

椭圆偏测量中反射率对于膜厚变化的灵敏度因子

王志刚 丁兰英
(山东大学光学系)

提 要

本文推导了环境-膜-基底系统的反射率对于膜厚变化的灵敏度因子公式, 利用计算机对三个不同的膜进行了模拟计算, 得出了该灵敏度因子对于入射角的依赖关系曲线, 并以此为基础讨论了椭圆偏测量中入射角的选择问题。

一、引 言

利用椭圆偏振技术确定吸收膜的厚度和光学常数时, 仅仅测量椭圆偏振角 ψ 和 Δ 是不够的。因为此时未知参数有三个, 即薄膜厚度 d_1 、折射率 n_1 和消光系数 k_1 , 而测量 ψ 与 Δ 只能提供两个关于这三个未知参数的方程, 即

$$\begin{aligned}\tan \psi &= F(n_1, k_1, d_1, n_0, k_0, n_2, k_2, \lambda, \phi_0), \\ \Delta &= G(n_1, k_1, d_1, n_0, k_0, n_2, k_2, \lambda, \phi_0),\end{aligned}$$

式中 n_0, k_0, n_2, k_2 是环境与基底的折射率和消光系数, λ 是光源在真空中的波长, ϕ_0 是入射角, 均为已知参量。解决这一问题的办法, 通常是利用辅助测量确定其中一个未知参数的第三个方程。Paik 与 Bockris 提出了通过测量反射率得到关于未知参数的第三个方程的方法^[1]。由于膜的反射率 R 也是 n_1, k_1, d_1 的函数即

$$R = H(n_1, k_1, d_1, n_0, k_0, n_2, k_2, \lambda, \phi_0)。$$

如能在椭圆偏仪上测出 ψ, Δ, R , 则由以上三个方程, 就可以求出吸收膜的光学常数 n_1, k_1 和膜的厚度 d_1 。

在椭圆偏振测量中, 如何选择光波入射角 ϕ_0 以提高测量的灵敏性问题, 一直受到注意。Azzam 和 Bashara 曾推出了 ψ 和 Δ 对于薄膜厚度变化的灵敏度因子 S_ψ 和 S_Δ , 并计算了这两个灵敏度因子对于入射角的依赖关系^[2]。但是, 文献 [2] 对于反射率测量的灵敏性问题未做研究。鉴于反射率测量对于研究吸收膜的重要性, 我们推导了环境-膜-基底系统的反射率对于厚度变化的灵敏度因子, 并利用计算机模拟计算, 研究了这一灵敏度因子对于光波入射角 ϕ_0 的依赖关系。

二、反射率对于厚度变化的灵敏度因子

对如图 1 所示的环境(0)-膜(1)-基底(2)系统, 在入射角的电矢量方位角为 45° 时, 系

统的总反射率 R 和系统对 p 光和 s 光的反射系数 r_p 和 r_s 之间有如下关系

$$R = \frac{1}{2} (|r_p|^2 + |r_s|^2), \quad (1)$$

而反射系数 r_p 与 r_s 可以表示为^[2]

$$\left. \begin{aligned} r_\nu &= N_\nu / D_\nu, & N_\nu &= r_{01\nu} + r_{12\nu}\chi, \\ D_\nu &= 1 + r_{01\nu}r_{12\nu}\chi, & \chi &= \exp r d_1, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

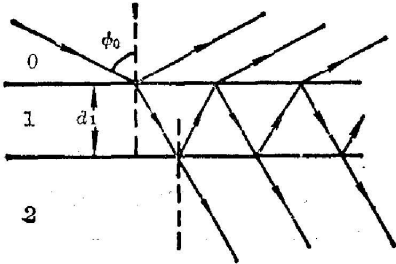


图 1 平行平面边界的环境-膜-基板系统

Fig. 1 Ambience-film-substrate system with parallel plane boundaries

式中 $\nu = p, s$, χ 是复数, 与系统和环境参量有关, $r_{01\nu}$ 和 $r_{12\nu}$ 分别是环境与膜、膜与基板两界面对于 p 光和 s 光的菲涅耳反射比, n_0 是环境折射率, $\bar{n}_1 = n_1 - ik_1$ 是膜的复折射率, ϕ_0 是光波的入射角, λ 是光源在真空中的波长。

由(1)式可以得到

$$\delta_R = |r_p|^2 (\delta|r_p|/|r_p|) + |r_s|^2 (\delta|r_s|/|r_s|), \quad (3)$$

为了计算 δ_R , 先要计算 $\delta|r_\nu|/|r_\nu|$, ($\nu = p, s$) 根据(2)式有

$$\frac{\delta|r_\nu|}{|r_\nu|} = \left[\frac{\delta|N_\nu|}{|N_\nu|} - \frac{\delta|D_\nu|}{|D_\nu|} \right], \quad (4)$$

若认为 $\delta|N_\nu|$ 和 $\delta|D_\nu|$ 都是由厚度的变化 δd_1 引起的, 考虑到

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial|N_\nu|}{\partial d_1} &= \frac{\partial}{\partial d_1} [N_\nu (N_\nu)^*]^{1/2} = \frac{1}{|N_\nu|} \operatorname{Re} \left[\frac{\partial N_\nu}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial d_1} (N_\nu)^* \right], \\ \frac{\partial|D_\nu|}{\partial d_1} &= \frac{1}{|D_\nu|} \operatorname{Re} \left[\frac{\partial D_\nu}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial d_1} (D_\nu)^* \right]. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

我们得到

$$\left. \begin{aligned} \frac{\delta|r_\nu|}{|r_\nu|} &= T_\nu \frac{\delta d_1}{d_1}, \\ T_\nu &= \left\{ \frac{\operatorname{Re} [r_{12\nu} (r_{01\nu} + r_{12\nu}\chi)^* \gamma \chi]}{|r_{01\nu} + r_{12\nu}\chi|^2} - \frac{\operatorname{Re} [r_{01\nu} r_{12\nu} (1 + r_{01\nu} r_{12\nu}\chi)^* \gamma \chi]}{|1 + r_{01\nu} r_{12\nu}\chi|^2} \right\} d_{10} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

将(6)式代入(3)式, 我们就得到

$$\left. \begin{aligned} \delta_R &= S_R (\delta d_1 / d_1), \\ S_R &= |r_p|^2 T_p + |r_s|^2 T_s, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

(7)式中 S_R 即为环境-膜-基板系统的反射率关于膜厚相对变化的灵敏度因子。

当 $d_1 \rightarrow 0$ 时, 公式(7)应改写为

$$\left. \begin{aligned} \delta_R &= \bar{S}_R \delta d_1, & \bar{S}_R &= |\bar{r}_p|^2 \bar{T}_p + |\bar{r}_s|^2 \bar{T}_s, \\ \bar{T}_\nu &= \frac{\operatorname{Re} [r_{12\nu} (r_{01\nu} + r_{12\nu})^* \gamma]}{|r_{01\nu} + r_{12\nu}|^2} - \frac{\operatorname{Re} [r_{01\nu} r_{12\nu} (1 + r_{01\nu} r_{12\nu})^* \gamma]}{|1 + r_{01\nu} r_{12\nu}|^2}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

式中 \bar{r}_p 、 \bar{r}_s 是 $d_1 = 0$ 时系统对 p 光与 s 光的反射系数。

三、计算机模拟计算

利用所推得的反射率 R 对于薄膜厚度变化的灵敏度因子公式(7)和(8)式, 我们在

Apple(II)微机上,用 Basic 语言对膜厚为零和膜厚不为零两种情况下的灵敏度因子 S_R 和 \bar{S}_R 对入射角 ϕ_0 的关系分别作了计算。计算中所用的系统和光源波长是:空气-金-玻璃系统 ($n_{\text{空气}}=1, \bar{n}_{\text{金}}=0.95-i2.45, n_{\text{玻璃}}=1.5$)、玻璃-硅-空气系统 ($\bar{n}_{\text{硅}}=4.05-i0.028$), 光源波长 $\lambda=5461\text{\AA}$ 和硼酸硼砂水溶液-钝化膜-钴系统 ($n_{\text{硼酸硼砂水溶液}}=1.388, \bar{n}_{\text{钝化膜}}=2.6-i0.4, \bar{n}_{\text{钴}}=2.393-i3.954$), 光源波长 $\lambda=5456\text{\AA}$ 。同时,为了便于对结果进行讨论,对上述三个系统的 ψ 和 Δ 对于薄膜厚度变化的灵敏度因子 S_ψ 和 S_Δ 也根据文献[2]的公式作了计算。图 2、图 3、图 4 是膜厚为零的情况下的上述系统的 $\bar{S}_\psi, \bar{S}_\Delta, \bar{S}_R$ 与入射角 ϕ_0 的关系。图 5、图 6、图 7 是膜厚 $d_1=10\text{\AA}$ 情况下,上述系统的 S_ψ, S_Δ, S_R 与入射角 ϕ_0 的关系。

从这些模拟计算所得的曲线中可以看到, S_ψ, S_Δ, S_R 的数值在入射角 ϕ_0 的某个角度范围数值的绝对值较大,这说明在此角度范围随着膜厚的微小变化,相应的 ψ, Δ, R 的测量值变化很大,即微小的膜厚变化就能在测量值 ψ, Δ, R 上反映出来;而曲线在某个入射角 ϕ_0 下与横轴相交,说明相应的灵敏度因子为零,即在此入射角 ϕ_0 下,对于微小的膜厚变化测量值 ψ, Δ, R 没有变化,所以从测量值 ψ, Δ, R 上不能反映出膜厚的变化。为了提高测量灵敏度,测量时应当选择的入射角 ϕ_0 其对应的绝对值数值较大的 S_ψ, S_Δ, S_R ; 而避开 S_ψ, S_Δ, S_R 为零所对应的入射角 ϕ_0 。但是因为 S_ψ, S_Δ, S_R 随 ϕ_0 的变化曲线,一般是三条不同的曲线,所以应当根据这三条曲线的具体形式,首先避开灵敏度为零的点所对应的入射角 ϕ_0 , 然后综合考虑,选取 S_ψ, S_Δ, S_R 都有较大数值的入射角 ϕ_0 。

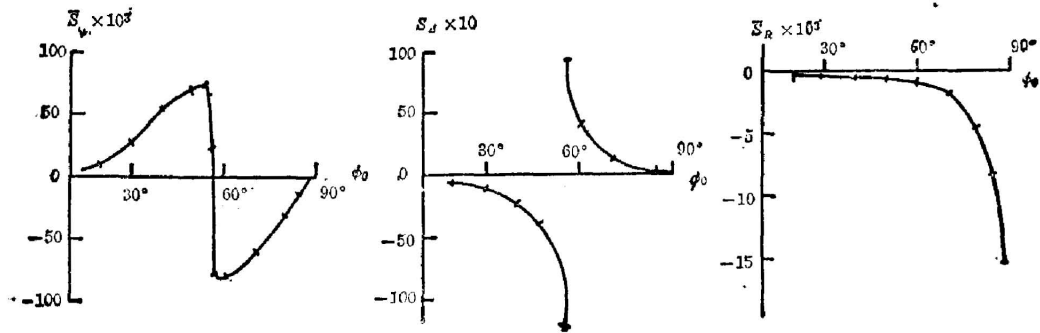


图 2 空气-金-玻璃系统的 $\bar{S}_\psi, \bar{S}_\Delta$ 和 $\bar{S}_R(d_1=0)$

Fig. 2 $\bar{S}_\psi, \bar{S}_\Delta$ and \bar{S}_R of the air-gold-glass system with $d_1=0$

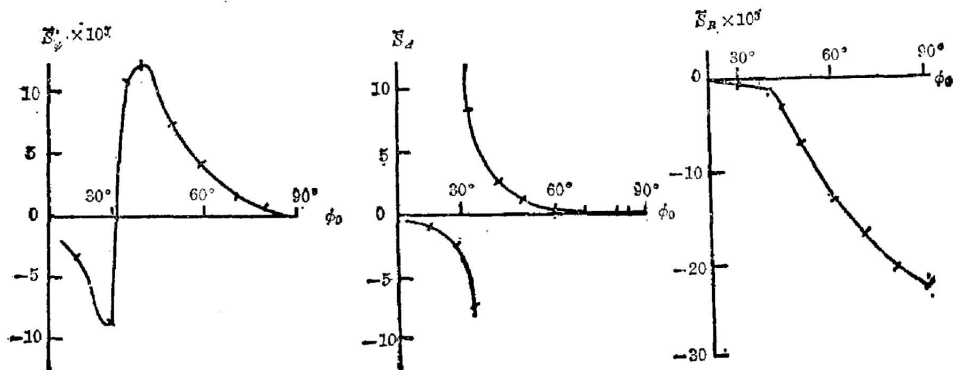


图 3 玻璃-硅-空气系统的 $\bar{S}_\psi, \bar{S}_\Delta$ 和 $\bar{S}_R(d_1=0)$

Fig. 3 $\bar{S}_\psi, \bar{S}_\Delta$ and \bar{S}_R of the glass-silicon-air system with $d_1=0$

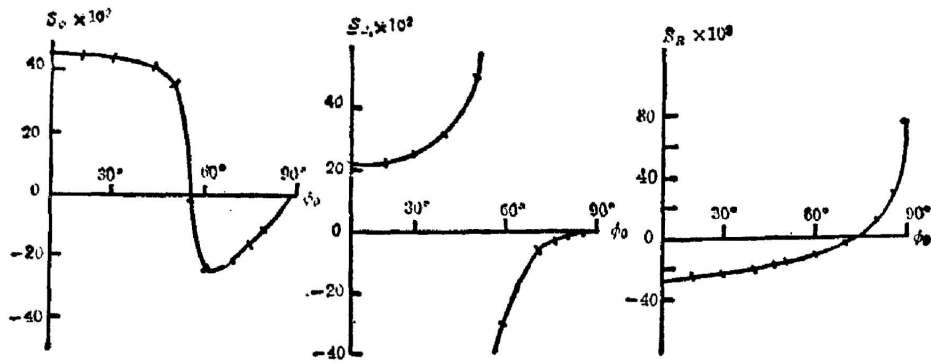


图 4 硼酸硼砂水溶液-钝化膜-钴系统的 \bar{S}_ψ , \bar{S}_d 和 \bar{S}_R ($d_1=0$)

Fig. 4 \bar{S}_ψ , \bar{S}_d and \bar{S}_R of the aqueous solution of boric/borax buffer-passivated film-cobalt system with $d_1=0$

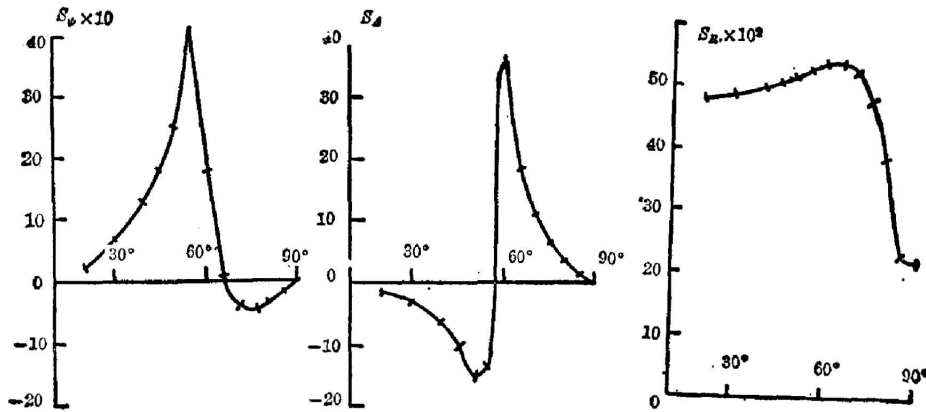


图 5 空气-金-玻璃系统的 S_ψ , S_d 和 S_R ($d_1=10 \text{ \AA}$)

Fig. 5 S_ψ , S_d and S_R of the air-gold-glass system with $d_1=10 \text{ \AA}$

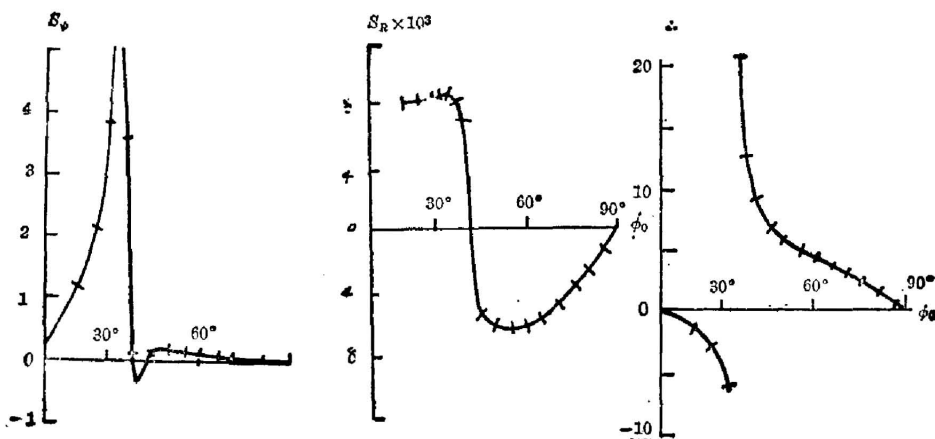


图 6 玻璃-硅-空气系统的 S_ψ , S_d 和 S_R ($d_1=10 \text{ \AA}$)

Fig. 6 S_ψ , S_d and S_R of the glass-silicon-air system with $d_1=10 \text{ \AA}$

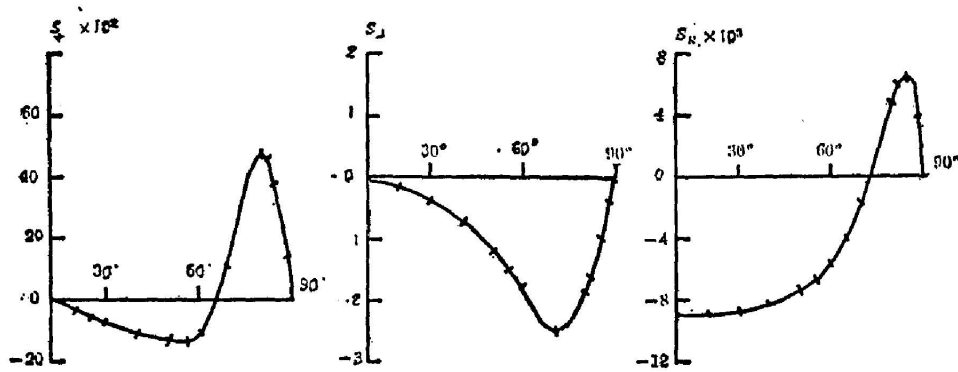


图 7 硼酸硼砂水溶液-钝化膜-钴系统的 S_ψ , S_Δ 和 S_R ($d_1=10 \text{ \AA}$)

Fig. 7 S_ψ , S_Δ and S_R of the aqueous solution of boric/borax buffer-passivated film-cobalt system at $d_1=10 \text{ \AA}$

例如对空气-金-玻璃系统,在 $d_1=0$ 的情况下(即在玻璃基底上刚开始镀金的情况),从图 2 中所得到的 \bar{S}_ψ , \bar{S}_Δ , \bar{S}_R 可以看到: \bar{S}_ψ 在 ϕ_0 为 57° 左右与横轴相交,可见 $\phi_0=57^\circ$ 附近的入射角不可取,而 \bar{S}_R 在 60° 以前较小, 60° 以后随 ϕ_0 的增大而很快地增加,所以 $\phi_0 < 60^\circ$ 是不合适的,对 $\phi_0 > 60^\circ$ 的情况, ϕ_0 很大时,虽然 \bar{S}_R 较大,但 \bar{S}_ψ , \bar{S}_Δ 相应变小。所以选 ϕ_0 为 65° 左右, \bar{S}_ψ , \bar{S}_Δ , \bar{S}_R 三个都有适中的值。同一系统对于 $d_1=10 \text{ \AA}$ 情况,由图 5 中的曲线可以看到, S_ψ , S_Δ 在 ϕ_0 为 60° 附近与横轴相交,而在 $\phi_0 > 60^\circ$ 的范围 S_R 又剧烈地下降,所以选 ϕ_0 在 55° 左右对 S_ψ , S_Δ , S_R 都有适中的值;对玻璃-硅-空气系统, $d_1=0$ 时,选 ϕ_0 为 40° 左右较合适,而对于 $d_1=10 \text{ \AA}$ 时 ϕ_0 选 30° 左右较为合适;类似的分析可以看出:对硼酸硼砂水溶液-钝化膜-钴系统在 $d_1=0$ 时, ϕ_0 选 50° 左右较合适;而 $d_1=10 \text{ \AA}$ 时 ϕ_0 选 50° 左右或 80° 左右较为合适。

当然,由于物理模型与实际系统的差别,公式推导中某些近似的引入及计算中的误差等原因,从曲线只能得到 ϕ_0 的合适选取范围。实际上究竟那个 ϕ_0 最为灵敏,尚需在实际测量中进一步确定最佳入射角 ϕ_0 。

四、结 论

根据 ψ , Δ , R 的光学测量确定薄膜的厚度和光学常数是实际可行的方法。为了提高测量的灵敏性,要同时研究 ψ , Δ , R 对厚度变化的灵敏度因子对于入射角 ϕ_0 的依赖关系。以选择最佳入射角。由于椭圆偏测量的自动化程度日益提高,现在已能对生长中的膜进行连续测量,因此往往必须研究膜厚变化时,系统的 ψ , Δ , R 随膜厚变化的灵敏度因子对于入射角 ϕ_0 的依赖关系。本文推导的反射率灵敏度因子 S_R 的公式和文献[2]的 ψ , Δ 的灵敏度因子 S_ψ , S_Δ 的公式,为这种研究提供了理论基础。

对于给定的膜系,利用本文和文献[2]的公式进行模拟计算,涉及到繁杂的复数运算,但我们已编好了计算这三个量的程序,利用这些程序,在 Apple(II) 微机上进行计算是简便可行的。正如我们的计算所表明的,这种计算可以为最佳入射角的选择提供具体而可靠的依据。

参 考 文 献

- [1] Woon-Kie-Paik, John O'm Bockris; *Surface Science*, 1971, **28**, 61.
[2] R. M. A. Azzam; «*Ellipsometry and Polarized Light*», (North Holland publishing Company, 1977).

**Sensitivity factor of reflectance to the change of
film thickness in ellipsometry**

WANG ZHIGANG AND DING LANYING

(*Department of Optics, Shandong Univeristy, Jinan*)

(Received 12 October 1984; revised 18 December 1985)

Abstract

The formula for the sensitivity factor of reflectance of ambience-film-substrate systems to the change of film thickness is derived. Computer simulation is carried out for three different systems, and curves representing the dependence of the sensitivity factor on the angle of incidence are presented. A discussion for the choice of the angle of incidence in ellipsometry based upon results of computer simulation is given.