

УДК 535.51

Е. Г. Борщаговский

*(Киев, Украина)***АНАЛИЗ ОШИБОК ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ
ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ**

Анализируются ошибки измерения эллипсометрических углов Ψ и Δ с помощью нуль-эллипсометров и эллипсометров с вращающимся анализатором. Показано, что знание поведения ошибок в зависимости от условий измерения необходимо для выбора оптимальных измерительных условий. Также отмечено, что рассмотрения только чувствительности эллипсометрических углов недостаточно для решения этой задачи. Впервые для эллипсометра с вращающимся анализатором приведены полные выражения для ошибок в зависимости от условий измерения.

Введение. Практически тривиально и очевидно сегодня утверждение, что для оптимизации каких-либо измерений необходимо максимизировать отношение интенсивности сигнала к шуму. При этом если измеряемая величина не является сама по себе интересующим нас параметром, сигналом будет служить чувствительность измеряемой величины к значению интересующего нас параметра. Таким образом, выбор наилучших условий измерения одного параметра исследуемой системы — задача оптимизации с вполне определенной целевой функцией. Задача существенно усложняется, если необходимо определить несколько параметров исследуемой системы. В этом случае выбор целевой функции часто становится неоднозначным (невозможно определить чувствительность сразу к нескольким параметрам), необходимо учитывать корреляции и т. д. Однако рассмотрение этого вопроса выходит за рамки данной работы, и здесь для простоты будет рассматриваться задача определения одного параметра.

Увеличение отношения сигнал/шум может проводиться тремя путями. Это увеличение сигнала, уменьшение шума и оптимизация всего выражения целиком, что далеко не всегда совпадает с первыми двумя способами. Очевидно, что хотя все три подхода дают положительный эффект, но лишь последний дает полное решение задачи.

Во многих исследованиях ошибки не зависят от условий измерений, поэтому максимизация сигнала достаточна для проведения оптимальных измерений и рассмотрения ошибок не требуется. Этот подход часто используется и в эллипсометрии (например, [1—5]) несмотря на существование зависимостей погрешностей определения Ψ и Δ от условий измерения. При этом получается, что чувствительность, причем сразу ко многим параметрам, максимизируется (или даже расходится до бесконечности) при стремлении $r_p \rightarrow 0$ или $r_s \rightarrow 0$. Поскольку все разновидности эллипсометрических методов сводятся к регистрации света, вывод об улучшении измерений при падении интенсивности регистрируемого светового потока кажется несколько странным. Это даже находит отражение в некоторых замечаниях по поводу полученных условий [4].

Гораздо меньше работ посвящено анализу всего отношения сигнал/шум [6—12]. Но даже здесь зачастую поведение ошибок не рассматривается, и выбор оптимальных условий измерений проводится только за счет максимизации чувствительности [6—9]. Поведению же случайных погрешностей изме-

рения эллипсометрических углов посвящено всего несколько работ [13—18]. Так, в [13] вводится очень полезная величина — минимальное обнаружимое изменение искомого параметра p_i по измерению величины a :

$$\delta p_i = \delta a / \frac{\partial a}{\partial p_i}, \quad (1)$$

где δa — среднеквадратичная случайная погрешность измерения a . Так как чувствительность может быть нулевой, а погрешности измерений, к сожалению, существуют всегда, для численного анализа удобнее использовать обратную величину. Эти величины (прямая и обратная) примечательны тем, что относятся лишь к исследуемой системе, но полностью определяются методом измерения. В результате именно эти величины должны использоваться при количественном сравнении разных методов исследования [11], а величины, сконструированные аналогичным образом с учетом погрешностей реальных измерений, могут использоваться в анализе результатов, полученных разными методами для построения одной комбинированной функции ошибок.

Такое обратное соотношение может быть названо точностью определения параметра p_i по измерению величины a [11], поскольку оно равно обсуждаемому выше отношению сигнал/шум. Так, в [10] было показано, что это выражение достигает максимума совсем не при условии $r_p \rightarrow 0$ или $r_s \rightarrow 0$, а в [11] приведены зависимости абсолютной достижимой точности определения толщины тонкой пленки на различных подложках от угла падения.

Следует заметить, что если при обработке результатов измерений в функции ошибок, где также необходимо использование погрешностей для расчета так называемых «взвешенных невязок» [9, 19, 20], нужно включать оценки реальных погрешностей, определяемых в процессе самого измерения [9], то для выбора оптимальных условий измерений используются теоретические зависимости поведения погрешностей.

Погрешности измерения. Так как наиболее распространенными являются нуль-эллипсометры и эллипсометры с вращающимся анализатором, ограничимся рассмотрением погрешностей измерений для этих типов приборов. Кроме того, анализ ошибок будет проводиться в рамках модели «идеального детектора» [15].

Несмотря на то что автору известна лишь одна работа [21], посвященная исследованию погрешностей измерений для нуль-эллипсометра с произвольной фазовой пластиной в качестве компенсатора с «быстрой» осью, повернутой по отношению к плоскости падения на угол C (считая здесь и далее пропускание этой пластины равным единице), в ней нет общего решения задачи и она посвящена методам, в которых компенсатор не фиксирован в процессе измерения. В случае измерений с фиксированным компенсатором простые соображения показывают, что сдвиг фаз $\sigma = \pi/2$ и угол поворота $C = \pi/4$ дают наиболее равномерные, а именно линейные соотношения между эллипсометрическими углами Ψ и Δ и углами поворота поляризатора P и анализатора A при гашении. В противном случае одна и та же точность измерения P и A по всей шкале даст существенный рост погрешностей определения Ψ и Δ на некоторых участках. Кроме того, отклонение положения компенсатора от $C = \pm \pi/4$ и сдвига фаз от $\pi/2$ приводит к увеличению погрешностей в измерении углов P и A и появлению корреляции между ними. Это можно видеть из анализа поведения интенсивности света в окрестности гашения при отклонении углов P и A от положений гашения (P_0, A_0) в случае эллипсометра с идеальным компенсатором и произвольной фазовой пластиной. Если в «идеальном» ($C = \pm \pi/4, \sigma = \pi/2$) случае

$$\Delta I = \frac{I_0}{2} \left[(R_p + R_s)(\Delta A)^2 + \frac{4R_p R_s}{R_p + R_s} (\Delta P)^2 \right], \quad (2)$$

то в случае произвольных C и σ

$$\begin{aligned} \Delta I = I_0 \left[(R_p \cos^2 A_0 + R_s \sin^2 A_0) (\Delta P)^2 + \frac{R_p R_s}{R_p \cos^2 A_0 + R_s \sin^2 A_0} (\Delta A)^2 + \right. \\ \left. + 2 \frac{R_p \cos^2 A_0 + R_s \sin^2 A_0}{\sin 2A_0} (\cos 2C \cdot \sin 2(P_0 - C) + \right. \\ \left. + \sin 2C \cdot \cos 2(P_0 - C) \cos \sigma) (\Delta P \Delta A) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где P_0 и A_0 определяются из условий:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \Psi \cdot \cos \Delta = -\operatorname{tg} A_0 \frac{\operatorname{tg} C (1 - \operatorname{tg}^2 (P_0 - C)) + \operatorname{tg} (P_0 - C) (1 - \operatorname{tg}^2 C) \cos \delta}{1 + \operatorname{tg}^2 C \operatorname{tg}^2 (P_0 - C) - 2 \operatorname{tg} C \operatorname{tg} (P_0 - C) \cos \delta}, \\ \operatorname{tg} \Psi \cdot \sin \Delta = \operatorname{tg} A_0 \frac{\operatorname{tg} (P_0 - C) (1 + \operatorname{tg}^2 C) \sin \delta}{1 + \operatorname{tg}^2 C \operatorname{tg}^2 (P_0 - C) - 2 \operatorname{tg} C \operatorname{tg} (P_0 - C) \cos \delta}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь R_p и R_s — коэффициенты отражения исследуемой системы для интенсивности света; I_0 — интенсивность света, которая может измеряться при установлении эллипсометра «на просвет» и совмещении всех осей пропускания, т. е. интенсивность света на выходе поляризатора.

Кроме того, выбор $C = \pm \pi/4$ и $\sigma = \pi/2$ уменьшает систематические погрешности за счет уменьшения влияния параметров несовершенств [22]. Хотя подобные рассуждения не являются строгим решением задачи, они позволяют ограничиться в большинстве случаев рассмотрением лишь системы с идеальным компенсатором. Для подобной системы показано [13], что погрешности измерения эллипсометрических углов определяются выражениями

$$\delta_{\Psi}^{\text{нул}} = \frac{1}{\sqrt{R_p + R_s}} \left(\frac{2\delta_{\text{нул}}}{I_0} \right)^{1/2}, \quad \delta_{\Delta}^{\text{нул}} = \left(\frac{R_p + R_s}{R_p R_s} \right)^{1/2} \left(\frac{2\delta_{\text{нул}}}{I_0} \right)^{1/2}, \quad (5)$$

которые легко получить из выражения (2) и зонных соотношений. Здесь $\delta_{\text{нул}}/I_0$ — достижимая относительная погрешность измерения интенсивности в окрестности гашения, которая в большинстве случаев определяется собственными шумами регистрирующей системы.

Отсюда видно, что при $r_p \rightarrow 0$ или $r_s \rightarrow 0$ ошибки определения Δ расходятся вместе с чувствительностью. Поэтому совсем не очевидно, что подобные точки должны дать максимальную точность в определении параметров исследуемой системы. Проведенные ранее расчеты [10] показывают, что в действительности максимальная точность достигается при других условиях. Интересно отметить, что хотя поведение чувствительности эллипсометрических углов Ψ и Δ в зависимости от условий измерения совершенно различно, поведение точности может быть совершенно одинаково [10].

Вопрос зависимости погрешностей определения Ψ и Δ от условий измерения с помощью эллипсометра с вращающимся анализатором также рассматривался достаточно давно [15—17]. Однако в этих работах не учтена зависимость величины постоянного сигнала от условий измерения, что привело к получению не совсем точных результатов и неверных выводов для измерения при $r_p \rightarrow 0$. Без учета указанной зависимости в этих работах получено, что минимальные погрешности будут достигнуты при условии $P = \Psi$ и их величина пропорциональна $\operatorname{tg} \Psi$, т. е. условие $r_p \rightarrow 0$ при установке $P = \Psi$ минимизирует ошибки. Это довольно странное утверждение, так как при этом полностью гасится сигнал на выходе эллипсометра и проведение измерений интенсивности становится вообще невозможным.

Рассмотрим данную ситуацию более подробно. Для эллипсометра, собранного по схеме PCSA, в котором анализатор вращается с угловой частотой Ω , а компенсатор с фазовым сдвигом σ установлен так, что $C = 0$, т. е. он вносит

лишь дополнительный сдвиг фаз в отражение от исследуемой системы, легко получить интенсивность на выходе всей системы:

$$I = I_0 \left(\frac{R_p \cos^2 P + R_s \sin^2 P}{2} + \frac{R_p \cos^2 P - R_s \sin^2 P}{2} \cos 2\Omega t + \frac{\sqrt{R_p R_s}}{2} \sin 2P \cdot \cos(\Delta + \sigma) \sin 2\Omega t \right) = a + b \cos 2\Omega t + c \sin 2\Omega t = a(1 + \alpha \cos 2\Omega t + \beta \sin 2\Omega t). \quad (6)$$

В этом случае

$$\Psi = \arctg \left(\operatorname{tg}^2 P \frac{1 + \alpha}{1 - \alpha} \right)^{1/2}, \quad \Delta = \arccos \left(\frac{\beta}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \right) - \sigma \quad (7)$$

и погрешности определяются выражениями [15], но с учетом корреляции фурье-коэффициентов α и β :

$$\delta_{\Psi}^{\text{rot}} = \sin \Psi \cdot \cos \Psi \frac{\sqrt{2 + \alpha^2}}{1 - \alpha^2} \frac{\delta_a}{a}, \quad (8)$$

$$\delta_{\Delta}^{\text{rot}} = \left(\frac{2 + \beta^2 + \alpha^2 \beta^2 (4 - \alpha^2) / (1 - \alpha^2)^2}{1 - \alpha^2 - \beta^2} \right)^{1/2} \frac{\delta_a}{a}.$$

Так как коэффициенты находятся по формулам

$$a = N^{-1} \sum_{i=1}^N I_i, \quad b = 2N^{-1} \sum_{i=1}^N I_i \cos(2\pi(i-1)/N), \quad (9)$$

$$c = 2N^{-1} \sum_{i=1}^N I_i \sin(2\pi(i-1)/N),$$

то при стандартном условии независимости измерений интенсивности во время одного оборота анализатора получаем

$$\delta_a = \frac{1}{\sqrt{N}} \delta_I, \quad \delta_b = \delta_c = \sqrt{2} \delta_a. \quad (10)$$

Из выражений (8) сделан вывод [15], что при $\alpha = \beta = 0$ погрешности должны быть минимальными. Однако при этом упущено, что коэффициент a также зависит от условий измерения и не является постоянной величиной. К счастью, данный коэффициент не является быстро меняющейся функцией, поэтому условие $P = \Psi$ не приводит к существенному увеличению ошибок. С учетом зависимости величины a от положения поляризатора имеем

$$\delta_{\Psi}^{\text{rot}} = \frac{\sqrt{2A^2 + B^2}}{\sqrt{R_p R_s} (R_p + R_s) \sin^2 2P} \frac{2\delta_I}{\sqrt{N} I_0}, \quad (11)$$

$$\delta_{\Delta}^{\text{rot}} = \frac{\sqrt{2R_p R_s \sin^2 2PA^2 + \cos^2(\Delta + \sigma)(A^4 + 2A^2 B^2)}}{R_p R_s A \sin^2 2P |\sin(\Delta + \sigma)|} \frac{2\delta_I}{\sqrt{N} I_0},$$

где $A = R_p \cos^2 P + R_s \sin^2 P$ и $B = R_p \cos^2 P - R_s \sin^2 P$.

Как видно из этих выражений, величины обеих погрешностей расходятся при $r_p \rightarrow 0$ или $r_s \rightarrow 0$, что и наблюдается в действительности. Положение

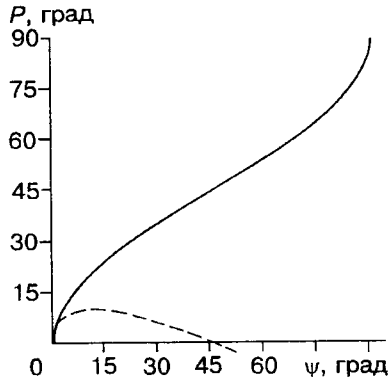


Рис. 1. Зависимость положения поляризатора от угла Ψ исследуемой системы, при котором погрешность измерения Ψ минимальна.

Штриховой линией показана часть отклонения угла P от равенства $P = \Psi$; вторая половина этой зависимости повторяет первую с обратным знаком

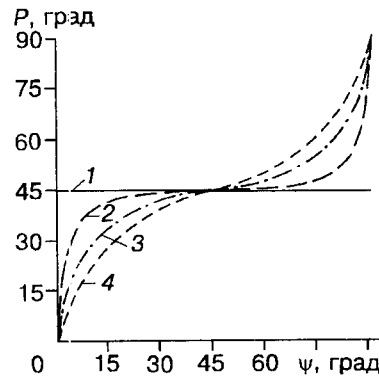


Рис. 2. Зависимость положения поляризатора от угла Ψ исследуемой системы, при котором погрешность измерения Δ минимальна для различных значений Δ (град):

1 -- 90; 2 -- 80; 3 -- 60; 4 -- 0

поляризатора, при котором погрешности определения Ψ минимальны, задается уравнением

$$3\text{tg}^6 P - \text{tg}^2 \Psi \text{tg}^2 P + \text{tg}^2 \Psi \cdot \text{tg}^4 P - 3\text{tg}^4 \Psi = 0. \quad (12)$$

Легко видеть, что условие $P = \Psi$ выполняется лишь при $\Psi = 0; \pi/4; \pi/2$. Численное решение для всего диапазона Ψ показано на рис. 1 вместе с отклонением его от условия $P = \Psi$. В интервале $\Psi \in (14, 76^\circ)$ оно хорошо аппроксимируется линейной зависимостью

$$P = \Psi + 0,35(45^\circ - \Psi). \quad (13)$$

Необходимо отметить, что учет зависимости коэффициента a от положения поляризатора приводит к различным положениям поляризатора для минимизации ошибок Ψ и Δ . Таким образом, эта аппроксимация не является универсальным правилом для минимизации ошибок.

Для погрешности определения Δ условие оптимальности $\Delta + \sigma = \pi/2$ сохраняет силу, но если его можно выполнить, оптимальным положением поляризатора является $P = \pi/4$. Опять нетрудно показать, что в общем случае положение $P = \Psi$ оптимально при $\Psi = 0; \pi/4; \pi/2$, хотя при $\Psi = 0$ или $\pi/2$ независимо от положения поляризатора ошибки измерения как Ψ , так и Δ расходятся. Численно рассчитанные зависимости оптимального положения поляризатора для минимизации ошибок определения Δ от Ψ приведены на рис. 2 для различных величин Δ в интервале $0 \div 90^\circ$. Для $\Delta \in (0, 30^\circ)$ зависимости очень слабо отличаются друг от друга. Необходимо заметить, что кривая на рис. 1 практически везде лежит ближе к линии $P = \Psi$, чем любая из кривых на рис. 2.

В общем случае для выбора оптимального положения поляризатора необходимо максимизировать точность на основе измерения обоих эллипсометрических углов [7] для конкретной исследуемой системы:

$$\frac{1}{\delta p_i} = \left[\left(\frac{1}{\delta \Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial p_i} \right)^2 + \left(\frac{1}{\delta \Delta} \frac{\partial \Delta}{\partial p_i} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (14)$$

Заключение. Рассмотрено поведение ошибок измерения эллипсометрических углов Ψ и Δ с помощью как нуль-эллипсометра, так и эллипсометра с вращающимся анализатором. Показано, что в случае эллипсометра с вращающимся анализатором положение поляризатора $P = \Psi$ не является оптималь-

ным, а лежит ближе к углу $\pi/4$ и определяется более сложными выражениями, различными для уменьшения ошибок в измерении Ψ и Δ . Еще раз обращено внимание на то, что для выбора оптимальных условий измерения рассмотрение лишь чувствительности эллипсометрических углов к параметрам системы недостаточно и должно быть дополнено рассмотрением поведения ошибок измерений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Alterovitz S. A., Bu-Abbud G. H., Woollam J. A. Analytic solutions for optimized ellipsometric measurements of interfaces and surface layers in thin film structures // *Thin Solid Films*. 1985. 123. P. 183.
2. Snyder P. G., Rost M. C., Bu-Abbud G. H. et al. Variable angle of incidence spectroscopic ellipsometry: Application to GaAs—Al_xGa_{1-x}As multiple heterostructures // *J. Appl. Phys.* 1986. 60, N 9. P. 3293.
3. Azzam R. M. A., Elshazly-Zaghloul M., Bashara N. M. Combined reflection and transmission thin-film ellipsometry: a unified linear analysis // *Appl. Opt.* 1975. 14, N 7. P. 1652.
4. Калныня Р. П., Фрейвальде И. Р. Выбор оптимальных условий многоугловых эллипсометрических измерений // *Изв. АН ЛатвССР. Сер. физ. и техн. наук.* 1984. № 2. С. 22.
5. Бендере Р. Б., Калныня Р. П., Фрейвальде И. Р., Фелтынъ И. А. Анализ оптимальных условий эллипсометрических измерений в видимой части спектра // *Изв. АН ЛатвССР. Сер. физ. и техн. наук.* 1987. № 4. С. 43.
6. Charlot D., Maruani A. Ellipsometric data processing: an efficient method and an analysis of the relative errors // *Appl. Opt.* 1985. 24, N 20. P. 3368.
7. Humlísek J. Sensitivity extrema in multiple-angle ellipsometry // *JOSA A*. 1985. 2, N 5. P. 713.
8. Gaillyova Y., Schmidt E., Humlícek J. Multiple-angle ellipsometry of Si—SiO₂ polycrystalline Si system // *Ibid.* P. 723.
9. Humlícek J. Sensitivity of optical measurements on planar stratified structures and reduction on experimental data. Brno: Folia, Masaryk University, 1992.
10. Борщаговский Е. Г., Гецко О. М. Выбор оптимальных условий для эллипсометрических измерений // *Оптика и спектроскопия*. 1991. 70, № 5. С. 1144.
11. Bortchagovsky E. G. Possibilities of ellipsometry with the surface plasmon excitation in the investigation of thin films in comparison with separated ellipsometry and surface plasmon spectroscopy // *Proc. SPIE*. 1997. N 1.
12. Коструба А. М., Влох О. Г., Петров В. В. Оптимальные условия эллипсометрического эксперимента с использованием существенно несовершенного компенсатора // *УФЖ*. 1995. 40, № 3. С. 186.
13. Свиташев К. К., Семенов А. И., Семенов Л. В. и др. О точности и чувствительности метода эллипсометрии. II. Чувствительность метода // *Оптика и спектроскопия*. 1977. 42, № 6. С. 1142.
14. Дронь О. С., Леонова Т. В., Соколова М. В. Методика определения погрешностей и оптимизация эллипсометрических измерений // *Опт.-мех. пром-сть*. 1989. № 1. С. 6.
15. Aspnes D. E. Optimizing precision of rotating-analyzer ellipsometers // *JOSA*. 1974. 64, N 5. P. 639.
16. Aspnes D. E. Precision bounds to ellipsometer systems // *Appl. Opt.* 1975. 14, N 5. P. 1131.
17. Aspnes D. E. *Handbook of Optical Constants of Solids* /Ed. E. Palik. Orlando: Academic Press, 1985.
18. Bortchagovsky E. G., Getsko O. M. Comparison of the precision of null-ellipsometer and ellipsometer with rotating analyzer // *Proc. SPIE*. 1997. N 1.
19. Jellison Jr. G. E. Use of the biased estimator in the interpretation of spectroscopic ellipsometry data // *Appl. Opt.* 1991. 30, N 23. P. 3354.
20. Пшеницын В. И., Храмовский И. А. Методы эллипсометрического анализа однородных поверхностных слоев и шероховатых поверхностей // *Эллипсометрия: теория, методы, приложения* /Под ред. К. К. Свиташева, А. С. Мардежова. Новосибирск: Наука, 1991. С. 20.
21. Schmidt E. Precision of ellipsometric measurement // *JOSA*. 1970. 60, N 4. P. 490.
22. Azzam R. M. A., Bashara N. M. *Ellipsometry and Polarized Light*. North-Holland, Amsterdam, 1977.

Поступила в редакцию 5 ноября 1996 г.