

Винахід відноситься до області фізики твердого тіла, зокрема до способів дослідження оптичних констант тонких плівок, і може бути використаний як ефективний та високоточний спосіб дослідження дисперсії показників заломлення та коефіцієнтів екстинкції тонких плівок шляхом оптико-рефрактометричного синтезу спектрів пропускання.

Відомо, що для дослідження оптичних констант тонких плівок розроблено цілий ряд одно- та багатовхвильових методів [1]. Різноманітні еліпсометричні методи є найбільш точними серед однохвильових [2]. Багатовхвильові методи ґрунтуються на використанні співвідношень Крамерса-Кроніґа або на комп'ютерній підгонці інтерференційних кривих за допомогою дисперсійних співвідношень типу Лоренца або Друде чи їх комбінації для показників заломлення та коефіцієнтів екстинкції. Слід відмітити, що застосування дисперсійних співвідношень Крамерса-Кроніґа обмежується як коректністю вибору способу низько- та високоенергетичної екстраполяції спектрів відбивання, так і шорсткуватістю відбивної поверхні. З іншого боку, дисперсійні співвідношення типу Лоренца або Друде включають підгоночні параметри без реального фізичного змісту.

Найбільш близьким до запропонованого способу визначення оптичних параметрів тонких плівок є метод, який полягає у визначенні дисперсійних залежностей показників заломлення та коефіцієнтів екстинкції шляхом оберненого синтезу спектрів пропускання [3]. Згідно цього методу експериментальні спектри пропускання $T_{\text{exp}}(\lambda)$ використовуються для одержання дисперсійних залежностей показників заломлення $n(\lambda)$ та коефіцієнтів екстинкції $k(\lambda)$ для випадку слабопоглинаючого шару шляхом чисельного розв'язку рівняння [1]:

$$T_{\text{exp}}(h\nu) = \bar{\alpha}(h\nu) \frac{1 - r_0(h\nu)}{1 - R(h\nu)r_0(h\nu)}, \quad (1)$$

де права частина враховує другу грань підкладки при $r_0(h\nu) = (n_0 - 1)^2 / (n_0 + 1)^2$, а величини в $\bar{\alpha}$ та R задаються відомими виразами:

$$R = \frac{A \cos \beta + B \sin \beta - C \cos \xi + D \sin \xi}{E \cos \beta + F \sin \beta - G \cos \xi + H \sin \xi}, \quad (2)$$

$$\bar{\alpha} = \frac{8n(n^2 + k^2)}{E \cos \beta + F \sin \beta - G \cos \xi + H \sin \xi}, \quad (3)$$

де $\beta = 4\pi v k d$, $\xi = 4\pi v n d$, $v = 4 \times 10^4 (\pi h\nu / 1,24)$,

$$A = (n^2 + k^2 + 1)(n^2 + k^2 + n_0^2) - 4n^2 n_0,$$

$$B = 2n[n_0(n^2 + k^2 + 1) - (n^2 + k^2 + n_0^2)],$$

$$C = (n^2 + k^2 - 1)(n^2 + k^2 - n_0^2) + 4k^2 n_0,$$

$$D = 2k[n_0(n^2 + k^2 - 1) - (n^2 + k^2 - n_0^2)],$$

$$E = (n^2 + k^2 + 1)(n^2 + k^2 + n_0^2) + 4n^2 n_0,$$

$$F = 2n[n_0(n^2 + k^2 + 1) + (n^2 + k^2 + n_0^2)],$$

$$G = (n^2 + k^2 - 1)(n^2 + k^2 - n_0^2) - 4k^2 n_0,$$

$$H = 2k[n_0(n^2 + k^2 + 1) - (n^2 + k^2 - n_0^2)].$$

Недоліком методу оберненого синтезу спектрів пропускання [3], не дивлячись на задовільне співпадання експериментального $T_{\text{exp}}(\lambda)$ та розрахункового $T_{\text{synt}}(\lambda)$ спектрів пропускання (Фіг.1), є те що в ньому, по-перше, не враховується взаємозв'язок між оптико-рефрактометричними (ширина оптичної псевдощілини E_g^* та показник заломлення n) та структурно-хімічними (густина ρ та рефракція R) параметрами тонких плівок, а, по-друге, за результатами розрахунків отримується фізично не обґрунтована поведінка $k(\lambda)$. На Фіг.1 наведено експериментальну (суцільна лінія) та розраховану (штрихована лінія) за допомогою метода оберненого синтезу спектральні залежності коефіцієнта пропускання, а також дисперсійні залежності показника заломлення $n(\lambda)$ та коефіцієнта екстинкції $k(\lambda)$ тонкої плівки $0,5\text{TiO}_2/0,5\text{Nd}_2\text{O}_3$, нанесеної на кварцовий субстрат.

Завданням винаходу є створення способу визначення оптичних параметрів тонких плівок шляхом оптико-рефрактометричного синтезу спектрів пропускання, який дозволяв би враховувати структурно-хімічні параметри тонких плівок та одержувати надійні значення їх оптичних констант.

Поставлене завдання досягається таким чином, що спосіб визначення оптичних параметрів тонких плівок шляхом оптико-рефрактометричного синтезу спектрів пропускання що включає результати еліпсометричних вимірювань товщини плівки, показників заломлення та коефіцієнтів екстинкції плівки та підкладки на певній довжині хвилі, для проведення оптико-рефрактометричного синтезу застосовують оптико-рефрактометричне співвідношення [4]

$$\frac{1n^2(h\nu) + 2}{3n^2(h\nu) - 1} = \left(\frac{\eta_s}{2}\right)^s \left(1 + \frac{E_g^*}{E_{pv}}\right) - \left(\frac{h\nu}{E_s}\right)^s \quad (4)$$

у ролі дисперсійного співвідношення для показників заломлення. Згідно винаходу, для проведення оптико-рефрактометричного синтезу спектрів пропускання використовують алгоритм розділення вкладів крайового $k_{\text{edge}}(h\nu)$ і фонового $k_{\text{back}}(h\nu)$ поглинання

$$k(h\nu) = k_{\text{back}}(h\nu) + k_{\text{edge}}(h\nu) = C(h\nu)^p + \frac{0.124}{4\pi h\nu} \exp\left(\frac{h\nu - E_g^*}{w}\right), \quad (5)$$

де $s=2$ для середньої та $s=3$ для високоенергетичної частин області прозорості, η_s , та E_s - підгоночні параметри; $E_{\rho\nu} = 28,82\sqrt{n_{\nu}\rho/\mu}$ - енергія плазмових коливань валентних електронів, n_{ν} - число валентних електронів на формульну одиницю, μ - молярна маса; C і p - параметри фонового поглинання в області прозорості; w - характеристична енергія "хвоста" оптичного поглинання.

Запропонований спосіб визначення оптичних параметрів тонких плівок шляхом оптико-рефрактометричного синтезу спектрів пропускання, у порівнянні зі способом-прототипом, є фізично обґрунтованим, ефективним та високоточним способом визначення оптичних параметрів тонких плівок, який на основі комбінованих еліпсометричних та інтерференційно-спектрометричних досліджень тонких плівок дозволяє отримати дисперсійні залежності показників заломлення і коефіцієнтів екстинкції тонких плівок, та теоретично-розрахунковий спектр пропускання $T_{\text{OR}}(\lambda)$, враховуючи при цьому взаємозв'язок між оптико-рефрактометричними (ширина оптичної псевдощільності E_g^* та показник заломлення n) та структурно-хімічними (густина ρ та рефракція R) параметрами тонких плівок:

$$\frac{\mu}{3\rho R} = \frac{1}{3} \frac{n^2(h\nu) + 2}{n^2(h\nu) - 1} = \left(\frac{\eta_s}{2}\right)^s \left(1 + \frac{E_g^*}{E_{\rho\nu}}\right) - \left(\frac{h\nu}{E_s}\right)^s, \quad (6)$$

Спосіб здійснюється наступним чином: за допомогою еліпсометра вимірюються еліпсометричні кути і розраховуються товщина плівки, показники заломлення та коефіцієнти екстинкції плівки та підкладки на певній довжині хвилі. У результаті інтерференційно-спектрометричних вимірювань отримують експериментальний спектр пропускання світла $T_{\text{exp}}(\lambda)$. Використовуючи ці дані, проводять оптико-рефрактометричний синтез, в результаті якого отримують теоретично-розрахунковий спектр пропускання $T_{\text{OR}}(\lambda)$.

Приклад конкретного використання запропонованого способу.

За допомогою запропонованого способу визначено оптичні параметри тонкої плівки $0,5\text{TiO}_2/0,5\text{Nd}_2\text{O}_3$, нанесеної на кварцовий субстрат, шляхом оптико-рефрактометричного синтезу спектрів пропускання.

Спочатку за допомогою лазерного еліпсометра ЛЕФ-2М ($2=0.6328\text{мкм}$) проводилися вимірювання еліпсометричних кутів ψ і Δ для m кутів падіння φ_0 . Величина m залежить від точності еліпсометра і може змінюватися в межах від 3 до 6. Для кожного набору значень φ_0 , ψ , Δ розв'язувалося основне еліпсометричне рівняння [2]:

$$\rho = R_p/R_s = \tan\psi e^{i\Delta}, \quad (7)$$

$$\text{де } R_p = \frac{r_{01}^p + r_{12}^p e^{-i2\beta}}{1 + r_{01}^p r_{12}^p e^{-i2\beta}} \text{ і } R_s = \frac{r_{01}^s + r_{12}^s e^{-i2\beta}}{1 + r_{01}^s r_{12}^s e^{-i2\beta}}$$

- відповідно коефіцієнти відбивання для p і s поляризації, які виражають через френелівські коефіцієнти на межах розділу середовищ як

$$r_{01}^p = \frac{N_1 \cos \varphi_0 - N_0 \cos^* \varphi_1}{N_1 \cos \varphi_0 + N_0 \cos^* \varphi_1}, \quad r_{12}^p = \frac{N_2 \cos^* \varphi_1 - N_1 \cos^* \varphi_2}{N_2 \cos^* \varphi_1 + N_1 \cos^* \varphi_2} \quad (8)$$

$$r_{01}^s = \frac{N_0 \cos \varphi_0 - N_1 \cos^* \varphi_1}{N_0 \cos \varphi_0 + N_1 \cos^* \varphi_1}, \quad r_{12}^s = \frac{N_1 \cos^* \varphi_1 - N_2 \cos^* \varphi_2}{N_1 \cos^* \varphi_1 + N_2 \cos^* \varphi_2}.$$

Кути φ_2 і φ_1 є комплексними величинами, що задовольняють закон Снелліуса

$$N_0 \sin \varphi_0 = N_1 \sin^* \varphi_1 = N_2 \sin^* \varphi_2, \quad (9)$$

$\beta = \frac{2\pi}{\lambda} d N_1 \cos^* \varphi_1$ - фазова товщина плівки, $N_2 = n - ik_2$ - комплексний показник заломлення підкладки, $N_1 = n - ik_1$ -

комплексний показник заломлення плівки, N_0 - показник заломлення діелектричного середовища, що оточує

систему плівка-підкладка. Ввівши позначення $A = r_{01}^p$, $B = r_{01}^p r_{12}^s + r_{12}^p$, $C = r_{01}^s r_{12}^p$, $D = r_{01}^s$, $E = r_{01}^p r_{12}^p + r_{12}^s$,

$F = r_{01}^p r_{12}^p r_{12}^s$, $X = e^{-i2\beta}$, рівняння (7) можна звести до квадратичного рівняння відносно X :

$$(C - \rho F)X^2 + (B - \rho E)X + A - \rho D = 0. \quad (10)$$

Знайшовши корені рівняння (10)

$$X_{12} = \frac{-(B - \rho E) \pm \sqrt{(B - \rho E)^2 - 4(C - \rho E)(A - \rho D)}}{2(C - \rho F)}, \quad (11)$$

та використавши формулу для фазової товщини плівки, знаходимо два значення комплексної товщини $d_{1,2}^*$. Для уникнення неоднозначності вибираємо значення товщини з невід'ємною дійсною частиною, або, якщо

$\text{Re} d_1^* \geq 0$ та $\text{Re} d_2^* \geq 0$, то те значення, що має меншу уявну частину. Спочатку значення товщини d^* розраховується для деяких заданих початкових значень оптичних матеріалів плівки n_1 , k_1 та набору оптичних параметрів підкладки n_2 , k_2 з широкого інтервалу значень. За допомогою методу дихотомії знаходимо ті значення n_2 , k_2 із заданого інтервалу, для яких цільова функція

$$M_1 = \left(\sum_{j=1}^m \text{Im} d_j^* \right)^{1/2} + \left(\sum_{j=1}^m \left(\frac{\text{Re} d_{j+1}^* - \text{Re} d_j^*}{\text{Re} d_j^*} \right)^2 \right)^{1/2}, \quad (12)$$

досягає мінімуму. Одержана таким чином пара значень оптичних параметрів підкладки (n_2^0, k_2^0) приймається за нульове наближення для розрахунку оптичних параметрів плівки. Ітераційний процес розрахунку параметрів плівки

$$M_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^m (\psi_{j,\text{розр}} - \psi_{j,\text{експ}})^2 + \sum_{j=1}^m (\Delta_{j,\text{розр}} - \Delta_{j,\text{експ}})^2} \quad (13)$$

Пара значень (n_1^0, k_1^0) , для якої функція M_2 є мінімальною, буде результатом роботи на цьому етапі. Використовуючи ці значення параметрів плівки, уточнюються оптичні параметри підкладки, які, у свою чергу, служать основою для подальшого уточнення параметрів плівки. Цей процес продовжується до тих пір, поки не отримаємо самоузгоджені значення N_1 та N_2 або відповідну точність у результаті розрахунку.

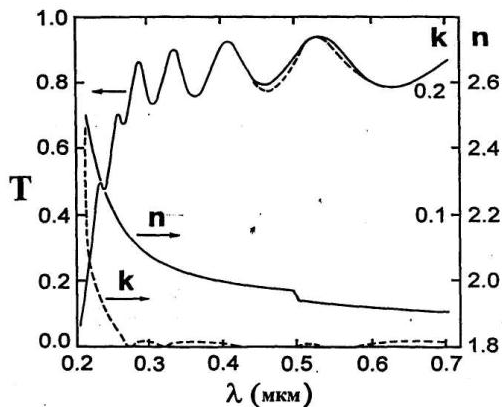
Таким чином були отримані товщина плівки, показники заломлення та коефіцієнти екстинкції плівки та підкладки на довжині хвилі $\lambda = 0,6328 \text{ мкм}$.

Спектр пропускання $T_{\text{exp}}(\lambda)$ при кімнатній температурі досліджувався за допомогою ґраткового спектрометра МДР-3. Інтерференційна крива пропускання $T_{\text{exp}}(\lambda)$ разом із даними еліпсометричних досліджень використовувалися для проведення оптико-рефрактометричного синтезу спектру пропускання за допомогою формул (1)-(3), а також отримання дисперсійних залежностей показника заломлення та коефіцієнта екстинкції плівки за допомогою формул (4) і (5). На Фіг.2 наведено експериментальну (суцільна лінія) та розраховану (штрихована лінія) шляхом оптико-рефрактометричного синтезу спектральні залежності коефіцієнта пропускання, а також дисперсійні залежності показника заломлення $n(\lambda)$ та коефіцієнта екстинкції $k(\lambda)$ тонкої плівки $0.5\text{TiO}_2-0.5\text{Nd}_2\text{O}_3$, нанесеної на кварцовий субстрат.

Винахід може бути використаний у науково-дослідних лабораторіях при дослідженні оптичних параметрів тонкоплівкових оптичних елементів з метою їх використання у ролі оптичних покриттів лазерної техніки.

Джерела інформації:

1. Розенберг Г.В. Оптика тонкослойных покрытий. - М.: Физ.-мат. лит, 1958.-572с.
2. Азам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. - М.: Мир, 1981. - 583с.
3. Dobrowolski I.A., Ho F.C., Waldort A. Determination of optical constants of thin film coating materials based on inverse synthesis. - Appl. Optics. - 1983. - Vol.22. - P.3191-3200. - прототип
4. Борец А.Н. Об оптико-рефрактометрической закономерности для неметаллических изотропных веществ. - Укр. физ. журн. - 1983. - Т.28, №9. - 0.1346-1350.



Фіг.1.

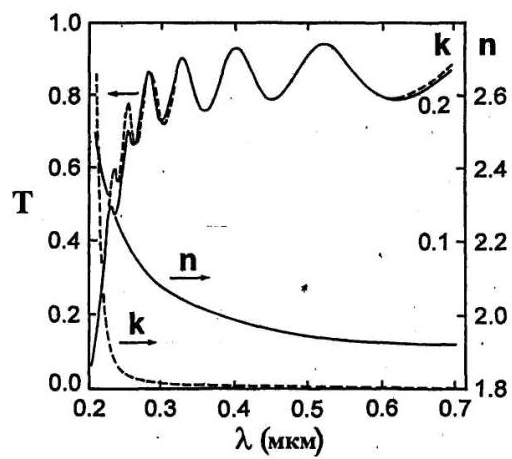


Fig.2.