Федеральное агентство по образованию

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

Кафедра физической электроники (ФЭ)

КУПРЕЙЧИК АНДРЕЙ ФЕДОРОВИЧ

ДИАГНОСТИКА НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Направление 210100
«Электроника и микроэлектроника»

Магистерская программа 210103
«Твердотельная электроника»

Автореферат диссертации на соискание
степени магистра техники и технологии

Научный
руководитель:
Смирнов С.В.
профессор, д.т.н.

Томск 2009

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В настоящее время происходит бурное развитие микроэлектроники и смежных областей науки и технологии. Все больше новых приборов конструируется с применением микро- и нанотехнологии. Компьютерные технологии применяются уже практически повсеместно, и их развитие во многом зависит от успехов научных исследований в области изучения наноразмерных эффектов и создания новых высокопроизводительных вычислительных систем.

Одним из основных вопросов нанотехнологии является изучение и разработка способов получения наноструктур, изучение новых свойств, возможностей их применения в условиях современного мира. Особое внимание уделяется развитию наноэлектроники, то есть использованию электрических и оптических свойств наноразмерных слоев различных материалов с целью создания электронных приборов нового поколения.

Естественно, наиболее важным аспектом должно считать измерение и контроль параметров наноразмерных структур, необходимые как при их изучении, так и при получении. Сам размер структуры ограничивает точность и применимость различных методов исследования.

В настоящее время перспективными считаются оптические методы контроля параметров наноразмерных пленок, такие как эллипсометрия и спектроскопия. Огромным достоинством оптических методов является возможность неразрушающего исследования, что позволяет применять подобные методы на производственных линиях. Разработка и анализ комплексных методик оптического анализа имеет большое значение для развития современной электроники.

Существует множество методов анализа материалов с применением спектроскопических или эллипсометрических данных. Однако не все из низ могут удовлетворить требованиям нанотехнологии. Также, отнюдь не все методы спектроскопического анализа реализованы в виде удобных компьютерных приложений, да и реализованные сильно разрознены и не могут быть применены в комплексе.

Таким образом, исследования в области оптического анализа, а также создание комплексных решений в данной области *актуальны* и *практически значимы*. А идея разработки аналитического программного комплекса является новой.

Целью данной работы является создание аналитического комплекса для обработки данных, получаемых оптическими методами.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- проанализировать существующие оптические методы исследования материалов;
- рассмотреть слабые и сильные стороны различных методов;
- проанализировать возможности повышения эффективности исследований путем объединения различных методик в комплекс;
- разработать алгоритмы, реализующие различные методики анализа;
- создать удобное и эффективное приложение для обработки экспериментальных данных согласно выбранным методам анализа.

Научная новизна проделанной работы заключается в том, что впервые предложен и частично реализован проект комплексной спектро-аналитической среды, позволяющей проводить исследования с применением большого спектра методик.

Практическая значимость работы обусловлена потребностью современной микроэлектроники в высокоэффективных нетребовательных методах анализа, универсальных программных комплексах, предоставляющих большой спектр аналитических возможностей. Результаты работы имеют практическую значимость как для ЦКП ТУСУР так и для микроэлектронной промышленности в целом.

Основные продукты работы применяются в работе ЦКП по спектроскопии и имеют значительную материальную ценность.

Публикации по теме работы били представлены на конференциях «Научная сессия ТУСУР» в 2008-м и 2009-м годах. Основные положения работы также представлены на конференции кафедру ФЭ в 2009-м году.

Структура и объем диссертации

Текст диссертации состоит из введения, трех глав и заключения. Работа изложена на 89 страницах, включает 27 иллюстраций, 3 таблицы и 20 страниц приложения. Текст диссертации составлен с использованием 15 литературных источников.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Первая глава представляет собой теоретический обзор, подробно освещающий основные принципы оптического анализа и его разновидности, физические явления и принципы, являющиеся основополагающими для всех оптических методов.

Основу всех оптических исследований составляют физические принципы взаимодействия света (или электромагнитной волны, если говорить более широко). Оптические свойства тел, или, точнее говоря, физические процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом, весьма разнообразны. Это взаимодействие можно разделить на два типа: взаимодействие с сохранением энергии кванта света и взаимодействие с превращением энергии.

К первому типу относят пропускание, отражение и рассеяние света, вращение плоскости поляризации и т.п. Сохранение энергии кванта (фотона) означает, что при взаимодействии с веществом отсутствует эффект передачи энергии.

Во взаимодействиях второго типа энергия фотона передается веществу, в результате чего могут порождаться различные квазичастицы. Эти взаимодействия условно можно разделить на две группы: неэлектричекие и электрические.

При делении света на границе раздела сред отношение амплитуд падающей, отраженной и преломленной волн определяется соотношениями Френеля.

Для описания поглощения света веществом вводят понятие *комплексного показателя преломления* $N = n + i\,k$, где величина k называется *показателем поглощения* (или *коэффициентом экстинкции*) и в прозрачных средах равна нулю. Использование данного выражения при описании волны дает соотношение:

$$E(x,t) = E_A \exp\left[\frac{-\omega\, k\, x}{c}\right] \exp\left[i\left(\omega\, t - \frac{\omega\, n\, x}{c} + \theta_0\right)\right]. \qquad (1)$$

Это выражение описывает плоскую волну, распространяющуюся со скоростью c/n и затухающую по закону $\exp(-\omega\, k\, x/c)$. При работе с интенсивностью излучения, которая пропорциональна квадрату амплитуды, затухание света в поглощающей среде описы-

вается законом Бугера-Ламберта-Бера. Величину $\alpha = 2\omega k / c$, входящую в запись данного закона, называют *коэффициентом поглощения*.

При поглощении света твердыми телами энергия фотонов превращается в другие виды энергии. Она может идти на изменение энергетического состояния свободных или связанных с атомами электронов, а также на изменение колебательной энергии атомов. Поглощение обусловлено, в основном, действием следующих механизмов:

– межзонные электрические переходы из валентной зоны в зону проводимости. Связанное с этим механизмом поглощение называется с*обственным*, или *фундаментальным*;

– переходы, связанные с участием экситонных состояний (*экситонное поглощение*);

– переходы электронов или дырок внутри соответствующих энергетических зон, т.е. переходы, связанные с наличием свободных носителей заряда (*поглощение свободными носителями заряда*);

– переходы с участием примесных состояний (*примесное поглощение*);

– поглощение энергии света колебаниями кристаллической решетки (*решеточное* или *фононное поглощение*).

Коэффициент поглощения α имеет смысл вероятности поглощения фотона с длиной волны λ на единичной длине образца. Если в кристалле действуют несколько механизмов поглощения и они независимы друг от друга, то полная вероятность поглощения выражается их суммой.

Множество значений $\alpha(\lambda)$ при разных λ является спектральной характеристикой поглощательной способности вещества. Полный спектр поглощения складывается из спектров поглощения, связанных с действием разных механизмов. В разных спектральных областях преобладают те или иные механизмы поглощения.

Изучение спектров поглощения веществ дает обширную информацию о структуре энергетических зон, примесных и дефектных состояниях, колебаниях решетки.

Для исследования оптических и электрических свойств, анализа поверхностных структур, количественного анализа материалов могут быть применены различные оптические методы. Оптические методики занимают особое положение среди применяемых в науке и производстве методов анализа, так как имеют *неразрушающий* характер и могут быть применены к рабочим структурам на этапах производства. Основными оптическими методами являются эллипсометрия, ИК-, КР- и электронно-оптическая спектроскопия.

Эллипсометрический метод основан на соотношениях Френеля. Метод был предложен еще Друде и, можно сказать, является завидным долгожителем. В классическом виде этот метод может быть использован для определения оптических постоянных материалов и толщин пленок.

Различные виды *спектроскопии* дают качественную и количественную информацию о химическом составе, а также электрических и оптических свойствах вещества.

В практике оптических исследований применяются как фундаментальные законы и соотношения так и сложные оптические эффекты в образцах и на их поверхности, наблюдаемые в определенных структурах, а также сложные соотношения, используемые при анализе экспериментальных данных или лежащие в основе определенных экспериментальных методик.

Один из наиболее интересных аналитических инструментов: *соотношения Крамерса-Кронига* — интегральная связь между действительной и мнимой частями любой комплексной функции, аналитичной в верхней полуплоскости. Данные соотношения могут быть применены для описания связи вещественной и мнимой части диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_r(\omega_r)-1=\frac{2}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\omega'\varepsilon_i(\omega')}{\omega'^2-\omega_r^2}d\omega', \qquad (2)$$

$$\varepsilon_i(\omega_r)=\frac{2\omega_r}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon_r(\omega')}{\omega_r^2-\omega'^2}d\omega', \qquad (3)$$

Подобные соотношения могут быть записаны также для комплексного показателя преломления и комплексного коэффициента отражения, что может быть применено для вычисления опти-

ческих постоянных вещества в исследуемом спектральном диапазоне.

Во второй главе рассматриваются особенности реализации алгоритмов обработки экспериментальных данных, используемые при разработке темы и построении программного обеспечения, являющегося продуктом работы.

Создание комплексного инструментария для обработки спектрометрических данных является одним из ключевых моментов данной работы. Программный комплекс *SpectraSoft*, разработанный в рамках исследования, направлен на реализацию в максимально удобной сосредоточенной форме большинства алгоритмов обработки спектральных данных: от простых задач обрезки/нормировки до сложных алгоритмов обработки, таких как метод Крамерса-Кронига.

Построенный комплекс предлагает следующие алгоритмы обработки:

- простые операции (сложение/вычитание и слияние спектров, преобразования координатных систем);
- нормировка, сглаживание, интерполяция и фильтрация;
- анализ по методу Крамерса-Кронига спектров отражения и пропускания;

Все алгоритмы обработки данных реализованы в виде модуля на языке паскаль. Для работы с комплексными числами был использован модуль из комплекта FreePascal 2, доработанный с учетом некоторых дополнительных потребностей. Данные в разработанном ПО представляются в виде набора точек, для каждой из которых можно хранить одну абсциссу и до трех ординат (используется две).

Модуль *SpectraParsers* является основной частью разработанного приложения, представляющего собой как набор интерфейсов для алгоритмов модуля, так и набор алгоритмов для контроля типизации спектров, сохранения и загрузки данных, поддержки различных форматов данных.

Для построения визуального интерфейса выбрана среда визуальной разработки *Lazarus* основанная на *FreePascal*. Данный программный продукт предоставляет широкие возможности по быстрому проектированию интерактивных приложений для различных операционных систем.

В проекте использован компонент отрисовки графиков TChart, существенно доработанный автором для поддержки дополнительной оси (доработки в настоящий момент внедряются в официально распространяемый код *Lazarus IDE*).

Разработанное приложение поддерживает форматы данных, применяемые в ПО производителей спектроскопического оборудования, установленного в лаборатории: формат данных OceanOptics, формат J-CAMP, используемый в ПО ИК Фурье-спектрометра Infralum и поддерживаемый ПО от AvaSoft.

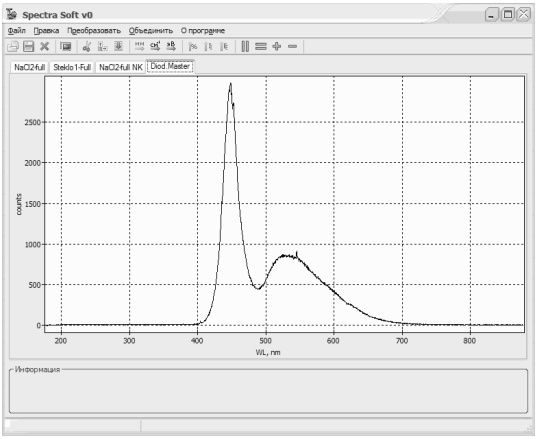

Рисунок 1 – Общий вид интерфейса SpectraSoft.

При решении задачи построения приложения подробно рассмотрены особенности реализации интегрирования для анализа по методу Крамерса-Кронига с учетом характерного разрыва подынтегральной функции. Также подробно рассмотрен алгоритм итерационного уточнения применяемый при решении обратной задачи эллипсометрии и реализации обратного преобразования с применением соотношений Френеля.

В третьей главе рассматриваются примеры применения разработанных сложных алгоритмов и показывается состоятельность и применимость выбранных методов и путей реализации.

Все разработанное ПО тестировалось в условиях ЦКП по спектроскопии ТУСУР в связке с оптическим оборудованием, представленным в приложении.

Приложение для обработки результатов эллипсометрических измерений применяется в ЦКП уже более года и было использовано как при анализе монолитных образцов, так и при исследовании тонкопленочных структур.

Программный комплекс SpectraSoft тестировался в ЦКП при обработке спектроскопических данных с разных спектрометров. Все основные простые функции и преобразования, проводимые с помощью ПО, были проверены в экспериментах по исследованию сверхтонких пленок, анализу монолитных образцов.

Алгоритм фильтрации шума методом Фурье был испытан на различных типах спектров. Частотная фильтрация оказалась достаточно полезной при работе со спектрами оптического диапазона: фильтрация снижает уровень шума, оставляя наиболее заметные пики. Применение Фурье-фильтра к спектрам с резкими пиками (например, ИК-спектры) показало неудовлетворительный результат, так как резкие переходы при этом сильно искажаются.

К сожалению, полностью испытать методику Крамерса-Кронига на данный момент не удалось в следствие ограничений материальной базы. Попытка смоделировать полное отражение при угле падения 45º (угол падения луча в спектрометре Инфралюм) не увенчалась успехом. Причиной этому, по мнению автора, является невозможность однозначной интерпретации фазы при моделировании полного отражения с эллиптической поляризацией отраженного луча. Поляризовать же ИК излучение имеющимися поляризаторами не удалось.

Обработка спектров пропускания (ИК + видимая область) методом Крамерса-Кронига подтвердила необходимость использования дополнительного инструмента для корректировки абсолютных значений показателя преломления, а также показала, что экспоненциальный характер затухания света в веществе не позволяет определять коэффициент поглощения вне области пропускания для толстых образцов, так как интенсивность света падает ниже уровня шума фотоприемника (рис. 2). На рисунке 3 показан спектр оптических постоянных, рассчитанный по доступному для анализа участку спектра поглощения, форма кривых хорошо согласуется с данными представленными в литературе.

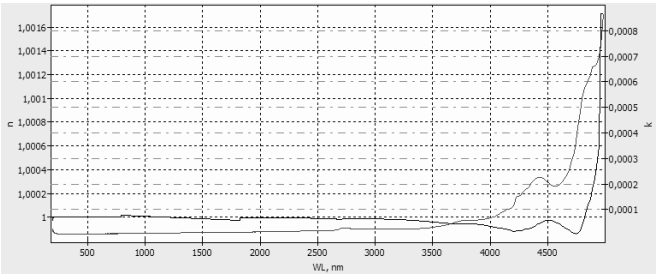

Рисунок 3 – Спектр оптических постоянных кварцевого стекла, рассчитанный методом Крамерса-Кронига из спектра поглощения в области прозрачности.

Представленные примеры показывают общую состоятельность специальных методов анализа, реализованных в пределах проекта, общую полезность и применимость разработанного ПО.

В *заключении* подводится итог проведенной работы, обобщаются основные ее результаты.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

• Подробно рассмотрены методы оптического анализа, отмечены их сильные и слабые стороны.

• Рассмотрена возможность объединения различных оптических методик в один комплекс.

• Разработаны вычислительные алгоритмы анализа для наиболее применимых и популярных методов оптического анализа.

• Создано универсальное программное обеспечение *Spectra-Soft*, позволяющее производить широкий спектр аналитических действий при работе со спектроскопическими данными любых диапазонов длин волн. Особенности продукта:

– поддержка 12 типов спектральных зависимостей;

– поддержка всех основных функций обработки спектров;

– возможность анализа спектров по методу Крамерса-Кронига;

– проведение сложного анализа спектров без применения каких либо дополнительных средств;

– возможность унифицировать обработку спектральных данных и

– возможность объединения различного спектрометрического оборудования в единый комплекс.

• На примерах показаны преимущества объединения спектроскопии различных видов, а также других оптических методов для достижения максимальной информативности исследований:

– важность применения объединенных спектров для метода Крамерса-Кронига;

– применение эллипсометрии для коррекции результатов вычислений с применением соотношений Крамерса-Кронига;

– применение эллипсометрии в совокупности со спектроскопией для анализа сверхтонких слоев.

• Рассмотрены возможные проблемы и трудности, возникающие при исследовании материалов оптическими методами. Отмече-

ны и локализованы существующие в ЦКП проблемы реализации и применения оптических методов анализа, требующие первостепенного решения.

• В процессе разработки темы составлены методические указания для проведения лабораторных работ по эллипсометрии; создан электронный обучающий макет эллипсометра.

По теме диссертации автором опубликованы следующие работы:

• Купрейчик А.Ф. Обработка результатов эллипсометрических измерений // Научная сессия ТУСУР-2008: Материалы Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, в 5-и частях, часть 4. – Томск: В-Спектр, 2008. – С. 22 - 24.

• Купрейчик А.Ф. Анализ и обработка спектроскопических данных // Научная сессия ТУСУР-2009: Материалы Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, в 5-и частях, часть 4. – Томск: В-Спектр, 2009. – С. 221 - 223.