РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АВТОМЕТРИЯ

№ 1 1997

УДК 535.5 : 531.7

А. И. Семененко, В. В. Бобро

(Сумы, Украина)

О МЕТРОЛОГИЧЕСКОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ (ОБЩИЙ ПОДХОД)

Предложен новый подход к метрологическому обеспечению эллипсометрии. Разброс экспериментальных значений поляризационных углов Ψ и Δ по измерительным зонам рассматривается как объективный метрологический критерий, определяющий точность измерения Ψ и Δ и, следовательно, физико-химических параметров поверхностных слоев. Данный подход лежит в основе однозонной методики, предполагающей уменьшение экспериментального разброса Ψ и Δ по зонам до того минимума, который диктуется требуемой точностью измерений. Обсуждены пути практической реализации однозонной методики, охватывающей в рамках единой эллипсометрической теории как изотропные, так и анизотропные отражающие системы.

Действующая в настоящее время в эллипсометрии метрология основана на использовании эталонного образца и усреднении результатов измерения по четырем измерительным зонам. При этом результаты измерения отличаются большим разбросом по зонам прибора, что объясняется, прежде всего, ограниченностью принятой методики по определению параметров фазового компенсатора, а также заметной анизотропией разработанного эталонного образца, которая не учитывается в используемых для экспериментального определения поляризационных углов зонных соотношениях «изотропного» случая. В результате усредненные значения поляризационных углов Ψ и Δ, несмотря на некоторое их улучшение, все-таки заметно ограничены в своей точности и не отражают истинных свойств образца. Такая направленность метрологии не стимулирует повышения точности приборов, а в конечном итоге весьма ограничивает возможности метода эллипсометрии.

В то же время разброс экспериментальных значений углов Ψ и Δ по измерительным зонам может рассматриваться как объективный метрологический критерий, определяющий точность измерения поляризационных углов и, следовательно, точность определения физико-химических параметров приповерхностных слоев. Величина этого разброса зависит от точности угломерного устройства, чувствительности фотодетектора, а также от точности определения и стабильности полного набора параметров оптических элементов (прежде всего, фазового компенсатора). Данный подход лежит в основе однозонной методики эллипсометрических измерений, предполагающей уменьшение разброса экспериментальных значений поляризационных углов Ψ и Δ по измерительным зонам до того минимума, который диктуется требуемой точностью измерений. Однозонную методику можно рассматривать как теоретическую основу для создания надежного метрологического обеспечения эллипсометрии и конструкторских разработок новых типов прецизионных эллипсометров.

В работе [1] обсуждены основные трудности, препятствующие практической реализации однозонной методики. При этом главное внимание уделено проблеме точного определения трех комплексных параметров компенсатора: ρ, ρ_1 и ρ_2. Основные свойства компенсатора, как фазовой пластины, описываются параметром ρ (действительными параметрами $\delta \approx 90°$ и $f \approx 1$), а величины ρ_1 и ρ_2 связаны с недиагональными элементами матрицы Джонса, записанной в главных осях компенсатора [2]:

$$M_k \sim \begin{pmatrix} 1 & \rho_1 \\ -\rho_1 + \rho_2 & \rho \end{pmatrix}. \tag{1}$$

В идеальном случае отличие ρ_1 и ρ_2 от нуля обусловлено оптической активностью фазовой пластины. Реально же вклад в ρ_1 и ρ_2 вносят также и погрешности в оптической юстировке этой пластины, т. е. ρ_1 и ρ_2 необходимо рассматривать отличными от нуля и при отсутствии оптической активности. Для успешной реализации однозонной методики достаточно точно должны быть определены все три комплексных параметра. Это общая задача для всех видов компенсаторов независимо от того, обладают они оптической активностью или нет. Первоначально для определения параметров ρ, ρ_1 и ρ_2 были использованы инварианты эллипсометрии, относящиеся к случаю изотропных отражающих сред (см. [3]). При этом выявились некоторые трудности, обусловленные поверхностной анизотропией образцов, хотя разброс поляризационных углов Ψ и Δ по измерительным зонам уменьшился по сравнению с методикой, игнорирующей недиагональные элементы матрицы Джонса (1). Для дальнейшего повышения точности определения ρ, ρ_1 и ρ_2 необходимо было учитывать поверхностную анизотропию. С этой целью в работе [4] использованы инварианты эллипсометрии анизотропных сред.

Инвариантное соотношение эллипсометрии анизотропных сред [5], обобщенное на случай отличных от нуля недиагональных элементов матрицы Джонса (1) и записанное для ситуации, когда «быстрая» ось компенсатора в каждой измерительной зоне системы PCSA образует с плоскостью падения угол

$$\Psi_k^{(j)} = 45^\circ \quad (j = 1, \ldots, 4), \tag{2}$$

имеет следующий вид [4]:

$$W_a = \| \zeta_j b_{1j},\ \zeta_j b_{2j},\ b_{1j} \mathrm{tg} \Psi_a^{(j)},\ b_{2j} \mathrm{tg} \Psi_a^{(j)} \| = 0, \tag{3}$$

где $j = 1, \ldots, 4$ — номер строки определителя, совпадающий с номером измерительной зоны;

$$\begin{aligned} b_{1j} &= [1 + \rho - \eta_j \rho_2] \cos\gamma_p^{(j)} + [\eta_j (1 - \rho) + (2\rho_1 - \rho_2)] \sin\gamma_p^{(j)}, \\ b_{2j} &= [1 + \rho + \eta_j \rho_2] \sin\gamma_p^{(j)} + [\eta_j (1 - \rho) - (2\rho_1 - \rho_2)] \cos\gamma_p^{(j)}, \end{aligned} \tag{4}$$

$$\zeta_j = (-1)^{j+1}, \ \eta_j = \begin{cases} 1, & j = 1, 2, \\ -1, & j = 3, 4, \end{cases} \tag{5}$$

$\gamma_p^{(j)}$ и $\Psi_a^{(j)}$ — угловые положения гашения поляризатора и анализатора в пределах j-й измерительной зоны.

Уравнения (3) исследованы [4] в предположении, что ρ_1 и ρ_2 определяются только оптической активностью фазовой пластины, а в этом случае (например, для кварцевого компенсатора) величиной ρ_2 можно пренебречь по сравнению с ρ_1 [2]. Показано, что ρ_1 и поправка $\Delta\rho$ к параметру ρ имеют соответственно первый и второй порядки малости по оптической активности, что позволяет найти выражение для ρ_1 в линейном приближении. Но и такой подход оказался недостаточным, так как ρ_1 и ρ_2 определяются также и погрешностями в юстировке компенсатора, что делает невозможным пренебрежение величиной ρ_2. Таким образом, уравнение (3) необходимо решать относительно всех трех комплексных параметров: ρ, ρ_1 и ρ_2. Одного уравнения, очевидно, недостаточно. Подставляя в (3) угловые положения гашения оптических элементов, измеренных на разных образцах или на одном образце, но при разных углах падения светового пучка, получаем необходимое число независимых уравнений, которые целесообразно решать, используя методы оптимизации вычислительной математики.

Принципиальную роль в эллипсометрии играют параметры анизотропии:

$$\alpha_{ij} = \mathrm{tg}(\gamma_p^{(i)} + \gamma_p^{(j)}), \qquad \beta_{ij} = \mathrm{tg}\Psi_a^{(i)} - \mathrm{tg}\Psi_a^{(j)} \quad (ij = 14, 23), \tag{6}$$

которые определяются как анизотропией образцов, так и величинами ρ_1 и ρ_2. Для изотропных образцов при условии $\rho_1 = \rho_2 = 0$ они обращаются в нуль:

$$\alpha_{ij} = \beta_{ij} = 0 \quad (ij = 14, 23), \tag{7}$$

т. е. для изотропных образцов они определяются только величинами ρ_1 и ρ_2, а при нулевых значениях ρ_1 и ρ_2 — только анизотропией отражающих образцов. Такой характер параметров анизотропии сохраняется всегда, когда «быстрая» ось компенсатора во всех измерительных зонах располагается относительно плоскости падения под углами, удовлетворяющими условиям [6]:

$$\Psi_k^{(1)} = \Psi_k^{(4)}, \qquad \Psi_k^{(2)} = \Psi_k^{(3)}. \tag{8}$$

Если ввести величину θ_j, характеризующую отклонение «быстрой» оси компенсатора от ее стандартного положения (2):

$$\theta_j = \Psi_k^{(j)} - 45°, \tag{9}$$

то условия (8) запишутся как

$$\theta_1 = \theta_4, \qquad \theta_2 = \theta_3. \tag{10}$$

Очевидно, что для наиболее употребительного ($\Psi_k^{(j)} = 45°$, $\theta_j = 0$, $j = 1, ..., 4$), как и для несколько более общего (но такого же простого) варианта

$$\Psi_k^{(1)} = \Psi_k^{(2)} = \Psi_k^{(3)} = \Psi_k^{(4)} \neq 45° \quad (\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_4 \neq 0), \tag{11}$$

данные условия выполняются.

В уравнениях (3) параметры анизотропии легко выделяются. Необходимое число независимых уравнений (3), используемых для определения ρ, ρ_1 и ρ_2, можно обеспечить также только за счет перехода к разным ориентациям «быстрой» оси, но при этом целесообразно придерживаться условий (8), (10). В этом случае вид уравнений (3) сохраняется, меняются только выражения для b_{1j} и b_{2j} [7]:

$$\begin{aligned} b_{1j} &= k_{11}^{(j)} \cos\gamma_p^{(j)} + k_{12}^{(j)} \sin\gamma_p^{(j)}, \\ b_{2j} &= k_{22}^{(j)} \sin\gamma_p^{(j)} + k_{21}^{(j)} \cos\gamma_p^{(j)}, \end{aligned} \tag{12}$$

где $k_{11}^{(j)}, ..., k_{22}^{(j)}$ — элементы матрицы Джонса для компенсатора, записанные в координатной системе, образованной p- и s-направлениями падающего светового луча:

$$\begin{aligned} k_{11}^{(j)} &= (1 + \rho) - (1 - \rho)\sin2\theta_j - \eta_j\rho_2\cos2\theta_j, \\ k_{12}^{(j)} &= \eta_j(1 - \rho)\cos2\theta_j - \rho_2\sin2\theta_j + (2\rho_1 - \rho_2), \\ k_{21}^{(j)} &= \eta_j(1 - \rho)\cos2\theta_j - \rho_2\sin2\theta_j - (2\rho_1 - \rho_2), \\ k_{22}^{(j)} &= (1 + \rho) + (1 - \rho)\sin2\theta_j + \eta_j\rho_2\cos2\theta_j. \end{aligned} \tag{13}$$

В то же время параметры $\alpha_{14(23)}$ и $\beta_{14(23)}$ в силу своей малости весьма чувствительны к экспериментальным ошибкам в определении угловых положений гашения оптических элементов. В результате возникает нестабильность величин ρ, ρ_1 и ρ_2 из уравнений (3). Такую нестабильность можно устранить, привлекая методы решения некорректных математических задач [8].

Методы оптической юстировки в эллипсометрии достаточно отработаны, не является проблемой и выбор высококачественных поляризационных призм для поляризатора и анализатора. И все же следует обратить внимание на одну интересную особенность оптической юстировки, отмеченную в [9]. Если параметры компенсатора ρ_1 и ρ_2 определены каким-то способом и не равны нулю, то выбор положительного направления вращения оптических элементов не может быть произвольным. Для этого случая предложена процедура [9], позволяющая определять положение «быстрой» оси компенсатора и положительное направление вращения всех оптических элементов. Однако если ρ_1 и ρ_2 определены по инвариантам эллипсометрии при заданном положительном направлении вращения, то с этими параметрами можно работать только при данном положительном направлении. Изменив это направление на обратное, мы должны поменять знаки величин ρ_1 и ρ_2. Это легко понять, если учесть, что положительное направление вращения и направления координатных осей, в которых определена матрица Джонса (1), связаны между собой. При изменении положительного направления вращения изменяется и направление одной из координатных осей. В этом случае, очевидно, изменяются знаки недиагональных комплексных коэффициентов пропускания через пластину компенсатора. Но поскольку недиагональными коэффициентами пропускания определяются недиагональные элементы матрицы (1), то это и означает изменение знака величин ρ_1 и ρ_2. Аналогично при изменении положительного направления вращения оптических элементов ведут себя недиагональные коэффициенты отражения, связывающие p- и s-составляющие комплексных амплитуд отраженной и падающей электромагнитных волн. Об этом нельзя забывать, так как в эллипсометрии анизотропных сред недиагональными коэффициентами отражения определяются две пары недиагональных поляризационных углов [7].

Важной проблемой, непосредственно связанной с точностью эллипсометрических измерений, является температурная неустойчивость параметров компенсатора. В современных эллипсометрах в качестве компенсатора чаще всего используется пластина одноосного кристалла с оптической осью, лежащей в плоскости пластины. Фазовый параметр δ такого компенсатора описывается приближенной формулой [5]

$$\delta \approx \frac{2\pi d}{\lambda}(n_e - n_o), \tag{14}$$

где

$$n_e = \sqrt{\varepsilon_{\parallel}}, \qquad n_o = \sqrt{\varepsilon_{\perp}}; \tag{15}$$

d — толщина пластины; λ — длина плоской монохроматической электромагнитной волны; $\varepsilon_{\parallel}$ и $\varepsilon_{\perp}$ — главные значения тензора диэлектрической проницаемости ε_{ik}, отвечающие соответственно оптической оси и двум другим эквивалентным главным осям тензора.

Температурная неустойчивость эллипсометрических результатов при использовании данного компенсатора обусловлена его большой толщиной. На практике обычно используются значения

$$d \approx 1500 \div 2000 \text{ мкм}. \tag{16}$$

При такой толщине температурные колебания n_e и n_o, проявляющиеся в шестом или седьмом знаке после запятой, а также температурные колебания самой толщины d приводят к заметным изменениям фазового параметра δ, что существенно сказывается на точности эллипсометрических измерений. Однако ситуация коренным образом изменится, если в качестве компенсатора использовать пластину одноосного кристалла с оптической осью, расположенной под углом θ к нормали пластины. Электромагнитная волна произвольной поляризации, падающая на такую пластину вдоль ее нормали, внутри пластины распадается на обыкновенную и необыкновенную волны. Необыкновенная волна поляризована в плоскости, образованной оптической осью и нормалью, а обыкновенная — поляризована линейно в перпендикулярном к указанной плоскости направлении. Волновые векторы k_e и k_o данных волн различны и определяются формулами, полученными из волнового уравнения Френеля [10]:

$$k_e \cong \frac{2\pi}{\lambda}\left[n_o + (n_e - n_o)\sin^2\theta - \frac{3}{2}\frac{1}{n_o}(n_e - n_o)^2\cos^2\theta\sin^2\theta\right], \tag{17}$$

$$k_o = \frac{2\pi}{\lambda} n_o. \tag{18}$$

На выходе из пластины между обыкновенной и необыкновенной волнами возникает разность фаз

$$\delta \approx (k_e - k_o)d \approx \frac{2\pi d}{\lambda}(n_e - n_o)\sin^2\theta, \tag{19}$$

которая представляет собой фазовый параметр пластины одноосного кристалла с произвольной ориентацией оптической оси.

Формулу (19) для δ перепишем аналогично формуле (14), т. е. в виде, характерном для обычного компенсатора, у которого оптическая ось лежит в плоскости пластины ($\theta = 90°$, $\sin\theta = 1$):

$$\delta \approx \frac{2\pi d_{эф}}{\lambda}(n_e - n_o), \tag{20}$$

где

$$d_{эф} = d\sin^2\theta. \tag{21}$$

Минимальное значение $d_{эф}$, обеспечивающее разность фаз $\delta = \pi/2$, находится с помощью формулы (20):

$$(d_{эф})_{\min} = \frac{\lambda}{4(n_e - n_o)}. \tag{22}$$

Считая толщину пластины d заданной в интервале (16), найдем с помощью формул (21) и (22) минимальное значение $\sin\theta$, обеспечивающее разность фаз $\delta = \pi/2$:

$$(\sin\theta)_{\min} = \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{d(n_e - n_o)}\right)^{1/2}. \tag{23}$$

Рассмотрим для примера пластину кристаллического кварца с параметрами: $d = 1570$ мкм, $(n_e - n_o) \approx 0{,}01$, $\lambda = 0{,}6328$ мкм. В этом случае $(\sin\theta)_{\min} = 0{,}1$, т. е. $\theta_{\min} \approx 5{,}5°$, $(d_{эф})_{\min} \approx 15{,}7$ мкм.

Формулы (14) и (20) аналогичны, но во втором случае $d_{эф}$ на два порядка меньше реальной толщины d, а это означает, что температурные колебания фазового параметра δ снижаются в рассматриваемом случае также на два порядка.

Таким образом, использование в качестве компенсатора пластины одноосного кристалла с оптической осью, образующей с нормалью к пластине сравнительно небольшой угол θ, может коренным образом изменить ситуацию в эллипсометрии, существенно снизив экспериментальные ошибки, связанные с температурными колебаниями.

Аналогом рассмотренного компенсатора (по температурной устойчивости) является двойной компенсатор, состоящий из двух пластин одноосного кристалла, оптические оси которых лежат в плоскости пластин и взаимно перпендикулярны. Однако предложенный компенсатор по сравнению с двойным обладает существенными преимуществами, главные из которых следующие:

1) гораздо большая простота в изготовлении, связанная с низкой чувствительностью (на два порядка меньшей по сравнению с двойным компенсатором) к изменению толщины пластины (изменению толщины в 1 мкм соответствует изменение фазового параметра всего лишь на 3');

2) простота оптической юстировки (отсутствует необходимость в процедуре по установлению соосности и параллельности пластин);

3) фазовый параметр каждой из пластин двойного компенсатора составляет $80°m \pm 45°$ (m — целое число), а в этой области контроль фазового параметра в процессе изготовления пластины оказывается более сложным, чем при $\delta \approx 90°$, особенно если учесть гораздо более высокую в данном случае чувствительность к изменению толщины.

Следует также отметить, что особых требований к точности задания угла θ для предлагаемого компенсатора не существует.

Обычный компенсатор (с оптической осью, лежащей в плоскости пластины), фазовый параметр (δ) которого определяется формулой (14), становится термоустойчивым при очень малых толщинах. Малая толщина может быть достигнута, если пластина одноосного кристалла наклеивается на изотропную стеклянную подложку толщиной $1500 \div 2000$ мкм и затем путем шлифовки и полировки доводится до необходимой малой толщины. При этом изотропная стеклянная подложка становится составной частью компенсатора. Такие компенсаторы, обладающие хорошей термоустойчивостью, существуют. Единственным их недостатком является сложная технология изготовления.

Однозонную методику нельзя реализовать только за счет повышения точности определения ρ, ρ_1 и ρ_2. Недостаточны также температурная стабильность и даже идеальная оптическая юстировка прибора. Дело в том, что любой отражающий объект в какой-то мере обладает анизотропией. Поверхностная анизотропия сама по себе, даже при точных значениях ρ, ρ_1, ρ_2, приведет к разбросу значений Ψ и Δ по зонам. Углы Ψ и Δ не дают полного описания поляризующих свойств анизотропных отражающих систем. Необходимо воспользоваться наиболее общим подходом к эллипсометрии анизотропных сред, основанным на введении трех пар поляризационных углов, одна из которых, как и в случае изотропных отражающих систем, связана только с диагональными, а две другие — с недиагональными амплитудными коэффициентами отражения световой волны. Конкретной реализацией такого подхода является метод обобщенных измерительных зон [5]. Зонные соотношения, относящиеся к четырем обобщенным зонам, при точно определенных параметрах компенсатора должны дать совпадающие по зонам значения трех пар поляризационных углов. Это и будет обобщением однозонной методики. Значительным препятствием здесь было то, что зонные соотношения в их первоначальном виде при $\delta \to 90°$ содержат особенность типа 0/0, поэтому фазовый параметр δ компенсатора не должен быть слишком близок к 90° (желательно не использовать интервал его значений ($85 \div 95°$)). Однако такой способ ухода от особенностей не может удовлетворять, прежде всего если проводятся спектроэллипсометрические исследования. Кроме того, исключение лучшего интервала значений фазового параметра δ становится необоснованным при переходе к исследованию (на том же приборе) практически изотропных систем, когда используются обычные зонные соотношения, не содержащие никаких особенностей.

В работе [7] предложен другой способ устранения особенностей, связанный с отказом от стандартной зонной методики, в которой «быстрая» ось компенсатора в любой измерительной зоне образует с плоскостью падения угол 45° (см. (2)). В этой работе рассмотрен вариант, когда отклонение «быстрой» оси от ее стандартного положения (2) определяется в каждой зоне одним и тем же углом θ (см. (9)):

$$\theta = \theta_1 = \ldots = \theta_4. \qquad (24)$$

Показано, что при соответствующем выборе угла θ можно заметно уйти от особенностей. Для этого не нужны слишком большие θ, чаще всего достаточно использовать значение $\theta = \pm 5°$. Таким образом, отказ от стандартной зонной методики снимает проблему особенностей в зонных соотношениях «анизотропного» случая.

Реализация однозонной методики в рамках единой эллипсометрической теории, охватывающей как изотропные, так и анизотропные отражающие системы, в конечном итоге позволит проводить аттестацию эллипсометров любого класса точности. В связи с этим особое значение приобретают разработка и создание метрологического эллипсометра повышенной точности для аттестации серийно выпускаемых эллипсометров и оптических элементов к ним.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семененко А. И. О реализации предельных возможностей метода эллипсометрии. 1. Общий подход // УФЖ. 1992. 37, № 4. С. 541.
2. Миронов Ф. С., Семененко А. И. О проявлении оптической активности кристаллического компенсатора в эллипсометрии // УФЖ. 1981. 26, № 6. С. 938.
3. Бохонько А. И., Семененко А. И. О проявлении оптической активности кристаллического компенсатора в эллипсометрии. Реализация однозонной «нулевой» методики // Оптика и спектроскопия. 1987. 63, вып. 4. С. 901.
4. Семененко А. И. О реализации предельных возможностей метода эллипсометрии. 2. Инварианты эллипсометрии и определение элементов матрицы Джонса компенсатора // УФЖ. 1993. 38, № 5. С. 675.
5. Ржанов А. В., Свиташев К. К., Семененко А. И. и др. Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979.
6. Семененко А. И. Инварианты эллипсометрии // Оптика и спектроскопия. 1978. 45, вып. 2. С. 387.
7. Семененко А. И. О реализации предельных возможностей метода эллипсометрии. 3. Метод обобщенных измерительных зон в эллипсометрии анизотропных сред // УФЖ. 1995. 40, № 4. С. 300.
8. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
9. Семененко А. И., Миронов Ф. С. О проявлении оптической активности кристаллического компенсатора в эллипсометрии // УФЖ. 1982. 27, № 3. С. 338.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматгиз, 1959.

Поступила в редакцию 10 ноября 1996 г.