

# 光学薄膜参数椭圆偏测量中的 多变量误差分析

战元龄 王 立  
(南开大学物理系)

## 提 要

本文采用多变量的误差分析方法给出光学薄膜参数对于椭圆偏角  $\psi$ ,  $\Delta$ , 反射率  $R$ , 入射角和吸收薄膜厚度的误差因子公式。由此便可确定出光学参数的测量精度。本文还利用误差因子与薄膜折射率, 薄膜厚度和入射角的关系曲线, 讨论了最佳测量条件和测量结构的选取。并且指出, 在同时确定两个或多个未知参数时, 不能只由可测量量随某一个参数变化的灵敏度来讨论和确定此参数的测量精度。

关键词: 椭圆偏测量; 薄膜参数; 多变量分析; 误差因子; 最佳结构。

## 一、引 言

在椭圆偏振测量中, 由膜系的椭圆参数  $\psi$ ,  $\Delta$  值和反射率  $R$  值可以确定单层薄膜的光学参数。Azzam<sup>[1]</sup> 和王志刚<sup>[2]</sup> 分别导出膜系的  $\psi$ ,  $\Delta$  和  $R$  值对于薄膜厚度变化的灵敏度因子, 并讨论了不同入射角下薄膜厚度的测量灵敏度。然而, 在同时确定两个或多个未知参数时, 不能只由可测量量  $\psi$ ,  $\Delta$ ,  $R$  值随某个参数变化的灵敏度来讨论和确定这些参数的测量精度, 而必须全面考察膜系的  $\psi$ ,  $\Delta$ ,  $R$  值与光学参数和入射角的依赖关系。对此, 丁兰英<sup>[3]</sup> 等初步给出了吸收薄膜的光学参数  $n$ ,  $k$ ,  $d$  的测量精度与  $\psi$ ,  $\Delta$ ,  $R$  的测量误差的关系式, 但忽略了入射角  $\varphi_0$  的误差的影响。本文则采用多变量的误差分析方法给出单层薄膜的光学参数对于  $\psi$ ,  $\Delta$ ,  $\varphi_0$ ,  $R$  值的误差因子以及误差因子与光学参数和入射角的关系曲线。由此可方便地确定出任意大小的光学参数的测量精度。文中还讨论了最佳测量条件和测量结构的选取。

## 二、椭圆参数的测量误差

在消光型椭圆偏振测量中, 当椭圆仪作精密调节之后, 膜系的椭圆参数  $\psi$ ,  $\Delta$  的测量误差主要来源于: (1) 起偏器, 检偏器和  $1/4\lambda$  波片的方位角误差; (2) 光路中光学元件的非完整性, 如: (2a) 起偏器和检偏器的消光比差; (2b)  $1/4\lambda$  波片的快慢轴相位延迟偏离  $\pi/2$  的误差, 以及 (3) 入射光束的非准直性等。测量时, 固定  $1/4\lambda$  波片的方位角  $O$ , 调节起偏器和检偏器的方位角  $P$  和  $A$ , 则将先后出现两组消光位置。膜系的椭圆参数由下式给出

$$\tan \psi \cdot e^{i\Delta} = -\tan A [\tan O - i \tan(P-O)] / [1 + i \tan(P-O)]. \quad (1)$$

可以证明, 将  $C = \pi/4$  或  $C = -\pi/4$  时得到的两组  $\psi, \Delta$  值进行平均, 能够消除  $2b$  的误差; 将  $C = \pi/4$  和  $C = -\pi/4$  时得到的四组  $\psi, \Delta$  值进行平均, 能够消除  $2a$  和  $2b$  的误差<sup>[3]</sup>。因此, 若忽略光束的非准直性和起偏器, 检偏器的消光比差的影响, 则  $\psi, \Delta$  值的最大测量误差为

$$\begin{bmatrix} \delta\psi \\ \delta\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta\Delta \\ 2\delta P + 2\delta C \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中  $\delta\Delta, \delta P$  和  $\delta C$  为检偏器, 起偏器和  $1/4\lambda$  波片方位角的误差。

### 三、误差因子

这里以单层吸收薄膜为例给出误差因子的表达式, 并且忽略基底折射率和光源波长的误差对光学参数测量精度的影响。由椭圆参数确定复折射率  $n - ik$  (薄膜厚度已知) 的方程可表示为

$$\begin{bmatrix} \psi \\ \Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi(n, k, d, \varphi_0) \\ \Delta(n, k, d, \varphi_0) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中  $n, k, d, \varphi_0$  分别为薄膜的折射率, 消光系数, 几何厚度与波长的比值和光束的入射角。由于这组方程的非线性, 故提出了多种优化的计算机搜索法<sup>[4~6]</sup>。采用这些方法亦可讨论各种误差对测量结果的影响, 但是无法得到任意入射角下任意光学参数测量精度的普遍公式<sup>[7]</sup>。为克服此种局限性, 进行如下推导。对 (3) 式求偏微分, 则有

$$\begin{bmatrix} \delta\psi \\ \delta\Delta \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \delta n \\ \delta k \end{bmatrix} + N \begin{bmatrix} \delta d \\ \delta\varphi_0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

其中

$$M = \begin{bmatrix} \psi_n & \psi_k \\ \Delta_n & \Delta_k \end{bmatrix}, \quad N = \begin{bmatrix} \psi_d & \psi_{\varphi_0} \\ \Delta_d & \Delta_{\varphi_0} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

而式中的  $\psi_n, \psi_k, \psi_d, \psi_{\varphi_0}$  和  $\Delta_n, \Delta_k, \Delta_d, \Delta_{\varphi_0}$  分别为  $\psi$  和  $\Delta$  值对  $n, k, d, \varphi_0$  的偏导数。由于  $n, k$  是待确定的参数, 而  $\psi, \Delta, d, \varphi_0$  是可测量量, 采用多变量误差分析方法<sup>[8]</sup>, 经代数运算, 则得到  $n, k$  的微分量的表达式为

$$\begin{bmatrix} \delta n \\ \delta k \end{bmatrix} = M^{-1} \begin{bmatrix} \delta\psi \\ \delta\Delta \end{bmatrix} - M^{-1} N \begin{bmatrix} \delta d \\ \delta\varphi_0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

若将矩阵  $M^{-1}$  和  $(-M^{-1}N)$  中的各个元素取正, 并将 (2) 式代入 (6) 式, 则  $n, k$  的测量误差为

$$\begin{bmatrix} \delta n \\ \delta k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_\psi & n_\Delta \\ k_\psi & k_\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\psi \\ \delta\Delta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} n_d & n_{\varphi_0} \\ k_d & k_{\varphi_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta d \\ \delta\varphi_0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

式中  $n_\psi, n_\Delta, n_d, n_{\varphi_0}$  和  $k_\psi, k_\Delta, k_d, k_{\varphi_0}$  分别称为  $n$  和  $k$  的误差因子。它们直接表征了  $n, k$  的测量精度与可测量量间的依赖关系, 因此具有特别重要的实际意义。令  $d=0$ , 即是吸收基底复折射率的误差因子<sup>[9]</sup>。而用  $d$  代替有关等式中的  $k$ , 则得到单层无吸收薄膜光学参数  $n, d$  的误差因子。附录 A 中给出由  $\psi, \Delta, R$  同时确定吸收薄膜的  $n, k, d$  时, 各个误差因子的相应公式。

由(5), (6)和(7)式得出  $n, k$  的误差因子的具体形式为

$$\begin{bmatrix} n_\psi & n_\Delta \\ k_\psi & k_\Delta \end{bmatrix} = \frac{1}{\text{abs}(|M|)} \begin{bmatrix} \text{abs}(\Delta_k) & \text{abs}(\psi_k) \\ \text{abs}(\Delta_n) & \text{abs}(\psi_n) \end{bmatrix}. \quad (8)$$

此式表明(abs表示对所示值取绝对值),  $n$  或  $k$  的误差因子  $n_\psi, n_\Delta$  或  $k_\psi, k_\Delta$  除通过  $|M|$  值而与  $\psi, \Delta$  对于  $k$  或  $n$  的偏导数有关外, 还分别直接与之成正比。亦即  $\psi, \Delta$  随某一参数的变化越灵敏, 则另一参数的测量误差可能越大。某参数的误差因子不仅与  $\psi, \Delta$  值随此参数的变化灵敏度有关, 亦与  $\psi, \Delta$  值随其它参数变化的灵敏度有关, 因此不能单从前者来分析待求的误差。从附录 A 中的有关等式还可看出, 薄膜参数  $d$  (或  $n, k$ ) 的误差因子与  $\psi, \Delta, R$  值随  $d, n$  和  $k$  的变化皆有关, 因而只是  $\psi_d, \Delta_d$  和  $R_d$ , 或只是  $\psi_n, \Delta_n$  和  $R_n$  或只是  $\psi_k, \Delta_k$  和  $R_k$  不能完全反映出  $d$  或  $n, k$  的误差因子的相应改变。因此, 在同时确定两个或多个未知参数时, 不能由可测量随某个参数变化的灵敏度来确定和讨论此参数的测量精度, 必须全面考察可测量与各个参数间的相互依赖关系。

#### 四、讨 论

由(6)式和(7)式可知, 光学薄膜参数的测量精度不但与可测量量的误差有关, 而且亦是光学参数本身和入射角的函数。我们以单层无吸收薄膜和吸收薄膜为例, 利用误差因子曲线, 根据测量结果的不同要求来分别讨论入射角, 薄膜厚度和基片的选取。为便于对所得结果进行分析而又不失一般性, 我们假定  $A, P, C, \varphi_0$  的误差均为  $\delta\theta$ 。将(2)式代入(6)式, 则薄膜光学参数对于  $\psi, \Delta, \varphi_0$  的误差因子简化为

$$x_\theta = x_\psi + 4x_\Delta + x_{\varphi_0}. \quad (9)$$

对于无吸收薄膜,  $x=n, d$ ; 而对于吸收膜系, 则  $x=n, k$ 。

##### 1. 无吸收薄膜

对于基底折射率已知的薄膜-基底系统, 其唯一可改变的测量参数是入射角  $\varphi_0$ 。当偏仪的  $P, A, C, \varphi_0$  的测量误差一定时, 选取合适的入射角可较精确地确定薄膜的  $n$  和  $d$ 。图 1 给出  $n_s=1.52, n=2.30, d=0.1\lambda$  时, 误差因子随  $\varphi_0$  变化的曲线。可见, 在  $\varphi_0=60^\circ \sim$

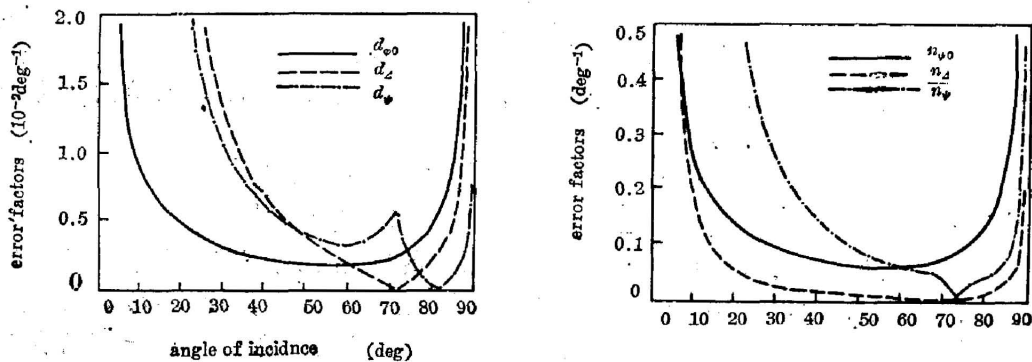


Fig. 1. Error factors of  $n$  and  $d$  as a function of angle of incidence for a single-film system with  $n=2.30, n_s=1.52$ , and  $d=0.1\lambda$

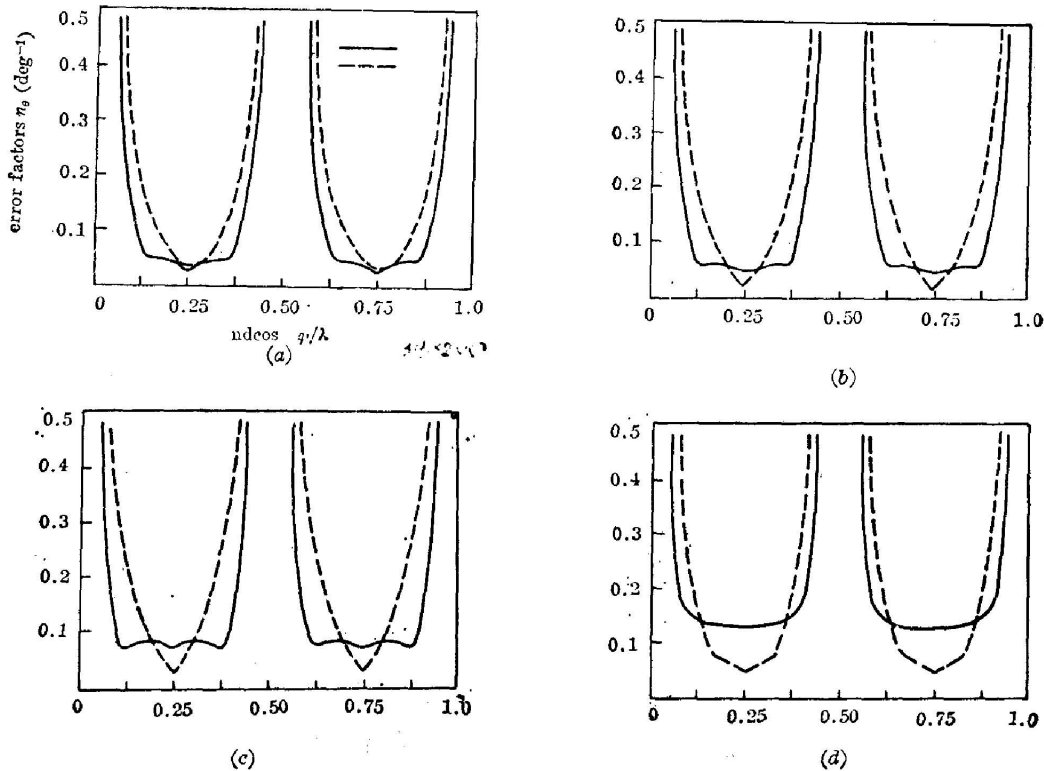


Fig. 2 Error factors of  $n$  as a function of film thickness for a single-film system (incident angle of  $70^\circ$ ) with film refractive indices of 1.38 (Fig. 2a), 1.46 (Fig. 2b), 1.70 (Fig. 2c), and 2.30 (Fig. 2d), respectively. The refractive indices of substrates are 1.52 (solid curves) and  $3.87 - i0.025$  (dashed curves), respectively

$75^\circ$  的入射角范围内, 误差因子均有较小的值, 因而此时  $n$ ,  $d$  的测量精度较高。若  $\delta\theta = 0.05^\circ$ , 则可达  $\delta n/n \leq 0.3\%$ ,  $\delta d/d \leq 0.5\%$ 。

折射率  $n$  的误差因子随膜厚变化的曲线如图 2 所示。显然, 适当选择薄膜的厚度可精确确定各种薄膜材料的折射率。在采用无吸收基底 ( $n_s = 1.52$ ) 的膜系中, 若

$$\left| nd \cos \varphi - K \cdot \frac{1}{4} \lambda \right| \leq 0.1\lambda \quad (K=1, 3),$$

则  $n_0$  值最小, 因此  $n$  的测量精度最高。采用硅片基底 ( $\hat{n}_s = 3.87 - i0.025$ ,  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ ) 会缩小高精度测量折射率的厚度范围。然而, 当薄膜折射率  $n > 1.70$  时, 采用这种结构能够提高等效光学厚度接近  $\frac{1}{4}\lambda$  或  $\frac{3}{4}\lambda$  时的折射率的测量精度。

图 3 为极薄薄膜厚度的误差因子曲线。膜厚增加, 误差因子变小,  $d$  的测量精度提高。当薄膜折射率接近基底折射率 (或弱吸收硅片的  $\hat{n}_s$  的实部  $\text{Re}(\hat{n}_s)$ ) 时,  $d$  的误差因子迅速变大。此时已不能由膜系的  $\psi$ ,  $\Delta$  值正确地确定薄膜的厚度。但是对于其折射率满足  $n \approx (\text{Re}(\hat{n}_s))^{1/2}$  关系, 或者远大于玻璃基底折射率的极薄薄膜,  $d$  的误差因子却很小。由图 3 可知, 这分别对应于薄膜折射率较低和较高的区域 ( $1.30 \sim 2.60$  和  $2.50 \sim 4.0$ )。因此, 无吸收玻璃基底的测量结构和弱吸收硅片基底的测量结构相结合, 可较精确地确定很大折射率范

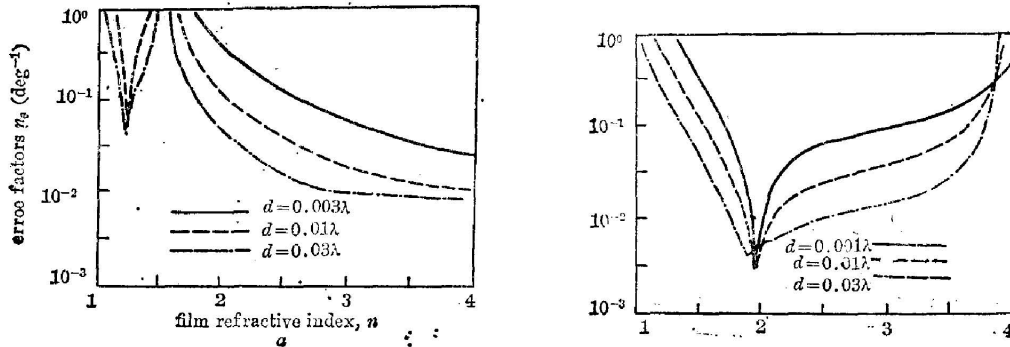


Fig. 3 Plots of error factors of  $n$  versus film refractive index for a single-film system (incident angle of  $70^\circ$ ) with film thicknesses of  $0.003\lambda$  (solid curves),  $0.01\lambda$  (dashed curves), and  $0.03\lambda$  (dash-dot curves), respectively. The refractive indices of substrates are 1.52 (Fig. 3a) and  $3.87 - i0.025$  (Fig. 3b) respectively

围内的极薄薄膜的厚度。

## 2. 吸收薄膜

椭圆测量的另一个应用是由膜系的  $\psi, \Delta$  值确定已知厚度的吸收薄膜的复折射率。

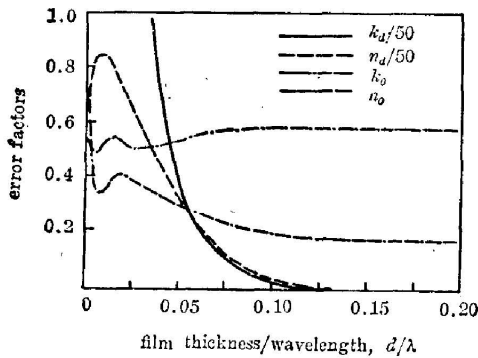


Fig. 4 Plots of error factors of  $n$  and  $k$  versus film thickness for an absorbing-film system (incident angle of  $70^\circ$ ) with film complex refractive index of  $0.06 - i4.0$  and substrate refractive index of 1.52

图4为银膜( $\hat{n} = 0.06 - i4.0$ ,  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ )的误差因子随膜厚变化的曲线。随着膜厚的增加,  $n_0$  和  $k_0$  值几乎不变, 而  $n_d$  和  $k_d$  却迅速衰减,  $d$  的测量误差对复折射率测量精度的影响急剧减弱。因为膜层变厚时, 薄膜内光波的衰减较大。薄膜-基底界面仅能反射很少的光波, 其中的多光束干涉效应显著变弱。此时可忽略膜层厚度对系统  $\psi, \Delta$  值的贡献。当膜层很厚时 ( $d/\lambda > 0.2$ , 相应的衰减系数  $\exp(-4\pi kd/\lambda) = e^{-10}$ ), 复折射率的测量精度已完全取决于方位角和入射角的测量误差。因此, 在复折射率不随膜层厚度而变(或可以忽略)的情况下, 采用厚膜的测量结构不但可以消除膜层厚度的误差对测量结果的影响, 提高  $n$  和  $k$  的测量精度,

而且可由  $\psi, \Delta$  值解析得到  $n$  和  $k$  值, 使得计算大为简化<sup>[1]</sup>。另外, 还可通过入射角的选取, 获得更加精确的测量值<sup>[9]</sup>。

弱吸收硅膜( $\hat{n} = 3.87 - i0.025$ ,  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ )的误差因子如图5所示。显然, 在膜层较薄 ( $nd \cos \varphi / \lambda < 0.5$ ) 的情况下, 若  $\delta\theta < 0.05^\circ$ ,  $\delta d > 10^{-3}\lambda$ , 则有下式成立

$$\begin{bmatrix} n_d \\ k_d \end{bmatrix} \delta d > \begin{bmatrix} n_0 \\ k_0 \end{bmatrix} \delta \theta. \quad (10)$$

此时  $n$  和  $k$  的测量误差主要取决于已知参数  $d$  的测量误差。但是在  $nd \cos \varphi$  为  $\frac{1}{2}\lambda$  的整数倍附近,  $n$  和  $k$  的误差最小, 并且可以忽略  $d$  的测量误差对  $k$  的测量精度的影响。

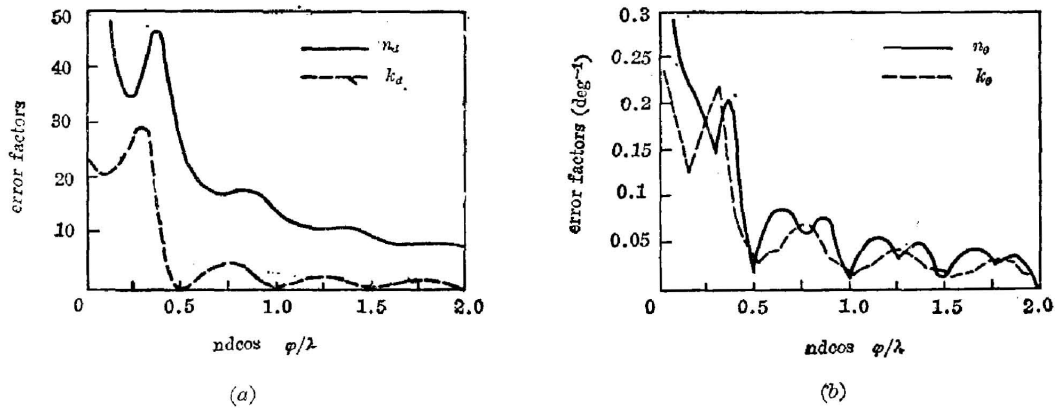


Fig. 5 Same as Fig. 4 except the film complex refractive index of  $3.87-i0.025$

## 五、总 结

本文采用多变量的误差分析方法给出椭圆测量中光学薄膜参数的误差因子及其与光学参数和入射角的关系曲线。由此便可确定单层薄膜光学参数的测量精度。文中指出,在同时确定两个或多个未知参数时,可测量量随某一个参数变化的灵敏度不能反映此参数测量精度的相应变化。最后分别以单层无吸收薄膜和吸收薄膜为例,根据测量结果的不同要求,讨论了光学薄膜参数的测量精度与测量结构和入射角的关系。这对于测量工作具有实际的指导意义。

### 附录 A

由  $\psi$ ,  $\Delta$ ,  $R$  同时确定吸收薄膜的  $n$ ,  $k$ ,  $d$  的方程可表示为

$$\begin{bmatrix} \psi \\ \Delta \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi(n, k, d, \varphi_0) \\ \Delta(n, k, d, \varphi_0) \\ R(n, k, d, \varphi_0) \end{bmatrix}. \quad (\text{A-1})$$

将上式求偏微分,则有

$$\begin{bmatrix} \delta\psi \\ \delta\Delta \\ \delta R \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \delta n \\ \delta k \\ \delta d \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \psi_{\varphi_0} \\ \Delta_{\varphi_0} \\ R_{\varphi_0} \end{bmatrix} \delta\varphi_0, \quad (\text{A-2})$$

$$\begin{bmatrix} \delta n \\ \delta k \\ \delta\varphi_0 \end{bmatrix} = M^{-1} \begin{bmatrix} \delta\psi \\ \delta\Delta \\ \delta R \end{bmatrix} - M^{-1} \begin{bmatrix} \psi_{\varphi_0} \\ \Delta_{\varphi_0} \\ R_{\varphi_0} \end{bmatrix} \delta\varphi_0, \quad (\text{A-3})$$

其中

$$M = \begin{bmatrix} \psi_n & \psi_k & \psi_d \\ \Delta_n & \Delta_k & \Delta_d \\ R_n & R_k & R_d \end{bmatrix}. \quad (\text{A-4})$$

经代数运算并整理,则得到  $d$  的误差因子为

$$\begin{bmatrix} d_\psi \\ d_\Delta \\ d_k \end{bmatrix} = \frac{1}{\text{abs}(|M|)} \begin{bmatrix} \text{abs}(\Delta_n R_k - \Delta_k R_n) \\ \text{abs}(\psi_n R_k - \psi_k R_n) \\ \text{abs}(\psi_n \Delta_k - \psi_k \Delta_n) \end{bmatrix} \quad (\text{A-5})$$

$n$  和  $k$  的误差因子与(A-5)式有完全类似的形式。

### 参 考 文 献

- [1] R. M. A. Azzam, N. M. Bashara; *«Ellipsometry and Polarized Light»*, (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1977), 270~274, 305~312, 315~320.
- [2] 王志刚等;《光学学报》,1985, **5**, No. 7 (Jul), 619~624.
- [3] R. M. A. Azzam; *J. Opt. Soc. Am.*, 1971, **61**, No. 5 (May), 600~607.
- [4] 范正修等;《光学学报》,1984, **4**, No. 10 (Oct), 939~945.
- [5] D. Charlot, A. Maruani; *Appl. Opt.*, 1985, **24**, No. 20 (Oct), 3368~3373.
- [6] Yutaka Yoriume; *J. Opt. Soc. Am.*, 1983, **73**, No. 7 (Jul), 888~891.
- [7] K. Riedling; *Thin Solid Films*, 1981, **75**, No. 4 (Jan), 355~369.
- [8] A. A. Clifford; *«Multivariate Error Analysis»*, (Applied Science Publishers Ltd, London, 1973), 16~17.
- [9] D. H. Loescher; *Appl. Opt.*, 1971, **10**, No. 5 (May), 1031~1033.
- [10] 丁兰英等;《山东大学学报(自然科学版)》,1986, **21**, No. 1 (Mar), 72~81.

## Multivariate error analysis in ellipsometric determination of optical thin film parameters

ZHAN YUANLING AND WANG LI

(Department of Physics, Nankai University, Tianjin)

(Received 8 October 1986; revised 19 November 1986)

### Abstract

Formulas for error factors of optical thin film parameters with respect to the ellipsometric angles  $\psi$  and  $\Delta$ , the reflectance  $R$ , the angle of incidence, and the thickness of absorbing thin film are presented using the technique of multivariate error analysis. Accuracies of the measurements of optical parameters can be predicted with the error factors, the azimuth-angle errors, and the reflectance error. In order to determine the optimal measurement configurations, the plots of error factors versus angle-of incidence, film refractive index, and film thickness are used. It is also pointed out that the measurement accuracy of a certain parameter can not be deduced and determined by using its sensitivity factors with respect to the measurable quantities, if two or more unknown parameters have to be simultaneously deduced from the measurements.

**Key Words:** ellipsometry; film parameters; multivariate analysis; error factors; optimum configuration.