

07;11,12

©1994 г.

О ПРИМЕНЕНИИ МНОГОУГЛОВОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ И КОНТРОЛЯ ТОНКОСЛОЙНЫХ ПОГЛОЩАЮЩИХ ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

В.Л.Аверьянов, В.А.Федоров, С.Г.Ястребов

Сообщается о разработке методов решения обратной задачи многоугольной отражательной эллипсометрии, позволяющих для модели Друде отражающей системы с высокой точностью определять основные оптические характеристики тонкослойных поглощающих сред, а также контролировать оптическую однородность получаемых пленок, что позволяет применить предложенные методы для неразрушающего контроля изготавливаемых оптических дисков и покрытий. Обсуждается также проблема выбора оптимальных светорегистрирующих сред для создания оптических дисков с требуемыми характеристиками.

Введение

Эллипсометрический метод определения оптических констант тонких пленок в настоящее время получил широкое распространение [1-5]. Основными достоинствами различных эллипсометрических методик являются как возможность определения оптических констант исследуемых материалов, так и проведение неразрушающего контроля качества поверхности пленок и их толщин в процессе приготовления. Однако в случае исследования поглощающих слоев (т.е. слоев с коэффициентом экстинкции отличным от нуля) существующие подходы к решению обратной задачи — определению оптических констант отражающей системы при использовании многоугольной эллипсометрии приводят, как правило, к возникновению неустойчивости, т.е. к значительному изменению решения по отношению к известным задаваемым в процессе численного эксперимента параметрам пленки даже при малом изменении одного из трех параметров, что приводит к существенным трудностям поиска такого решения, которое, как оказывается, кроме того, не соответствует реальным физическим параметрам пленки.

Целью настоящей работы являются исследование такой неустойчивости, а также разработка методик решения обратной задачи отражательной многоугольной эллипсометрии, позволяющих существенно повысить качество численного решения при вариации эффективной толщины слоя $N_1 d$, происходящей при изменении угла падения света на исследуемый образец и обусловленной, например, неадекватностью

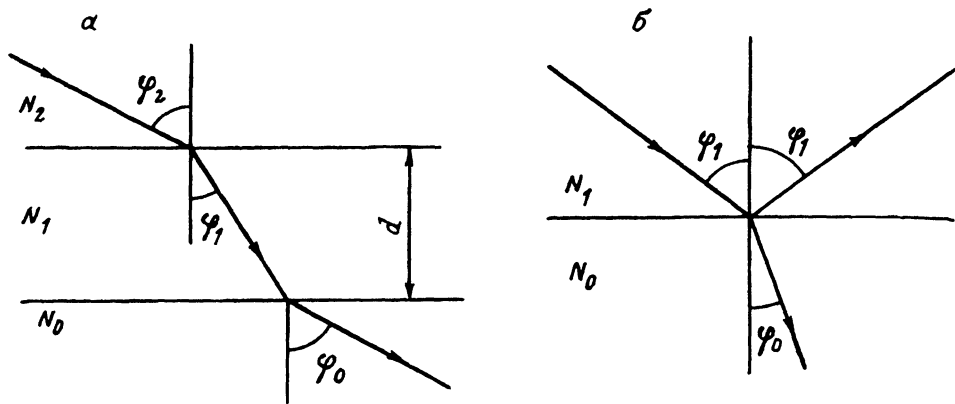


Рис. 1. Отражение света от однослойной системы (а) и от границы между двумя полубесконечными средами (б).

реальной оптической системы, применяемой обычно на практике для решения прямых и обратных задач модели Друде. Разработанные методы позволяют определять основные параметры пленки: показатель преломления n_1 , коэффициент экстинкции k_1 и ее толщину d , а также, что особенно важно, оценить с высокой точностью оптическую неоднородность изучаемых слоев. Метод может быть с успехом применен для исследования и контроля основных параметров тонкопленочных поглощающих покрытий, используемых в качестве светорегистрирующих слоев оптических дисков при записи информации.

Решения обратной задачи

Рассмотрим основные соотношения, применяемые при решении эллипсометрических задач (рис. 1,а) [1-5] (прямая задача эллипсометрии, модель Друде).

$$R_p = \frac{R_{21p} + R_{10p} \exp(-i2\delta)}{1 + R_{10p} R_{21p} \exp(-i2\delta)}; \quad R_s = \frac{R_{21s} + R_{10s} \exp(-i2\delta)}{1 + R_{10s} R_{21s} \exp(-i2\delta)}, \quad (1)$$

$$\rho = \operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) = \frac{R_p}{R_s},$$

где Ψ и Δ — эллипсометрические углы; ρ — эллипсометрическая функция; $\delta = 2\pi/\lambda d N_1 \cos \phi_1$ — фазовая толщина слоя, λ — длина волны излучения в вакууме; $N_0 = n_0 - ik_0$, $N_1 = n_1 - ik_1$ — комплексные показатели преломления подложки и пленки (слоя) соответственно; d — ее толщина; R_{21p} , R_{10p} , R_{21s} , R_{10s} — коэффициенты отражения света от соответствующих границ раздела для собственных p и s состояний поляризации электромагнитной волны: индекс p относится к волне, линейно поляризованной параллельно, а s — перпендикулярно плоскости падения; цифровые индексы соответствуют границам раздела сред, показанных на рис. 1,а.

Для ситуации, представленной на рис. 1,б, коэффициенты отражения от границы раздела 10 имеют вид

$$R_p = \frac{N_0 \cos \phi_1 - N_1 \cos \phi_0}{N_0 \cos \phi_1 + N_1 \cos \phi_0}, \quad R_s = \frac{N_1 \cos \phi_1 - N_0 \cos \phi_0}{N_1 \cos \phi_1 + N_0 \cos \phi_0}. \quad (1a)$$

Здесь N_0, N_1 — показатели преломления нижней и верхней сред; ϕ_1, ϕ_0 — углы падения и преломления света в средах связаны законом Снеллиуса

$$N_1 \sin \phi_1 = N_0 \sin \phi_0 = \Phi,$$

величина Φ является инвариантом для отражающей системы в целом.

Решение обратной задачи по определению основных оптических характеристик отражающей пленки (рис. 1,а) сводится обычно к численному решению системы нелинейных уравнений относительно трех параметров слоя: показателя преломления, коэффициента экстинкции и его толщины при известных экспериментальных данных, которыми являются эллипсометрические углы Ψ и Δ , измеренные при двух углах падения света ϕ на исследуемый образец, а также показатель преломления верхней среды. Оптические константы подложки при этом определяются обычно из независимого измерения. Существует несколько равносильных формализмов математической записи таких систем: формализм, использующий эллипсометрическую функцию ρ , фазовую толщину X , а также эллипсометрические углы Ψ и Δ .

Используя формализм Ψ и Δ , имеем для определенных экспериментально (э) и найденных теоретически (т) с помощью (1), (1а) Ψ, Δ

$$\begin{aligned} \Psi_1^{\text{э}} - \Psi_1^{\text{т}}(n_1, k_1, d) &= 0; & \Delta_1^{\text{э}} - \Delta_1^{\text{т}}(n_1, k_1, d) &= 0; \\ \Psi_2^{\text{э}} - \Psi_2^{\text{т}}(n_1, k_1, d) &= 0; & \Delta_2^{\text{э}} - \Delta_2^{\text{т}}(n_1, k_1, d) &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Легко видеть, что для случая многоугольных измерений система (2) является избыточной (число уравнений превосходит число неизвестных). В самом деле, для случая, показанного на рис. 1,а, при двух углах падения света на исследуемый образец имеет четыре уравнения и три неизвестных параметра слоя: показатель преломления n_1 , коэффициент экстинкции k_1 и его толщину d . Обычно такую систему решают методом наименьших квадратов, т.е. минимизируют функционал вида

$$(\Psi_1^{\text{э}} - \Psi_1^{\text{т}})^2 + (\Delta_1^{\text{э}} - \Delta_1^{\text{т}})^2 + (\Psi_2^{\text{э}} - \Psi_2^{\text{т}})^2 + (\Delta_2^{\text{э}} - \Delta_2^{\text{т}})^2 = F. \quad (2a)$$

Отметим, что, используя формализм фазовой толщины, можно уменьшить количество переменных при решении обратной задачи эллипсометрии с четырех до двух действительных — n_1 и k_1 или одного комплексного N_1 . В самом деле, введем обозначения $X = \exp(-2i\delta)$, тогда из (1) следует

$$X = \frac{-B \pm (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A}, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \rho R_{21p} R_{10p} R_{10s} - R_{21s} R_{10p} R_{10s}; \\ B &= \rho(R_{10s} + R_{21p} R_{21s} R_{10p}) - R_{21p} R_{21s} R_{10s} - R_{10p}; \\ C &= \rho R_{21s} - R_{21p}. \end{aligned}$$

Из определения X следует, что

$$d = \frac{i \lambda \ln X}{4\pi N_1 \cos \phi_1}. \quad (4)$$

Рассмотрим выражение

$$|X| = |\exp(-2i\delta)|. \quad (5)$$

Обычно для определения параметров слоя используется не само выражение (5), а полученные при помощи (4) значения квадратов невязок Nev мнимой и действительной части толщины

$$Nev_1^2 = (d_{\phi_1} + d_{\phi_2})^2, \quad Nev_2^2 = d_{i\phi_1}^2 + d_{i\phi_2}^2. \quad (6)$$

Здесь d_{ϕ_1} и d_{ϕ_2} , $d_{i\phi_1}$ и $d_{i\phi_2}$ — соответственно действительные и мнимые части выражения (4) для двух углов падения ϕ_1 и ϕ_2 . В процессе вычислений по формуле (4) берется то значение корня (3), которое имеет минимальную мнимую часть. Имеем функционал

$$F = Nev_1^2 + Nev_2^2, \quad (7)$$

который можно минимизировать относительно неизвестного комплексного показателя слоя. Описанный метод можно обобщить на любое количество многоугловых измерений [3]. Обычно при этом в F записывается сумма квадратов невязок каждого измерения.

Для определения параметров слоя можно предложить также следующий метод. Выражение (5) является тождеством только в том случае, если толщина, определяемая соотношениями (3)–(5), имеет отличную от нуля мнимую часть. Если организовать итерационный процесс, происходящий при поиске корня (минимума), таким образом, чтобы входящая в расчеты толщина была действительной, т.е. на каждой итерации полагать равной нулю ее мнимую часть, то имеем нелинейное уравнение относительно N_1 (считается, что показатель преломления подложки, угол падения и оптические константы верхней среды известны). При наличии поглощения в материале пленки число неизвестных (два) превосходит число уравнений. Если использовать выражения (3)–(5) дважды, для отличающихся углов падения, то имеем систему двух нелинейных уравнений. В этом случае можно производить поиск решения относительно одной комплексной величины — показателя преломления пленки (слоя) или двух действительных величин — его мнимой и действительной частей; на каждой итерации толщина d определяется реальной частью выражения (4) независимо для каждого угла падения. В процессе вычислений, как и ранее, следует обратить значение корня (3), имеющее минимальную мнимую часть. При отсутствии поглощения в материале пленки выражение (5) принимает вид

$$|X| = 1,$$

что соответствует методу Холмса [2].

Покажем, что решение обратной задачи с использованием избыточной системы (2) дает значительное отличие от результатов расчета эллипсометрических углов Ψ и Δ прямой задачи в случае наличия поглощения в материале пленки при вариации ее толщины с изменением угла падения. Решение прямой задачи проводилось по формулам (1), показатель преломления подложки верхней среды и слоя на длине волны $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ (все расчеты, проводившиеся в рамках данной

Таблица 1.

Угол падения	Прямая задача					Обратная задача 1			Обратная задача 2		
	$d, \text{Å}$	n_1	k_1	Ψ	Δ	n_1	k_1	$d, \text{Å}$	n_1	k_1	$d, \text{Å}$
70°	300			11°201'	160°40'						300
60°	301	3.0	1.2	23°472'	172°27'	2.950	0.95	362.695	3.0	1.2	
60°	300			23°457'	172°32'						301

работы, относятся к этой длине волны) полагались равными соответственно (1.52–10), (1.0–10), (3.0–11.2), т.е. (это будет показано ниже) для моделирования брались параметры, близкие к встретившейся нам при исследовании физической ситуации. В табл. 1 приведены результаты решения прямой задачи эллипсометрии для двух разных углов падения света на пленку с одинаковой и/или отличающейся толщиной d при варьировании угла. Там же приведено решение обратной задачи. В том случае, если решение обратной задачи (обратная задача 1 в табл. 1) проводилось с использованием избыточной системы уравнений (2) и набора данных, соответствовавших разным толщинам для разных углов падения, результат решения существенно отличается от изначально задаваемого при математическом моделировании параметров прямой задачи даже при малом изменении параметра d с изменением угла падения света. Из табл. 1 видно, что результаты решения прямой и обратной задач существенно отличаются по толщине слоя при ее вариации в процессе решения прямой задачи для разных углов всего на 1 Å. Такому изменению параметра d , как это следует из табл. 1, соответствует изменение эллипсометрических углов Ψ и Δ всего на несколько минут по сравнению со случаем, когда толщина слоя не зависит от угла. При использовании данных прямой задачи, соответствовавших одинаковым толщинам при разных углах падения, итерационный процесс поиска корня (минимума) системы (2) быстро сходился к известным из прямого расчета параметрам слоя. При большем, чем 4 Å, отличии толщин пленки для разных углов падения решения обратной задачи в физически допустимых границах, игравших роль ограничений в процессе расчета ($k_1 \leq 0$, $d < 5000 \text{ Å}$, $n \leq 7$), найти не удавалось как при использовании для поиска корня (минимума) метода Ньютона, так и золотого сечения даже при удачно заданной начальной точке (области) поиска, соответствовавшей точному решению задачи для одного из углов падения света. Применение метода Ньютона для поиска минимума казалось оправданным, так как предполагалось, что решение обратной задачи должно не сильно отличаться от задававшихся в процессе численного эксперимента параметров прямой задачи и, следовательно, минимизируемый функционал (2а) можно с высокой точностью аппроксимировать рядом Тейлора при удержании в нем низших производных [5]. Однако это предположение не является корректным для нашего случая, даже при малых изменениях толщины ($> 1 \text{ Å}$) при моделировании.

На рис. 2 приведены величины, рассчитанные относительно невозмущенных коэффициентов преломления, экстинкции слоя, а также его

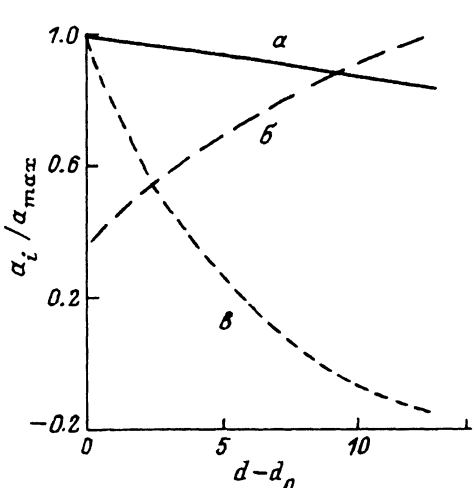


Рис. 2. Решения обратной задачи отражающей эллипсометрии (однородный поглощающий слой) при вариации толщины пленки $d - d_0$ ($d_0 = 300 \text{ \AA}$). *a* — нормированный на максимальное значение (3.00445) показатель преломления, *b* — нормированный на минимальное значение (-1.21994) коэффициент экстинкции, *c* — нормированная на максимальное значение (879.903 \AA) толщина слоя. Подложка — стекло (1.52-10), верхняя среда — воздух.

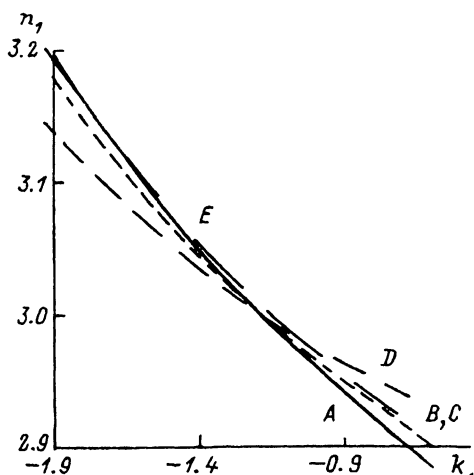


Рис. 3. Часть множества точек, на которых обращается в нуль невязка выражения (5), полученная при различных параметрах модели Друде. k_1 : A-C — -1, 2, D — 1.21; d , \AA : A — 300, B — 301-315, C — 315, D — 300; ϕ , град: A — 70; B, D — 60; C — 50; $n_1 = 3$.

толщины, получаемые из точного решения обратной задачи при вариации толщины пленки d с изменением угла падения в зависимости от приращения толщины, соответствующей углу падения 60° , толщина пленки для угла 70° , а также оптические константы принимались равными, как и ранее, 300 \AA и 3-1.21 соответственно. Обратная задача при этом решалась, как и ранее, методом Ньютона, приращение толщины для каждой точки бралось $\leq 1 \text{ \AA}$, а в качестве начального приближения для поиска решения при каждом новом приращении брались решения, полученные для предшествующей каждому новому приращению толщины пленки. Из рисунка видно, что решение обратной задачи при этом существенно отличается от параметров прямой задачи, т.е. обратная задача в этом случае решается некорректно.

Избыточность системы (2) легко устраняется введением в рассматриваемую математическую модель дополнительного параметра — толщины слоя d_1 , соответствующей второму углу падения. Результат решения обратной задачи, найденный с учетом этого предположения, также приведен в табл. 1 (обратная задача 2), при этом наблюдалась быстрая сходимость итерационного процесса к точному значению параметров, использовавшихся при решении прямой задачи даже при существенном изменении толщины слоя с изменением угла падения. Этот же результат можно получить с использованием выражений (3)–(5), если в процессе расчета полагать независимыми физические толщины пленки при изменении угла падения света. Этот факт можно интерпретировать, например, следующим образом. Рассмотрим отдельно невязку, т.е. квадрат разности левой и правой частей выраже-

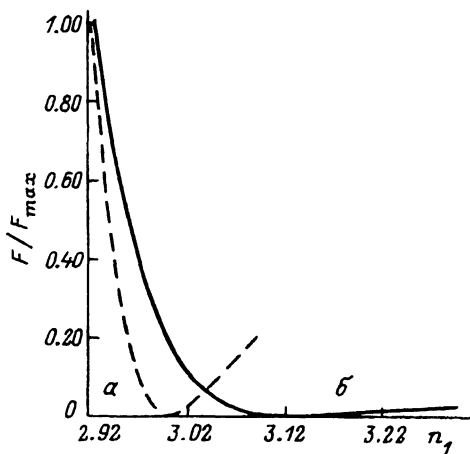


Рис. 4. Квазиодномерная проекция функционала, полученного с помощью выражения (5) для двух углов падения ($n_1 = 3$, $k_1 = 1.2$, $d_0 = 300 \text{ \AA}$, $\phi = 70^\circ$). $a - d = d_0 + (0 + 10A)$, $\phi = 60^\circ$; $b - d = d_0$, $n_1 = 3.01$, $k_1 = -1.21$, $\phi = 60^\circ$.

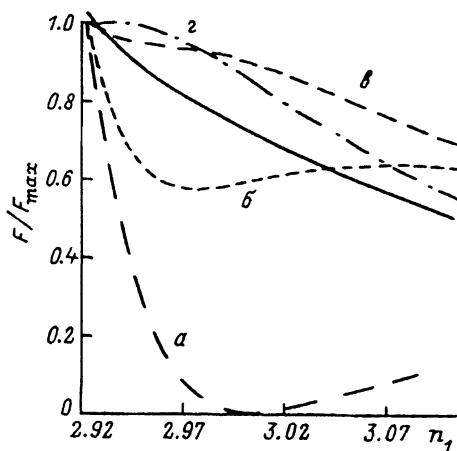


Рис. 5. Квазиодномерная проекция функционала, определенного выражением (7), без исключения из него действительной части толщины при несоответствии ее (кривые $a-e$) и других параметров модели Друде (кривая z) при разных углах падения ($n_1 = 3$, $k_1 = -1.2$, $d_0 = 300 \text{ \AA}$, $\phi = 70^\circ$).

$a - d = d_0$, $\phi = 60^\circ$; $b - d = d_0 + 1 \text{ \AA}$, $\phi = 60^\circ$; $в - d = d_0 + 5 \text{ \AA}$, $\phi = 60^\circ$; $z - d = d_0$, $n_1 = 3.01$, $k_1 = -1.21$, $\phi = 60^\circ$.

ния (5) для нескольких углов падения (рис. 3). Каждая такая невязка обращается в нуль на некоем множестве точек n и k (дно "оврага" на рис. 3, соответствующем некоторому фиксированному углу падения, для которого, как это видно из рисунка, существует бесконечно много решений обратной задачи). Для двух углов падения решениями обратной задачи можно назвать точки пересечения (если они существуют) двух или большего числа оврагов, как это показано на рисунке. Следует отметить, что подобный подход к решению обратной задачи уже известен в литературе [6]; речь в таких работах обычно идет о решении систем уравнений, а правильно понимаемая теоретическая посылка об увеличении числа определяемых из экспериментов параметров не связывается с избыточностью рассматриваемой системы уравнений и при этом не указывается на причины, способные привести к изменению толщины с изменением угла падения. На рис. 4 представлено квазиодномерное изображение нормированного на максимальное значение функционала (сумма квадратов невязок выражения (5) для двух углов падения), которое он принимает в рассматриваемом диапазоне изменения комплексного показателя преломления (рис. 3).

Из рисунка видно, что функционал имеет минимум в точке, соответствующей параметрам прямой задачи, при этом характер поведения функционала и, следовательно, положение точки минимума не зависят от величины изменения толщины пленки при вариации угла падения. Аналогичные результаты дает применение функционала (7) при исключении из него действительных частей толщин.

Таблица 2.

Угол падения	Прямая задача				
	$d, \text{Å}$	n_1	k_1	Ψ	Δ
70°	300	3.0	1.2	11°201'	160°40'
60°	300	3.01	1.21	23°527'	172°26'
60°	300	3.001	1.2001	23°462'	172°32'

Таблица 2. Продолжение

Угол падения	Обратная задача			Обратная задача		
	n_1	k_1	$d, \text{Å}$	n_1	k_1	$d, \text{Å}$
70°			347.2			210
60°	2.964	1.01	347.2	3.13	1.69	212
60°	3.008	1.23	293.0	3.017	1.28	284

С другой стороны, некоторые авторы [1] считают невозможным изменение толщины при вариации угла падения. На рис. 5 представлен функционал, определенный при прочих равных условиях выражением (7) без исключения из него выражений для действительных частей толщин. Видно, что уже малые изменения толщины пленки приводят к исчезновению минимума в рассматриваемом диапазоне изменения показателя преломления.

Представляется также интересным выяснить влияние вариации других параметров отражательной системы в процессе многоугольного эксперимента на результат решения обратной задачи.

В табл. 2 приведены значения эллипсометрических углов Ψ и Δ , полученных в результате решений прямой задачи эллипсометрии для двух углов падения: варьировалась как мнимая, так и действительная части показателя преломления пленки (слоя). Там же приведены решение обратной задачи по описанной выше методике (обратная задача 2) и решение по стандартной методике с использованием избыточной системы (2) (обратная задача 1). Из таблицы видно, что существенное изменение показателя преломления и коэффициента экстинкции с вариацией угла падения приводит при решении обратной задачи в обоих случаях к существенному изменению оптических констант и толщин исследуемых слоев по сравнению с параметрами, изначально закладываемыми при решении прямой задачи. Это же обстоятельство иллюстрирует рис. 5, из которого видно, что при малом изменении показателя преломления при вариации угла минимум функционала (5) существует, однако существенно отличается от параметров прямой задачи, сам же функционал при этом в довольно протяженной области, находящейся в окрестности минимума, становится сильно пологим.

Изменение параметров оптической системы при изменении угла падения, которое может являться следствием неадекватности математической модели Друде реальной физической ситуации, важно и его нужно учитывать при обработке результатов эллипсометрических измерений. Как было показано выше, в случае если предполагается измерение одного параметра в процессе измерения — толщины, задача об определении оптических констант пленки может быть успешно решена. Избыточность системы (2) может быть легко устранена также при

предположении о вариации не более чем одной оптической константы, входящей в выражение (1) при изменении угла падения, что в общем при изменении всех оптических констант в процессе проведения эксперимента не позволяет корректно поставить и, следовательно, решить обратную задачу отражательной эллипсометрии. Для решения обратной задачи необходимо задать дополнительное уравнение, описывающее исследуемую оптическую систему при одном фиксированном угле падения, т.е. для таких условий, при которых изменение оптических констант исследуемой системы не может произойти в принципе. В качестве такого условия можно воспользоваться, например, выражением для производных от эллипсометрической функции по углу падения (1)

$$\dot{\rho} = \frac{\dot{R}_p R_s - \dot{R}_s R_p}{R_s^2}. \quad (8)$$

Здесь $\dot{\rho}$ — первая производная эллипсометрической функции по углу падения; R_p, R_s — выражения, определенные (1); \dot{R}_p, \dot{R}_s — производные от них, определенные соотношениями:

$$\begin{aligned} \dot{R}_p &= \frac{-X^2 \dot{R}_{p21} R_{p10}^2 + X \dot{R}_{p10} (1 - R_{p21}^2) + \dot{X} R_{p10} (1 - R_{p21}^2) + \dot{R}_{p21}}{(1 + R_{p10} R_{p21} X)^2}; \\ \dot{R}_s &= \frac{-X^2 \dot{R}_{s21} R_{s10}^2 + X \dot{R}_{s10} (1 - R_{s21}^2) + \dot{X} R_{s10} (1 - R_{s21}^2) + \dot{R}_{s21}}{(1 + R_{s10} R_{s21} X)^2}. \end{aligned} \quad (8a)$$

Здесь $R_{p,s(10,21)}$ — коэффициенты Френеля для соответствующих цифровым индексам границ раздела (рис. 1) (1a), $\dot{R}_{p,s(10,21)}$ — производная от них

$$\begin{aligned} \dot{R}_{p10} &= \frac{-2N_1 N_0 (-\cos \phi_0 \cos \phi_1 + \cos \phi_0 \cos \phi_1)}{(N_0 \cos \phi_1 + N_1 \cos \phi_0)^2}; \\ \dot{R}_{s10} &= \frac{-2N_1 N_0 (-\cos \phi_0 \cos \phi_1 + \cos \phi_0 \cos \phi_1)}{(N_1 \cos \phi_1 + N_0 \cos \phi_0)^2}; \\ \dot{\cos \phi_0} &= \frac{(N_2^2 / N_0) (-\sin \phi_2 \cos \phi_2)}{(N_0^2 - N_2^2 \sin^2 \phi_2)}; \\ \dot{\cos \phi_1} &= \frac{(N_2^2 / N_1) (-\sin \phi_2 \cos \phi_2)}{(N_1^2 - N_2^2 \sin^2 \phi_2)}; \\ \dot{R}_{p21} &= \frac{-2N_2 N_1 (\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \dot{\cos \phi_1} \cos \phi_2)}{(N_1 \cos \phi_2 + N_2 \cos \phi_1)^2}; \\ \dot{R}_{s21} &= \frac{-2N_2 N_1 (\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \dot{\cos \phi_1} \cos \phi_2)}{(N_2 \cos \phi_2 + N_1 \cos \phi_1)^2}; \\ \dot{X} &= -4\pi i d N_1 \cos \phi_1 X / \lambda. \end{aligned} \quad (86)$$

В нашем случае имеем четыре уравнения и четыре неизвестных параметра: толщина слоя, его комплексный показатель преломления и

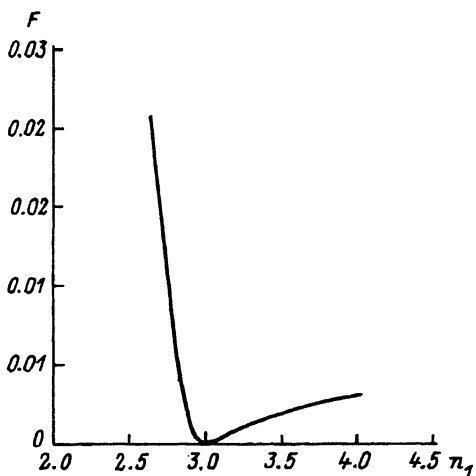


Рис. 6. Квазиодномерная проекция функционала, определенного выражением (8в) ($n_1 = 3$, $k_1 = -1.2$, $d_0 = 300 \text{ \AA}$, $\phi = 70^\circ$).

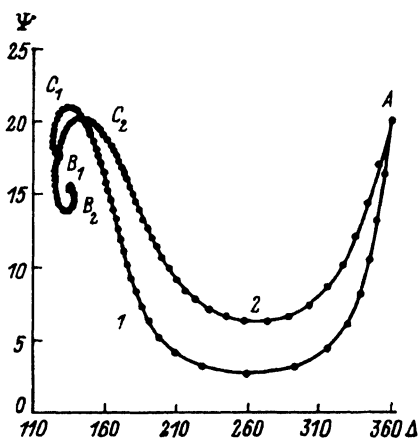


Рис. 7. Толщинная зависимость эллипсометрических углов для отражающей системы с поглощающей пленкой. 1 — $n_1 = 3.4$, $k_1 = 1.8$, $\phi = 70^\circ$; 2 — $n_1 = 3.6$, $k_1 = 1.4$, $\phi = 70^\circ$.

коэффициент преломления подложки (считаем подложку прозрачной), т.е. поставленная задача не имеет избыточности. На рис. 6 представлено квазиодномерное изображение функционала

$$(\dot{\rho}_{i\theta} - \dot{\rho}_{it})^2 + (\dot{\rho}_{r\theta} - \dot{\rho}_{rt})^2 = F, \quad (8в)$$

заданного, как и прежде, на множестве точек оврага, рассчитанного для угла падения 70° . Здесь $\dot{\rho}_{i\theta}$, $\dot{\rho}_{it}$, $\dot{\rho}_{r\theta}$, $\dot{\rho}_{rt}$ — “экспериментальные” (полученные расчетным путем) и теоретические значения мнимой (1) и действительной части, производной от эллипсометрической функции. Из рисунка видно, что функционал достигает минимального значения в точке показателя преломления, равного задаваемому, при моделировании прямой задачи. На практике значение производных от эллипсометрической функции можно определить аппроксимируя найденную угловую зависимость эллипсометрической функции полиномом высокого порядка, применяя какой-либо сглаживающий алгоритм или используя сеточную аппроксимацию производной.

При решении обратной задачи с использованием значений, производных от эллипсометрической функции, число уравнений превосходит число неизвестных, и поэтому для избавления от избыточности можно производить поиск еще одного параметра отражающей системы: в рамках настоящей работы производился поиск действительной части показателя преломления подложки (подложка-стекло).

В качестве способа выявления степени оптической неоднородности материала пленки по показателю преломления при изменении угла падения света на образец в настоящей работе применялся также метод анализа особых точек на плоскости эллипсометрических углов Ψ и Δ . На рис. 7 приведены кривые, соответствующие таким углам при изменении толщины исследуемого слоя. По осям координат отложены параметры Ψ и Δ ; точки, помеченные маркером, отличаются на

толщину 10 \AA , точка A на графике соответствует эллипсометрическим углам подложки (стекло, $N_0 = (1.52-10)$). Кривые построены для трех различных показателей преломления, соответствующих, как это будет показано ниже (табл. 3), двум экспериментальным ситуациям, встретившимся при определении оптических констант и толщин светорегистрирующих слоев оптических дисков в рамках данной работы.

Особыми точками на рисунке являются точки B_1, B_2 , соответствующие бесконечно толстой пленке ($d_1 \rightarrow \infty$). На практике это условие выполняется уже при таких толщинах слоев, для которых становится справедливой оценка $\alpha d \gg 1$, где $\alpha = 4\pi k/\lambda$ — бугеровский коэффициент поглощения слоя.

Для точки B на рис. 2 (имеем ситуацию, приведенную на рис. 1,6, для которой справедливы формулы Френеля (1а)) решение обратной задачи по нахождению оптических констант отражающей системы однозначно определяется измерением эллипсометрических углов при фиксированном угле падения света на исследуемый образец ^[1,2]

$$N_0 = N_1 \sin \phi_1 \left[\left(\frac{\rho - 1}{\rho + 1} \right)^2 \operatorname{tg}^2 \phi_1 + 1 \right]^{1/2}. \quad (6a)$$

При проведении эллипсометрических измерений поглощающих слоев можно использовать выражение (6а) для выявления угловой зависимости действительной и мнимой частей показателя преломления исследуемого материала.

Приведенная на рис. 2 зависимость эллипсометрических углов Ψ и Δ от толщины слоя может быть применена также для оценки свойств и оптимизации оптических характеристик светорегистрирующих сред, применяемых при изготовлении оптических дисков. Так, из численных оценок следует, что точкам C_1, C_2 на рисунке соответствует максимум на зависимости коэффициента отражения от толщины оптического покрытия.

Итак, существующие известные методики решения обратной задачи многоугловой эллипсометрии приводят в ряде случаев или к расходимости итерационного процесса поиска корня (минимума) или могут иметь большое отличие найденного решения от реальной физической ситуации. Предложенные в рамках настоящей работы методики позволяют качественно улучшить устойчивость решения обратной задачи при наличии поглощения в материале слоя, существенно повысить точность решения, а также в ряде случаев снизить количество вычислений при поиске решения в два раза.

Результаты и их обсуждение

Разработанный метод решения обратной задачи с использованием производной от эллипсометрической функции был применен при определении оптических констант и толщин пленок, используемых в качестве регистрирующих сред для записи побитовой информации на оптические диски.

Известно, что в основе процессов цифровой записи на одноразовые (аблятивные), так и на многоканальные (реверсивные) среды лежит

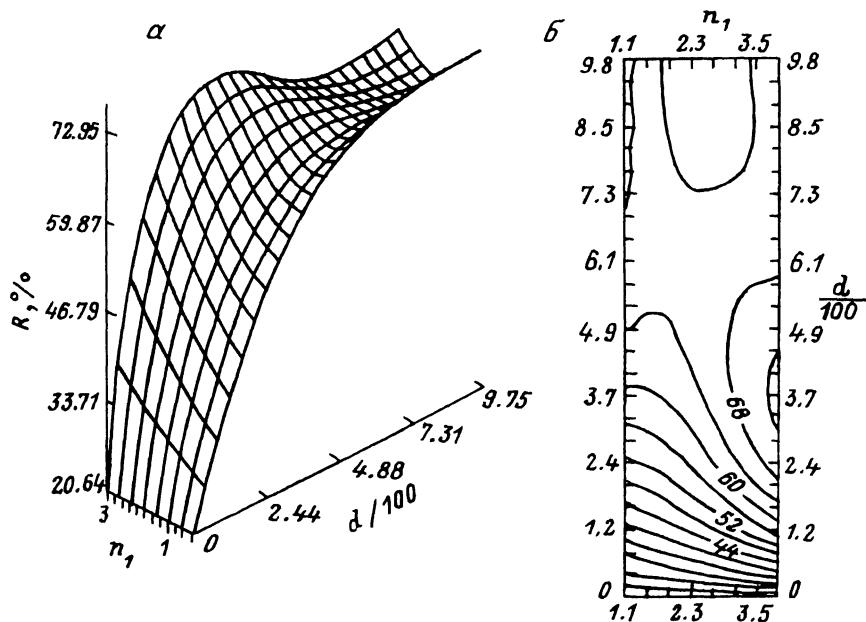


Рис. 8. Зависимость модуля коэффициента отражения для поглощающей пленки на прозрачной подложке от ее толщины d и показателя преломления n_1 ($k_1 = 2$). а — аксонометрическая проекция, б — карта уровней.

явление термического нагрева пленки под действием лазерного излучения. Таким образом, для обеспечения высокой чувствительности записи светорегистрирующий слой должен иметь минимальную толщину, при которой обеспечивается эффективное поглощение воздействующего света, условием которого является выполнение критерия $\alpha d_1 \geq 1$, где $\alpha = 4\pi k_1/\lambda$ — коэффициент поглощения регистрирующей среды [7,8]. Другим важным условием является наличие высокого коэффициента отражения ($R > 40\%$) для обеспечения надежного считывания записанной информации. Отношение коэффициентов отражения облученных (перфорированных) и необлученных участков оптического диска — оптический контраст K должен при этом достигать значений $K \geq 2$ [7,8].

По формуле (1) был проведен расчет модуля коэффициента отражения при нормальном падении на оптический диск света с длиной волны 6328 \AA при различных значениях коэффициента экстинкции и показателя преломления светопоглощающего слоя в широком диапазоне толщин, показатель преломления материала диска полагался равным (1, 52, 10) (стекло). На рис. 8,а,б представлены результаты расчета, выполненного с учетом изложенных выше требований эффективного поглощения воздействующего света регистрирующей средой оптического диска, а именно при значении коэффициента экстинкции $k_1 \leq -0.7$, что соответствует условию $\alpha d_1 \geq 1$ при минимальной толщине пленки 300 \AA . На рис. 8,а представлено аксонометрическое изображение, наглядно иллюстрирующее зависимость коэффициента оптического

ского диска (регистрирующая пленка на стеклянной подложке) от толщины пленки d при различных значениях действительной части показателя преломления n_1 . Из рисунка видно, что с ростом показателя преломления коэффициент отражения достигает необходимых значений ($R > 40\%$) в области малых толщин пленок (менее 300 \AA).

На рис. 8,6 представлены линии равного коэффициента отражения для этого же случая, по осям отложены значения толщины $d_1/100$ и действительной части показателя преломления n_1 . По представленной карте уровней и требуемым значениям коэффициента отражения и толщине пленки легко могут быть определены значения действительной части коэффициента преломления регистрирующей среды. Таким образом, становится легко разрешаемой проблема выбора оптимальных материалов для светорегистрирующих сред для оптических дисков с требуемыми оптическими характеристиками: R, k_1, d_1 .

Одним из классов материалов, удовлетворяющих изложенным выше требованиям, является класс халькогенидных стеклообразных полупроводников (ХСП), обладающий возможностью варьирования оптических свойств в широких пределах при изменении их состава.

В настоящей работе было проведено эллипсометрическое исследование стеклообразных полупроводниковых пленок систем Te-Se-Sb и Te-Ga-Se, нанесенных методом термического или ВЧ напыления. Как известно, светорегистрирующие слои должны обладать высокой оптической однородностью и иметь минимальный разброс толщин по поверхности оптического диска^[9]. Прямое измерение толщин пленок, например с помощью интерференционного микроскопа МИИ-11 не обес-

Таблица 3.

Номер пленки	Состав пленки	Способ нанесения пленки	n_1	δn_1
1	Te ₇₀ Ga _{4.5} Se _{25.5}	Вч напыление	3.4022 ± 0.0002	± 0.0004
2	"	"	3.4015 ± 0.0003	± 0.0002
3	"	Термическое напыление	3.4252 ± 0.0002	± 0.0005
4	Te ₇₄ Se ₁₁ Sb ₁₅	Вч напыление	3.6142 ± 0.0007	± 0.0001
5	"	"	3.6064 ± 0.0004	± 0.0003
6	"	"	3.5804 ± 0.0008	± 0.0002

Таблица 3. Продолжение

Номер пленки	k_1	δk_1	$d, \text{ \AA}$	$d_1, \text{ \AA}$
1	1.806 ± 0.0002	± 0.0008	435 ± 13	448 ± 14
2	1.807 ± 0.0004	± 0.0007	440 ± 10	450 ± 15
3	1.774 ± 0.0005	± 0.0002	380 ± 8	392 ± 14
4	1.409 ± 0.0003	± 0.0007	410 ± 10	420 ± 12
5	1.405 ± 0.0009	± 0.0003	402 ± 9	407 ± 11
6	1.407 ± 0.0007	± 0.0004	405 ± 7	412 ± 13

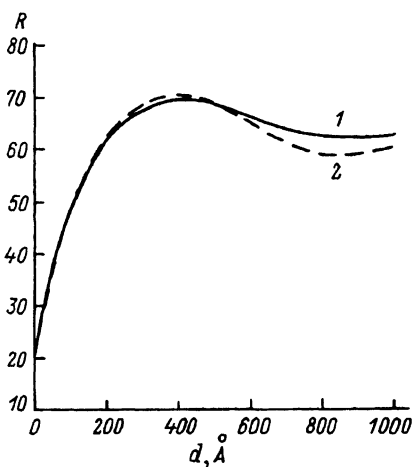


Рис. 9. Зависимость модуля коэффициента отражения для поглощающей пленки на прозрачной подложке от ее толщины d .

1 — $n_1 = 3.4$, $k_1 = 1.8$, $\phi = 70^\circ$; 2 — $n_1 = 3.6$, $k_1 = 1.4$, $\phi = 70^\circ$.

печивает высокой точности проводимых измерений, а также требует напыления на исследуемую поверхность отражающей металлической пленки.

Разработанный эллипсометрический метод в свою очередь является неразрушающим и может быть применен как для технологического контроля толщины и однородности нанесения покрытия, так и для выбора оптимальных составов светорегистрирующих слоев.

В табл. 3 приведены оптические параметры изготовленных лазерных дисков.

Исследования слоев проводились с помощью эллипсометра ЛЭФ 3 м методом многоугловой эллипсометрии на длине 6328 \AA при различных углах падения. Исследовались оптические диски на стеклянных полированных подложках. Показатель преломления стекла определялся как из измерений, выполненных до напыления регистрирующих слоев (6), так и по результатам решения обратной задачи с использованием производной от эллипсометрической функции и находился для образцов в пределах от 1.49754 до 1.51418. Измерения проводились в нескольких точках диска.

Производная от эллипсометрической функции определялась с помощью полученной из экспериментальной зависимости углов Ψ и Δ от угла падения света на исследовавшуюся отражающую систему, которые пересчитывались в ρ в соответствии с выражением (1), и затем отдельно для мнимой и вещественной частей аппроксимировались по способу наименьших квадратов полиномом высокого порядка, от которого и бралась производная.

Как видно из таблицы, полученные слои имеют высокую однородность оптических констант и толщин по поверхности образца (так, отличие толщин не превышало 15 \AA для образца 2) и высокий коэффициент преломления. Многоугловые измерения, выполненные на "толстых" пленках исследуемых материалов ($ad \gg 1$, $d > 2000 \text{ \AA}$), не выявили существенных отличий в показателе преломления при изменении угла падения света на исследуемый образец (6) как при использовании метода термического, так и ВЧ напыления, кроме того, для пленок ХСП состава, соответствующего образцу 2, отличие в оптических константах "тонкой" и "толстой" пленок (δn_1 , δk_1) мало, что также

свидетельствует о высоком качестве получаемых слоев и адекватности реальной ситуации, применяемой описанной выше математической модели пленки (рис. 1,а).

С целью выявления области толщин, обеспечивающей максимальный контраст записи на исследуемые диски с использованием формулы (1), был проведен расчет модуля коэффициента отражения как функции толщины пленки при нормальном падении света на оптическую систему. Результаты расчета, выполненного для светорегистрирующих слоев ХСП двух различных составов (табл. 3), представлены на рис. 9. Из рисунка видно, что коэффициент отражения слоев исследованных пленок достигает максимальных значений в диапазоне толщин 380–420 Å. Коэффициент отражения подложки составляет 20%, что на графике зависимости коэффициента отражения пленки от ее толщины соответствует началу координат.

Выводы

1. Предложенные методы решения обратной задачи многоугольной отражательной эллипсометрии позволяют существенно повысить устойчивость численного решения при вариации эффективной толщины слоя ($n - 1d$), происходящей при изменении угла падения света на исследуемый образец.

2. Предложенные методы позволяют с высокой точностью определять основные оптические характеристики тонкослойных регистрирующих сред и могут быть использованы для определения эффективности новых классов светочувствительных материалов для записи оптической информации.

3. Методы позволяют также контролировать с высокой точностью однородность пленок по толщине, определить оптические параметры, что позволяет использовать их для неразрушающего контроля качества изготавливаемых оптических дисков и покрытий.

Список литературы

- [1] Пшеницын В.И., Абаев М.И., Лызов Н.Ю. // Эллипсометрия в физико-химических исследованиях. Л.: Химия, 1986. 152 с.
- [2] Holmes D.A. // Appl. Opt. 1967. Vol. 6. N 1. P. 168.
- [3] Ястребов С.Г. // Об аналитическом решении обратной задачи эллипсометрии. Препринт ФТИ. № 1578. СПб., 1992. 16 с.
- [4] Honig V., Fedorov V., Liebmann G., Suptitz P. // Phys. Stat. Sol. (a). 1986. Vol. 96. P. 611.
- [5] Аззам Р., Башара Н. // Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981. 583 с.
- [6] Malin M., Vedam K. // Surf. Sci. 1976. Vol. 56. P. 49–63.
- [7] Бакулин Ю.К., Завзатов А.Н., Любин В.М., Орлов В.М., Федоров В.А. // Тез. конф. Некристаллические полупроводники-89. Ужгород, 1989. С. 219–223.
- [8] Попов П.А., Даскалов О.Д., Неделчева Е.И., Цанков Н.П. Памяти с оптические диски. София: Техника, 1988. 240 с.
- [9] Боульюз Г., Браат Дж., Хейсер А., Пасман Дж. и др. Оптические дисковые системы. М.: Радио и связь, 1991. 280 с.