). В пределах точности задания параметров расчет позволяет получить хорошее качественное согласие модели и эксперимента.

Для образцов с размером a = 25 мкм несоответствие модели и эксперимента состоит, прежде всего, в том, что узкая область углов падения ϕ_0 , где существует рассеяние (41 и 45), может не попадать в область интерференции, тем более двух пиков (как на рис.6-10 - рис.6-13 из Приложения IV). Следовательно, строго заданные границы области рассеяния для модели трапециидального рельефа не соответствуют реальному положению вещей. Это служит подтверждением нашего предположения, что боковые грани не являются плоскими. Вопрос об отражении от рельефа с цилиндрическими боковыми гранями рассмотрен отдельно.



86

Рис. 32. Влияние **размера** *а* трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности **кварца**: а) - зависимость $\Psi(\varphi_0)$: б)- зависимость $\Delta(\varphi_0)$ и с) - зависимость $\Delta(\varphi_0)$ для очень малых изменений размера *a*, сравнимых с точностью изготовления образцов. Величины *a* варьируются от 2.0 до 2.5 мкм и показаны в Таблице к Рис. 32. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя граница перемещается от 44.2° до 47.1° для *a*=2 мкм и *a*=2.5 мкм, соответственно.

Размер ячейки	a_1	a_2	a_4	<i>a</i> 5	<i>a</i> ₆	<i>a</i> ₃₋₁	a ₃₋₂	a 3-3
мкм (Рис. 32)	2	2.1	2.3	2.4	2.5	2.20	2.21	2.22
нижняя граница фо	44.2°	44.8	46.0°	46.5°	47.1°	45.4°		
верхняя граница φ ₀	59.8°	60.0°	60.2°	60.4°	60.5°	60.1°		
Глубина рельефа <i>d</i> = 0.306 мкм								
наклон боковой грани α=75°; λ=0.63 мкм								

Таблица к	Рис.	32.
-----------	------	-----



Рис. 33. Влияние глубины рельефа *d* трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности кварца: а) - зависимость $\Psi(\varphi_0)$: б)зависимость $\Delta(\varphi_0)$. Величины *d* варьируются и показаны в Таблице к Рис. 33. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя (1[']-3') граница φ_0 перемещается от 46.7° до 47.9° для *d*=0.286 мкм и *d*=0.326 мкм.

	7	1	7				
I лубина рельефа в мкм	d_1	d_2	d_3				
	0.286	0,306	0,326				
нижняя граница фо	46.7°	47.3°	47.9°				
верхняя граница ϕ_0	60.3°	60.3°	60.3°				
Финтерф	56.4°	58.8°	60.9°				
Размер ячейки а=2.5 мкм (Рис. 33)							
наклон боковой грани $\alpha = 75^{\circ}; \lambda = 0.63$ мкм							

Таблица к Рис. 33.



Рис. 34. Влияние наклона боковой грани α трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности кварца: а) - зависимость $\Psi(\phi_0)$: б)зависимость $\Delta(\phi_0)$. Величины α варьируются и показаны в Таблице к Рис. 34. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя (1' -4') и верхняя (1"-4") границы ϕ_0 перемещаются, как показано в Таблице к Рис. 34.

Таблица к Ри	ic. 34.									
		α_1	α_2	α_3	α_4					
	утол наклона обковой грани в градусах	73	75	77	79					
	нижняя граница фо	42.6°	47.4°	50.8°	54.7°					
	верхняя граница φ ₀	56.1°	59.8°	63.7°	67.8°					
	ширина области φ ₀	13.5°	12.4°	12.9°	13.1°					
	Размер ячейки <i>a</i> =2.5 мкм (Рис. 34) Глубина рельефа <i>d</i> =0.306 мкм; λ=0.63 мкм									

Таким образом, случайная фазовая маска с трапециидальным профилем как модель шероховатой поверхности позволяет точно вычислить эллипсометрические параметры отраженного света, учесть влияние затенения и выявить ситуации, когда в угловых зависимостях появляются экстремумы.

§ 4.4. Отражение света от ячейки случайной фазовой маски с цилиндрическими

боковыми гранями

В настоящем параграфе приведены результаты расчета $Y(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$ поляризационных характеристик света, отраженного от поверхности с рельефом случайной фазовой маски (СФМ), используемой в качестве модели шероховатой поверхности. При расчете учтены: а) кривизна боковых граней элементарной ячейки СФМ, б) изменение скважности дефектов за счет ухода размеров в процессе получения рельефа СФМ, в) наличие нескольких сортов "дефектов" разной геометрии.

Поскольку наши измерения проведены на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ и касаются состояния поляризации света, отраженного под углом, равным углу падения, иными словами, отраженного в зеркальном направлении, то необходимо найти условия, при которых рассеянный свет попадет на детектор эллипсометра, т.е. свет будет рассеян в зеркальном направлении.

§ 4.4.1. Анализ условий максимального влияния рассеянного света.

Случайная фазовая маска, предложенная нами ранее [49, 51-52] в качестве модели шероховатой поверхности, представляет собой поверхность со случайно распределенными дефектами, одинаковыми по высоте и ориентации на плоскости, но образующими массивы произвольной конфигурации. Одиночный дефект в идеальном случае должен быть параллелепипедом с высотой *d* и квадратным основанием со стороной *a*. Однако,

технологические условия изготовления рельефной поверхности травлением через специальный шаблон приводили к искажению формы боковых граней. В первом приближении мы считали, что боковые грани дефектов при травлении остаются плоскими, но наклонены к основанию под некоторым углом. Тогда элементарная отражающая ячейка, образованная двумя соседними дефектами в строке СФМ, имеет трапециидальный профиль. Особенности отражения поляризованного света от <u>трапециидальной ячейки</u> рассмотрены в предыдущем разделе и ранее в [49, 51] и выявлен недостаток модели, заключающийся в том, что существует *ограниченная* область углов падения света ϕ_0 , внутри которой возможно рассеяние в зеркальную компоненту света, падающего на боковые грани.

Сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей эллипсометрических параметров **Y** и Δ рельефной поверхности от угла падения света φ₀ показало, что в отличие от экспериментальных зависимостей расчетные зависимости имеют *резкие* границы области рассеяния, за пределами которых, наличие рельефа не сказывается [52].

На Рис.35 приведены для сравнения расчетные и экспериментальные зависимости Y(ϕ_0) и

Δ(φ₀) для поверхности кварца с трапециидальным рельефом СФМ. Такое качественное совпадение расчета и эксперимента вынуждает нас рассмотреть более сложный случай: отражение света от элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями.

При травлении рельефа в плавленом кварце, благодаря изотропности материала, профиль боковой грани будет дугой окружности радиуса *r*, равного глубине травления *d*. Для иллюстрации на Рис. 36 приведена фотография поперечного среза канавок, вытравленных в кварце через хромовую маску. Очень важно, что профиль элементарной ячейки остается симметричным.

90



Рис. 35. 1)- экспериментальные (*d*=0.306 мкм и *a*=2.5 мкм) и 2)- расчетные зависимости поляризационных углов Y и Δ для света, отраженного от поверхности плавленого *кварца* с рельефом СФМ. Длина волны λ=0.633 мкм. Расчетная геометрия СФМ трапециидальной ячейки: *d*=0.306мкм, *a*=2.3 мкм и α=75°. Углы падения φ₀₁ и φ₀₂ ограничивают область, где свет, рассеянный боковыми гранями, попадает в зеркальную компоненту. На вставке показана зависимость Δ(φ₀) около φ₀₂.



Рис. 36. а) - Схема, иллюстрирующая технологию получения рельефа СФМ, и б) - фотография профиля рельефа, вытравленного в кварце, с размерами *a* =60 мкм, *d* =30 мкм.

Рассмотрим отражение параллельного пучка света, падающего на боковую грань такой канавки. Как видно из рисунка 37, угол падения θ_i для *i*-того луча на боковую грань зависит от координаты и равен $\theta_i = \alpha_i \cdot \phi_0$, где α_i -угол наклона к горизонту касательной дуги окружности в точке падения. Кроме того, сильно расходящиеся отраженные лучи не имеют

общего фокуса. Поскольку нас интересуют только те лучи, которые могут участвовать в рассеянии в зеркальную компоненту, то ограничимся рассмотрением отражения от дуги AB на Рис. 37.



Рис.37. Параллельный пучок света, падающий на цилиндрическую боковую грань, отражается сильно расходящимся пучком, не имеющим общего фокуса.



Рис. 38. Для любого угла падения φ_{0i} существует луч, отраженный параллельно оси X. α_iугол наклона к горизонту касательной дуги окружности в точке падения.

Очевидно, что из точки В луч М (10) отразится навстречу падающему и α_i(B)=α₁₀=φ_{0i}. Из точки С луч 5 отразится параллельно донышку ячейки (оси X) и

$$\alpha_{i}(C) = \alpha_{5} = \pi/2 + \varphi_{0i}/2,$$
 (48)

а точка *С* делит дугу АВ пополам, т.к. ∠АОВ= 2 ∠ АОС для выбранного угла падения.

Легко показать, что для любого угла падения φ_{0i} существует точка C_i, от которой луч отражается параллельно оси X, как показано на Рис. 38. Координата точки C_i определяется с учетом равенства углов: α_{Ci}= ∠DOC_i:

$$C_{i}\left[d\cos\frac{90^{\circ}-\varphi_{0i}}{2}, d\sin\frac{90^{\circ}-\varphi_{0i}}{2}\right]$$
(49)

Луч, отраженный из *C*_i, пересечется в точке *P*_i с лучом M, рассеянным в обратном направлении и отраженным нормально к боковой грани,

$$P_{i}\left[d\sin\frac{90^{\circ}-\varphi_{0i}}{2}tg\varphi_{0i}, d\sin\frac{90^{\circ}-\varphi_{0i}}{2}\right]$$
(50)

и с лучом, отраженным от А, в точке Q_i с координатами:

$$Q_{i}\left[d(1-\sin\frac{90^{\circ}-\varphi_{0i}}{2}tg\varphi_{0i}), d\sin\frac{90^{\circ}-\varphi_{0i}}{2}\right]$$
(51)

Лучи, проходящие через центр О и точку А, пересекутся при отражении в точке M_i, лежащей на перпендикуляре к ОА, проходящем через середину ОА. Как видно из Рис.38, при увеличении угла падения ϕ_{0i} точки P_i и Q_i стремятся к точке M_i.

Рассмотрим условия, при которых свет, рассеянный боковыми гранями ячейки, попадает в зеркальную компоненту, регистрируемую фотоприемником эллипсометра ЛЭФ-ЗМ, т.е. условия, когда угол падения ϕ_0 равен углу отражения ϕ_i .

$$\phi_0 = \phi_i$$
 (52)

Обозначим углы падения на первую и вторую боковые грани θ_{1i} и θ_{2i} тогда

$$\theta_{1i} = \alpha_{1i} - \varphi_0,$$

$$\theta_{2i} = \alpha_{2i} - \varphi_i = \alpha_{2i} - \varphi_0,$$
(53)

а угол падения на нижнюю грань γ_{1i} и угол отражения от нее γ_{2i} , причем $\gamma_{1i} = \gamma_{2i}$.

$$\gamma_{1i} = \pi + \varphi_0 - 2\alpha_{1i} \gamma_{2i} = \pi + \varphi_i - 2\alpha_{2i} = \pi + \varphi_0 - 2\alpha_{2i}$$
(54)

Следовательно, условие рассеяния света в зеркальную компоненту выполняется только, когда

$$\alpha_{1i} = \alpha_{2i} \tag{55}$$

Очевидно, что (55) - это условие симметрии ячейки для отраженных лучей. Из условия (55) также ясно, что для выбранного угла падения φ_{0i} отраженный луч либо параллелен нижней грани при $\gamma_{1i} = \gamma_{2i} = \pi/2$ (луч С на Рис. 39), либо отраженные боковыми гранями лучи образуют равнобедренный треугольник, вершина которого лежит в середине нижней грани (луч Т на Рис. 39).

Из рисунка 39 легко записать условие симметрии луча Т для произвольной ячейки СФМ, ширина донышка которой *b* кратна *a*:

$$\frac{b}{2}ctg\gamma_T = d - [y_T + x_T ctg\gamma_T],$$

$$b = na, \quad n = 1, 2, 3, ..$$
(56)

где x_T и y_T - координаты точки падения луча *T* на боковую грань, γ_T - угол падения на нижнюю грань.

$$x_{T} = d \sin \alpha_{T},$$

$$y_{T} = d \cos \alpha_{T},$$

$$\gamma_{T} = \pi + \varphi_{0} - 2\alpha_{T}$$

$$tg \gamma_{T} = \frac{\sin \alpha_{T} + b/2d}{1 - \cos \alpha_{T}}.$$
(57)
(57)
(57)
(57)
(57)

Из (56) и (57) получим:

Для большей части наших экспериментов отношение
$$b/d \gg 1$$
 и, как следует из (58), $\gamma_T \rightarrow \pi/2$,

а из (54)

$$\alpha_{Ti} \to \frac{\varphi_{0i}}{2} + \frac{\pi}{4} \,. \tag{59}$$



Рис. 39. Рассеяние параллельного пучка света элементарной ячейкой с цилиндрическими боковыми гранями в зеркальную компоненту можно рассматривать как отражение от двух точечных источников света, расположенных в точках F и F'.

Сравнивая (48) и (59) получим

$$\alpha_{Ti} \to \alpha_{Ci} \tag{59a}$$

Таким образом, для большей части наших экспериментов точка F на Puc.39 является практически общим фокусом параксиальных пучков света, отраженных от площадок dS_C и dS_T . Для определения координат точки F обратимся к Puc.40. Вычислим координаты точки пересечения лучей, отраженных из точек G и H, симметрично отстоящих от C.

Пусть,

$$\alpha_{c} = 45^{\circ} + \varphi_{0i} / 2, \qquad \gamma_{c} = \pi / 2,$$

$$\alpha_{G} = \alpha_{c} + \alpha_{1}, \qquad (60) \qquad \text{тогда}, \rightarrow \qquad \gamma_{G} = \pi / 2 - 2\alpha_{1}, \qquad (61)$$

$$\alpha_{H} = \alpha_{c} - \alpha_{1} \qquad \gamma_{H} = \pi / 2 + 2\alpha_{1}.$$

Координаты точек С, G, H равны:

$$x_{c} = d \sin \alpha_{c}, \quad y_{c} = d \cos \alpha_{c},$$

$$x_{G} = d \sin \alpha_{G}, \quad y_{G} = d \cos \alpha_{G},$$

$$x_{H} = d \sin \alpha_{H}, \quad y_{C} = d \cos \alpha_{H}.$$

(62)

Очевидно, что JE= EK, т.к. углы при вершине F равны $2\alpha_1$: \angle JFE= \angle KFE= $2\alpha_1$.

Отсюда

$$y_{K} = y_{G} + x_{G} tg 2\alpha_{1},$$

$$y_{J} = y_{H} - x_{H} tg 2\alpha_{1},$$
 (63) $x_{F} = \frac{y_{K} - y_{J}}{2} ctg 2\alpha_{1}.$ (64)

$$y_{F} = \frac{y_{K} + y_{J}}{2},$$

После подстановки (48-51) в (52) и преобразований получим координаты фокуса F:

$$x_{F} = d \sin \alpha_{C} \frac{1}{2 \cos \alpha_{1}};$$

$$y_{F} = d \cos \alpha_{C} \frac{\cos \alpha_{1}}{\cos 2\alpha_{1}}.$$
(65)



Рис. 40. Допустимый угол $2\alpha_1$ для луча из точки С.



Рис. 41. Влияние апертуры приемника эллипсометра на величину рассеивающей площадки для луча С, параллельного донышку ячейки.

Из (65) - следует что, во-первых, для крайних лучей, дающих точки P_i и Q_i на Рис.38, когда $\alpha_1 = 45^\circ + \varphi_0/2$, координаты точки M_i [d/2; dctg φ_{0i} /2]; во-вторых, точка пересечения лучей, отраженных в окрестности ($\alpha_C \pm \alpha_1$) от точки C, приближенно определяется координатами:

$$\alpha_{1} \ll \alpha_{C} = \frac{\varphi_{0i}}{2} + 45^{\circ},$$

$$x_{F} = \frac{d}{2}\sin\alpha_{C} \approx \frac{\sqrt{2}}{2}d\left(\cos\frac{\varphi_{0i}}{2} + \sin\frac{\varphi_{0i}}{2}\right),$$

$$y_{F} \approx \frac{d}{2}\cos\alpha_{C} = \frac{\sqrt{2}}{2}d\left(\cos\frac{\varphi_{0i}}{2} - \sin\frac{\varphi_{0i}}{2}\right).$$
(65a)

Иными словами, точка пересечения параксиальных лучей F делит отрезок CC₁ (на Рис. 40) пополам, причем для $\phi_0 \ge 70^\circ$, $X_F \approx d/2$. Кроме того, для большей части наших экспериментов при b \gg d , как видно из (47)-(47a), точка F, действительно, является практически общим фокусом для пучков света, отраженных от dS_C и dS_T на Рис.39. Отражение от второй боковой

грани в зеркальную компоненту от площадок dS'_{C} и dS'_{T} можно рассматривать как отражение света от двух точечных источников, расположенных в фокусах F и F', как показано на Рис.39, координаты которых зависят от глубины ячейки d и угла падения света φ_{0i} . Точные координаты F заданы (65), а координаты F' следующими выражениями:

$$x_{F'} = x_F = \frac{d}{2} \frac{\sin \alpha_C}{\cos \alpha_1},$$

$$y_{F'} = 2d - y_F = d \left(1 - \cos \alpha_C \frac{\cos \alpha_1}{\cos 2\alpha_1} \right),$$
(66)

или с учетом условий эксперимента

$$\begin{aligned} x_{F'} &\simeq \frac{d}{2} \sin \alpha_C \approx \frac{\sqrt{2}}{2} d \left(\cos \frac{\varphi_{0i}}{2} + \sin \frac{\varphi_{0i}}{2} \right), \\ y_{F'} &\approx d \left(1 - \cos \alpha_C \right) = \frac{\sqrt{2}}{2} d \left(\sqrt{2} - \cos \frac{\varphi_{0i}}{2} + \sin \frac{\varphi_{0i}}{2} \right). \end{aligned}$$
(66a)

Влияние апертуры приемника эллипсометра ЛЭФ-ЗМ на интенсивность сигнала, принимаемого от расходящегося пучка скажется прежде всего на величине отражающих площадок dS_C и dS_T (Рис.39). Из рисунка 41 определим размер дуги, dS_C , участвующей в рассеянии света в зеркальном направлении, и допустимый угол α_1 в (60) для расходящегося отраженного пучка:

$$dS_{c} = \frac{D}{2L} \cdot \frac{d^{2}}{b + 3d/2},$$

$$\alpha_{1} = \frac{D}{4L} \cdot \frac{d}{b + 3d/2},$$
(67)

или при b ≫ d

$$dS_c \simeq Dd^2/2Lb,$$

$$\alpha_1 \approx Dd/4Lb.$$
(67a)

Следовательно, в зеркальную компоненту отразятся лучи, для которых угол α_i, образуемый осью X и касательной в точке падения, удовлетворяет неравенству:

$$\begin{bmatrix} \alpha_{c} - \alpha_{1} \end{bmatrix} < \alpha_{i} < \begin{bmatrix} \alpha_{c} + \alpha_{1} \end{bmatrix},$$

$$u\pi u \quad \left[\frac{\varphi_{0i}}{2} + 45^{\circ} - \frac{D}{4L} \cdot \frac{d}{b + 3d/2} \right] < \alpha_{i} < \left[\frac{\varphi_{0i}}{2} + 45^{\circ} + \frac{D}{4L} \cdot \frac{d}{b + 3d/2} \right], \quad (68)$$

$$ec\pi u \quad b \gg d, \quad mo \left[\frac{\varphi_{0i}}{2} + 45^{\circ} - \frac{Dd}{4Lb} \right] < \alpha_{i} < \left[\frac{\varphi_{0i}}{2} + 45^{\circ} + \frac{Dd}{4Lb} \right].$$

Аналогичным образом из Рис. 42 и Рис. 43 можно определить размер отражающей дуги dS_T и допустимый угол α₂ для луча T , дающего вклад в зеркальную компоненту;

$$dS_{T} = \frac{D}{2L} \cdot \frac{d^{2} \cos \gamma_{T}}{b + 3d/2},$$

$$\alpha_{2} = \frac{D}{4L} \cdot \frac{d \cos \gamma_{T}}{b + 3d/2},$$
(69)

или с учетом $b \gg d$

$$dS_{T} \simeq \left(Dd^{2}\cos\gamma_{T}\right)/2Lb, \qquad (69a)$$

$$\alpha_{2} \approx \left(Dd\cos\gamma_{T}\right)/4Lb$$

где _{үт} задано выражением (45). Угол α_i в этом случае удовлетворяет неравенству

$$[\alpha_T - \alpha_2] < \alpha_i < [\alpha_T + \alpha_2], \qquad (70)$$

где α_T определяется из условия симметрии (44) для $\gamma_T \neq \pi/2$.



Рис. 42. Допустимый угол 2α₂ для луча Т.



Рис. 43. Влияние апертуры приемника эллипсометра на величину рассеивающей площадки для луча Т.

Как показано на Рис. 44, луч T существует не для всех углов падения, а только в диапазоне от 0° до некоторого угла φ_{0T}, определяемого геометрией ячейки:

$$\varphi_{0T} = \operatorname{arc} tg \frac{d + b/2}{d},\tag{71}$$

или при b $\gg d$

$$\varphi_{0T} \approx \operatorname{arc} tg\left(b/2d\right). \tag{71a}$$

При углах падения больших, чем ϕ_{0T} , луч T не попадает в зеркальную компоненту в отличие от луча *C* и, вообще,

$$\alpha_{Ti} - \alpha_{Ci} = \alpha_{TC}, \qquad (72)$$

где α_{TC} тем меньше, чем больше отношение b/d, и следовательно, тем ближе на дуге окружности расположены точки С и Т для одного и того же угла падения.

Зная области, где возможно рассеяние, определим величины площадок S_C и S_T , ограниченных дугами dS_c и dS_T ,

$$S_{c} = 4d(b-2d)\alpha_{1},$$

$$S_{T} = 4d(b-2d)\alpha_{2},$$
(73)

где α_1 и α_2 определяются согласно выражениям (67) и (69).

Если на рельефную поверхность падает волна E_0 , то от элементарной ячейки для любого фиксированного угла падения отражаются волны: E_1 - от верхней грани, E_2 - от нижней грани, E_C – от площадки в окрестности линии C на цилиндрической боковой грани. Для углов падения света меньших, чем φ_{0T} (71, 71а), от площадки в окрестности линии T цилиндрической боковой грани отражается волна E_T .

$$E_{1} = E_{0}R_{1}k_{1},$$

$$E_{2} = E_{0}R_{2}k_{2}e^{i\Delta_{1}},$$

$$E_{3} = E_{C} + E_{T} = E_{0}\left(R_{C}k_{C}e^{i\Delta_{C}} + R_{T}k_{T}e^{i\Delta_{T}}\right),$$
(74)

где $R_1 = R_2$, R_C и R_T ~ комплексные коэффициенты Френеля; k_1 , k_2 , k_C и k_T - геометрические коэффициенты, учитывающие отражающие площади граней; Δ_1 , Δ_C и Δ_T - геометрические разности хода между лучом, отраженным от верхней грани, и лучами, отраженными от нижней и боковых граней, соответственно.



Рис. 44. Условие симметрии для рассеянного луча Т выполняется только углов падения $\varphi_0 \leq \varphi_{0T}$. На вставке приведены расчетные значения α_{Ci} , α_{Ti} и φ_{0T} для рельефа СФМ: b=a=2.5 мкм и d=0.306 мкм.

Для нижней грани коэффициент k₂ дан с учетом затенения. Величина ξ учитывает изменение размеров при фотолитографии.

$$k_{1}^{2} = \frac{b + 2\xi - 2d}{b},$$

$$\begin{cases}
k_{2}^{2} = \frac{b - 2\xi - 2d(tg\varphi_{0} - 1)}{b}, \\
\pi/2 \le \varphi_{0} \le \operatorname{arc} tg(1 + b/2d)
\end{cases},$$

$$k_{c}^{2} = 4\alpha_{1} \frac{a - 2d}{a},$$

$$k_{T}^{2} = 4\alpha_{2} \frac{a - 2d}{a}.$$
(75)

Очевидно, что от нижней грани элементарной ячейки не будет отражаться свет при k_2 =0; чем глубже ячейка, тем при меньших значениях углов φ_0 , наступит полное затенение нижней грани. Разность хода лучей, отраженных от верхней и нижней граней, Δ_1 определяется для данного угла φ_0 глубиной ячейки и длиной волны падающего света:

$$\Delta_1 = \frac{4\pi d \cos \varphi_{0i}}{\lambda}.$$
(76)

Амплитуды и фазы волн E_C и E_T , отраженных от площадок боковой грани S_C и S_T , зависят от координат точек падения лучей C и T для каждого фиксированного угла падения ϕ_{0i} . Запишем суммы парциальных значений этих волн в виде:

$$\begin{cases} E_{C} = \sum_{\alpha_{C} - \alpha_{1}}^{\alpha_{C} + \alpha_{1}} E_{0} k_{Ci} R_{Ci}^{2} e^{i\Delta_{Ci}}, \\ 0 \le \varphi_{0i} \le \pi/2, \end{cases} \quad \begin{cases} E_{T} = \sum_{\alpha_{T} - \alpha_{2}}^{\alpha_{T} + \alpha_{2}} E_{0} k_{Ti} R_{T1i}^{2} R_{T2i} e^{i\Delta_{Ti}}, \\ 0 \le \varphi_{0i} \le \varphi_{0T}, \end{cases}$$

$$(77)$$

где E_0 -падающая волна, R_{Ci} и R_{T1i} -коэффициенты отражения света при его падении на *i* площадку боковой грани в окрестности С или Т лучей, соответственно; R_{T2i} - тоже при отражении луча T от донышка ячейки. Разности хода лучей Δ_{Ci} и Δ_{Ti} зависят от координаты точки отражения луча и от угла падения света.

$$\Delta_{Ci} = \frac{4\pi}{\lambda} \Big[b \sin^2 \alpha_i + d \sin 2\alpha_1 \Big],$$

$$\Delta_{Ti} = \frac{4\pi}{\lambda} \Big[b \sin \alpha_i \cos(\alpha_i - \varphi_{0i}) + d \cos \varphi_{0i} \Big].$$
(78)

Запишем выражение для суммарной волны с учетом рассеяния:

$$E = E_{1} + E_{2} + E_{3} = E_{12} + E_{3},$$

$$E_{12} = E_{0}R_{1}\sqrt{k_{1}^{2} + k_{2}^{2} + 2k_{1}k_{2}\cos\Delta_{1}}e^{i\theta_{12}} =$$

$$= E_{0}R_{1}k_{12}e^{i\theta_{12}},$$

$$k_{12} = \sqrt{k_{1}^{2} + k_{2}^{2} + 2k_{1}k_{2}\cos\Delta_{1}},$$

$$\theta_{12} = arctg\left[\frac{k_{2}\sin\Delta_{1}}{k_{1} + k_{2}\cos\Delta_{1}}\right] + \delta_{R},$$
(79)

где $R_1 = R_2$ и δ_R -модули и фаза коэффициентов Френеля.

Верхний и нижний пределы суммирования в (65) отличаются на $2\alpha_1$ или $2\alpha_2$, поскольку $\alpha_1 \ll \alpha_C$ и $\alpha_2 \ll \alpha_T$, как видно из (55) и (57), то можно считать, что E_C и E_T практически не изменяются в указанных пределах. Для вычисления E_C и E_T достаточно заменить в (65) α_i на α_C и α_T , соответственно. Причем, согласно (67), (69) и (75), геометрические коэффициенты $k_C \approx k_T$, при D \ll L и $d \leq b = na$.

Поляризация суммарной волны будет зависеть от суммы *p*-и *s*-компонент, составляющих ее волн.

$$E_{p} = E_{12p} + E_{3p},$$

$$E_{s} = E_{12s} + E_{3s}.$$
(80)

В выражениях (77, 79) геометрические коэффициенты k_{12} , k_C и k_T и разности хода Δ_1 , Δ_{Ci} и Δ_{Ti} не зависят от типа поляризации. Коэффициенты отражения R₁, R_{Ci} и R_{T1i} зависят от типа поляризации. Общий вид коэффициентов Френеля (при измерении на воздухе) для материала с диэлектрической функцией є имеют вид:

$$R_{p} = \frac{\varepsilon \cos \beta - \sqrt{\varepsilon - \sin^{2} \beta}}{\varepsilon \cos \beta + \sqrt{\varepsilon - \sin^{2} \beta}},$$

$$R_{s} = \frac{\cos \beta - \sqrt{\varepsilon - \sin^{2} \beta}}{\cos \beta + \sqrt{\varepsilon - \sin^{2} \beta}},$$
(81)

где β нужно заменить в выражениях (82) на величины, указанные в Таблице 3.1, для вычисления соответствующих коэффициентов:

Таблица 4.1

при вычислении	$R_1 = R_2$	R _{C i}	R _{T1i}	R _{T2i}
β заменить на	Φ0i	α _{Ci} - φ _{0i}	α _{Ti} - φ _{0i}	$\pi + \varphi_{0i} - 2\alpha_{Ti}$

$$E_{12p} = E_{0p}R_{1p}k_{12}e^{i\theta_{12p}},$$

$$E_{12s} = E_{0s}R_{1s}k_{12}e^{i\theta_{12s}},$$

$$E_{3p} = E_{0p}\left[\sum_{\alpha_{C}-\alpha_{1}}^{\alpha_{C}+\alpha_{1}}k_{Ci}R_{Cpi}^{2}e^{i\Delta_{Ci}} + \sum_{\alpha_{T}-\alpha_{2}}^{\alpha_{T}+\alpha_{2}}k_{Ti}R_{T1pi}^{2}R_{T2pi}e^{i\Delta_{Ti}}\right] = E_{0p}R_{3p}k_{3}e^{i\Delta_{3p}},$$

$$E_{3s} = E_{0s}\left[\sum_{\alpha_{C}-\alpha_{1}}^{\alpha_{C}+\alpha_{1}}k_{Ci}R_{Csi}^{2}e^{i\Delta_{Ci}} + \sum_{\alpha_{T}-\alpha_{2}}^{\alpha_{T}+\alpha_{2}}k_{Ti}R_{T1si}^{2}R_{T2si}e^{i\Delta_{Ti}}\right] = E_{0s}R_{3s}k_{3}e^{i\Delta_{3s}},$$
(82)

Зная *p*- и *s* - составляющие суммарной отраженной волны можно вычислить поляризационные характеристики пучка света, отраженного от ячейки с цилиндрическими боковыми гранями $tg\overline{\Psi}_{13}e^{i\overline{\Lambda}_{13}}$ с выражений (69) и (70):

$$tg\overline{\Psi}_{13}e^{i\overline{\lambda}_{13}} = \frac{E_{12p} + E_{3p}}{E_{12s} + E_{3s}} \left/ \frac{E_{0p}}{E_{0s}} = \frac{R_{1p}k_{12}e^{i\theta_{12p}} + R_{3p}k_{3}e^{i\Delta_{3p}}}{R_{1s}k_{12}e^{i\theta_{12s}} + R_{3s}k_{3}e^{i\Delta_{3s}}}, \\ tg\overline{\Psi}_{13} = \sqrt{\frac{\left(R_{1p}k_{12}\right)^{2} + \left(R_{3p}k_{3}\right)^{2} + 2R_{1p}k_{12}R_{3p}k_{3}\cos(\theta_{12p} - \Delta_{3p})\right)}{\left(R_{1s}k_{12}\right)^{2} + \left(R_{3s}k_{3}\right)^{2} + 2R_{1s}k_{12}R_{3s}k_{3}\cos(\theta_{12s} - \Delta_{3s})}, \\ \overline{\Delta}_{13} = \theta_{13p} - \theta_{13s} = arctg \frac{R_{12p}k_{12}\sin\theta_{12} + R_{3p}k_{3}\sin\Delta_{3p}}{R_{12p}k_{12}\cos\theta_{12} + R_{3p}k_{3}\cos\Delta_{3p}} - arctg \frac{R_{12s}k_{12}\sin\theta_{12} + R_{3s}k_{3}\sin\Delta_{3s}}{R_{12s}k_{12}\cos\theta_{12} + R_{3s}k_{3}\cos\Delta_{3s}}, \end{cases}$$
(83)

или с учетом малости α₁ и α₂:

$$tg\overline{\Psi}_{13}e^{i\overline{\Delta}_{13}} \approx \frac{R_{1p}k_{12}e^{i\theta_{12p}} + R_{Cp}^2k_Ce^{i\Delta_C} + R_{T1p}^2R_{T2p}k_Te^{i\Delta_T}}{R_{1s}k_{12}e^{i\theta_{12s}} + R_{Cs}^2k_Ce^{i\Delta_C} + R_{T1s}^2R_{T2s}k_Te^{i\Delta_T}},$$
(83a)

Анализ выражения (71) показывает, что также как в случае трапециидальной ячейки для аналогичных выражений (30) и (34), вклад рассеянной волны Е₃ может быть заметен только в

"особых" точках, когда $|E_{12}|$ обращается в нуль или очень мало, поскольку амплитуда E_3 всегда мала вследствие малости геометрических коэффициентов k_C и k_T .

Рассмотрим возможные случаи, когда |Е₁₂| мало или равно нулю:

1. если геометрический коэффициент k_{12} минимален. Только для $\Delta_1 = \pi$ коэффициент k_{12} принимает минимальное значение, причем это значение возрастает с увеличением глубины рельефа. По определению k_1 меньше k_2 и для углов падения $\varphi_0 < 45^\circ$ отсутствует затенение нижней грани, т.е. нижняя грань освещается полностью (72). При углах падения $\varphi_0 > \varphi_{0T}$ наступает полное затенение для луча Т и $k_1=0$. Как видно из (67), k_{12} не может обращаться в нуль. Значение угла падения φ_0 , при котором вклад света, рассеянного рельефной поверхностью максимален, задается выражением (72),

$$k_{1} < k_{2}, \quad k_{2} \left(\varphi_{0} < \frac{\pi}{4} \right) = 1,$$

$$\Delta_{1} = n\pi, \quad \varphi_{unmep\phi} = \arccos \frac{\lambda}{4d}n, \quad n = 1, 3, 5,$$
(84)

что соответствует минимуму интерференции парциальных волн Е1 и Е2.

2. если R_1 обращается в нуль; в нуль может обращаться только p - компонента коэффициента Френеля R_{1p} на угле падения света, равному углу Брюстера. и только для диэлектриков; R_{1p} близка к нулю для слабо поглощающих полупроводников и заметно отличается от нуля для металлов. Следовательно, это условие выполняется не всегда.

Чтобы учесть влияние ячеек с произвольным размером, введем коэффициент C_n, равный $C_n=2^{-(n+1)}$ и учитывающий вероятность появления в строке ячейки с размером *b*, Обозначим через C_nE_{pn} и $C_n E_{sn} - p$ - и *s*- компоненты отраженного электрического поля от ячейки с размером *b×a*, где *b=na* (n=1, 2, 3, ..). Полное отраженное поле будет являться суммой

$$E_p = \sum_{1}^{n} C_n E_{pn}, \quad E_s = \sum_{1}^{n} C_n E_{sn}.$$
 (85)

Ограничимся суммированием по n до n = 5, поскольку C_n быстро убывает.

Основные выводы к § 4.4.

Учет вклада в зеркальную компоненту рассеянных лучей от ячеек с размерами *a*, 2*a*, 3*a*., 4*a*, 5*a* приведет:

- a) к увеличению значения φ_{0Tn}, согласно выражению (71 71а), и, следовательно, к
 увеличению диапазона углов φ_{0i}, где есть вклад рассеянного света;
- б) к уменьшению геометрических коэффициентов k_{Cin} и k_{Tin} (75), за счет уменьшения в *n* раз углов α_1 и α_2 (67, 69), т. е. более жесткие условия на расходимость пучка света;
- в) к изменению в *n* раз первых слагаемых в выражениях (66) для фазовых сдвигов Δ_{Ci} и Δ_{Ti} , которые пропорциональны $4\pi an/\lambda$;
- г) к небольшому изменению положения одной из "особых точек" минимума интерференции за счет изменения положения минимума k₁₂, согласно выражениям (63, 67, 72);
- д) к уменьшению затенения (75), что приведет к более глубокому минимуму интерференции волн E₁ и E₂ и сделает более заметным вклад рассеянных лучей.

§ 4.4.2. Расчетные зависимости поляризационных характеристик от угла падения света для поверхности меди с вытравленным рельефом с учетом кривизны боковых граней

Напомним, что зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для зеркальногладкой поверхности меди имеют вид, представленный на Рис. 45. Наличие рельефа на поверхности приводит к искажению формы зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, и к появлению экстремумов в "особых точках". Для модели отражающей ячейки с цилиндрическими боковыми гранями при <u>любых</u> углах падения необходимо учитывать влияние рассеянного света. В отличие от модели трапециидальной ячейки, где интервал углов падения, для которых возможно попадание рассеянного света в зеркальную компоненту, <u>ограничен</u>, и для симметричной ячейки этот интервал равен [arc tg[*a*/2d+ctg α]+π-2α<φ≤2α-π/2], как было показано на Рис. 25 и на Рис. 35.



Рис. 45. Угловые зависимости поляризационных углов $\Psi(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$ для зеркально-гладкой поверхности меди. Минимальное значение Ψ определяет угол псевдо-Брюстера, равный $\approx 70^{\circ}$. Благодаря сильному поглощению меди на длине волны 0.633 мкм *p*-компонента отраженного света не обращается в нуль, и поляризационный угол $\Psi_{\min} \approx 43^{\circ}$, что соответствует $R_p/R_s \approx 0.93$.

Для элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями, размер которой b=na, по формулам (71), полученным выше, были рассчитаны зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для поверхности *меди* с варьируемой глубиной рельефа (d₁, d₂, d₃) и учетом изменения размеров ячейки при фотолитографии (ξ_1 , ξ_2), но с сохранением расстояния между центрами соседних ячеек. Размер ячейки тоже варьировался: в первом случае $a_1=2.5$ мкм, а во втором случае на порядок больше- $a_2=25$ мкм. Все расчетные параметры ячейки представлены в Таблицах 4.2 и 4.3. В этих же таблицах показаны расчетные значения углов падения (φ_{01} , φ_{02} , φ_{03}), при которых $\Delta_1=\pi$, вычисленные по формуле (64) для каждой глубины рельефа (d₁, d₂, d₃), соответственно. Как показал предыдущий анализ, именно вблизи этих углов падения должны наблюдаться аномально большие искажения в зависимостях поляризационных характеристик Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) отраженного света, вызванные наличием рельефа. Для луча T на рисунке 46 показано изменение угла φ_{0Tn} для ячеек с размерами *a*₁ и *a*_{2.}

На рисунках 47 (а, б, в, г) и 48 (а, б, в, г) представлены расчетные поляризационные характеристики света, отраженного от поверхностей *меди*, параметры рельефа которых показаны в Таблице 4.2 и Таблице 4.3, соответственно.



Рис. 46. Расчетное значение максимально возможного угла падения ϕ_{0T} , при котором свет, рассеянный боковой гранью из точки T, попадает в зеркальную компоненту. ϕ_{0T} представлен как функция геометрии рельефа b=na элементарных ячеек с цилиндрическими боковыми гранями. Для размера $a_2=25$ мкм эффект затенения минимален и $\phi_{0T}>88^{\circ}$, т.е. почти при любом угле падения часть рассеянного света попадает на детектор эллипсометра.

Таблица	4.2								
Рис. 47	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d ₁	d ₂	d ₃	٤	b	
				В	мик	ромет	rpax		
а	0	0	0				0.105	b=a	<i>а</i> ₁ =2.5 мкм
б	6.4	8.9	0.9	86	90	26	0.105	b=na	λ=0.63 мкм
В	5	S	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> =1,2,3,4,5
Г							0.130	b=na	

Таблица 4.3									
Рис. 48	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d ₁	d ₂	d ₃	ىد	b	
				В	микј	ромет	грах		
a	0	0	0				0.105	b=a	а2=25 мкм
б	7.7	9.9	1.9	96	16	36	0.105	b=na	λ=0.63 мкм
В	5	S	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> = <i>1</i> , <i>2</i> , <i>3</i> , <i>4</i> , <i>5</i>
Γ							0.150	b=na	


	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d_1	d ₂	d ₃	ىخ	b	
Рис. 47				в микрометрах			грах		
a	٥.	0_	0_				0.105	b=a	<i>а</i> ₁ =2.5 мкм
б	6.4	8.9	6.0	86	90	26	0.105	b=na	λ=0.63 мкм
В	5	S	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> =1,2,3,4,5
Г							0.130	b=na	

Рис. 47. Расчетные поляризационные характеристики Ψ и Δ от угла падения света φ_0 для поверхности меди с рельефом 2.5 СФМ (a = 2.5 мкм) для трех различных глубин рельефа: d₁, d₂, d₃, с учетом изменения скважности ξ и с учетом типа дефектов: b = a или b=na, (n = 1, 2, 3, 4, 5). Длина волны света $\lambda = 0.633$ мкм. Все параметры рельефа показаны в Таблице 4.2.





Таблица 4.3									
	φ01	φ ₀₂	φ ₀₃	d_1	d ₂	d ₃	w	b	
Рис. 48				В	микј	омет	pax		
а	0	0	0				0 105	b=a	а2=25 мкм
б	7.7	9.9	1.9	96	16	36	0.105	<i>b</i> = <i>na</i>	λ=0.63 мкм
В	5	S	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> = <i>1</i> , <i>2</i> , <i>3</i> , <i>4</i> , <i>5</i>
Г							0.150	b=na	



Рис. 48. Расчетные зависимости Ψ и Δ от угла падения света φ_0 для поверхности меди с рельефом 25 СФМ (a = 25 мкм). Размер элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями в десять раз больше, чем на Рис. 47. Расчет сделан для трех различных глубин рельефа: 1- d₁, 2- d₂, 3- d₃, с учетом изменения скважности ξ и с учетом типа дефектов: однотипные дефекты (b = a) и разнотипные дефекты (b=na). Длина волны света 0,633 мкм. Все параметры рельефа показаны в Таблице 4.3.

Рассмотрим влияние каждого из параметров рельефа:

- глубины рельефа *d*;
- изменения скважности за счет параметра ξ, т.е. ухода размера *a* при травлении рельефа;
- размера ячейки *a*; и параметра *b=na*, который в свою очередь определяет целый ряд параметров: φ_{0T} (выражение 59 и Рис. 46), *k₁*, *k₂* (63) и *C_n* (73).
- Влияние глубины рельефа проявляется, прежде всего, в положении "особых точек" (φ₀₁, φ₀₂, φ₀₃), которые сдвигаются в сторону бо'льших углов падения при увеличении глубины *d*, как следует из выражения (72). Кроме того, глубина опосредованно влияет на величину экстремума через эффект затенения, изменяя геометрический коэффициент отражения *k*_T. Очевидно, с увеличением размера элементарной ячейки затенение играет меньшую роль.
- О Сравним расчетные зависимости Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для поверхности с "однотипными дефектами" b=a₁ (Рис. 47а и Рис. 47в) и b=a₂ (Рис. 48 а и Рис. 48в), которые отличаются только параметром ξ, уменьшающим верхнюю грань ячейки. Изменение размера верхней грани учитывается геометрическим коэффициентом k₁ и влияет на величину экстремума через k₁₂ (67, 71). Очевидно, что с увеличением размера ячейки *a* относительное изменение 2ξ/*a* падает, поскольку *a*≫ξ. В Приложении А для глубины рельефа d₁ и d₃ приведены на

одном графике Рис. 1А для сравнения зависимости, отличающиеся только параметром ξ , и, как видно из Рис. 47ав и Рис. 48ав, где b=a, а также из Рис. 47бг, и Рис. 48бг, где учтены "разнотипные дефекты", т.е. b=na, влияние ξ на поляризационные характеристики поверхности уменьшается при увеличении размера элементарной ячейки a : зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для $a_2=25$ мкм почти полностью совпадают, отличаясь только в значении экстремумов.

Существенное значение имеет размер отражающей (рассеивающей) ячейки: *a*₁=2.5мкм или
 *a*₂=25мкм и это отчетливо видно при сравнении Рис. 47а с Рис. 48а или Рис. 47в с Рис. 48в,
 где *b*=*a*. Следует заметить, что одна и та же зондируемая площадка для *a*₁=2.5мкм

содержит в 100 раз больше рассеивателей, чем для $a_2=25$ мкм, поэтому расчетные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ выглядят более гладкими. В Приложении А для глубины рельефа d_1 , d_2 и d_3 на Рис. 2А показано влияние размера ячейки (45а и 46а), а на Рис. 3А (45в и 46в). Увеличение размера *а* приводит к резкому изменению эллипсометрических углов вблизи "особых точек".

Учет парциальных волн рассеянного света от ячеек с размерами кратными *n* (*n*=1,2,3,4,5)
 приводит к появлению дополнительных близко расположенных экстремумов в зависимостях Ψ(φ₀) и Δ(φ₀), как можно видеть при сравнении пар Рис. 47а и Рис. 47б или пар Рис. 47в и Рис. 47г, где *a*₁=2.5мкм.

Аналогичные изменения в расчетных зависимостях $\Psi(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$ для $a_2=25$ мкм можно видеть при сравнении пар Рис. 48а и Рис. 48б или пар Рис. 48в и Рис. 48г.

В Приложении II для глубины рельефа d_1 , d_2 и d_3 на Рис. 2А и Рис. 3А показаны те же зависимости, удобнее расположенные.

При одной и той же геометрии СФМ учет распределенных "разнотипных дефектов" дает сильный эффект при $a \ge d$ и заметный, но слабый эффект при $a \le d$. Для рельефа СФМ, где $a \le d$ достаточно рассчитать зависимость поляризационных углов Ψ и Δ только для одного наиболее вероятного размера дефектов: b=a.

выводы

Учет кривизны боковых граней элементарной ячейки СФМ позволяет устранить недостаток, присущий расчетам поляризационных характеристик рельефной поверхности по модели трапециидальной ячейки СФМ [43, 45, 46], проявляющийся в резком ограничении области углов падения света φ_0 , в которой наличие рельефа на отражающей поверхности изменяет поляризационные характеристики отраженного от нее света. Изменение размера *a* на 4% за счет параметра ξ заметно влияет на поляризационные характеристики рельефной поверхности (Приложение II Рис. 1А), если размер a_1 =2.5 мкм.

ГЛАВА 5. Экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности с вытравленным рельефом

В этой главе приведены результаты экспериментальных зависимостей поляризационных характеристик, т.е. эллипсометрических углов Ψ и Δ для поверхностей диэлектрика и металла с рельефом случайной фазовой маски (СФМ) с известными параметрами, используемой в качестве модели шероховатой поверхности. Исследованы угловые зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ как функции параметров рельефа СФМ на одной длине волны.

При отражении электромагнитного излучения от поверхности жидкого или твердого тела необходимо учитывать неровности, которые всегда присутствуют на реальной отражающей поверхности. Высота, форма и плотность (количество на единицу площади) неровностей определяют параметры отраженного сигнала: индикатрису рассеяния, интенсивность сигнала в заданном направлении, степень и тип поляризации, и изменение частоты падающего излучения. Задачи отражения от неровных поверхностей делятся, прежде всего, на прямые и обратные. Прямая задача - определение параметров отраженного электромагнитного излучения для поверхности, высота, форма, плотность и закон распределения неровностей которой известны. Обратная задача - это нахождение параметров неровной поверхности по измеренным характеристикам отраженного сигнала. В любом случае, если поверхность статистически неоднородна, то необходимо решить задачу ее описания, т.е. выбрать достаточное число параметров, однозначно ее описывающих. Способы решения задачи делятся на два класса: аналитические и физические, использующие моделирование шероховатой поверхности. Из всего многообразия аналитических методов необходимо выделить два основных: метод касательной плоскости (или метод Кирхгофа) и метод малых возмущений. Первый из методов применим для поверхностей, неровности которых больше длины волны падающего излучения; второй - для неровностей меньших длины волны. В основе обоих методов лежит использование формулы Грина, позволяющей выразить решение U(r) уравнения Гельмгольца $\Delta U + k^2 U = 0$ в заданной области Σ через значения этого же решения и его нормальной производной на границе S области Σ .

$$U(r) = \int_{s} \left[U(s) \frac{\partial V(r,s)}{\partial v} + V(r,s) \frac{\partial U(s)}{\partial v} \right]$$
$$V(r,s) = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|r-s|)}{|r-s|}.$$

где $\partial/\partial v$ - дифференцирование по нормали к *s* , направленной внутрь области Σ .

Аналитические методы дают качественно верное описание отраженной волны, но не учитывают многократного рассеяния и последующих дифракций падающих и отраженных волн. Решение по методу Кирхгофа не самосогласованно, поскольку поля и их производные не принимают на границе тех значений, которые вкладываются в формулу Грина для их вычисления. Метод Кирхгофа не позволяет, например, объяснить наличие экстремумов в угловых зависимостях света, отраженного от поверхности с длинными (L>λ) ступеньками, составляющими малый (~15°) угол со средней поверхностью [7].

Большое число работ посвящено моделированию шероховатой поверхности эффективной средой или эквивалентной пленкой. Суть модели, и параметры шероховатого слоя, которые можно определить на основе этой модели, подробно рассмотрены в <u>главе</u> 2 и ранее в работе [49, 88]. Модель не является универсальной, хотя в ряде случаев очень полезна для количественной оценки шероховатого слоя. Неоднократно предпринимались попытки моделировать шероховатую поверхность с помощью периодического рельефа: дифракционных решеток прямоугольного [5] и синусоидального [6], и треугольного (эшелетт) профиля [34] и т.д. с известной геометрией.

В настоящей главе исследуются экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности, для которой в качестве модели выбрана случайная фазовая маска. Рельеф случайной фазовой маски (СФМ) формируется построчно (см. Рис. 22 в Главе 4) по случайному закону. Вероятность появления в строке белого или черного квадратика размером *а* равна 1/2ⁿ⁺¹ (рис.23), квадратики черного и белого цвета образуют на поверхности массивы произвольной конфигурации соответствующего цвета. В главе 4 подробно рассмотрены случаи, когда вклад рассеянного света настолько существенен, что не только искажает форму зависимостей $\Psi(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$, но и приводит к возникновению экстремумов в "особых точках". "Особые точки" возникают, когда выполняется условие интерференции (36), (78) и (86) для зеркально отраженного света, и/или его *p*-компонента обращается в нуль либо принимает минимальное значение на угле Брюстера. Угол Брюстера определяется оптическими константами отражающего материала, для диэлектрика $\varphi_E = arctgn$, для поглощающего материала угол псевдо Брюстера определяется модулем комплексного показателя преломления N: $\varphi_{accepto} = arctg|N|$.

Особое внимание было уделено форме боковых рассеивающих граней. Вначале полагали, что боковые грани симметрично наклонены к донышку ячейки под углом α, и получили условия (44) и (46) рассеяния в зеркальную компоненту с учетом затенения в *ограниченной* области углов падения света φ₀:.

$$\pi - 2\alpha + \operatorname{arctg}\left[\frac{a}{2d} + \operatorname{ctg}\alpha\right] \le \varphi_0 \le 2\alpha - \frac{\pi}{2}$$

Затем получили условия рассеяния зеркальную компоненту для ячейки с цилиндрическими боковыми гранями: а) для лучей, рассеянных параллельно донышку ячейки, *нет ограничений* на углы падения, как показано на Рис. 38; б) и плюс для света, рассеянного с участием нижней грани, для углов падения света 0<φ₀<φ_{0T}. Максимально возможный угол φ_{0T} определяется размерами ячейки (71), и его зависимость от параметров ячейки показана на Рис. 46.

В разделе 4.3.6 исследовано влияние параметров ячейки трапециидального рельефа на расчетные поляризационные характеристики на примере поверхности кварца, как показано на Рис. 32 – Рис. 34.

В разделе 4.4.2 исследовано влияние параметров ячейки на расчетные поляризационные характеристики для поверхности меди с вытравленным рельефом с учетом кривизны боковых граней. Результаты расчета показаны на Рис. 47 и Рис. 48 и Приложении II.

§ 5.1. Экспериментальные результаты: зависимости поляризационных углов $\Psi(\phi_0)$ и

Δ(φ₀) от параметров рельефа

Экспериментальная зависимость поляризационных характеристик света, отраженного рельефной поверхностью случайной фазовой маски, от угла падения света изучалось на четырех типах образцов, полученных на двух материалах: на диэлектрике-*кварце* и металле*алюминии*, с размером элементарной ячейки 25х25 мкм и 2.5х2.5 мкм на каждом из материалов. Глубина рельефа изменялась от 0.02 мкм до 1,005 мкм. Всего изготовлено и измерено 74 образца.

Переход от одного размера СФМ к другому означает изменение площади элементарной ячейки в 100 раз, что соответствует изменению в ~100 раз плотности "дефектов" на исследуемой поверхности.

Переход от одного материала к другому означает существенное изменение модуля и фазы коэффициентов отражения p- и s- поляризованного света, а также изменение интенсивности рассеянного света, поскольку отражательная способность кварца составляет ~4%, а алюминия ~ 90% при нормальном падении. Варьирование глубины рельефа означает изменение отношения a/d, ответственного за область углов падения света, где возможно рассеяние в зеркальную компоненту, и изменение условия интерференции.

Предполагается, что профиль рельефа изменяется по одному и тому же закону для всех образцов. Если считать скорости травления в горизонтальном и вертикальном направлениях постоянными, но не равными, то угол наклона боковой грани к донышку ячейки α=const. Анализ, проведенный в разделах 4.2 и 4.3 для простого случая -

симметричного трапециидального рельефа, позволяет понять результаты эксперимента на более сложной реальной поверхности. Главный вывод, который следует из этого анализа, - существование *ограниченной* области углов падения, определяемой геометрией рельефа. На Рис. 25, Рис. 26 и Рис. 27 показаны случаи, когда возможно попадание рассеянного света в зеркальную компоненту, и определены соответствующие области углов падения: arc $tg[a/2d+ctg \alpha]+\pi-2\alpha \le \varphi_0 \le 2\alpha-\pi/2$.

Но, по-видимому, боковая стенка не остается плоской, а ее поверхность приобретает кривизну благодаря изотропности травления. В этом случае для цилиндрической поверхности боковой грани условия рассеяния сильно отличаются от условий рассеяния на плоской грани, т.к. угол падения света на боковую грань будет зависеть от радиуса кривизны и координаты. Для света, падающего на боковую грань, вместо одного угла падения, равного (α - ϕ_0), будет набор углов падения (α_i - ϕ_0), где α_i -угол, образуемый касательной плоскостью в данной точке цилиндрической поверхности с горизонталью, как показано на Рис. 38. Очевидно, для каждого ϕ_0 на цилиндрической поверхности найдется (α_i - ϕ_0), где возможно рассеяние в зеркальном направлении, но по-прежнему, рассеянные лучи дадут заметный вклад только в "особых точках" (интерференция, угол Брюстера). Кроме того, в данном случае существуют еще лучи света, показанные ранее на Рис. 39, Рис. 43 и на Рис. 44 для симметричной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями, для углов падения меньших, чем ϕ_{0T} (71, 71a), т.е. область, где учитывается рассеяние, имеет вид:

$$\begin{split} & 0 \leq \varphi_0 \leq \frac{\pi}{2} \xrightarrow{+} 0 \leq \varphi_0 \leq \varphi_{0T}, \\ & \varphi_{0T} = \arccos tg \, \frac{d + b/2}{d}, \xrightarrow{b \gg d} \varphi_{0T} \simeq \arccos tg \, \frac{b}{2d} \end{split}$$

Таким образом, согласно модели, рассмотренной в §4.4, рассеянные лучи могут попадать в зеркальную компоненту практически во всем диапазоне углов падения света.

При измерении образцы с рельефом СФМ устанавливалась на предметном столике эллипсометра, так чтобы строка СФМ находилась в плоскости падения, и результаты

117

измерений можно было бы анализировать с помощью выражений, полученных в разделах 4.2, 4.3 и 4.4. Точность позиционирования образца составляла 1-2 угловых минуты и обеспечивалась с помощью микроскопа, установленного на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ. Все измерения проводились на длине волны 0.63 мкм. Напомним, что измерения относятся только к зеркальной компоненте отраженного света.

Поскольку наши измерения на таких поверхностях проводятся на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ при косом падении света, то следует рассматривать особенности дифракция когерентного света на случайной фазовой маске с произвольным фазовым сдвигом. Отраженное поле СФМ представляет собой суперпозицию дифракционных картин, получающихся в результате дифракции на квадратном отверстии, наиболее вероятный размер которого *а*. Картина отражения от наших образцов очень похожа на дифракционную картину Фраунгофера от 56 одинаковых отверстий в плоском экране с упорядоченной ориентировкой [3, стр. 436]. Все наши измерения относятся только к нулевому порядку дифракции, т.е. к зеркально отраженным лучам.

Результаты экспериментальных зависимостей поляризационных характеристик приведены на рисунках в §5.2: Рис. 49(1-3), Рис. 50(1-4) {и полностью зависимости показаны *для кварца* в Приложении III на Рис. 5-(1-13) и *для алюминия* в Приложении IV на Рис. 6-(1-13) }; а также на рисунках в §5.3: Рис. 51 (1-4), Рис. 52(1-3) {и полностью зависимости показаны *для кварца* в Приложении V на Рис. 7-(1-8) и *для алюминия* в Приложении VI на Рис. 8-(1-7) }.

В Таблицах 5.1 и 5.2 для размеров элементарной ячейки *a* =25 мкм и *a* =2.5 мкм, соответственно, приведены основные данные об образцах:

- о глубина рельефа, определенная на МИИ-11;
- о положение экстремумов в экспериментальных зависимостях $\Delta(\phi_0)$ и $\Psi(\phi_0)$;
- о расчетные значения углов падения $\phi_{uhrep\phi}$, при которых разность хода лучей $\Delta_1 = \pi$ или $\Delta_1 = 3\pi$.

В "Приложениях" дан расширенный вариант этих же Таблиц, где дополнительно указаны:

о номера образцов на кварце и алюминии;

номера рисунков, на которых приведены угловые зависимости поляризационных Δ(φ₀)
 и Ψ(φ₀) характеристик света, отраженного поверхностью случайной фазовой маски (СФМ).

Таблица 5.1. Расчетные и наблюдаемые в эксперименте величины углов падения ϕ_0 , при которых поляризационные характеристики отраженного света принимают аномальные значения, обусловленные наличием вытравленного рельефа СФМ с размером элементарной ячейки 25×25 мкм, для двух материалов: диэлектрика и металла.

Глубина	Расче	т угла	Эксперимент						
рельефа	интерференции		Угловое положение экстремумов						
d, nm	Д.	ля		в Υ(φ) и Δ(φ)					
	$\Delta_1 = \pi$ и	$\Delta_1=3\pi$	кварц СФ	РМ 25 мкм	алюминий (СФМ 25 мкм			
	ϕ_{uhtp1}	Финтр2	Финтр1	Финтр2	Финтр1	Финтр2			
20									
40									
50									
80									
110									
224	45.1°				47-49°				
316	59.9°		590		60-61 °				
351	63.2°		62.5 °		64 °				
413	67.5 °		67 [°]		67-68°				
446	69.2°		68 °		69-70°				
450	69.4°		68-70°		70°				
461	69.9°		69-70°		70 °				
572	73.9°	33.9°	72-73°		74 °				
690	76.7 °	46.5°	75 °	47.5°	76°	47-48°			
791	78.5°	53.1 °	75 °		79°	54 °			
904	79.9°	58.3°	79°	58°	80°	58°			
1005	80.3 °	60.9°	80 °	61 °	79°	60-61 °			

Таблица 5.2. Расчетные и наблюдаемые в эксперименте величины углов падения φ₀, при которых поляризационные характеристики отраженного света принимают аномальные значения, обусловленные наличием вытравленного рельефа СФМ с размером элементарной ячейки 2.5×2.5 мкм, для двух материалов: диэлектрика и металла.

глубина	Расчет угла		Экс	перимент	
рельефа	интерференции		Угловое положение экстремумов		
d, nm	для		в Υ(φ) и Δ(φ)		
	$\Delta_1 = \pi$ и $\Delta_1 = 3\pi$		кварц СФМ 2.5 мкм	алюминий СФМ 2.5 мкм	
	Финтр1	Финтр2	Ф интр1	Финтр1	
0					
21					
40					
55					
80					
103					
143					
208	40.5°				
250	50.8°		50°	50°	
306	58.8°		57.5 °	56-58°	
350	63.1 °		62.5 °	62 °	
408	67.2°		62.5-66°	64-69°; 70-71°	
451	69.4°	30.5 °	69°	67.5-74°	

Как видно из Таблиц 5.1 и 5.2 для одного и того же рельефа (одинаковых *a* и *d*) получено по два образца на различных материалах (*кварце* и *алюминии*), что очень удобно при сравнении угловых зависимостей $\Delta(\phi_0)$ и $\Psi(\phi_0)$, поскольку значение имеет не только геометрия ячейки, но и отражательная способность материала, т.е. коэффициенты Френеля R_s и R_p , а также угол Брюстера ϕ_b .

§ 5.2. Сравнение поляризационных характеристик диэлектрика и металла с вытравленным рельефом случайной фазовой маски 25×25 мкм

Отметим, прежде всего, <u>общие эффекты</u>, наблюдаемые для всех образцов с размером ячейки *a*=25 мкм и *a*=2.5 мкм.

Для малой глубины рельефа (т.е. *d*<223.7 нм), малые изменения угловых зависимостей
 Δ(φ₀) и Ψ(φ₀) наблюдаются только вблизи угла Брюстера, для кварца равного 55.6° и

для алюминия угол псевдо Брюстера равен ~81°: Рис. 49-1, Рис. 50-1, Рис. 51-2, Рис. 51-3, Рис. 52-1.¹

- При глубине рельефа d>λ/4 в угловых зависимостях Δ(φ₀) и Ψ(φ₀) появляется сначала один (Рис. 49-2, Рис. 50-2, Рис. 51-4, Рис. 52-2), а затем и два экстремума (Рис. 49-3, Рис. 50-3, Рис. 50-4, Рис. 52-3) и даже три экстремума (Рис. 50-3), находящиеся вблизи углов интерференции φ_{интерф}.².
- Положение экстремумов Δ_{max}(φ₀) и Ψ_{max}(φ₀), как правило, не совпадают, поскольку Δ
 характеризует фазовые, а Ψ амплитудные особенности отраженного света.
- Особенно большие изменения наличие рельефа на поверхности вносит в поляризационные характеристики, если угол интерференции ф_{интерф} совпадает или находится вблизи угла Брюстера, соответствующего данному материалу: (Рис. 49-3, Рис. 50-3, Рис. 50-4).³

Теперь остановимся на основных <u>различиях</u> в наблюдаемых угловых поляризационных характеристиках.

Различия эти связаны, прежде всего, с оптическими константами отражающей поверхности, определяющими как отражающие, так и поляризационные свойства поверхности. Во-первых, отражательная способность кварца при нормальном падении R ~4%, а алюминия R~90%, очевидно, что интенсивность лучей, рассеянных с участием трех граней для кварца составит не более 0,006%, а для алюминия ~72%. от интенсивности падающего излучения.

^{■ &}lt;sup>1</sup> { или в Приложениях III-VI: Рис. 5-1, Рис. 5-2, Рис. 6-1, Рис. 7-2, Рис. 7-3, Рис. 8-1)}.

 ² { или в Приложениях III-VI: (Рис. 5-3÷Рис. 5-9; Рис. 6-2 ÷ Рис. 6-9; Рис. 7-4÷Рис. 7-8 и Рис. 8-3÷Рис. 8-7) и (Рис. 5-10, Рис. 5-12, Рис. 5-13, Рис. 6-10÷Рис. 6-13)}.

 ³ { или в Приложениях III-VI: (Рис. 5-3, Рис. 5-12, и Рис. 6-11-Рис. 6-13)}.

- Поэтому для образцов на алюминии более существенны изменения модуля относительного коэффициента отражения |ρ|=tgΨ и более яркие изменения наблюдаются в угловой зависимости Ψ(φ₀).
- Для кварца основные изменения наблюдаются в фазовых соотношениях $\Delta(\varphi_0)$.Кроме того, для кварца как для диэлектрика R_p равно нулю на угле Брюстера 55.6° и $\Psi=0$, тогда как для алюминия R_p никогда не обращается в нуль и даже на угле псевдо Брюстера (81.5°) R_p лишь на 18% меньше R_s , т.е. во всем диапазоне измерений $R_p \approx R_s$.
- Различия, связанные с десятикратным уменьшением размера элементарной ячейки, проявляются в том, что для углов падения φ₀> 70°, т.е. вблизи угла псевдо-Брюстера на алюминии нет выраженных экстремумов, из-за затенения (Рис. 8-7 и Рис. 6-6÷Рис. 6-8).
- Общая тенденция для рельефа с размером *a*=2.5 мкм более заметное искажение угловых зависимостей Δ(φ₀) и Ψ(φ₀) по сравнению с рельефом *a* =25 мкм при примерно одинаковой глубине *d*. Например, сравним пары рисунков: Рис. 49-2 и Рис. 50-4; Рис. 50-3 и Рис. 52-2.⁴

 ⁴ {или в Приложениях Ш-VI: (Рис. 5-3 и Рис. 7-5; Рис. 5-5 и Рис. 7-7; Рис. 6-3 и Рис. 8-4 и т.д.)}

Рис. 49(1-3). Экспериментальные зависимости поляризационных углов Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для света, отраженного поверхностью *кварца* с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 25×25 мкм; глубина рельефа варьируется от 20 нм до 1005 нм.



Рис. 49-1. Глубина рельефа *кварца*: d_1 =20 нм, d_2 =40 нм, d_3 =50 нм, d_4 =80 нм, d_5 =110 нм. При увеличении глубины смещается положение Ψ_{\min} .⁵



Рис. 49-2. Зависимости поляризационных углов $\Delta(\varphi_0)$ и углов $\delta \Psi(\varphi_0)$; $\delta \Psi(\varphi_0)$ равен изменению Ψ за счет рельефа и на порядок меньше изменений в Δ по величине. Глубина рельефа *кварца*: d_1 =316 нм, d_2 =351 нм, d_3 =413 нм, d_4 =461 нм, d_5 =572 нм.⁶

⁵ (Приложение III : Рис. 5-1)

⁶ (Приложение III: Рис. 5-3, Рис. 5-4, Рис. 5-5, Рис. 5-8, Рис. 5-9)



Рис. 49-3. Зависимости поляризационных углов $\Delta(\varphi_0)$. Изменение Ψ за счет рельефа мало по величине и не приводится на графике. Глубина рельефа *кварца*: d_1 =690 нм, d_2 =904 нм, d_3 =1005 нм. На вставке показано поведение экстремумов в области больших углов падения; величины экстремумов уменьшаются из-за геометрической тени.⁷

Рис. 50 (1-3). Экспериментальные зависимости поляризационных углов Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для света, отраженного поверхностью *алюминия* с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 25×25 мкм; глубина рельефа варьируется от 20 нм до 1005 нм.



Рис. 50-1. Глубина рельефа *алюминия*: d_1 =20 нм, d_2 =40 нм, d_3 =50 нм, d_4 =80 нм. На вставке показано поведение Δ вблизи псевдо Брюстера, равного для алюминия ~81°, при этом $\Delta \approx 90^{\circ}$. ⁸

⁷ (Приложение III: Рис. 5-10, Рис. 5-12, Рис. 5-13)

⁸ (Приложение IV: Рис. 6-1)



Рис. 50-2. Глубина рельефа *алюминия*: d_1 =224 нм. На вставке показано поведение Δ вблизи первого экстремума в $\Psi(\varphi_0)$.



Рис. 50-3 Экспериментальные зависимости поляризационного угла $\Psi(\varphi_0)$ и изменения угла $\delta\Delta(\varphi_0)$ от глубины рельефа; глубина рельефа *алюминия*: $d_1=224$ нм, $d_2=316$ нм, $d_3=351$ нм, $d_4=413$ нм, $d_5=450$ нм, $d_6=572$ нм, $d_7=791$ нм, $d_8=1005$ нм. На вставке показано поведение Ψ вблизи угла псевдо Брюстера. ¹⁰

⁹ (Приложение IV: Рис. 6-2)

¹⁰ (Приложение IV: Рис. 6-2, Рис. 6-3, Рис. 6-4, Рис. 6-5, Рис. 6-7, Рис. 6-9, Рис. 6-11, Рис. 6-13)

§ 5.3. Сравнение поляризационных характеристик диэлектрика и металла с вытравленным рельефом случайной фазовой маски 2.5×2.5 мкм

Уменьшение размера ячейки в 10 раз приводит к увеличению интенсивности света, рассеянного поверхностью *кварца*, и влияет на увеличение роли амплитудных соотношений поляризованного света $\Psi(\phi_0)$, как видно из Рис. 49-2 и Рис. 51-4. Для *алюминия* же, наоборот, увеличивается роль фазовых соотношений и заметно увеличивается ширина экстремумов: Рис. 50-3 и Рис. 52-2, Рис. 52-3. Есть еще одна характерная деталь, отличающая поляризационные характеристики кварца от алюминия - это ширина экстремумов. Поскольку интенсивность рассеянного света на кварце значительно меньше, то и его влияния сказывается в более узкой области углов падения вблизи интерференционного минимума: Рис. 51-4 и Рис.52-2.



Рис. 30а. Расчетные значения углов падения ϕ_0 из условия интерференции (сплошные линии), показанные на Рис. 30, и экспериментальные значения: □ и ○-кварц 25 мкм и 2.5 мкм, соответственно; ☆ и ▽- алюминий 25 мкм и 2.5 мкм, соответственно.

Рис. 51 (1-4). Экспериментальные зависимости поляризационных углов Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для света, отраженного поверхностью *кварца* с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 2.5×2.5 мкм; глубина рельефа варьируется от 0 нм до 451 нм.





Рис. 51 –1. Зависимости поляризационных углов Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для света, отраженного чистой поверхностью *кварца* без рельефа.

Рис. 51-2. Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Delta(\phi_0)$ для света, отраженного поверхностью *кварца*; глубина рельефа: d_1 =21 нм, d_2 =40 нм, d_3 =55 нм, d_4 =80 нм. ¹¹

¹¹ (Приложение V: Рис. 7-2.)



Рис. 51 -3. Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Delta(\phi_0)$ и $\Psi(\phi_0)$ для света, отраженного поверхностью кварца с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 2.5×2.5 мкм; глубина рельефа кварца: d₁=103 нм, d₂=143 нм, d₃=208 нм. ¹²



Рис. 51 -4. Экспериментальные зависимости поляризационных углов Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для света, отраженного поверхностью кварца с вытравленным рельефом СФМ; глубина рельефа кварца: d₁=250 нм, d₂=306 нм, d₃=408 нм, d₄=451 нм. Пунктиром отмечено значение Ψ_0 (на угле Брюстера) и Δ_0 для чистой поверхности. ¹³

128

 ¹² (Приложение V: Рис. 7-3)
 ¹³ (Приложение V: Рис. 7-4, Рис. 7-5 Рис. 7-7, Рис. 7-8,)

Рис. 52 (1-2) Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного поверхностью *алюминия* с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 2.5×2.5 мкм; глубина рельефа варьируется от 0 нм до 451 нм.



Рис. 52 -1. Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного поверхностью *алюминия* с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 2.5×2.5 мкм; глубина рельефа: $d_1=0$ нм, $d_2=55$ нм, $d_3=103$ нм, $d_4=143$ нм. Пунктиром отмечено а) значение угла Брюстера, где $\delta \Psi_{min} = \Psi_{1min}$ - $\Psi_{4min} = -3.2^{\circ}$ и б) значение $\Delta=90^{\circ}$, чтобы показать смещение главного угла падения φ_P : $\delta \varphi_P \approx 2^{\circ}$.¹⁴



Рис. 52 -2. Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного поверхностью *алюминия* с вытравленным рельефом СФМ; глубина рельефа: d_1 =250 нм, d_2 =306 нм, d_3 =350 нм, d_4 =408 нм, d_4 =451 нм.¹⁵

¹⁴ (Приложение VI: Рис. 8-1)

¹⁵ ПриложениеVI: Рис. 8-3, Рис. 8-4, Рис. 8-5, Рис. 8-6, Рис. 8-7

§ 5.4. Поверхностная анизотропия рельефной поверхности

Рельеф с малым размером *a* обладает большими *анизотропными* свойствами. Для иллюстрации анизотропных свойств образец вращался вокруг нормали к его поверхности. Очевидно, что такое вращение эквивалентно изменению профиля рельефа, при этом циклически (через 90°) меняется разность хода рассеянных лучей, и часть отраженного света уходит из плоскости падения. На Рис. 53 видно, что анизотропия Δ и Ψ от угла поворота θ вокруг нормали к поверхности образца может составлять от нескольких минут при малых глубинах рельефа до нескольких градусов при *d*=451 нм. В работе [51] было экспериментально обнаружено, что анизотропия в зависимостях $\Delta(\theta)$ и $\Psi(\theta)$ резко возрастает (~ в 5 раз), если угол падения ϕ_0 =62.5°, на котором проводились измерения анизотропии, находится вблизи угла интерференции, где $\Psi(\phi_0)$ максимально.



Рис. 53. Экспериментальные анизотропные зависимости поляризационных характеристик $\Delta(\theta)$ и $\Psi(\theta)$ для рельефной поверхности *алюминия* от угла поворота θ строки СФМ относительно плоскости падения вокруг нормали к плоскости образца. Размер элементарной ячейки-2.5 мкм; глубина рельефа: d_1 =143 нм, d_2 =208 нм, d_3 =451 нм; угол падения света φ_0 =62.5°; длина волны 0,63 мкм.

§ 5.5 Наблюдение аномального эффекта поглощения в нано-структурных системах

§ 5.5.1. Описание нано-вискеров; их параметры и свойства

Кремниевые нано-вискеры (также называемые нано-проволоками, нано-столбами или ноно-дорожками), выращенные молкулярно лучевой эпитаксией, рассматриваются как многообещающие структуры для изготовления post-CMOS логических элементов, благодаря их потенциальной совместимости с существующей CMOS технологией, что позволяет осуществить вертикальную архитектуру интегральных схем [103-105]. В наших предыдущих работах [106-108] были исследованы электрические и оптические свойства, а также морфология таких структур с помощью сканирующей электронной микроскопии (SEM), спектральной эллипсометрии и измерения вольт-амперных характеристик.

§ 5.5.2. Аномальное поглощение в области относительной прозрачности кремния

В эллипсометрических спектрах псевдо-диэлектрической функции таких структур, приведенных в этих работах, в области энергий фотонов от 1.5 эВ до 4.77 эВ наблюдалось аномально большое поглощение для структур, для которых кремниевые высокие (580÷890 нм) нано-вискеры были выращены на кремниевой подложке. Аномальное кажущееся поглощение наблюдалось в области *относительной прозрачности* кремния (0.45÷0.83 мкм, где для кристаллического кремния $\varepsilon_2 \approx 0$), только для высоких нано-вискеров и отсутствовало для нано-вискеров меньшей высоты (150-250 нм). Авторы объясняли эти аномалии интерференционным эффектом. Описание спектральных свойств диэлектрической функции слоя нано-вискеров с помощью метода эффективной среды, используя модель Бруггемана, не дало хороших результатов.

Псевдо - диэлектрическая функция вычисляется по формуле (86)

$$\varepsilon_{ncesolo} = \left(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2\right)_{ncesolo} = \tan^2 \varphi_0 \left[1 - \frac{\left(4\rho \sin^2 \varphi_0\right)}{\left(1 + \rho\right)^2}\right], \quad \rho = \frac{R_p}{R_s}, \quad (86)$$

если не учитывается реальная структура образца, т. е. структура полагается однородной и полубесконечной.

131



Рис. 54. Сверху в низ: SEM изображение одного Si-вискера с полусферической капелькой Аи на вершине и SEM изображения структуры (вид сверху); SEM изображение при косом падении, каждый вискер расположен в гексагональной ямке. Длина вискеров 580÷890 нм.

§ 5.5.3. Учет рассеяния света и фазовые соотношения

Возвращаясь к интерпретации полученных ранее эллипсометрических спектров и используя фазовые соотношения для интерферирующих лучей света, сравним длины волн, на которых наблюдаются аномалии в эксперименте и расчетные дины волн, полученные исходя из длины (высоты) вискеров, как показано в Таблице к Рис. 55.

В таблице приведены расчетные длины волн интерференции λ_1 и λ_2 , когда геометрическая разность хода лучей, отраженных от кремниевой подложки и от вершины высоких (или низких) вискеров, также между лучами, отраженными от вершин вискеров разной высоты, кратна π (π или 2π). Положение экспериментальных экстремумов в спектре ε_2 взято из Рис.

Как видно из Таблицы к Рис. 55, использование фазовых соотношений для интерпретации аномального поведения псевдо - диэлектрической функции в области относительной прозрачности кремния хорошо согласуется с экспериментом, если учесть, что точность определения длины вискеров хуже, чем точность позиционировании экстремумов в спектре.



Рис. 55. Спектр мнимой части 1) – диэлектрической функции чистой поверхности кристаллического кремния Si (100) и 2) -псевдо - диэлектрической функции ε_2 для поверхности кремния с на ней кремниевыми вискерами.

длина вискеров,	Длина волны инт	ерференции, мкм	Положение	экстремумов
МКМ	λ_1	λ_2	в спектре ε_2	
	$\Delta = \pi$	$\Delta = 2\pi$		
$L_1 = 0.99$	1.25	0.698		0.688
$L_2 = 0.58$	0.82	0.41	0.805	0.416
$L_3 = L_1 - L_2 = 0.41$	0.579	0.289	0.576	0.287

Таблица к Рис. 55.

Выводы к ГЛАВЕ 5.

 Экспериментально показано влияние поверхностного рельефа на поляризационные характеристики отраженного света методом многоугловых эллипсометрических измерений на одноволновом лазерном эллипсометре. Шероховатость поверхности моделировалась с помощью вытравленного рельефа, сформированного случайной фазовой маской (СФМ), все параметры которой *априори* известны.

- Теоретически найдены и сформулированы условия, при которых влияние рельефа максимально, это условие интерференции отраженного и рассеянного (рассеянного в зеркальную компоненту) света.
- Построены теоретические зависимости фазового угла Δ относительного коэффициента отражения ρ = tgΨe^{iΔ}, при котором наблюдается интерференция (Δ₁=π и Δ₁=3π), вычисленного методом сложения парциальных волн, при варьировании угла падения света φ для λ=0.633 мкм.
- Экспериментально показано, что условия интерференции, т. е. значения углов падения φ_{интер1} и φ_{интер2}, при которых Δ₁= π или 3π определяются суперпозицией двух парциальных волн, отраженных от верхней и нижней граней, и не зависят от:

а) диэлектрической функции поверхности (диэлектрика или металла),

б) размера ячейки СФМ, площадь которой изменялась в 100 раз.

- Экспериментально показано, что угловые зависимости поляризационных параметров
 Y и ∆ сильно зависят от:
 - а) глубины рельефа,
 - b) диэлектрической функции поверхности (диэлектрика или металла),
 - с) размера ячейки СФМ, площадь которой изменялась в 100 раз;
 - d) и их отличия составляют десятки градусов для тех же самых углов на идеально-гладкой поверхности.
- 6. Теоретически обосновано и экспериментально показано, что главной характеристикой, влияющей на поляризационные углы отраженного света, является глубина рельефа, которая варьировалась в диапазоне от 0 до 1 мкм.

- Экспериментально показано, что поверхностная анизотропия, определяемая углом поворота строки СФМ относительно плоскости падения света, сильно зависит от глубины рельефа.
- 8. Найдены условия, когда шероховатостью можно пренебречь.
- Показано, что использование фазовых соотношений для интерпретации аномального большого поглощения в области относительной прозрачности кремния для наноструктур (Si- кремниевые вискеры) хорошо согласуется с экспериментом.

ГЛАВА 6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ КАЛИБРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

В этой главе представлены результаты исследований поляризационных характеристик света, отраженного от неоднородной поверхности, на которую нанесено известное число калиброванных частиц с размерами от 0,15 до 5 микрометров. Обнаружено, что эллипсометрический параметр Δ является случайной величиной для такой поверхности, и его распределение подчиняется нормальному закону. Вместо общепринятой характеристики неоднородного слоя, выраженной в г/см², предложен универсальный критерий чистоты поверхности, равный произведению степени покрытия на диэлектрическую функцию материала частиц Q(ε_p-1), позволяющий определить пороговую чувствительность эллипсометрических параметров к наличию частиц на измеряемой поверхности. Многоугловые эллипсометрические измерения проведены на длине волны 0.63 мкм.

Во Введении был представлен обзор методов контроля неоднородных поверхностей, но многие из перечисленных методов находят лишь ограниченное применение в силу методической сложности, недостаточной надежности и малой разрешающей способности. Для полупроводниковых приборов и устройств при оценке рельефа в настоящее время

используется Атомно-силовой микроскоп, который определяет размеры дефектов в трех измерениях с высокой точностью, как например, на Рис. 8 в Главе 2. Однако полученная информация относится к малому участку большого образца.

Метод эллипсометрии, используемый для исследования оптических характеристик материалов и поверхностных покрытий, очень чувствителен к изменению параметров отражающей системы [1, 2]. Наличие на поверхности микрорельефа или загрязнений, как известно, изменяет электрические, механические и оптические свойства этой поверхности [18, 23]. Большая чувствительность поляризационных характеристик отраженного света к наличию неровностей позволила использовать эллипсометрический метод для оценки качества поверхности [20, 21].

Контроль поверхностей оптических деталей на их соответствие заданному параметру шероховатости согласно ГОСТ 2789-73 в условиях оптического производства осуществляется путем визуального сравнения с образцами шероховатости, заранее аттестованными с помощью какого-либо измерительного прибора [14], очевидно, что такой метод ненадежен.

§ 6.1. Описание исследуемой системы (Моделирование загрязнений)

При анализе технологического процесса изготовления оптических деталей было выявлено, что основными источниками загрязнений могут являться шлифующие и полирующие абразивные материалы, органические смолы (пеко-канифольные смолы, шеллак и др.). Трудности идентификации загрязнений на реальной поверхности исследуемого образца заставили перейти к моделированию реальных загрязнений.

На образец наносили взвеси веществ в этаноле при помощи бюретки 5/005 *ml*. Объем капли подбирался таким образом, чтобы она растекалась по всей поверхности образца и держалась на нем за счет поверхностного натяжения. Размер капли ≈0,5 мл. Испарение

этанола должно быть быстрым (1-2 мин), иначе он, поглощая воду, испаряется, а вода с порошком собирается в мелкие капли. Чтобы избежать этого, взвеси веществ наносили на подложку, разогретую до температуры t=70-80°С и нагревали в сушильном шкафу WSU 100 при той же температуре.

Взвеси веществ разводили в перегнанном этаноле (C₂H₅OH), так как он практически не оставляет следов на поверхности образца после высыхания. Первую концентрацию получали разведением десятикратной исходной навески каждого вещества в 5 мл этанола. Все последующие концентрации получали разведением предыдущей в два раза.

6.1.1. Выбор веществ, загрязняющих поверхность

Для эксперимента были выбраны следующие загрязнители:

1. Калиброванные алмазные синтетические порошки ACM I/0, ACM 2/1, ACM 3/3, ACM 5/3, где числитель указывает на максимальный размер зерен основной фракции, а знаменатель - на минимальный, выраженный в микрометрах. В состав алмазных микропорошков любой зернистости входит три фракции, причем основная составляет не менее 65%, мелкая - не более 30%, а крупная не превышает 5%. Алмазные порошки представляют собой смесь алмазных зерен, которые имеют правильную кристаллическую форму. За размер зерна принимают половину суммы длины и ширины проекции зерна на предметное стекло микроскопа. Плотность алмазного порошка $r = 3.5 \, r/cm^3$.

Полирит - порошок коричневого цвета. Основным веществом является окись церия
 CeO₂. Форма зерен - удлиненные пластинки среднего размера 2-3 мкм. Зерна легко
 дробятся, образуя остроугольные осколки. Плотность полирита г =7.3 г/см³.

3. Окись хрома Cr_2O_3 - полирующий микропорошок с размером зерен 0.8-1.2 мкм, интенсивного зеленого цвета. Плотность окиси хрома $r = 5.2 \text{ г/см}^3$.

137

Для получения закономерных зависимостей количество загрязнений брали из расчета максимальной исходной *концентрация распределенной массы* загрязнения, равной $C_{max1}=1\times10^{-6}$ г/см², для ACM I/0. За исходное число частиц на единицу поверхности принята *концентрация частиц N* самого мелкого абразивного материала ACM I/0:

$$N_1 = \frac{C_{\text{max1}}}{m_1} = 4.38 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2},$$

где m_i - масса одной частицы ACM I/0. Полагая форму частицы сферой с диаметром, равным среднему размеру частицы, и принимая за средний размер частиц 0,5 мкм, 1,5 мкм, 2,5 мкм и 4 мкм для алмазных синтетических материалов ACM I/0, ACM 2/1, ACM 3/2, ACM 5/3, соответственно; средний размер 2,5 мкм для полирита и 1 мкм для окиси хрома и, учитывая плотность каждого вещества, вычислим массу одной частицы: $m_i = 4\pi R_i^3 \rho_i$.

Таблица 6.1

Тип частиц	Масса частицы×10 ⁻¹² г	Тип частиц	Масса частицы×10 ⁻¹² г
ACM1/0	m ₁ =0.228	ACM 5/3	m ₄ =117.2
ACM 2/1	m ₂ =6.18	CeO ₂	m ₅ =59.59
ACM 3/2	m ₃ =28.6	Cr ₂ O ₃ 1.2/0.8	m ₆ =2.71

Тогда исходные максимальные навески для выбранного значения N₁ будут равны:

 $M_{i1} = m_i N_i s$.

Таблица 6.2

Тип частиц	Масса навески × 10 ⁻⁶ г	Тип частиц	Масса навески × 10 ⁻⁶ г
ACM1/0	M ₁₁ =12.4	ACM 5/3	M ₄₁ =6373.34
ACM 2/1	M ₂₁ =336.06	CeO ₂	M ₅₁ =3240.5
ACM 3/2	M ₃₁ =1555.2	Cr ₂ O ₃ 1.2/0.8	M ₆₁ =147.36

6.1.2. Выбор подложки

В качестве подложек использовали прямоугольные пластины из кварцевого стекла КУ-I (ГОСТ 15130-79). Кварцевое стекло обладает высокой механической прочностью в широком интервале температур. Оно не гигроскопично, устойчиво к воздействию воды. Полировали пластины по I-II классу чистоты (ГОСТ 11147-76). Микронеровности на поверхности R_z =0.025-0.08 мкм (ГОСТ 2789-73). Площадь поверхности подложек составляет 12,4 см². Толщина подложек *l*=3 мм. Обратную сторону подложки матировали, чтобы прошедший через стекло луч не отражался, а полностью рассеивался нижней гранью и не влиял на результаты измерений.

6.1.3. Методика проведения эксперимента

Эллипсометрические измерения выполнены по двухзонной методике на ЛЭФ-ЗМ с I =0.63 мкм. Серия измерений проведена на двух образцах при углах падения света $\phi_0 \in 45^\circ$ -

 75° с шагом 2° и в области углов $\phi_0 \in 56^\circ\text{-}58^\circ$ с шагом 0.5° для каждой концентрации.

Были проведены два типа измерений. Первый тип измерений - измерения в разных точках поверхности при фиксированном угле падения светя. Этот тип измерений несет *информацию об однородности поверхности*. Для каждой концентрации взвесей всех веществ проводили по 7 измерений в разных точках.

Второй тип измерений - многоугловые зависимости эллипсометрических углов $Y(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$ реальной поверхности. Поскольку зависимости $Y(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$ существенно нелинейны, важно было выяснить наибольшее влияние наличия частиц на поверхности на измеренные величины. Кроме того, для оценки *воспроизводимости* измерений для каждого угла падения проведены 5-кратные измерения в одной точке, затем была просчитана среднестатистическая ошибка для каждого угла падения, которая зависит от работы оператора, свойств самой системы, угла падения света, точности прибора.

$$\delta \Psi = t \overline{S_{\Psi}}, \quad \overline{S_{\Psi}} = S_{\Psi} / \sqrt{N}, \quad S_{\Psi} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} (\Psi_i - \overline{\Psi})^2}, \quad \overline{\Psi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Psi_i,$$

$$\delta \Delta = t \overline{S_{\Delta}}, \quad \overline{S_{\Delta}} = S_{\Delta} / \sqrt{N}, \quad S_{\Delta} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} (\Delta_i - \overline{\Delta})^2}, \quad \overline{\Delta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i$$
(87)

где *i* =1,2,...,5; t -коэффициент Стьюдента, для данного доверительного интервала t=2,8 для N=5; N - число пар измеренных значений Y и Δ ; δ Y и $\delta\Delta$ - среднестатистические ошибки эллипсометрических углов.

Учитывая неоднородность распределения "загрязнителей" по поверхности образца, проводили замеры Y и Δ в 7 точках, а затем определяли среднее арифметическое значение поляризационных углов

$$\overline{\Psi} = \frac{1}{7} \sum_{i=1}^{7} \Psi_i, \quad \overline{\Delta} = \frac{1}{7} \sum_{i=1}^{7} \Delta_i.$$
(88)

Затем рассчитали среднеквадратичный разброс $\sigma_{\rm Y}$ и σ_{Δ} поляризационных углов по поверхности образца.

$$\sigma_{\Psi} = \frac{1}{7} \sqrt{\sum_{i=1}^{7} (\Psi_i - \overline{\Psi})^2}, \quad \sigma_{\Delta} = \frac{1}{7} \sqrt{\sum_{i=1}^{7} (\Delta_i - \overline{\Delta})^2}.$$
(89)

§ 6.2. Фаза относительного коэффициента p- случайная величина,

характеризующая неоднородную поверхность

Для неоднородной поверхности, как было показано в [21], относительный коэффициент отражения $\rho = tg \Psi e^{i\Delta}$ является случайной функцией координат поверхности. Экспериментально было обнаружено, что из двух измеряемых на эллипсометре величин **Y** почти не несет информации о неоднородности изучаемой системы, а Δ превращается в случайную величину, характеризующую неоднородную поверхность. Как всякая случайная величина Δ может принимать любое значение из диапазона от 0° до 360°. Однако, среднее значение случайной величины $\overline{\Delta}$ и ее среднеквадратичное отклонение при достаточно

большом количестве измерений есть величины, присущие данной неоднородной поверхности. На Рис. 56 приведены экспериментальные результаты зависимости среднего значения случайной величины $\overline{\Delta}$ и ее среднеквадратичного отклонения **s** от количества измерений n_k для разного размера и количества частиц на поверхности кварца. Из Рис. 56 видно, что при $n_k > 20 \overline{\Delta}$ и **s** отличаются для каждой из систем не более, чем на 5%.

6.2.1. Сравнение эмпирического и теоретического распределения случайной

величины

В связи с этим проведена оценка необходимого числа измерений для вычисления среднего значения случайной величины Δ и оценку вероятности отклонения выборочных средних от генеральной средней совокупности. Оценку вероятности отклонения легко сделать для случайных величин, подчиняющихся нормальному закону распределения.



Рис. 56. Зависимость среднего значения $\overline{\Delta}$ (пунктирные линии) от числа измерений n_k для алмазных частиц с размерами 2.5 (0.25) мкм и концентрацией 2.7 10^5 (4.4 10^7) см⁻², соответственно. Вертикальными штрихами обозначены среднеквадратичные отклонения $\pm s$ для соответствующих значений $\overline{\Delta}$.

Поэтому вначале по методу Пирсона эмпирическое распределение сравнено с теоретическим (нормальным) распределением для двух размеров частиц с различной концентрацией. Метод Пирсона и методика вычислений подробно описаны в [15, 109-110].



Рис. 57. Сравнение гистограммы эмпирического и полигона теоретического нормального распределения для алмазных частиц: a)-d=2.5 мкм, N= 2.7×10^5 см⁻², число интервалов s=7; б)-d=0.25 мкм, N= 4.4×10^7 см⁻², число интервалов s=8.

а)- относительная частота, б)- плотность вероятности.

На Рис. 57 представлены результаты расчета по методу Пирсона в виде гистограммы эмпирического распределения и полигона теоретического распределения от аргумента t, выраженного в условных единицах, где в качестве <u>критерия согласия</u> были использованы *критерий Колмогорова* и *коэффициент точности*. Из этого рисунка видно, что теоретическое нормальное распределение является хорошим приближением для эмпирического распределения фазы Δ относительного коэффициента отражения **г** неоднородной поверхности.

6.2.2. Оценка необходимого числа измерений по правилу сигмы

Интеграл вероятности для нормального закона имеет вид $\Phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-(\Delta - \bar{\Delta})^2/2\sigma_\Delta^2} d\Delta$,

 $z = \Delta - \overline{\Delta} / \sigma_{\Delta}$. Для нормального закона распределения случайной величины вероятность того, что Δ по абсолютной величине не превышает среднего квадратичного отклонения S_{Δ} , равна удвоенному значению интеграла вероятности $\Phi(z)$, где z=1.

$$p(|\Delta| < \sigma) = 2\Phi(1) = 0.6826.$$

Смысл этой формулы в том, что, если распределение близко к нормальному, то приблизительно в двух третях случаев абсолютная величина отклонения не превышает **S**. Это утверждение называется *правилом сигмы*.

Доверительной вероятностью того, что случайная величина примет какое-нибудь значение в некоторых границах, называется такое значение этой вероятности, которое по соглашению считается достаточно близким к единице. Соответствующие границы называются доверительными. Доверительные вероятности и соответствующие им доверительные границы приведены в Таблице 6.3.

Таблица 6.3.

Доверительные границы	Доверительные вероятности
$\overline{\Delta} \pm \mathbf{S}$	0,683
$\overline{\Delta} \pm 1.5$ s	0,866
$\overline{\Delta} \pm 2\mathbf{S}$	0,954
$\overline{\Delta} \pm 3s$	0,997

Как показал предварительный анализ статистической обработки эмпирического материала, все выводы, касающиеся нормального закона, применимы к оценке *необходимого числа измерений* в эксперименте, благодаря хорошему согласию между теоретическим и эмпирическим распределением. *Необходимое число измерений* определяется двумя факторами:

а) трудоемкостью эксперимента (ограничивается максимальное число измерений);

б) доверительной вероятностью выбранных доверительных границ (см. Таблицу 6.3).

Например, если доверительные границы заданы ±S, то по правилу сигмы только одна

треть измерений выпадает из заданного интервала. Если же доверительные границы расширить до 1.5 s, то мало вероятно, чтобы отклонение случайной величины превысило заданный интервал и число измерений можно уменьшить.

§ 6.3. Основные экспериментальные результаты

6.3.1. Цель и задачи

Основной целью данной главы является установление количественной связи между непосредственно измеряемыми в эксперименте поляризационными углами Y и Δ для света,

отраженного от поверхности, покрытой известным числом частиц, размер и вещество которых также известны заранее, с характеристиками загрязнения поверхности: концентрацией, степенью покрытия и т.д. Для достижения основной цели работы решался целый ряд небольших задач:

a) определение угла падения φ₀, обеспечивающего *максимальную чувствительность* к
 наличию загрязнений при приемлемой точности;

б) исследование зависимости поляризационных характеристик отраженного света от концентрации загрязнений;

в) исследование *зависимости от размера* загрязняющих частиц изменения поляризации света при отражении;

г) исследование зависимости поляризационных характеристик от материала частиц;

 д) установление *минимальных изменений* поляризационных углов в модельной системе – на подложке с нанесенным слоем предполагаемых загрязнений;

е) определение предельно обнаруживаемых концентраций частиц из эллипсометрических измерений.

6.3.2. Выбор измерительной ситуации

Из всего набора параметров, от которых зависит относительный коэффициент отражения $\rho \equiv \tan \Psi e^{i\Delta} = R_p/R_s$, в нашем эксперименте изменяется только угол падения φ_0 ; поэтому выбор измерительной ситуации связан с поиском оптимального угла падения света φ_0 , обеспечивающего, с одной стороны, максимальную чувствительность к наличию загрязнений, а с другой стороны, достаточную точность измерений.
Вклад, вносимый загрязняющими частицами в изменения поляризационных углов Ү

и Δ , может зависеть от угла падения света φ_0 по двум причинам. Во-первых, площадь зондирования образца световым пучком обратно пропорциональна величине $\cos \varphi_0$ [21]. При изменении угла φ_0 от 45° до 75° площадь растет почти в 3 раза и, следовательно, возрастает число частиц в зондируемой области. Во-вторых, за счет различия в угловой зависимости R_p и R_s .

На Рис. Рис. 51-1 показаны расчетные зависимости поляризационных углов Y и Δ для чистой кварцевой подложки от угла падения φ_0 . Аналогичные зависимости Y(φ_0) и $\Delta(\varphi_0)$ можно наблюдать для любого прозрачного материала, отличие будет только в значении φ_5 , определенного как arctan n_1 , для которого $R_p=0$. Следует помнить, что приращения коэффициентов Френеля за счет наличия загрязнений на поверхности может оказаться малым из-за больших значений R_p и R_s на углах падения света вдали от φ_5 .



Рис. 58. Зависимость приращения угла $\delta\Delta = \overline{\Delta}_{3\kappa cn} - \Delta_0$, характеризующая чувствительность фазы Δ к углу падения ϕ_0 и к концентрации частиц окиси хрома (Cr₂O₃) с размерами 0.8-1.2 мкм. Концентрации отличаются в 8 раз.

На Рис. 58 показана угловая зависимость чувствительности фазы относительного коэффициента отражения поляризованного света $\delta\Delta(\phi_0)$ от параметра N_i - поверхностной концентрации частиц. Резкая зависимость чувствительности $\partial\Delta(\phi_0)/\partial N$ определяет выбор угла падения -56°. Для оценки точности определения параметра Δ по методике, описанной выше, рассчитана ошибка для реального чистого образца, которая составила 0°04', т.е. заведомо меньше изменений параметра Δ , вносимых наличием частиц на поверхности. Подробнее в таблице I, опубликованной ранее в [110], были приведены *все экспериментальные* результаты, относящиеся к углу падения ϕ_0 =56°; и было видно, что изменения поляризационного угла Y для любых концентраций много меньше, чем угла Δ

даже для φ₀=56°, (т.е. в области максимальной чувствительности). Изменения δ**Y** едва превышает 0.5°, тогда как изменения δΔ могли составлять десятки градусов.

Таблица I была построена так, что в каждой ее строке приведены значения поляризационных углов Y и Δ для одного и того же количества N [частиц / см²] разного размера и материала и с разной удельной поверхностной плотностью загрязнений C [г/см²]. На основании данных таблицы I построены два графика зависимости Δ (N) и Δ (C) на Рис. 59 и Рис. 60, соответственно.

6.3.3. Зависимость поляризационных характеристик от концентрации загрязнений

Частицы на поверхности кварца приводят к заметному рассеянию отраженного света, причем рассеяние не изотропно, а имеет ярко выраженную *спекловую* картину. Яркость центрального пятна, соответствующего зеркальному отражению, заметно уменьшается с увеличением концентрации частиц, следовательно, все большая часть падающей энергии рассеивается. Деполяризация в центральном пятне не значительна. Степень деполяризации зеркальной компоненты можно оценить по уровню сигнала гашения и можно сделать количественное сравнение для различных концентраций частиц. Все наши измерения

относятся к анализу состояния поляризации зеркально отраженной компоненты света; и далее будут обсуждаться результаты, относящиеся только к этим измерениям.



Рис. 59. Зависимость фазового угла $\overline{\Delta}$ от концентрации частиц N (log₂N) на поверхности кварца для разного размера и типа частиц. Алмазные синтетические порошки (ACM) с размерами частиц 1/0 мкм, 2/1 мкм, 3/2 мкм, 5/3 мкм; окись хрома с размерами частиц 1 мкм; полирит с размерами частиц 3/2 мкм. На вставке показано распределение частиц по размеру. $\overline{\Delta}_0 = 0^\circ$ – значение для чистой поверхности. (Угол падения света $\phi_0 = 56^\circ$; длина волны света $\lambda = 0.63$ мкм.)



Рис. 60. Зависимость фазового угла $\overline{\Delta} \pm \sigma_{\Delta}$ от концентрации распределенной массы С [г/см²] на поверхности кварца для разного размера и типа частиц. Алмазные синтетические порошки (ACM) с размерами частиц 1/0 мкм, 2/1 мкм, 3/2 мкм, 5/3 мкм; окись хрома Cr₂O₃ с размерами частиц 1.2/0.8 мкм; полирит CeO₂ с размерами частиц 3/2 мкм. $\overline{\Delta}_{0} = 0^{\circ}$ – значение для чистой поверхности. (Угол падения света $\phi_{0}=56^{\circ}$; длина волны света $\lambda=0.63$ мкм.)

Рассмотрим влияние концентрации частиц на поляризационные углы. Концентрацию будем выражать двумя способами: а) N - число частиц на единицу площади - удельная поверхностная концентрация [частиц/см2]; б) С - количество массы в граммах на единицу площади поверхности - удельная поверхностная плотность загрязнений [г/см2]. На Рис. 59 и Рис. 60, концентрации даны в логарифмическом масштабе. На вставке к Рис. 59 показано распределение частиц по размеру внутри каждой фракции.

К сожалению, величины N и C не являются однозначными характеристиками загрязнения поверхности: одному и тому же изменению Δ соответствуют различные по порядку величины концентраций C или N загрязнений частицами, отличающимися по размеру и показателю преломления. Из этих рисунков трудно определить предельно малую концентрацию частиц, обнаруживаемую эллипсометрическим методом, что в конечном итоге нас интересует больше всего.

6.3.4. Зависимость поляризационных характеристик от геометрии частиц

Для исследования зависимости поляризационных углов **Y** и Δ от геометрии загрязняющих частиц были проведены измерения с использованием алмазных синтетических порошков, средний размер частиц которых изменялся от 0,5 мкм до 4 мкм. Наши исследования показали, что при увеличении среднего размера частиц при одной и той же удельной поверхностной концентрации N изменение поляризационного угла Δ также возрастает, т.е. угол Δ чувствителен не только к концентрации частиц, но и к их размеру. Чувствительность $\partial \Delta / \partial d$ тем больше, чем больше концентрация частиц.

На Рис. 61 представлены зависимости среднего значения Δ от размера частиц алмазных синтетических порошков, из которых видно, что Δ достаточно пропорционален среднему размеру частиц в пределах постоянной концентрации частиц одного и того же материала.



Рис. 61. Зависимость поляризационного угла $\overline{\Delta}$ от среднего размера частиц АСМ для шести различных концентраций (1-6). 1-исходная концентрация N₁=4.4·10⁶ частиц/см², каждая следующая концентрация в 2 раза меньше предыдущей. $\overline{\Delta}_0=0^\circ$ –значение поляризационного угла для чистой поверхности.

(Угол падения света $\phi_0=56^\circ$; длина волны света $\lambda=0.63$ мкм.)

6.3.5. Зависимость поляризационных характеристик от материала частиц

Результаты эксперимента показали, что при одинаковой удельной поверхностной концентрации N или при одинаковой удельной поверхностной плотности C и одинаковом размере частиц, но для разных материалов, т.е. с отличающейся диэлектрической проницаемости (*или комплексным показателем преломления n*), наблюдаются существенно различные зависимости $\partial \Delta(N)$ или $\partial \Delta(C)$. Вернемся к Рис. 60 и сравним поведение поляризационного угла Δ от концентрации для частиц с одинаковым размером. Частицы окиси хрома Cr₂O₃ (1.2/0.8 мкм) и ACM (2/1 мкм), имеющие средний размер \approx I мкм, дают вклад в изменение Δ , отличающийся на десятки градусов. То же самое наблюдается и для частиц со средним размером \approx 2.5 мкм для полирита и ACM (3/2 мкм), эффект здесь не менее яркий.

Такая разница в поведении ∆ объясняется, прежде всего, поглощением света частицами окиси хрома и полирита в видимой области (I =0.63 мкм).

§ 6.4. Математические модели описания поверхности, покрытой частицами

В этом параграфе рассмотрен вопрос *математического* описания поверхности, покрытой частицами, с помощью которой получены экспериментальные результаты по моделированию загрязнений.

6.4.1. Модель эффективной подложки

Схема модели эффективной подложки приведена на Рис. 62.



Рис. 62.

Сущность такой модели заключается в замене поверхности с некоторым неоднородным слоем частиц на абсолютно гладкую поверхность, ограничивающую *полубесконечную* среду, называемую эффективной подложкой, при условии, что воздействие на поляризацию отраженного света эффективной подложкой адекватно воздействию нашей модельной поверхности. Эффективная подложка описывается эффективными оптическими константами n_e и k_e, формулами аналогичным (18-19), приведенным в § 2.1.

На Рис. 63 на комплексной плоскости n_e - ik_e отображены изменение параметров эффективной подложки для всех исследуемых материалов. Основные выводы, которые можно сделать, исходя из модели эффективной подложки:

1. Появление кажущегося поглощения подложки. Напомним: кварц прозрачен и поглощение отсутствует. Кажущееся поглощение меняется в наших экспериментах на два порядка.

Изменения показателя преломления n_e укладываются в 0,004 и составляют ≈0.3% от показателя преломления чистого кварца.

Модуль $|N_e| = \sqrt{n_e^2 + k_e^2}$ мало отличается от \overline{N} для чистой поверхности, поэтому эффективная подложка влияет только на фазу отраженного света.

4. Модель никак не описывает рассеяние.



Рис. 63. Зависимость параметров эффективной подложки *n*_e и *k*_e от концентрации частиц разного размера и материала: 1, 2, 3-алмазные синтетические порошки с размерами частиц 1.5, 2.5 и 4 мкм, соответственно; 4-полирит (2.5 мкм), 5-окись хрома (1 мкм). Кружочки с цифрами относятся к исходной концентрации частиц *N*₁= 4.4 10⁶ частиц/см², каждый следующий шаг-к концентрация в 2 раза меньше. Треугольниками обозначены минимальные концентрации для соответствующего размера частиц.

6.4.2. Модель однородной изотропной пленки.

На Рис. 65 приведена схема модели, описывающей исследуемую поверхность с помощью однородной изотропной пленки. Сущность этой модели состоит в замене неоднородного поверхностного слоя на однородный изотропный и непоглощающий слой (k_I =0), свойства подложки при этом остаются неизменными.



Рис. 64.

Попытка определить параметры слоя с помощью программы "Поиск" [110] не дала удовлетворительных результатов по двум причинам:

а) точность экспериментального определения Y в исследуемой системе недостаточна для

поисковой задачи; б) не разрешается неоднозначность относительно толщины пленки.

6.4.3. Модель эффективной среды

Особенности модели эффективной среды, ее возможности и область ее применимости подробно рассмотрены в [43]. На Рис. 65 показана схема модели эффективной среды с учетом объемной доли материала частиц. Неоднородный поверхностный слой заменяется на однородный слой эффективной пленки, описываемой четырьмя параметрами q, n_e , k_e и d_e , два из которых q и d_e являются независимыми, тогда как n_e и k_e зависят от объемной доли содержания материала частиц в слое. Оптические свойства эффективной пленки заданы выражением (27а).

$$N_e = n_e - ik_e = \sqrt{\frac{1+2q\alpha_f}{1-q\alpha_f}}, \quad \alpha_f = (\varepsilon_p - 1)/(\varepsilon_p + 2),$$

где є_р-диэлектрическая функция материала частиц.



Рис. 65

Графическая интерпретация экспериментальных результатов проводится аналогично [49], для чего на Рис. 66 приведена расчетная номограмма для е_p=5.76.



Рис. 66. Номограмма на плоскости Ψ-Δ для алмазных частиц на кварцевой подложке, рассчитанная по модели эффективной среды, показаны линии равной толщины d_e и линии равного коэффициента заполнения q. (Угол падения света φ₀=56[°]; длина волны света λ=0.63 мкм.)

Такая модель годится для интерпретации результатов измерений на поверхностях с концентрацией частиц $(1-4)\cdot 10^6$ см⁻². При меньших концентрациях возникают трудности интерпретации, связанные с малыми изменениями δ **Y** и большой погрешностью измерения этого параметра; т.е. когда значения **Y** близки к Ψ_0 на чистой поверхности и изменения, вносимые наличием частиц на поверхности, сравнимы с экспериментальной ошибкой. Таким образом, математические описания поверхности, содержащей слой частиц, рассмотренные в разделах 6.4.1-6.4.3, могут быть применены для выбранных материалов в нашем эксперименте только для больших концентраций частиц. Эти модели могут быть полезны для другого набора параметров системы, аналогичной рассмотренной.

§ 6.5. Выбор характеристики для оценки загрязнений

Рассмотренные зависимости поляризационных углов отраженного света от величин, характеризующих частицы, таких как: концентрация N или C, средний размер d и диэлектрическая проницаемость e_p , не является однозначными и универсальными.

Поэтому рассмотрим еще две величины, характеризующие покрытие:

а) степень покрытия в поверхности частицами, равную отношению площади,

занимаемой частицами к площади образца:

$$\theta = Ns_n = N\pi d^2/4, \qquad (90)$$

б) α_e - поляризуемость единичного объема слоя покрытия: $\alpha_e = q \alpha_p$, где q, -объемная доля слоя, занимаемая частицами, α_p -поляризуемость единичного объема материала частицы.

$$q = \frac{NV_p}{2rs_p} = \frac{4\pi r^3 N}{6r} = \frac{\pi d^2 N}{6}.$$
 (91)

Таким образом

$$\alpha_e = \frac{\pi d^2 N(\varepsilon_p - 1)}{6}.$$
(92)

Рассмотрим связь между поляризационным углом Δ и α_e . Поскольку размер частиц в нашем эксперименте больше длины волны падающего излучения d > λ , поэтому

разложить экспоненты в коэффициентах Френеля по δ, как по малому параметру, нельзя, что обычно делают при рассмотрении отражения тонким слоем или малыми частицами [1, 16]. Но, если рассматривать электрическое поле *E* в точке регистрации как суперпозицию волн, отраженных различными участками поверхности, то:

$$E = E_0(1-\theta)R_1 + E_0\theta\xi R_2 e^{i(\delta_p + \delta_e)}$$
(93)

где **q** -степень покрытия, ξ -коэффициент учитывающий рассеяние, $\xi \leq I$, R_1 и R_2 амплитудные коэффициенты отражения от чистой поверхности подложки и от эффективной пленки, соответственно. Первое слагаемое в (93) определяет отражение от чистой поверхности, второе - вклад в зеркальную компоненту отражения от частиц на поверхности, δ_e -разность хода лучей, вносимая частицами, δ_p -скачок фазы при отражении:

$$\delta_e = \frac{4\pi d_e}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_e - \sin^2 \varphi_0}, \quad \varepsilon_e = 1 + \alpha_e.$$
(94)

Тогда основное уравнение эллипсометрии с учетом (94) можно представить в виде:

$$\rho \equiv \tan \Psi e^{i\Delta} = \frac{(1-\theta)R_{1p} + \theta\xi R_{2p}e^{i(\delta_{pp}+\delta_e)}}{(1-\theta)R_{1s} + \theta\xi R_{2s}e^{i(\delta_{ps}+\delta_e)}}$$
(95)

Поскольку коэффициент, учитывающий рассеяние в зеркальном направлении, $\xi << I$ и степень покрытия **q** < 1, то **q** $\xi \ll (1-q)$ и

$$\theta \xi R_{2p} < (1-\theta)R_{1p} \ \text{i} \ \theta \xi R_{2s} < (1-\theta)R_{1s} \tag{96}$$

тогда

$$\tan \Psi \simeq \frac{(1-\theta)R_{1p}}{(1-\theta)R_{1s}} = \tan \overline{\Psi}_0$$
(97)

Следовательно, Y неоднородной поверхности близко к $\overline{\Psi}_0$ чистой поверхности. Поскольку, в нашем эксперименте для диэлектрической подложки и для фиксированного рабочего угла падения света $\varphi_0 > \varphi_b$ коэффициент отражения R_p - действительное число и фаза r определяется следующим отношением:

$$\Delta \simeq \arctan \frac{\theta \xi R_{2p} \sin(\delta_{pp} + \delta_e)}{\theta \xi R_{2p} \sin(\delta_{pp} + \delta_e) + (1 - \theta) R_{1p}},$$
(98)

которое преобразуется в соответствие с (96):

$$\Delta \simeq \arctan \frac{\theta \xi R_{2p} \sin(\delta_{pp} + \delta_e)}{(1 - \theta) R_{1p}} \approx \frac{\theta \xi R_{2p} \sin(\delta_{pp} + \delta_e)}{(1 - \theta) R_{1p}}.$$
(99)

После логарифмирования (87) получим

$$\ln \Delta \simeq \ln[\theta \xi R_{2p}] + \ln \sin(\delta_{pp} + \delta_e) - \ln[(1 - \theta)R_{1p}], \qquad (100)$$

где последними двумя членами можно пренебречь из-за их слабой зависимости от параметров частиц; поскольку d_e << I и δ_e << δ_{pp}. Используя для грубой оценки толщины эффективной пленки условие, что объем частиц, приходящийся на единицу площади, равномерно распределены по этой же площади, получим:

$$d_e = \frac{NV_p}{S} = \frac{\pi d^3 N/6}{1} = \frac{\pi d^3 N}{6}$$

Величина d_e для используемых в эксперименте размеров и концентраций лежит в диапазоне ($10^{-4} - 10^{-2}$) мкм. Следовательно, если d_e < $\lambda/10$ и sin($\delta_{pp} + \delta_e$) ≤ 1 , тогда

$$\ln \Delta \simeq \ln[\theta \xi R_{2n}] \tag{101}$$

Рассмотрим зависимость R_{2p} от e_p частиц для фиксированного угла падения $\phi_0=56^\circ$.

$$R_{2p} = \frac{\sqrt{1 + \beta(\varepsilon_p - 1)} \cos \varphi_0 - \sqrt{1 - \sin^2 \varphi_0 / [1 + \beta(\varepsilon_p - 1)]}}{\sqrt{1 + \beta(\varepsilon_p - 1)} \cos \varphi_0 + \sqrt{1 - \sin^2 \varphi_0 / [1 + \beta(\varepsilon_p - 1)]}} \approx \frac{\sqrt{1 + \beta(\varepsilon_p - 1)} \cos \varphi_0 - 1}{\sqrt{1 + \beta(\varepsilon_p - 1)} \cos \varphi_0 - 1} \approx \gamma [\cos \varphi_0 (1 + \frac{1}{2}\beta(\varepsilon_p - 1)) - 1] \approx t(\varepsilon_p - 1)$$
(102)

Это условие выполняется только в узкой области значений ее, т.е. для малых степеней

покрытия q. При этом можно записать

$$\ln \Delta \simeq \ln[\theta(\varepsilon_n - 1)] \tag{103}$$

$$\ln \Delta \simeq \ln[Nd^2(\varepsilon_p - 1)] \tag{104}$$

На основании (98)-(104) можно предположить теоретически линейную зависимость между $\ln \Delta$ и логарифмом от произведения параметров частиц $\ln[Nd^2(\varepsilon_p - 1)]$.

На Рис. 67 построена экспериментальная зависимость изменения фазы Δ относительного коэффициента отражения неоднородной модельной поверхности от параметров калиброванных частиц для трех видов этих частиц по результатам наших измерений. Экспериментальная зависимость удовлетворительно согласуется с предсказанной теоретической. По-видимому, согласие было бы более четким, если бы усреднение по Δ проводилось по большему числу измерений.

На рис.67 легко определить пороговую чувствительность поляризационных измерений к наличию частиц на поверхности: при экспериментальном отклонении Δ от значения $\overline{\Delta}_0$ - чистой поверхности равном 5 угловым минутам, $\ln[Nd^2(\varepsilon_p - 1)] = -6.5$. Из

этой величины для каждого конкретного материала частиц легко определить пороговую чувствительность по какому-нибудь неизвестному параметру частиц, *если другие известны априори*. Этот график также показывает, что практически невозможно идентифицировать тип загрязнений или восстановить все интересующие величины (N, C, d, q, e_p), поскольку

фаза Δ зависит только от их произведения.

Все сделанные выше заключения полностью применимы для частиц, размер которых меньше длины волны. В эксперименте не замечено никакой резкой границы для частиц с размерами больше и меньше длины волны



Рис. 67. Зависимость $\ln \Delta$ от $\ln[Nd^2(\varepsilon_p - 1)]$ для частиц окиси хрома (Cr₂O₃), полирита (CeO₂) и алмазных частиц.

Основные выводы к ГЛАВЕ 6.

 Найдена зависимость изменения поляризации отраженного света от концентрации калиброванных частиц на неоднородной поверхности и показано, что существенными являются только фазовые изменения, а не амплитудные. Причем эти изменения регистрируются только вблизи угла Брюстера.

- Показано, что Δ случайная величина, среднее значение которой характеризует неоднородную поверхность, а ее зависимость от координаты Δ(x) хорошо описывается нормальным законом, что разрешает пользоваться правилом сигмы для оценки необходимого числа измерений.
- Установлена связь между изменением среднего значения фазы относительного коэффициента отражения и параметрами, описывающими неоднородный поверхностный слой (N, d, *ε_p*).
- Экспериментально доказано, что общепринятая характеристика загрязнения поверхности, выражаемая в г/см2, не является информативной и универсальной при эллипсометрических измерениях.
- Экспериментально не обнаружено различия в зависимости ∆ от параметров частиц, средний размер которых меньше длины волны света.
- Математическое моделирование неоднородной поверхности не дает удовлетворительных результатов из-за недостаточного разрешения по углу Ψ в рамках трех рассмотренных моделей: а) эффективной подложки, б) изотропной однородной пленки и в) эффективной среды. Обнаружено экспериментально, что нет согласия и с моделью эффективной пленки, предложенной Г. ван де Хюлстом [16], где комплексный показатель эффективной пленки пропорционален числу частиц.
- Предложен единый критерий чистоты поверхности для неоднородного поверхностного слоя в виде произведения степени покрытия и диэлектрической проницаемости или в виде произведения числа частиц на квадрат среднего размера и на диэлектрическую проницаемость материала части Nd²(ε_p -1).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Поляризация света, отраженного от шероховатой поверхности, характеризуются

случайными функциями Y(x) и $\Delta(x)$, зависящими от координат поверхности x.

Средние отклонения этих функций бҮ и б∆ являются легко измеряемыми и непосредственными характеристиками шероховатой поверхности. Критерием чистоты поверхности могут служить минимальные значения бҮ и б∆ и их инвариантность от угла падения света. При уменьшении микрорельефа зеркально гладких поверхностей значения Ү и ∆ заметно изменяются, но и величина и характер этих изменений различны для различных материалов.

- 2. Теоретический анализ модели эквивалентной пленки для шероховатой поверхности, показал, что комплексный показатель преломления эквивалентной пленки может иметь экстремумы в зависимостях n_e(q) и k_e(q), особенно ярко проявляющиеся для сильно-поглощающих материалов. Получено условие *концентрационного* резонанса, который может наблюдаться для материалов, у которых k_s > 2, a n_s < k_s, например, для золота, серебра, меди. Объяснена возможность разрушения зеркально-гладкой поверхности из-за аномально-высокого поглощения в тонком слое эквивалентной пленки.
- 3. Методом эквивалентной пленки: 1) объяснена причина затухания осцилляций эллипсометрических углов в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии германия на германии, когда шероховатость поверхности очень мала; 2) из спектров Ψλ) и Δ(λ) найдены композитный состав, толщина и край поглощения TiO₂ пленок, диэлектрическая функция которых описывается набором осцилляторов Лорентца.
- 4. Графический метод предложен для количественной оценки параметров шероховатости зеркально-гладких поверхностей, путем замены четырех искомых параметров на два независимых. Показана, на примере нескольких материалов (диэлектрика-кварца, металлов- меди и молибдена, полупроводника- кремния),

возможность неоднозначности решения с использованием эквивалентной пленки и метод ее устранения. Наши данные, полученные из применения этого метода, хорошо коррелируют с результатами статистической обработки интерферограмм и профилограмм полированных поверхностей ряда материалов, в том числе и меди, взятыми из работы других авторов.

- 5. Теоретически найдены и сформулированы условия максимального влияния рассеянного света на поляризационные характеристики света, отраженного от поверхности с вытравленным рельефом случайной фазовой маски. Получены аналитические выражения, связывающие параметры рельефа с состоянием поляризации отраженного света при учете рассеяния и затенения, и рассчитаны зависимости Ψ(φ₀) и Δ(φ₀) для рельефной поверхности. Найдены условия, когда шероховатостью можно пренебречь.
- Экспериментально показано, что для поверхности с вытравленным рельефом зависимости поляризационных параметров Y(φ₀) и Δ(φ₀) сильно зависят от:
 - а) глубины рельефа, которая варьировалась в диапазоне от 0 до 1 мкм,
 - b) диэлектрической функции поверхности (диэлектрика или металла),
 - с) размера ячейки СФМ, площадь которой изменялась в 100 раз,
 - d) поверхностная анизотропия сильно зависит от глубины рельефа.
- 7. Экспериментально показано, что использование фазовых соотношений для интерпретации аномально высокого "кажущегося" поглощения в области относительной прозрачности кремния для наноструктур (Si/кремниевые вискеры) хорошо согласуется с экспериментом.
- 8. Установлено, что для неоднородной поверхности, неоднородность которой моделируется с помощью *калиброванных* частиц, существенными являются только фазовые изменения вблизи угла Брюстера. Предложен единый критерий чистоты поверхности для неоднородного поверхностного слоя в виде произведения степени

покрытия и диэлектрической проницаемости или в виде произведения числа частиц на квадрат среднего размера и на диэлектрическую проницаемость материала частиц $Nd^2(\varepsilon_n - 1)$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основная часть работы выполнена автором в ИФП СО РАН.

Личный вклад автора является основным и заключается в формулировке проблемы, постановке задач исследования, проведения экспериментов по моделированию неоднородной поверхности, выводе аналитических соотношений для вычисления состояния поляризации рельефной поверхности; в анализе и интерпретации полученных данных, установлении основных закономерностей между параметрами поверхности и состоянием поляризации отраженного от нее света; в обосновании основных положений и нового научного направления – Эллипсометрия дифрагирующих поверхностей.

Содержание диссертации отражено в следующих публикациях:

- 1. А. В. Ржанов, С. Н. Свиташева, К. К. Свиташев, В. К. Соколов, Ю. В. Ашкеров, Л. А. Осадчев, Л. С. Цеснек. Эллипсометрический метод определения качества обработки поверхности // Доклады Академии Наук СССР, -1982, т. 267, №2, - с. 373-377.
- А. В. Ржанов, С. Н. Свиташева, К. К. Свиташев. Графический метод интерпретации результатов эллипсометрических измерений на шероховатых поверхностях// Доклады Академии Наук СССР,- 1983, т. 273, N5, с. 1123-1126.
- С. Н. Свиташева, К. К. Свиташев, Е. В. Семенов, А. Г. Васильев. Изменение эллипсометрических параметров в зависимости от механической обработки// Поверхность. Физика, химия, механика, -1983, N12, с. 64-71.
- Л. С. Брагинский, И. А. Гилинский, С. Н. Свиташева. Отражение света шероховатой поверхностью: интерпретация эллипсометрических измерений // Доклады Академии Наук СССР, -1987т. 293, N5, с. 1097-1102.

- С. Н. Свиташева, Р. И. Любинская. Эффективная среда как модель шероховатой поверхности// в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, Наука, 1987, с. 18-24.
- С. Н. Свиташева. Отражение светового луча с трапециидальным рельефом //в книге:
 "Эллипсометрия в науке и технике ", ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1987, с. 7-13.
- С. Н. Свиташева. Статистическая обработка экспериментальных результатов эллипсометрических измерений на неоднородных поверхностях // в книге: " Эллипсометрия в науке и технике", вып.2, ИФП, Новосибирск, 1991, с. 24-27.
- S. N. Svitasheva, V. G. Mansurov, K. S. Zhuravlev, A. Yu. Nikitin, D. V. Sheglov, and B. Pecz. Correlation between optical properties of MBE films of AlN and morphology of their surface // phys. stat. sol. (a) -2008-Vol. 205, No. 4, P.941–944.
- O. V. Naumova, Yu. V. Nastaushev, S. N. Svitasheva, L. V. Sokolov, N. D. Zakharov, P. Werner, T. A. Gavrilova, F. N. Dultsev and A. L. Aseev. MBE-grown Si whisker structures: morphological, optical and electrical properties // Nanotechnology -2008-Vol. 19 225708, P. 1-5.
- O. V. Naumova, Y. V. Nastaushev, S. N. Svitasheva, L. V. Sokolov, Peter Werner, N. D. Zakharov, T. A. Gavrilova, F. N. Dultsev, A. L. Aseev. Properties of Silicon Nanowhiskers Grown by Molecular-Beam Epitaxy // INST PHYS CONF SER -2007- Vol. 893, №1, P. 7390.200.67
- V. G. Mansurov, A. Yu. Nikitin, Yu.G. Galitsyn, S. N. Svitasheva, K. S. Zhuravlev, Z. Osvath, L. Dobos, Z. E. Horvath, B. Pecz. AlN growth on sapphire substrate by ammonia MBE // Journal of Crystal Growth -2007- Vol. 300, P.145–150.
- S. N. Svitasheva, V. A. Gritsenko, B. A. Kolesov. Optical properties of TiO2 films made by air oxidation of Ti. // phys. stat. sol. (c), 5, No. 5, 1101–1104 (2008) / DOI 10.1002/pssc.200777731.

- 13. *С. Н. Свиташева*. Определение оптических констант МЛЭ пленок GaAs n-типа в спектральном диапазоне 1.5-4.75 эВ. // Автометрия, т. 43, № 6, стр. 108-115, 2007.
- S. N. Svitasheva, V. G. Mansurov, V. V. Preobrazhenskii. Spectroscopic ellipsometry of thin films AlN grown by ammonia MBE. // 6thInternational Conference on Nitride Semiconductors 28.08-2.09.2005, Bremen, Germany, Program, p. 94.
- 15. *S. N. Svitasheva, V. A. Gritsenk., B. A. Kolesov.* Optical properties of TiO2 films made by air oxidation of Ti. // Proceeding of ICSE-4, Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007, p.81.
- S. N. Svitasheva, L. V. Sokolov, N.D. Zakharov, P. Werner. Si-whiskers fabricated by MBE and their optical properties. // Proceeding of ICSE-4, Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007, p.290.
- S. N. Svitasheva, V. G. Mansurov, K. S. Zhuravlev, A. Yu. Nikitin, D. V. Sheglov, and B. Pecz. Correlation between optical properties of MBE films of AlN and morphology of their surface. // Proceeding of ICSE-4, Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007, p.28.
- S. N. Svitasheva, A. K. Gutakovskiy, Yu. V. Nastaushev. Structure and optical properties of titanium nitride. // MRS spring meeting 24-28 March 2008, San Francisco CA, USA. Program p.120.

Часть представленной работы была выполнена в организациях:

- 1. НПО «Астрофизика» (Москва)
- 2. НПО «Оптика» (Москва)
- 3. НПО «ОРИОН» (Москва)
- 4. НИТИ (Саратов)

Материалы диссертации в виде 15 докладов обсуждались на10 Российских и Международных научных конференциях:

2^{ая} Всесоюзная конференция "Эллипсометрия - метод исследования физикохимических процессов на поверхности твердых тел", (Новосибирск, 1981), 3 доклада; The 2nd International Conference on Spectroscopic Ellipsometry- ICSE-2, (Charleston, SC, USA, 12-15 May 1997), 2 Abstracts: P2.15 and P4.12; The 29th IEEE Photovoltaic Specialists Conference.-(20-24 May2002, New Orleans, USA), Proceedings, p. 1178-1181; Кремний-2002, (Новосибирск, 9-12 июля 2002г.) "Совещание по росту кристаллов, пленок и дефектам структуры кремния" с. 154; The 6th International Conference on Nitride Semiconductors, (28.08-2.09.2005, Bremen, Germany), Abstract Th-P-072; The 14th International Symposium on Nanostructures Physics and Technology, (26-30.06.2006, St. Petersburg, Russia), Abstract, p. 82-83; The 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, (24-28 July, 2006, Vienna, Austria) Abstract FrM2j.31; Symposium on Growth of III-Nitrides, (Linkoping, Sweden, 2006) Abstract; The 4th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry- ICSE-4, (Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007), 3 Abstracts: p. 28, p.81, p. 290; MRS spring meeting 2008, (San Francisco CA, USA), Abstract H4.42.

В заключение автор считает своим долгом выразить искреннюю благодарность своему научному консультанту доктору физико-математических наук, члену-корреспонденту РАН, профессору А. В. Чаплику за ценные и полезные консультации и замечания при оформлении работы.

Автор выражает искреннюю и глубокую признательность академику РАН А.В. Ржанову и члену-корреспонденту РАН К.К. Свиташеву за поддержку в проведении работы в целом, обсуждение полученных результатов и ценные замечания при оформлении публикаций. Автор выражает благодарность всем руководителям и сотрудникам сторонних организаций {НПО «Астрофизика» (Москва), НПО «Оптика» (Москва), НПО «ОРИОН» (Москва), НИТИ (Саратов)} за предоставленную возможность проведения части экспериментов. Персональную благодарность автор выражает всем соавторам за плодотворное

сотрудничество и, в том числе, д.ф.-м.н. В.А. Гриценко, д.ф.-м.н. К.С. Журавлеву, к.ф.-м.н.

В.Г. Мансурову, к.ф.-м.н. Ю.В. Настаушеву, к.ф.-м.н. Д.В. Щеглову, и программисту ЭВМ Р.И. Любинской и И.С. Солдатенкову.

Автор признателен д.ф.-м.н. О.П. Пчелякову и члену-корреспонденту РАН А.В. Двуреченскому за внимание и ценные рекомендации при подготовке к защите. Безусловно, автор благодарен всем сотрудникам, без квалифицированной и

добросовестной помощи которых, не могла быть выполнена эта работа.

ПРИЛОЖЕНИЕ І

Влияние размера *a*, глубины рельефа *d* и наклона боковой грани α трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности кварца





Рис. П1.1. Влияние размера *а* трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности кварца: а) - зависимость $\Psi(\varphi_0)$: б)- зависимость $\Delta(\varphi_0)$ и в) - зависимость $\Delta(\varphi_0)$ для очень малых изменений размера *a*, сравнимых с точностью изготовления образцов. Величины *a* варьируются от 2.0 до 2.5 мкм и показаны в Таблице к Рис. П1.1. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя граница перемещается от 44.2° до 47.1° для *a*=2 мкм и *a*=2.5 мкм, соответственно.

Таблица к Рис. П1.1

Размер ячейки	a_1	a_2	a_4	<i>a</i> 5	<i>a</i> ₆	<i>a</i> ₃₋₁	a ₃₋₂	a 3-3		
МКМ	2	2.1	2.3	2.4	2.5	2.20	2.21	2.22		
нижняя граница ϕ_0	44.2°	44.8	46.0°	46.5°	47.1°	45.4°				
верхняя граница ϕ_0	59.8°	60.0°	60.2°	60.4°	60.5°	60.1°				
Глубина рельефа <i>d</i> = 0.306 мкм										
наклон боковой грани $\alpha = 75^{\circ};$ $\lambda = 0.63$ мкм										



Рис. П1.2. Влияние глубины рельефа *d* трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности кварца: а) - зависимость $\Psi(\phi_0)$: б)зависимость $\Delta(\phi_0)$. Величины *d* варьируются и показаны в Таблице к Рис. П1.2. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя граница ϕ_0 перемещается от 46.7° до 47.9° для *d*=0.286 мкм и *d*=0.326 мкм, соответственно; *d*> $\lambda/4$.

Таблица к Рис. П1.2.

Глубина рельефа в мкм	d_1	d_2	d_3					
	0.286	0,306	0,326					
нижняя граница ф ₀	46.7°	47.3°	47.9°					
верхняя граница ϕ_0	60.3°	60.3°	60.3°					
Размер ячейки а=2.5 мкм (Рис. 33)								
наклон боковой грани $\alpha = 75^{\circ};$ $\lambda = 0.63$ мкм								



Рис. П1.3. Влияние наклона боковой грани α трапециидальной ячейки на <u>расчетные</u> поляризационные характеристики рельефной поверхности кварца: а) - зависимость $\Psi(\phi_0)$: б)зависимость $\Delta(\phi_0)$. Величины α варьируются и показаны в Таблице к Рис. П3. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя и верхняя границы ϕ_0 перемещаются, как показано в Таблице к Рис. П1.3.

Таблица к Рис. П1.3.

Угол наклона боковой грани в градусах	α_1	α_2	α ₃	α_4					
	73	75	77	79					
нижняя граница фо	42.6°	47.4°	50.8°	54.7°					
верхняя граница ϕ_0	56.1°	59.8°	63.7°	67.8°					
ширина области φ ₀	13.5°	12.4°	12.9°	13.1°					
Размер ячейки а=2.5 мкм (Рис. 34)									
Глубина рельефа <i>d</i> =0.306 мкм; λ=0.63 мкм									

Приложение II к разделу 4.4.2

Расчетные зависимости поляризационных характеристик от угла падения света для поверхности меди с рельефом СФМ, имеющей цилиндрические боковые грани.

Учет кривизны боковых граней элементарной ячейки СФМ позволяет устранить недостаток, присущий расчетам поляризационных характеристик рельефной поверхности по модели трапециидальной ячейки СФМ, проявляющийся в резком ограничении области углов падения света ϕ_0 , в которой наличие рельефа на отражающей поверхности изменяет поляризационные характеристики отраженного от нее света. Изменение размера *a* на 4% за счет параметра ξ заметно влияет на поляризационные характеристики рельефной поверхности изменяет поверхности (Рис. 1А), если размер *a*₁ =2.5 мкм.





 φ_{0T} представлен как функция геометрии рельефа *b=na* элементарных ячеек с цилиндрическими боковыми гранями. Для размера *a*₂=25 мкм эффект затенения минимален и φ_{0T} > 88°, т.е. почти при любом угле падения часть рассеянного света попадает на детектор эллипсометра.

Таблица к Рис. П2.2

	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d1	d ₂	d ₃	ىرى	b	
Рис. П2.2				В	мик	ромет	pax		
а	0	0	0				0.105	b=a	<i>а</i> ₁ =2.5 мкм
б	6.4	8.9	0.9	86	90	26	0.105	b=na	λ=0.63 мкм
В	5	5	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	
Γ							0.150	b=na	



Рис. П2.2. Расчетные поляризационные характеристики Ψ и Δ от угла падения света φ_0 для поверхности **меди** с рельефом 2.5 СФМ (*a* =2.5 мкм) для трех различных глубин рельефа: d₁, d₂, d₃, с учетом изменения скважности ξ и с учетом типа дефектов: *b* = *a* или *b*=*na*, (*n* =1, 2, 3, 4, 5). Длина волны света λ =0.633 мкм. Все параметры рельефа показаны в Таблице к Рис. П2.2.



Таблица к Рис. П2.3

Рис. П2.3	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d ₁	d ₂	d ₃	٤	b	
				В	мик	ромет	rpax		
a	0	0	0				0.105	b=a	а2=25 мкм
б	7.7	9.6	1.9	96	16	36	0.105	b=na	λ=0.63 мкм
В	5	5	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> =1,2,3,4,5
Г							0.150	b=na	



Рис. П2.3. Расчетные зависимости Ψ и Δ от угла падения света φ_0 для поверхности меди с рельефом 25 СФМ (*a* =25 мкм). Размер элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями в десять раз больше, чем на Рис. П2.2. Расчет сделан для трех различных глубин рельефа: 1- d₁, 2- d₂, 3- d₃, с учетом изменения скважности ξ и с учетом типа дефектов: однотипные дефекты (*b* = *a*) и разнотипные дефекты (*b*=*na*). Длина волны света 0,633 мкм. Все параметры рельефа показаны в Таблице к Рис. П2.3.



Рис. П2.2ав и Рис. П2.3ав показывают влияние параметра ξ (изменение размера верхней грани) для двух глубин рельефа d_1 и d_3 , если размеры элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями равны a_1 и a_2 , соответственно; и учтены однотипные "дефекты" b=-a.

Рис. П2.26г и Рис. П2.36г показывают влияние параметра ξ , когда учтены разнотипные "дефекты" b=na. $2\xi_1/a_1=8.4\%$ и $2\xi_2/a_1=12\%$ $2\xi_1/a_2=0.84\%$ и $2\xi_2/a_2=1.2\%$



Рис. П2.2а и Рис. П2.3а показывают влияние размера *а* элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями (*a*₁ =2.5 мкм и *a*₂ =25 мкм), если параметр ξ=0,105 мкм.

Рис. П2.2а и Рис. П2.2б и пара Рис. П2.3а и Рис. П2.3б показывают влияние рассеянного света от ячеек с размерами (*b=na*, *n* =1, 2, 3, 4, 5), т.е. влияние разнотипных "дефектов".



Рис. П2.2в и Рис. П2.3в показывают влияние размера а элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями ($a_1 = 2.5$ мкм и $a_2 = 25$ мкм), если параметр $\xi = 0,15$ мкм.

Сравнение пары Рис. П2.2в и Рис. П2.2г и пары Рис. П2.3в и Рис. П2.3г показывают влияние

рассеянного света ячейками с размерами (b=na, n =1, 2, 3, 4, 5), т.е. влияние разнотипных

"дефектов".

Рис. П2.2	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d ₁	d ₂	d ₃	ξ	b=a	
				В	микј	ромет	rpax		
а	۰.	0	0_				0.105	b=a	а=2.5 мкм
б	6.4	8.9	0.9	86	90	26	0.105	b=na	λ=0.63 мкм
В	5	Ś	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> =1,2,3,4,5
Г							0.150	b=na	

Габлица 3.2										
Рис. П2.3	φ ₀₁	φ ₀₂	φ ₀₃	d_1	d ₂	d ₃	ىد	b		
				В	микј	ромет	rpax			
а	0	0_	0				0 105	b=a	а2=25 мкм	
б	7.7	9.9	1.9	96	16	36	0.105	b=na	λ=0.63 мкм	
В	S	S	9	0.2	0.3	0.3	0.150	b=a	<i>n</i> = <i>1</i> , <i>2</i> , <i>3</i> , <i>4</i> , <i>5</i>	
Г							0.150	b=na		

174

Приложение III кварц-25 к разделу 5.2

Экспериментальные поляризационные характеристики поверхности кварца с

вытравленным рельефом СФМ 25×25 мкм

В таблице представлены расчетные и экспериментальные значения углов падения света, на которых наблюдаются экстремумы в поляризационных характеристиках рельефной поверхности кварца. Угол интерференции рассчитан без учета рассеянного света, когда геометрическая разность хода лучей Δ₁=π или 3π. Длина волны падающего света λ=0.6328 мкм.

Глубина	Расчетный угол		кварц							
рельефа	интерференции		номер	номер	Экспериментальные					
<i>d</i> , нм	$\Delta_1 = \pi$	$\Delta_1=3\pi$	образца	Рис.	углы падения света					
	1	1	с <i>а</i> =25 мкм		для экстре	мумов в				
					Ψ(φ ₀) иΔ(ρ ₀)				
20			1	П3.2-1-1						
40			2	П3.2-1-2						
50			3	П3.2-1-3						
80			4	П3.2-1-4						
110			5	П3.2-1-5						
224	45.1°		6	П3.2-2						
316	59.9°		7	П3.2-3	590					
351	63.2°		8	П3.2-4	62.5 °					
413	67.5 °		9	П3.2-5	67 ^o					
446	69.2 °		10	П3.2-6	68 °					
450	69.4°		11	П3.2-7	68-70°					
461	69.9°		12	П3.2-8	69-70°					
572	73.9°	33.9°	13	П3.2-9	72-73°					
690	76.7 °	46.5 °	14	П3.2-10	76°	47.5°				
791	78.5 °	53.1 °	15	П3.2-11	75°					
904	79.9°	58.3°	16	П3.2-12	79°	58°				
1005	80.3 °	60.9°	17	П3.2-13	80 °	61 °				



Рис. ПЗ.1. Расчетная зависимость угла падения $\phi_{интер\phi}$, при котором $\Delta_1 = \pi$, или 3π , от глубины рельефа *d* без учета рассеянного света.; длина волны падающего света $\lambda = 0.633$ мкм. На графике представлены экспериментальные значения углов интерференции для алюминия и кварца с размером ячейки 25×25 мкм и 2.5×2.5 мкм, которые практически совпадают с расчетными значениями.

Рис. ПЗ.2. (1-13) Экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности кварца с вытравленным рельефом случайной фазовой маски (СФМ), которая составлена из квадратных ячеек 25×25 мкм. Глубина рельефа варьируется от 0 до 1.005 мкм. Пунктирные линии на всех графиках - экспериментальные зависимости Ψ(φ₀) и сплошными линиями представлены экспериментальные зависимости Δ(φ₀).



Рис. П3.2-1. На вставке подробно показаны зависимости $\Psi(\phi_0)$ для нескольких глубин рельефа: d₁= 20 нм, d₂=40 нм d₃= 50 нм, d₄=80 нм, d₅=110 нм.

Рис. ПЗ.2-2. Глубина рельефа: d= 224 нм.



Рис. П3.2-3. Глубина рельефа: d= 316 нм. Появляется первый экстремум, причем фазовый в Δ на порядок больше амплитудного в Ψ .



Рис. П3.2-4. Глубина рельефа: d= 351 нм. На вставке А подробно показана зависимость $\Psi(\phi_0)$ в увеличенном масштабе.



 $\varphi_{\rm c}$

Рис. П3.2-7. Глубина рельефа: d= 450 нм. На вставке подробно показана зависимость $\Psi(\phi_0)$ в увеличенном масштабе.

Рис. ПЗ.2-8. Глубина рельефа: d= 461 нм.

Q.







Рис. П3.2-10. Глубина рельефа: d= 690 нм; появляется второй экстремум для $\phi_0 \approx 45^\circ$. На вставке - зависимость $\Psi(\phi_0)$ в увеличенном масштабе.



Рис. П3.2-11. Глубина рельефа: d= 791 нм. На вставке -зависимость $\Psi(\phi_0)$ в увеличенном масштабе.

Рис. П3.2-12. Глубина рельефа: d= 904 нм. Второй экстремум в $\Delta(\phi_0)$ для $\phi_0 \approx 78^\circ$ много меньше первого. Положение первого экстремума совпадает с углом Брюстера.



Рис. П3.2-13. Глубина рельефа: d= 1005 нм. На вставке А -зависимость $\Psi(\phi_0)$ в увеличенном масштабе для $\phi_0 \approx 60^\circ$. Второй экстремум немного увеличился.
Экспериментальные поляризационные характеристики поверхности

алюминия с вытравленным рельефом СФМ 25×25 мкм

В таблице представлены расчетные и экспериментальные значения углов падения света, на которых наблюдаются экстремумы в поляризационных характеристиках рельефной поверхности *алюминия*. Угол интерференции рассчитан без учета рассеянного света, когда геометрическая разность хода лучей Δ₁=π или 3. Длина волны падающего света λ=0.6328 мкм.

Глубина	Расчетный угол		алюминий			
рельефа	интерференции		номер	номер	Экспериментальные	
<i>d</i> , нм	$\Delta_1 = \pi$	$\Delta_1=3\pi$	образца	Рис.	углы паде	ния света
	1	1	с <i>а</i> =25 мкм		экстрему	MOB B
					Ψ(φ ₀) иΔ(φ ₀)
20			1			
40			2			
50			3	6-1-1		
80			4	6-1-2		
110			5	6-1-3		
224	45.1°		6	6-2	47-49°	
316	59.9°		7	6-3	60-61 °	
351	63.2 °		8	6-4	64 ^o	
413	67.5°		9	6-5	67-68°	
446	69.2°		10	6-6	69-70°	
450	69.4°		11	6-7	70°	
461	69.9°		12	6-8	70°	
572	73.9°	33.9°	13	6-9	74 ^o	
690	76.7 °	46.5°	14	6-10	76°	47-48°
791	78.5°	53.1°	15	6-11	79°	54°
904	79.9°	58.3°	16	6-12	80°	58°
1005	80.3 °	60.9°	17	6-13	79°	60-61 °

Рис. П4.1. (1-13) Экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности *алюминия* с вытравленным рельефом случайной фазовой маски (СФМ), которая составлена из квадратных ячеек 25×25 мкм. Глубина рельефа варьируется от 0 до 1.005 мкм. Пунктирные линии на всех графиках - экспериментальные Ψ(φ₀) и сплошными линиями представлены экспериментальные зависимости Δ(φ₀).



Рис. П4.1-1. На вставке подробно показаны зависимости $\Delta(\phi_0)$ для нескольких глубин рельефа: d₁= 50 нм, d₂=80 нм, d₃=110 нм.

Рис. П4.1-2. Глубина рельефа: d= 224 нм; появляется первый экстремум. На вставке подробно показана зависимость Δ(φ₀) в

диапазоне 163°-165°.



появляется первый экстремум "максимум -

минимум" в $\Psi(\phi)$.





Рис. П4.1-11. Глубина рельефа: d= 791 нм. Появляется экстремум на малых углах падения, для которого разность хода лучей Δ₁=3π.

Рис. П4.1-12. Глубина рельефа: d= 904 нм



Рис. П4.1-13. Глубина рельефа: d= 1005 нм. В зависимости Ψ(φ₀) присутствует пара"минимум-максимум" экстремумов.

Приложение V к разделу 5.3

Экспериментальные поляризационные характеристики поверхности кварца с

вытравленным рельефом СФМ 2.5×2.5 мкм

В таблице представлены расчетные и экспериментальные значения углов падения света, на которых наблюдаются экстремумы в поляризационных характеристиках рельефной поверхности кварца.

Глубина	Расчетный угол интерференции		кварц			
рельефа			номер	номер	Экспериментальные	
<i>d</i> , нм	$\Lambda = \pi$	$\Lambda = 3\pi$	образца	Рис.	углы падения света	
			с а=2.5 мкм		экстремумов в $\Psi(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$	
0				7-1		
21			1	7-2-1		
40			2	7-2-2		
55			3	7-2-3		
80			4	7-2-4		
103			5	7-3-1		
143			6	7-3-2		
208	40.5°		7	7-3-3		
250	50.8°		8	7-4	50 °	
306	58.8°		9	7-5	57.5°	
350	63.1°		10	7-6	62.5 °	
408	67.2°		11	7-7	62.5-66°	
451	69.4°	30.5°	12	7-8	69 °	

Угол интерференции рассчитан без учета рассеянного света, когда геометрическая разность хода лучей $\Delta_1 = \pi$ или 3π . Длина волны падающего света $\lambda = 0.633$ мкм.

Рис. П5.1 (1-8). Экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности *кварца* с вытравленным рельефом случайной фазовой маски (СФМ), которая составлена из квадратных ячеек 2.5×2.5 мкм. Глубина рельефа варьируется от 0 до 0.541 мкм. Пунктирные линии на всех графиках - экспериментальные Ψ(φ₀) и сплошными линиями представлены экспериментальные зависимости Δ(φ₀).





d₁= 103 нм, d₂=143 нм, d₃=208 нм;

изменения малы и экстремумов нет.

d=250 нм; появляется экстремум в $\Psi(\phi_0)$.



d=350 нм; экстремум в $\Psi(\phi_0)$ не виден.

187

d= 306 нм.



d= 408 нм; наблюдаются большие пики в $\Psi(\phi_0)$ и $\Delta(\phi_0)$.

 $\Delta(\phi_0)$ резко изменилась.

ПРИЛОЖЕНИЕ VI к разделу 5.3

Экспериментальные поляризационные характеристики поверхности алюминия с вытравленным рельефом СФМ 2.5×2.5 мкм

В таблице представлены расчетные и экспериментальные значения углов падения света, на которых наблюдаются экстремумы в поляризационных характеристиках рельефной поверхности *алюминия*. Угол интерференции рассчитан без учета рассеянного света, когда геометрическая разность хода лучей Δ₁=π или 3. Длина волны падающего света λ=0.63 мкм.

Глубина	Расчетный угол интерференции		алюминий			
рельефа			номер	номер	Экспериментальные	
<i>d</i> , нм	$\Delta = \pi$	$\Delta=3\pi$	образца	Рис.	углы падения света	
			с а=2.5 мкм		экстремумов в	
					Ψ(φ ₀) иΔ(φ ₀)	
0				8-1-1		
21			1			
40			2			
55			3	8-1-2		
80			4			
103			5	8-1-3		
143			6	8-1-4		
208	40.5°		7	8-2		
250	50.8°		8	8-3	50 °	
306	58.8°		9	8-4	56-58°	
350	63.1°		10	8-5	62 °	
408	67.2°		11	8-6	64-69°; 70-71°	
451	69.4°	30.5 °	12	8-7	67.5-74°	

Рис. Пб.1 (1-7) Экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности *алюминия* с вытравленным рельефом случайной фазовой маски (СФМ), которая составлена из квадратных ячеек 2.5×2.5 мкм. Глубина рельефа варьируется от 0 до 0.541 мкм. Пунктирные линии на всех графиках - экспериментальные Ψ(φ₀) и сплошными линиями представлены экспериментальные зависимости Δ(φ₀).



Рис. Пб.1-1. Глубина рельефа: $d_1 = 0$ нм, $d_2 = 55$ нм, $d_3 = 103$ нм, $d_4 = 143$ нм; экстремумов нет. На вставке зависимости $\Delta(\phi_0)$ в увеличенном масштабе.

Рис. Пб.1-2. Глубина рельефа: d= 208 нм; появляется первый экстремум.



Рис. Пб.1-3. Глубина рельефа: d= 250 нм; появляется первый экстремум

Рис. Пб.1-4. Глубина рельефа: d= 306 нм; первый экстремум сдвигается в сторону больших ф₀.

Ψ

50

40

30

20

40



Рис. Пб.1-5. Глубина рельефа: d= 350 нм; появляется второй экстремум.



Рис. Пб.1-7. Глубина рельефа: d= 451 нм. Рис. Пб.1-6. Глубина рельефа: d= 408 нм;

первый экстремум сдвигается в сторону

больших ϕ_0 и появляется второй.

ЛИТЕРАТУРА

- Свиташев К.К., Семененко А.И., Семененко Л.В., Соколов В.К. Основы эллипсометрии.под ред. Ржанова А.В., Новосибирск, Наука, 1979, с.419.
- 2. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет.- М., Мир, 1981, с. 578.
- Басс Ф.Г., Фукс И.М. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности.-М., Наука, 1972.
- Хусу А.П., Витенберг Ю.Р., Пальмов В.А. Шероховатость поверхностей.- М. .Наука, 1975.
- Егорова Г.А., Лонский Э.С, Потапов Е.В., Раков А.В. Эллипсометрия диффрагированного света. - Микроэлектроника, 1980, г.9, вып.4, с.319.
- 6. Elson J.M., Bennett J.M. *Relation between the angular dependence of scattering and the statistical properties of optical surfaces.*-J.Opt.Soc.Am., 1979, v.69, N1, p. 31.
- Azzam R.M.A. and Bashara N.M. Polarization characteristics of scattered radiation from a diffraction grating by ellipsometry with application to surface roughness.-Phys. Rev. B, 1972, v.5, N12, p.4721.
- 8. Раутиан С.Г. К теории эшелетта. Оптика и спектроскопия, 1959, т.7, вып.4, с.564.
- Vorburger T.V., Ludema K.C. *Ellipsometry of rough surfaces*.-Applied Optics,1980, v.19, N4, p.581.
- Johnson P. B., and Christy R. W. *Optical Constants of the Noble Metals.* Physical Review B, V.6, No.12, p. 4370-4379, 1972.
- 11. Кириллова М. М., Номерованная Л. В., Носков М. М. *Оптические свойства монокристалла молибдена.*-Ж. эксперим. и теор. физ., 1971, т. 60, № 6, с. 2252.

- Соколов Л.В., Ламин М.А., Марков В.А., Машанов В.И., Пчеляков О.П., Стенин С.И. Осцилляции оптических характеристик поверхности роста пленок Ge при эпитаксии из молекулярного пучка.//- Письма в ЖЭТФ.1986, т.44, вып.6, с.278-280.
- 13. Борн М., Вольф Э. Основы оптики.- М., Наука, 1970.
- Справочник технолога-оптика. Под ред. С.М. Кузнецова, М.А.Окатова. Ленинград, "Машиностроение", 1983, с.414.
- 15. Щиголев Б.М. Математическая обработка наблюдений. М., Наука, 1969, с.344.
- 16. Г. ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами. Москва, ИЛ, 1961, с.536.
- 17. *Радиоокеанографические исследования морского волнения*, под ред. С.Я.Брауде. Киев Изд-во АН УССР, 1962.
- Цеснек Л. С. Механика и микрофизика истирания поверхностей. М., Машиностроение, 1979.
- 19. Франсон М. Оптика спеклов. М., Мир, 1980.
- 20. Ржанов А.В., Свиташева С.Н., Свиташев К.К., Соколов В.К., Ашкеров Ю.В., Осадчев Л.А., Цеснек Л.С. Эллипсометрический метод определения качества обработки поверхности.- Доклады АН СССР, 1982, т.267, №2, с.373.
- Свиташева С.Н., Свиташев К.К., Семенов Е.В., Васильев А.Г. Изменение эллипсометрических параметров в зависимости от механической обработки поверхности.- Поверхность. Физика, химия, механика, 1983, №12, с.64.
- 22. Курьянов Б.Ф. *Рассеяние звука на шероховатой поверхности с двумя типами неровноегей.*-Акуст.журнал,1962, т.8, №3, с.325.
- Прудов А.Я. Влияние микрорельефа поверхности металлических зеркал лазерных резонаторов на их характеристики и структуру излучения.-Канд.диссертация.М., МФТИ.1981.
- 24. Воронович А.Г. *Приближение малых наклонов в теории рассеяния волн на неровных поверхностях.*-ЖЭТФ,1985, т.89,вып.I, с.116.

- 25. Калмыков А.И., Островский И.Е., Розенберг А.Д., Фукс И.М. *0 влиянии структуры морской поверхности на пространственные характеристики рассеянного ею радиоизлучения.* Изв. вузов, Радиофизика, 1965, т.8. №6, с.1117.
- 26. Maradudin A.A., Mills D.L. *Scattering and absorption of electromagnetic radiation by a semiinfinite medium in the presence of surface roughness.* //Phys. Rev. V. 11, p. 1392, 1975.
- Рыбалов М.А. Методы измерения светопоглощения в оптических деталях и элементов лазеров. Обзоры по электронной технике. Серия II. Лазерная техника и оптоэлектроника. Вып.2, М., ЦНИИ Электроника, 1987, с.72.
- Емельянов А.М., Косяков В.И., Макушкин Б.В. Применение интегрирующей полости для измерения малых оптических поглощений. - Оптико-механическая промышленность. 1978, №1, с.37.
- 29. Elterman P.E. Integrating cavity spectroscopy.-Applied Optics.1970, v.9, p. 2140.
- Дарвойд Т.И., Карлова Е.К., Карлов Н.В. и др. Исследование некоторых свойств кристаллов КРС в 10-микронной области спектра. - Квантовая электроника, 1975, т.2, №4, с.765.
- 31. Bennett H.E. and Porteus J.O. *Relation between surface roughness and specular reflectance at normal incidence.* Journal of the Optical Society of America, 1961, v.51, N2, p.123.
- 32. Harrington J.A., Don A. Gregory and William P. Otto. Jr. *Infrared absorption in chemical laser window materials.* Applied Optics, 1976, v.15, N8, p.1953.
- 33. Rosenstok H.B., Don A. Gregory and Harrington J.A. *Infrared bulk and surface absorption by nearly transparent crystals.*- Applied Optics, 1976, v.15, N9.P.2075.
- Плотниченко В.Г., Сысоев В.К., Фирсов И.Г. Исследование оптической однородности высокопрозрачных материалов методом лазерной калориметрии. - Квантовая электроника, 1981 т.8, №7, с.1495.
- 35. HasB U., Davission J.W., Rosenstock H.B. and Babiskin J. *Measurement of very low absorption coefficients by laser calorimetry* Applied Optics, 1975, v.14 N5, p.1128.

- Касюк Н.Е., Радченко В.В., Федоров Г.И. Зависимость коэффициента поглощения оптических стекол от температуры при воздействии лазерного излучения. - Квантовая электроника, 1979, т.6, Л2, с.337.
- Мельников А.В. Измерение коэффициентов отражения зеркал для газовых ОКГ. -Журнал прикладной спектроскопии, 1967, №6, с.21.
- 38. Дроздов М.М., Матвеев В.И. Определение оптимального коэффициента пропускания выходного зеркала ОКГ. Приборы и техника эксперимента, 1967, №4, с.56.
- Бурыкин С.Е., Зверев Г.М., Скворцов Л.А., Фомичев В.П. Способ измерения оптического поглощения в покрытиях.- А.С. №730084 СССР. Заявлено 15.06.78, опубл.25.03.81, Бюл. №293.
- 40. Ahrene H., Welling H. and Scheel H.E. *Measurement of optical absorption in dielectric reflectors.* Applied physics, 1973, v.1, p.69.
- 41. Кириенко В.П., Ковалевич В.И. *Измерение поглощения в оптических элементах.* Москва. Препринт №4403/9, Ин-т атомной энергии, 1987, с. 44.
- 42. Егорова Г.А., Лонский Э.С., Потапов Е.В., Раков А.В., Садовая Т.В. Определение линейных размеров элементов дифракционных решеток из зависимостей эллипсометрических параметров от порядка дифракции при различных углах падения.-В книге: Эллипсометрия метод исследования поверхности. Под ред. Ржанова А.В., Новосибирск, Наука, 1983, с.130.
- 43. Егорова Г.А., Капаев В.В., Потапов Е.В. Эллипсометрические аномалии дифракционных порядков на решетках. в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, Наука, 1987, с. 111-117.
- Егорова Г.А., Лонский Э.С., Потапов Е.В. Определение линейных размеров элементов микросхем методом дифракционной эллипсометрии.- в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, Наука, 1987, с. 117-120.

- 45. Лонский Э.С., Лонская Е.Э. *Метод дифракционной эллипсометрии для определения линейных размеров элементов микросхем.* в книге:"Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, Наука, 1987, с. 120-123.
- Федоринин В.Н. Метод эллипсометрического анализа периодических структур.- в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, Наука, 1987, с. 123-126.
- 47. Свиташев К.К., Семененко А.И., Семененко Л.В., Соколов В.К. Об использовании сходящегося пучка при эллипсометрических измерениях.- Оптика и спектроскопия, т. 30, с. 532, 1971; Эллипсометрия на основе сходящегося пучка., т. 34, с. 941, 1973.
- Анциферов А.П., Панькин В.Г., Свиташев К.К., Шашкин В.В., Шварц Н.Л. Применение эллипсометрии для измерения толщин диэлектрических пленок на отдельных элементах интегральных микросхем.- Микроэлектроника, т. 4, с. 273-275, 1975.
- Свиташева С.Н., Любинская Р.И. Модели шероховатой поверхности и поляризационные характеристики отраженного от нее света.- Препринт 11-87, ИФП СО АН СССР, с.48.
- Свиташева С.Н, Любинская Р. И. Эффективная среда как модель шероховатой поверхности.- в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения ", Новосибирск, Наука, 1987, с. 18-24.
- 51. Свиташева С.Н., Солдатенков И.С. Экспериментальные зависимости Y и ∆ от угла падения света на поверхность случайной фазовой маски. Препринт-12, ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1987, с. 48.
- 52. Свиташева С. Н. Отражение светового луча с трапециидальным рельефом.- в книге:"Эллипсометрия в науке и технике ", ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1987, с. 7-13.

- 53. Брагинский Л. С., Гилинский И. А, Свиташева С.Н. Отражение света шероховатой поверхностью: интерпретация эллипсометрических измерений.- Доклады Академии Наук СССР, -1987т. 293, N5, с. 1097-1102.
- I. Szendrő, Zs. Puskás, K. Somogyi and K. Erdélyi. Surface scattering optical loss measurements in thin oxide planar waveguide layers. -Thin Solid Films, Vol. 516, Iss. 22, p. 8215-8218, 2008.
- Hrdina J. Estimation of the quality of polish optical glass surfaces by spectral ellipsometry. -Thin Solid Films v.233, p. 825-830, (1998).
- Zangooie S., Bjorkland R., Arwin H. Protein adsorption in thermally oxidized porous silicon layer. -Thin Solid Films v.313-314, p. 50-52, (1993).
- 57. Fried M., Lohner T., Gyulai J. *Effect of disorder and defects in ion-implanted semiconductors: Optical and photothermal characterization.*- in the book: Semiconductors and Semimetals, V.
 46, Chapter 1, p. 1-37,. Academic Press, 1997.
- Lohner T., Khanh N. Q., Petric P., Biro L. P., Fried M., Pinter I., Lehnert W., Frey L., Ryssel H., Wentink D. J., Gyulai J. Surface disorder production during plasma immersion implantation. Thin Solid Films v.313-314, p. 254-258, (1998).
- 59. Vaupel M., Song Yunfeng, Yuan Zimin. *n and k testing of magnetic heads with imaging spectroscopic ellipsometry*. -Phys. stat. sol. (a) 205, No. 4, 772-778 (2008).
- Hofmann T., Herzinger C. M., Krahmer C., Streubel K., Schubrt M. *The optical Hall effect.* -Phys. stat. sol. (a) 205, No. 4, 779-783 (2008)
- 61. Foldina M., De Martino A., Garcia-Caurel E., Ossikovski R., Bertin F., Hazart J., Postava K., Drevillon B. *Monitoring critical dimensions of bidemensional gratings by spectroscopic elllipsometry and Muller polarimetry.* - Phys. stat. sol. (a) 205, No. 4, 806-809 (2008).
- 62. Krüger H., Kemnitz E., Hertwig A., Beck U. *Modarate temperature sol-gel deposition of magnesium fluoride films for optical UV-applications: A study on homogeneity using spectroscopic ellipsometry.* - Phys. stat. sol. (a) 205, No. 4, 821-824 (2008).

- Himcinschi C., Singh R., Moutanabbir O., Scholz R., Reiche M., Christiansen S. H., Gösele U., Zahn D. R. T. *Etching-back of uniaxially strained silicon on insulator investigated by spectroscopic ellipsometry*. Phys. stat. sol. (a) 205, No. 4, 841-844 (2008).
- Yamada Y., Tjima K., Okada M., Bao S., Tazawa M., Yoshimura K., Roos A. Control of the concentration of protons intercalated into tungsten oxide thin films during deposition. Phys. stat. sol. (c) 5, No. 5, 1105-1108 (2008).
- 65. Oukassi S., Gagnard X., Salot R., Zahorski D., Stehle J. L., Piel J. P., Pereira-Ramos J. P. A spectroscopic ellipsometry investigation of RF-sputtered crystalline vanadium pentoxide thin films. -Phys. stat. sol. (c) 5, No. 5, 1109-1112 (2008).
- 66. Nabok A., Tsargorodskaya A., Suryajaya *Ellipsometry study of ultra thin layers of evaporated gold.* Phys. stat. sol. (c) 5, No. 5, 1150-1155 (2008).
- 67. Yia-Chung Chang, Shih-Hsin Hsu, Pei-Kuen Wei, Young Dong Kim. *Optical nanometrology of Au nanoparticles on a multilayer film.* -Phys. stat. sol. (c) 5, No. 5, 1194-1197 (2008).
- Воронкова Е. М., Гречушников Б. Н., Дистлер Г. И., Петров И. П. Оптические материалы для инфракрасной техники. - М.: Наука, 1965.
- 69. Veal B.W. and Paulikas A. P. Optical properties of molybdenum. I. Experiment and Kramers-Kronig analysis. -Phys. Rev. B 10, № 4, p. 1280, 1974; Koelling D.D., Mueller F.M., and Veal B.W. Optical properties of molybdenum. II. Theory. - Phys. Rev. B 10, 1290 - 1297 (1974).
- Ambacher O., Arzberger M., Brunner D., Angerer H., Freudenberg F., Esser N., Wethkamp T.,
 Wilmers K., Richter W., and Stutzmann M.. *AlGaN-Based Bragg Reflectors*. -MRS Internet J.
 Nitride Semi-cond. Res. Vol.2, article 22 (1997).
- 71. Brunner D., Angerer H., Bustarret E., Freudenberg F., Höpler R., Dimitrov R., Ambacher O., Stutzmann M.. *Optical constants of epitaxial AlGaN films and their temperature dependence.* -J. Appl. Phys. 82 (10) p. 5090-5096, (1997).
- 72. Hardtdegen H., Kaluza N., Cho Y.S., Stein R., Strittmatter A., Reißmann L., Bimberg D. and Zettler J.-T. *New method for the in situ determination of Al_xGa_{1-x}N composition in MOVPE by*

real time optical reference. -in Abstracts-book of 6th ICNS, Bremen, Germany, 2005, Mo-P-073.

- Yu G., Ishikawa H., Umeno M., Egawa T., Watanabe J., Jimbo T., Soga T. Optical properties of AlxGa1-xN/GaN heterostructure on sapphire by spectroscopic ellipsometry. -J. Appl. Phys. Lett. 72 (18) p. 2202 (1998).
- 74. Tisch U., Katz O., Meyler B., Finkman E., and Salzman J. *The Dependence of the Refractive Index of AlGaN on Temperature and Composition at Elevated Temperatures*. J. Appl. Phys. 89, 2676 (2001).
- 75. Antoine-Vincent N., Natali F., Mihailovic M., Vasson A., Leymarie J., Disseix P., Byrne D., Semond F., Massies J. Determination of the refractive indices of AlN, GaN, and AlxGa1-xN grown on (111)Si substrates. - J. Appl. Phys. 93 (9) p. 5222 (2003)
- 76. Wethkamp T. and Wilmers K., Cobet C., Esser N., and Richter W., Ambacher O. and Stutzmann M., Cardona M. Dielectric function of hexagonal AlN films determined by spectroscopic ellipsometry in the vacuum-UV spectral range. - Phys. Rev. B 59, 1845 1999.
- Svitasheva S. N., Mansurov V. G., Zhuravlev K. S., Nikitin A. Yu., Sheglov D. V., and Pecz B. *Correlation between optical properties of MBE films of AlN and morphology of their surface.* phys. stat. sol. (a) -2008-Vol. 205, No. 4, P.941–944.
- 78. Mansurov V.G., Nikitin A.Yu., Galitsyn Yu.G., Svitasheva S. N., Zhuravlev K.S., Osvath Z., Dobos L., Horvath Z.E., Pecz B. *AlN growth on sapphire substrate by ammonia MBE.-/*Journal of Crystal Growth Vol. 300, P.145–150, (2007).
- 79. Garnett J.C.M. Colors in metal glasses, in metallic films, and in metallic solutions. Phil. Trans. Roy. Soc., A, 1906, v. v.205, p.237.
- 80. Bruggeman D.A.G. Von Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogen substanzen.-Annalen der Physik., 1935, 5 Folge, Band 24, s.636.

- Фейнберг Е.Л. Распространение радиоволн вдоль реальной поверхности.// В сб.: Исследование по распространению радиоволн.- Под ред. Введенского Б.А., Изд-во АН СССР, 1948, вып.2.
- Сивухин Д.В. К теории эллиптической поляризации при отражении света от изотропных сред.- ЖЭТФ, 1956, т.30, №2, с.374.
- Aspnes D.E., Theeten G.B., Hottier F. Investigation of effective-medium models of microscopic surface roughness by spectroscopic ellipsometry.-Phys.Rev.B., 1979, v.20, N8, p.3292.
- Aspnes D.E., Kinsbron E. and Bacon D.D. *Optical properties of Au: Sample effects.*-Phys. Rev. B., 1980, v. 21, p. 3290.
- 85. Hanekamp L.G., Lisowski W., Bootsma G.A. *Spectroscopic ellipsometric investigation on clean and oxygen covered copper single crystal surfaces.*-Surface science, 1982, v.118, p.1.
- Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. М., Мир, 1981.
- 87. Займан Дж. Электроны и фононы.- М., Мир, 1962.
- 88. Ржанов А.В., Свиташева С.Н., Свиташев К.К. Графический метод интерпретации результатов эллипсометрических измерений на шероховатых поверхностях. – Доклады АН СССР, 1983, т.273, №5, с.1123.
- Чураева М. Н., Зорин З. М., Персианцев В. И. Эллипсометрическое, исследование оптически полированной поверхности меди. Поверхность. Физика, химия, механика, 1985.— № 2, С. 132-138.
- 90. Соколов А.В. Оптические свойства металлов.- М., Физматгиз, 1961.
- 91. Волькенштейн М.В. Молекулярная оптика.- М., Гостехиздат, 1951.
- Алгазин Ю.Б., Блюмкина Ю.А., Гребнев Н.И., Свиташев К.К., Семененко Л.В.,
 Яблонцева Т.М. Оптические постоянные атомарно-чистой поверхности германия и

кремния и их температурные зависимости. - Оптика и спектроскопия, 1978, т.45, №2, с.330.

- 93. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Оптика.- М., Наука, 1980.
- 94. Svitasheva S. N., Gritsenko V. A., Kolesov B. A. Optical properties of TiO2 films made by air oxidation of Ti. phys. stat. sol. (c), 5, No. 5, 1101–1104 (2008) / DOI 10.1002/pssc.200777731.
- 95. Свиташева С. Н. Определение оптических констант МЛЭ пленок GaAs n-типа в спектральном диапазоне 1.5-4.75 эВ.-/ Автометрия, т. 43, № 6, стр. 108-115, 2007
- 96. Uri Ban J. Polarization and interference in optics. Refraction from metal gratings. Surface smoothness.-Optics. 1983, v.63, N3, 191.
- Takeda J. Hologram memory with high quality and high information storage density.-Japan.
 Jour. of Applied Physics, 1972, v.11, N5, p.656.
- 98. Takeda J., Osjida Y., Miyamura Y. *Random phase shifters for Fourier transformed holograms*.-Applied Optics, 1972, v.11, N4, p.818.
- 99. Burckhardt C.V. Use of random phase mask for the recording of Fourier transform holograms of data masks.-Applied Optics, 1970, v.9, N3, p.695.
- 100. Haken R.A., Backer J.M., Beynon J.D. An investigation into the dependence of the chemicallyetched edge profiles of silicon dioxide films on etchant concentration and temperature.-Thin Solid Film, 1973, v.18, 3t, p.53.
- Brandes R.G. Wall profiles produced during photoreresist masked isotropic etching.-J.Electrochem., Soc., 1973, v.120, N1, p. 140.
- 102. Свиташева С.Н., Любинская Р.И., Свиташев К.К. Отражение света от ячейки фазовой маски с цилиндрическими боковыми гранями. - Препринт №18, Новосибирск, ИФП, СО АН СССР, 1987.
- 103. Smith V., Riel H., Senz S., Karg S., Riess W., and Gosele U. Realization of a Silicon Nanowire Vertical Surround-Gate Field-Effect Transistor. - Small, 2, 85-88 (2006).

- 104. Zakharov N., Werner P., Sokolov L. and Gosele U. Growth of Si Whiskers by MBE: Mechanism and peculiarities.- Physics E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2007, V.37, N.1-2, pp.148-152.
- 105. Smith D.R., Schultz S., Markos P., and Soukoulis C.M. Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission. -Phys. Rev. B 65, 195104 (2002); and Metamaterials Publications.htm.
- 106. Naumova O. V., Nastaushev Yu. V., Svitasheva S. N., Sokolov L. V., Zakharov N. D., Werner P., Gavrilova T. A., Dultsev F. N. and Aseev A. L. *MBE-grown Si whisker structures: morphological, optical and electrical properties.* Nanotechnology -2008-Vol. 19, 225708, P. 1-5.
- 107. Naumova O. V., Nastaushev Y.V., Svitasheva S. N., Sokolov L. V., Werner Peter, Zakharov N. D., Gavrilova T. A., Dultsev F. N., Aseev A. L. *Properties of Silicon Nanowhiskers Grown by Molecular-Beam Epitaxy*. INST PHYS CONF SER -2007- Vol. 893, №1, p. 7390.200.67.
- 108. Svitasheva S N, Sokolov L V, Zakharov N D and Werner P. *Si-whiskers fabricated by MBE* and their optical properties. – 2007, Proc. ICSE-4 (Stockholm), p. 290.
- 109. Свиташева С.Н., Любинская Р.И., Аникеева Н.В., Земцова М.Ф., Торгашова С.Ю.. Моделирование неоднородности поверхности с помощью калиброванных частиц и поляризационные характеристики такой поверхности. - Препринт №24, Новосибирск, ИФП, СО АН СССР, 1988, с. 1-56.
- 110. Свиташева С.Н. Статистическая обработка экспериментальных результатов эллипсометрических измерений на неоднородных поверхностях. - в книге: "
 Эллипсометрия в науке и технике", вып. 2, ИФП, Новосибирск, 1991, с. 24-27.