Федеральное агентство по образованию

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

Кафедра физической электроники (ФЭ)

к защите допустит	b			
заведующий кафедрой ФЭ				
профессор, д.т.н.				
Троян П.Е.				
« <u></u> » 2009.				

КУПРЕЙЧИК АНДРЕЙ ФЕДОРОВИЧ

ДИАГНОСТИКА НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Направление 210100 «Электроника и микроэлектроника» Магистерская программа 210103 «Твердотельная электроника»

Диссертация на соискание степени магистра техники и технологии ФЭТ ВКР.415114.001 ПЗ

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

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ОБЗОР	7
1.1 Принципы взаимодействия света с веществом	7
1.1.1 Волновая теория света. Поляризация света	7
1.1.2 Виды взаимодействия света с веществом	9
1.1.3 Оптические явления на границе раздела сред	11
1.1.4 Поглощение света в веществе	12
1.1.5 Поглощение света кристаллами	13
1.2 Сложные эффекты, законы, соотношения	21
1.2.1 Соотношения Крамерса-Кронига	21
1.2.2 Двухлучевая интерференция	22
1.2.3 Многолучевая интерференция	23
1.2.4 Поляризация волны, отраженной от пленки на поверхности	
полубесконечной среды. Основное уравнение эллипсометрии	25
1.3 Методы исследования структур	28
1.3.1 Определение толщины пленки методом интерферометрии	28
1.3.2 Эллипсометрический анализ поверхности	31
1.3.3 Колебательная спектроскопия	34
1.3.4 Электронно-оптическая спектроскопия	38
1.3.5 Спектральный анализ по методу Крамерса-Кронига	41
1.3.6 Метод дисперсионного анализа	45
1.4 Постановка задачи	48
ГЛАВА 2. ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ	50
2.1 Обработка эллипсометрических данных	50
2.2 Обработка спектрометрических данных	52
2.2.1 Обработка с использованием соотношений Крамерса-Кронига .	55
2.2.2 Фильтрация с применением преобразований Фурье	57
2.2.3 Обработка с применением соотношений Френеля	57

2.2.4 Интерфейс ПО	58
2.3 Побочные продукты и результаты	59
ГЛАВА 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ	61
3.1 Применение базовых алгоритмов	61
3.2 Применение метода Крамерса-Кронига	62
3.3 Проблемы применения	63
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	65
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	67
ПРИЛОЖЕНИЕ А	69
ПРИЛОЖЕНИЕ Б	78
ПРИЛОЖЕНИЕ В	79
ПРИЛОЖЕНИЕ Г	81

ВВЕДЕНИЕ

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.

Переход к наноразмерам означает не только и не столько уменьшение размеров конечного продукта. При переходе к размерам элементов, соизмеримым с межатомным расстоянием, приводит к появлению особых эффектов, которые могут быть использованы в электронных компонентах.

Одним из основных вопросов нанотехнологии, естественно, является изучение и разработка способов получения наноструктур, изучение новых свойств, возможностей их применения в условиях современного мира. Особое внимание, естественно, 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 разделен на 3 главы. *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.

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

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

B заключении подводится итог проведенной работы, обобщаются основные ее результаты.

ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ОБЗОР

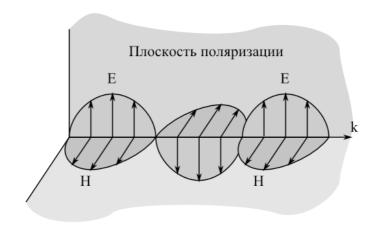
1.1 ПРИНЦИПЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕТА С ВЕЩЕСТВОМ

Основу всех оптических исследований составляют физические принципы взаимодействия света (или электромагнитной волны, если говорить более широко). В данном разделе рассмотрим основные принципы взаимодействия света с веществом и его поверхностью.

1.1.1 Волновая теория света. Поляризация света.

В классической волновой оптике свет рассматривается как электромагнитная волна. При этом оптика занимается изучением диапазона волн от длинноволнового инфракрасного излучения ($\lambda \approx 1 \, \text{мм}$) до коротковолнового рентгеновского ($\lambda \approx 1 \, \text{нм}$).

Основными характеристиками света, как и любого другого электромагнитного излучения, принято считать частоту, длину волны и поляризацию. Длина волны зависит от скорости распространения и частоты излучения. Скорость распространения света в вакууме (c=2.997924586×10⁸ M/c) является одной из основных физических констант.



Pисунок 1.1 - Плоская монохроматическая волна.

Электромагнитная волна — связанное возмущение магнитного и электрического полей. Вектора напряженности электрического (E) и магнитного (H) полей в электромагнитной волне колеблются в двух взаимно перпендикулярных плоскостях (рис. 1.1). Волну также принято характеризовать волновым вектором $k_{\rm s}$, направлен-

ным вдоль направления распространения волны, модуль которого обратно пропорционален длине волны:

$$k_s = \frac{2\pi}{\lambda} \ . \tag{1.1}$$

Плоскость, в которой колеблется вектор напряженности электрического поля называют *плоскостью поляризации*. А саму волну *плоской* или *плоскополяризованной*. Уравнение плоской волны, распространяющейся вдоль оси x, имеет следующий вид:

$$E(x,t) = E_A \cos(\omega t - k_e x + \theta_0), \qquad (1.2)$$

где E_A – амплитуда колебаний; ω — циклическая частота; θ_0 – начальная фаза колебаний.

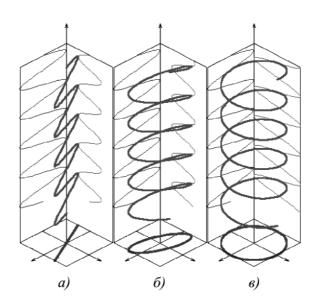


Рисунок 1.2 — Виды поляризации электромагнитной волны: а - линейная, б - эллиптическая, в - круговая.

Любую реальную монохроматическую электромагнитную волну можно представить в виде суперпозиции двух плоских волн, распространяющихся во взаимно перпендикулярных плоскостях (1.4, 1.5). Такая волна имеет может иметь *линейную*, *круговую* или эллиптическую поляризацию в зависимости от разности фаз между составляющими, а вектор напряженности будет являться векторной суммой составляющих:

$$E = \sqrt{E_1^2 + E_2^2} \; ; \; \vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 \; , \tag{1.3}$$

$$E_1(x,t) = E_{AI}\cos(\omega t - k_e x + \theta_1),$$
 (1.4)

$$E_2(x,t) = E_{A2}\cos(\omega t - k_s x + \theta_2). \tag{1.5}$$

Вид поляризации определяется соотношением амплитуд составляющих и разностью фаз $\Delta \theta = \theta_2 - \theta_1$ (рис. 1.2):

- если $\Delta \theta = 0$, то волна линейно поляризована;
- если $\Delta \theta = \pi/2$ и $E_{AI} = E_{A2}$, то волна циркулярно поляризована;
- иначе волна имеет эллиптическую поляризацию.

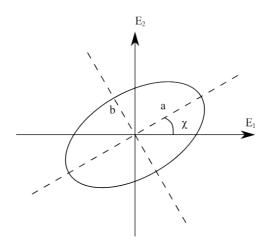


Рисунок 1.3 – Эллипс поляризации.

Эллиптическую поляризацию также можно характеризовать полуосями эллипса a и b и углом поворота χ , отсчитываемым относительно выбранной системы координат (рис. 1.3).

1.1.2 Виды взаимодействия света с веществом

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 (А) и электрические (В).

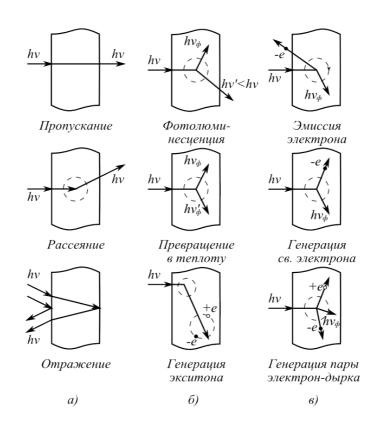


Рисунок 1.4 — Взаимодействие света с телом: а — процессы с сохранением энергии кванта; б, в — процессы с передачей энергии (неэлектрические и электрические)

Группу А составляют явления, в которых в результате взаимодействия рождаются квазичастицы, не имеющие электрического заряда — фононы, экситоны, втофотоны. В ричные группу В получившие входят явления, название фотоэлектрических. В них энергия фотонов поглощается твердым телом и при этом генерируются свободные электроны, дырки или электронно-дырочные пары, наблюдается фотоэлектронная эмиссия, возникают различные объемные и поверхностные явления с участием заряженных частиц. Различные виды взаимодействия света с твердым телом показаны на рисунке 1.4.

1.1.3 Оптические явления на границе раздела сред

Если на границу раздела двух однородных сред с различными оптическими свойствами падает плоская волна, она разделяется на две: проходящую во вторую среду и отраженную. Условие синфазности изменения волновых полей на границе раздела дает соотношение между углом падения φ_0 , углом преломления φ_1 и показателями преломления обоих сред:

$$N_0 \sin \varphi_0 = N_1 \sin \varphi_1 \,. \tag{1.6}$$

Соотношение (1.6) вместе с утверждением, что волновые вектора отраженной и преломленной волн лежат в плоскости падения, составляет *закон Снеллиуса*.

Отношение амплитуд падающей, отраженной и преломленной волн определяется соотношениями Френеля:

$$r_{p} = \frac{N_{1}\cos\varphi_{0} - N_{0}\cos\varphi_{1}}{N_{1}\cos\varphi_{0} + N_{0}\cos\varphi_{1}},$$
(1.7)

$$r_{s} = \frac{N_{0}\cos\varphi_{0} - N_{1}\cos\varphi_{1}}{N_{0}\cos\varphi_{0} + N_{1}\cos\varphi_{1}},$$
(1.8)

$$t_{p} = \frac{2 \cdot N_{0} \cos \varphi_{0}}{N_{1} \cos \varphi_{0} + N_{0} \cos \varphi_{1}},$$
(1.9)

$$t_{s} = \frac{2 \cdot N_{0} \cos \varphi_{0}}{N_{0} \cos \varphi_{0} + N_{1} \cos \varphi_{1}}, \qquad (1.10)$$

где r_p , r_s , t_p , t_s — амплитудные коэффициенты отражения и пропускания для p- и s-поляризованного света. Так как при исследовании световых волн мы имеем дело с энергией волны, то вводятся энергетические коэффициенты отражения и пропускания:

$$R_p = |r_p|^2$$
, $R_s = |r_s|^2$, (1.11)

$$T_p = |t_p|^2$$
, $T_s = |t_s|^2$. (1.12)

Показатели преломления N_0 и N_I , используемые в выражениях (1.6 - 1.10), в общем случае являются комплексными:

$$N = n + i k (1.13)$$

Величина k называется *показателем поглощения* (или *коэффициентом экстинкции* [1]) и в прозрачных средах равна нулю. Для поглощающих сред также определяется комплексная диэлектрическая проницаемость:

$$\dot{\varepsilon} = \varepsilon_r + i\,\varepsilon_i \,. \tag{1.14}$$

1.1.4 Поглощение света в веществе

При движении электромагнитной волны в веществе напряженность электрического поля описывается соотношением (1.2), которое может быть записано в комплексной форме:

$$E(x,t) = E_A \exp\left[i\left(\omega t - k_e x + \theta_0\right)\right]. \tag{1.15}$$

Волновой вектор $k_{\scriptscriptstyle 6}$ определяется длиной волны, т.е. зависит от частоты колебаний v и скорости распространения волны, которая в свою очередь определяется показателем преломления среды:

$$k_{s} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi \nu}{V_{s}} = \frac{\omega N}{c} . \tag{1.16}$$

При подстановке (1.16) в (1.15) с учетом (1.13) получаем выражение [1]:

$$E(x,t) = E_A \exp\left[\frac{-\omega k x}{c}\right] \exp\left[i\left(\omega t - \frac{\omega n x}{c} + \theta_0\right)\right]. \tag{1.17}$$

Это выражение описывает плоскую волну, распространяющуюся со скоростью c/n и затухающую по закону $\exp(-\omega k \, x/c)$. На практике, при работе с интенсивностью излучения, которая пропорциональна квадрату амплитуды, затухание света в поглощающей среде описывается законом Бугера-Ламберта-Бера:

$$I(x) = I_0 \exp\left(-\frac{2\omega k x}{c}\right) = \exp(-\alpha x), \qquad (1.18)$$

$$\alpha = \frac{2\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda_0} \,, \tag{1.19}$$

где λ_0 — длина волны в вакууме. Величину α также называют коэффициентом поглощения. Экспоненциальный характер ослабления света в поглощающей среде позволяет интерпретировать α как вероятность поглощения фотона в образце

единичной длины. В соответствии с этим величину α^{-1} можно рассматривать как *среднюю длину свободного пробега фотона* в веществе. Коэффициент поглощения α имеет размерность обратной длины и выражается обычно в м⁻¹.

1.1.5 Поглощение света кристаллами

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 получило название с*обственного*, или *фундаментального*;
- 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).

Ранее было отмечено, что 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 соотношением:

$$\alpha(\lambda) = \sum_{i} \alpha_{i}(\lambda) . \tag{1.20}$$

Множество значений $\alpha(\lambda)$ при разных λ является спектральной характеристикой поглощательной способности вещества. Как видно из соотношения (1.20), полный спектр поглощения складывается из спектров поглощения, связанных с действием разных механизмов. В разных спектральных областях преобладают те или иные механизмы поглощения.

Ясно, что при взаимодействии света с электронами должны выполняться законы сохранения энергии и импульса. Требование выполнения этих законов приводит к тому, что почти во всех механизмах поглощения, света связанных с различными электронными (или дырочными) переходами, принимают участие фононы. Это происходит потому, что значительное изменение импульса электронов в некоторых переходах не может быть обусловлено малыми импульсами фотонов, поглощенных при этих переходах. Это изменение импульса достигается за счет участия в процессе поглощения фононов, которые могут дать достаточно большой импульс.

Собственное поглощение

Собственное поглощение связано с переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости. В идеальном полупроводнике (или диэлектрике) при абсолютном нуле (T=0k) валентная зона заполнена электронами полностью, так что переходы электронов в этой области невозможны. Единственно возможным процессом здесь является поглощение фотона с энергией, достаточной для переброса электронов через запрещенную зону. В результате этого в зоне проводимости появляется свободный электрон, а в валентной зоне — дырка. Если к кристаллу приложить электрическое поле, то образовавшиеся в результате поглощения света свободные носители приходят в движение — возникает фотопроводимость. Таким образом, для фотонов с энергией $hv < E_g$ материал прозрачен (т.е. фотоны не поглощаются). В области малых длин волн (больших энергий) имеет место сплошной спектр поглощения, ограниченный более или менее крутым *краем поглощения* при $hv < E_g$. Для большинства полупроводников этот край находится в инфракрасной области. В зави-

симости от структуры энергетических зон межзонное поглощение может быть связано с *прямыми* или *непрямыми* оптическими переходами.

Для прямых переходов (без изменения импульса электрона) зависимость коэффициента поглощения от энергии фотонов имеет вид [1]:

$$\alpha(\nu) = A \left(h\nu - E_g \right)^{1/2}, \tag{1.21}$$

где A — некоторый коэффициент. Это соотношение выполняется в ограниченной области изменения $(h\nu-E_g)$. В этой области зависимость $\alpha^2=f(h\nu)$ является линейной. По точке пересечения этой прямой с осью $h\nu$ можно определить ширину запрещенной зоны для прямых переходов.

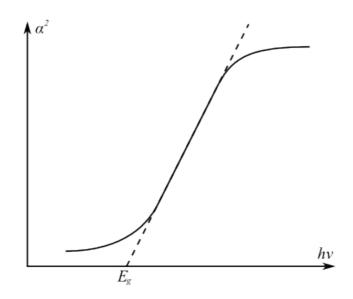


Рисунок 1.5 — Вид зависимости α^2 от энергии фотона при прямых переходах.

В полупроводниках, имеющих сложную зонную структуру, возможны не только прямые переходы, но и переходы с изменением импульса электрона (непрямые переходы). Зачастую для такого перехода нужна меньшая энергия, однако необходим дополнительный импульс, поэтому в таком взаимодействии участвует фонон порождаемый или поглощаемый в процессе перехода.

Вероятность непрямых переходов значительно меньше, поскольку в них участвует большее количество частиц (электрон, фотон и фонон). Поэтому поглоще-

ние, обусловленное непрямыми переходами, является более слабым, чем поглощение, связанное с прямыми переходами.

Спектральная зависимость коэффициента поглощения для непрямых переходов определяется выражением [1]:

$$\alpha(\nu) = B(h\nu - E_g \pm E_\phi)^2$$
,

где B — некоторый коэффициент, в который в качестве множителя входит функция распределения фононов.

Экситонное поглощение

При поглощении света возможно как образование свободного электрона так и генерация экситона — связанной пары электрон-дырка. При этом электрон валентной зоны переводится в возбужденное состояние, но остается связанным с образовавшейся дыркой в водородоподобном состоянии. Энергия образования экситона меньше ширины запрещенной зоны, поскольку последняя есть ни что иное как минимальная энергия создания разделенной пары. Экситон может перемещаться в кристалле, но фотопроводимость при этом не возникает, так как электрон и дырка движутся вместе. Экситоны могут достаточно легко возникать в диэлектриках, так как в них кулоновское притяжение электрона и дырки значительно. В полупроводниках это притяжение мало, поэтому энергия связи экситона также мала. Вследствие этого экситонные орбиты охватывают несколько элементарных ячеек кристалла (радиус орбиты ~15 нм). В металлах экситонное поглощение очень маловероятно.

Экситонные состояния приводят к поглощению на длинноволновой стороне края поглощения. Экситонным линиям соответствуют значения энергии фотона:

$$hv = E_g - \frac{E_{ex}}{m^2}, \quad m = 1, 2, 3...,$$
 (1.22)

где E_{ex} — энергия связи экситона.

Поглощение свободными носителями

Поглощение фотонов может быть связано с переходами электронов (или дырок) с уровня на уровень в пределах одной и той же разрешенной зоны. Поглощение, связанное с этим процессом, наблюдается за краем поглощения при достаточно больших концентрациях носителей заряда в полупроводниках. Оно плавно возрастает с длиной волны вплоть до очень больших длин волн (~100 мкм). Коэффициент поглощения в этом случае пропорционален концентрации основных носителей заряда. Такое поглощение получило название неселективного.

Рассматриваемые внутризонные переходы осуществляются либо при участии фонона, либо когда имеется рассеяние носителей на ионизированных примесях. Это обусловлено законом сохранения импульса. Коэффициент поглощения свободными носителями заряда определяется проводимостью вещества:

$$\alpha = \frac{\sigma}{c \, \varepsilon_0 \, n} \,. \tag{1.23}$$

Проводимость вещества σ зависит от времени релаксации τ , которое определяется механизмом рассеяния. Таким образом, на коэффициент поглощения свободными носителями оказывают влияние механизмы рассеяния. Действительно, в полупроводниках рассеяние акустическими фононами приводит к поглощению, меняющемуся как $\lambda^{1.5}$, рассеяние на оптических фононах — $\lambda^{2.5}$, а рассеяние ионизированными примесями — $\lambda^{3.5}$. Если в веществе имеют место все три механизма рассеяния, то коэффициент поглощения свободными носителями равен сумме:

$$\alpha(\lambda) = A \lambda^{1.5} + B \lambda^{2.5} + C \lambda^{3.5} , \qquad (1.24)$$

где A, B, C — константы.

Примесное поглощение

Наблюдается в полупроводниках и диэлектриках, содержащих примесные атомы. В этом случае поглощение света связано с возбуждением примесных центров или с их ионизацией. Например, в материале *n*-типа электроны с донорных уровней

могут быть возбуждены в зону проводимости. Если донорные (или акцепторные) примеси вносят в запрещенную зону мелкие уровни, то наблюдать примесное поглощение можно лишь при низких температурах, т.к. С повышением температуры эти уровни легко ионизируются за счет тепловой энергии. Так как энергия ионизации примесных уровней меньше, чем энергия, требуемая для переброса электрона из валентной зоны в зону проводимости, то полосы примесного поглощения находятся за краем собственного поглощения.

Решеточное поглощение

Решеточный механизм поглощения может наблюдаться в кристаллах с достаточной степенью ионности связей. Такие кристаллы можно рассматривать как набор диполей. Эти диполи могут поглощать энергию электромагнитного излучения. Наиболее сильным поглощение будет тогда, когда частота излучения равна частоте собственных колебаний диполя. Поглощение света, связанное с возбуждением колебаний кристаллической решетки, наблюдают в далекой инфракрасной области спектра.

Закон сохранения квазиимпульса требует участия фононов в решеточном поглощении. Поглощаться могут только фотоны, импульс которых равен квазиимпульсу фононов. Однако импульс фотона пренебрежимо мал по сравнению с импульсом отдельного фонона, поэтому для соблюдения закона сохранения квазиимпульса необходимо образование двух или более фононов. Это приводит к весьма сложной структуре спектра решеточного поглощения.

Поглощение света кристаллами определяет их окраску. Например, многие диэлектрики при комнатной температуре оптически прозрачны. Эта прозрачность обусловлена отсутствием в них электронных или колебательных переходов в видимой области спектра. Видимая область простирается от 740 до 360 нм, что соответствует интервалу энергий от 1.7 до 3.5 эВ. Этой энергии недостаточно для перевода

электрона из валентной зоны в зону проводимости (т.к. для диэлектриков ширина запрещенной зоны больше 3.5 эВ).Так, например, чистые кристаллы алмаза, имеющие ширину запрещенной зоны 5.2 эВ, являются прозрачными. Однако если в алмаз ввести примеси или дефекты, он становится окрашенным. То же самое можно сказать о корунде Al₂O₃, у которого ширина запрещенной зоны 7 эВ. Al₂O₃, содержащий около 0.5 % примеси Cr, (рубин) является окрашенным. Его окраска связана с поглощением света примесью хрома.

Изучение спектров поглощения веществ дает обширную информацию о структуре энергетических зон, примесных и дефектных состояниях, колебаниях решетки. Спектральные области, соответствующие различным типам поглощения, приведены в таблице 1.1 [2].

Tаблица 1.1 — 4астотные диапазоны электромагнитного излучения и соответствующие им процессы поглощения.

Название диапазона	Длины волн	Линейные частоты (Гц), волновые числа (см ⁻¹) и/или энергии квантов (эВ)	Процессы поглощения
Радиоволны	100 км - 1 м	3 кГц - 300 МГц	Нерезонансные смещения ионов (миграционные потери).
Микроволны или область СВЧ	2 мм - 1 м	300 МГц - 1.5×10 ¹¹ Гц	«Хвосты» поглощения, обусловленно- го колебательными переходами.
Инфракрасное излучение	760 нм - 2 мм	1.5×10 ¹¹ - 3.9×10 ¹⁴ Гц 5 - 13000 см ⁻¹ 0.0006 - 1.6 эВ	Фундаментальные, многофононные и примесные колебательные переходы; некоторые электронные переходы в d -и f -оболочках ионов соответствующих элементов; поглощение на свободных носителях заряда.
Видимое из- лучение	400 -760 нм	$3.9 \times 10^{14} - 7.5 \times 10^{14} $ Гц $13000 - 25000 $ см ⁻¹ $1.6 - 3.1 $ эВ	«Хвосты» поглощения, обусловленного фундаментальными электронными и многофононными колебательными переходами; электронные переходы в <i>d</i> - и <i>f</i> -оболочках ионов соответствующих элементов.
УФ излучение	10 - 400 нм	7.5×10 ¹⁴ - 3×10 ¹⁶ Гц 25000 - 10 ⁶ см ⁻¹ 3.1 - 124 эВ	Фундаментальные электронные переходы; некоторые электронные переходы в d - и f -оболочках ионов соответствующих элементов.
Рентгеновское излучение	10 - 10 ⁻² нм	3×10 ¹⁶ - 6×10 ¹⁹ Гц 124 эВ - 124 кэВ	Электронные переходы в атомных остовах; внешний фотоэффект; взаимодействие с ядрами атомов.
Гамма излучение	10 ⁻¹ - 10 ⁻⁶ нм	3×10 ²⁰ - 10 ²³ Гц 124 кэВ - 12400 МэВ	

1.2 СЛОЖНЫЕ ЭФФЕКТЫ, ЗАКОНЫ, СООТНОШЕНИЯ

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

1.2.1 Соотношения Крамерса-Кронига

Соотношения Крамерса-Кронига — интегральная связь между действительной и мнимой частями любой комплексной функции, аналитичной в верхней полуплоскости. Данные соотношения в частности могут быть применены для описания связи вещественной и мнимой части диэлектрической проницаемости [3]:

$$\varepsilon_r(\omega_r) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega' \,\varepsilon_i(\omega')}{\omega'^2 - \omega_r^2} d\,\omega', \qquad (1.25)$$

$$\varepsilon_{i}(\omega_{r}) = \frac{2\omega_{r}}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_{r}(\omega')}{\omega_{r}^{2} - {\omega'}^{2}} d\omega', \qquad (1.26)$$

где ε_r , ε_i — вещественная и мнимая части диэлектрической проницаемости.

На практике, в частности при определении оптических постоянных, мы обычно имеем дело не с диэлектрической проницаемостью, а с комплексным показателем преломления N либо с показателями отражения или поглощения.

В случае комплексного показателя преломления соотношения Крамерса-Кронига можно записать в виде:

$$n(\omega_r) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega' k(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \qquad (1.27)$$

$$k(\omega_r) = \frac{2\omega_r}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n(\omega')}{\omega_r^2 - {\omega'}^2} d\omega'.$$
 (1.28)

При работе с коэффициентом отражения экспериментальные данные обычно содержат только модуль изучаемой величины. В случае необходимости восстановле-

ния комплексной величины могут быть использованы соотношения, связывающие модуль p и фазу θ амплитудного коэффициента отражения:

$$r = r_r + ir_i = \rho e^{i\theta} \,, \tag{1.29}$$

$$\theta(\omega_r) = \frac{2\omega_r}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\ln \rho(\omega')}{\omega'^2 - \omega_r^2} d\omega', \qquad (1.30)$$

$$\ln \rho \left(\omega_r\right) = \ln \rho \left(i\right) + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \theta(\omega')}{\omega_r^2 - {\omega'}^2} d\omega'. \tag{1.31}$$

Порядок вывода соотношений (1.30, 1.31) и доказательство аналитичности коэффициента отражения в верхней полуплоскости подробно показаны в [3] и [4].

В оптических исследованиях соотношения Крамерса-Кронига применяются для вычисления оптических постоянных вещества при спектроскопических измерениях отражения или поглощения света.

1.2.2 Двухлучевая интерференция

Рассмотрим случай, когда луч света падает на тонкую пленку под углом φ_0 (рис. 1.6). Часть его преломляется на границе 1 под углом φ_1 , отражается от границы 2 под тем же углом и, снова преломляясь на границе 1, взаимодействует с той частью луча, которая в точке A отразилась от границы 1. Поскольку свет принято считать гармоническим колебанием, то при разнице фаз этих колебаний, равной $2\pi n$ (n=0,1,2...), в результате сложения этих волн будет иметь место максимум интерференции. Если же разность фаз будет равна ($\pi + 2\pi n$), то в результате взаимодействия наблюдается интерференционный минимум.

Разность фаз будет определяться разницей оптических путей AB и AC+CD, пройденных светом. Из геометрических соображений видно, что

$$AC + CD = 2d n_1/\cos \varphi_1, \qquad (1.32)$$

$$AB = 2d n_0 \cdot tg \varphi_1 \cdot \sin \varphi_0. \tag{1.33}$$

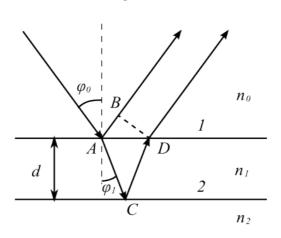


Рисунок 1.6 — Модель однослойной непоглощающей пленки к выводу формул двухлучевой интерференции.

Если в разности оптических путей укладывается целое число полуволн применяемого излучения, то наблюдается интерференционный экстремум (максимум или минимум) интенсивности света:

$$2\operatorname{dn}_{1}/\cos\varphi_{1} - 2\operatorname{dn}_{0} \cdot tg\,\varphi_{1} \cdot \sin\varphi_{0} = m\lambda/2 \,. \tag{1.34}$$

Преобразуем данное выражение, вынесем общий член за скобку:

$$(2d/\cos\varphi_1)(n_1 - n_0 \cdot \sin\varphi_1 \cdot \sin\varphi_0) = m\lambda/2. \tag{1.35}$$

Согласно закону Снеллиуса:

$$n_0 \sin \varphi_0 = n_1 \sin \varphi_1 \,. \tag{1.36}$$

Подставляя (1.36) в (1.35), имеем

$$(2d/\cos\varphi_1)(n_1 - n_1 \cdot \sin^2\varphi_1) = m\lambda/2. \tag{1.37}$$

Воспользовавшись преобразованием $1-\sin^2\alpha=\cos^2\alpha$, получаем:

$$2\operatorname{dn}_{1}\cos\varphi_{1}=m\lambda/2. \tag{1.38}$$

1.2.3 Многолучевая интерференция

Рассмотрим случай, когда прошедший через пленку луч отражается от границ раздела много раз (рис. 1.7). Найдем суммарную амплитуду отраженного света.

Разница оптических путей лучей 1 и 2 равна $2dn_1\cos\cos\phi_1$, как следует из формулы (1.38). Соответствующая разность фаз колебаний получается умножением

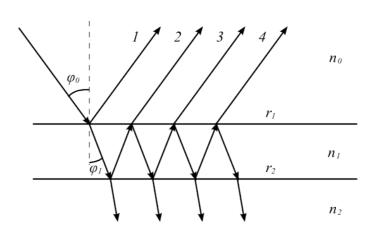


Рисунок 1.7 — Модель однослойной пленки для вывода формулы многолучевой интерференции.

на волновой вектор $2\pi/\lambda$. Обозначим эту разность фаз как $2\theta_r$:

$$2\delta = \frac{4\pi d \, n_1 \cos \varphi_1}{\lambda_e} \,. \tag{1.39}$$

Обсудим каждый луч в отдельности, для чего пронумеруем их (рис. 1.7).

Амплитуда отраженного света луча 1 равна r_1E_0 ;

Луч 2 образуется путем прохождения начального луча через границу 1, при котором пропускается часть амплитуды $(1-r_1)E_0$, затем после отражения от границы 2, остается только $r_2(1-r_1)E_0$. Далее луч проходит со стороны границы 2 через границу 1, при этом амплитуда будет изменяться в $[1-(-r_1)]=1+r_1$. Таким образом, с учетом набега фазы по (1.39), имеем:

$$E_2 = (1 - r_1)r_2(1 + r_1)E_0 \exp(2i\delta) = (1 - r_1^2)r_2E_0 \exp(2i\delta).$$
 (1.40)

Лучи 3 и 4 проанализируем по аналогии с лучом 2:

$$E_3 = (1 - r_1)r_2(-r_1)r_2(1 + r_1)E_0 \exp(2 \cdot 2i\delta) = -(1 - r_1^2)r_2^2r_1E_0 \exp(4i\delta), \qquad (1.41)$$

$$E_4 = (1 - r_1)r_2(-r_1)r_2(-r_1)r_2(1 + r_1)E_0 \exp(3.2i\delta) = (1 - r_1^2)r_2^3r_1^2E_0 \exp(6i\delta). \tag{1.42}$$

Видно, что амплитуды лучей 2, 3 и 4 различаются в $[-r_1r_2\exp(2i\delta)]$ раз. А поскольку r_1 и r_2 меньше единицы, то сумма амплитуд всех вторичных лучей (кроме луча 1) представляет собой сумму бесконечно убывающей геометрической прогрессии ($\Sigma = a_1/(1-q)$, где a_1 – первый член прогрессии, q – знаменатель прогрессии).

Следовательно, суммарная амплитуда будет определяться выражением:

$$E_{\Sigma} = \left[r_1 + \frac{\left(a - r_1^2 \right) r_2 e^{2i\delta}}{1 + r_1 r_2 e^{2i\delta}} \right] E_0 = \frac{r_1 + r_2 e^{2i\delta}}{1 + r_1 r_2 e^{2i\delta}} E_0.$$
 (1.43)

Данное выражение имеет смысл для света, поляризованного в плоскости падения или перпендикулярно ей. При этом величины r_1 и r_2 определяются соответствующими соотношениями Френеля (1.7, 1.8). Если преобразовать данное выражение в приложении интенсивностей и проанализировать его на экстремумы, будет получено выражение (1.38) [5].

1.2.4 Поляризация волны, отраженной от пленки на поверхности полубесконечной среды. Основное уравнение эллипсометрии

При решении задачи определения поляризации волны при отражении поле Е представляется в виде суммы двух компонент: E_p и E_s , где E_p лежит в плоскости падения луча, а E_s перпендикулярна ей. s и p составляющие могут рассматриваться независимо. Изменение состояния поляризации при отражении характеризуется величиной:

$$\frac{E_{1p}/E_{0p}}{E_{1s}/E_{0s}} = \left(\frac{E_{0s}}{E_{0p}}\right) \cdot \left(\frac{E_{1p}}{E_{1s}}\right),\tag{1.44}$$

где E_{0p} , E_{0s} и E_{Ip} , E_{Is} — комплексные амплитуды ($E=E_Ae^{i\theta_0}$) p и s компонент падающего и отраженного луча соответственно.

Используя (1.43) можно преобразовать (1.44) к виду:

$$\left(\frac{E_{0s}}{E_{0p}}\right) \cdot \left(\frac{E_{1p}}{E_{1s}}\right) = \frac{r_{1p} + r_{2p} e^{2i\delta}}{1 + r_{1p} r_{2p} e^{2i\delta}} \cdot \frac{1 + r_{1s} r_{2s} e^{2i\delta}}{r_{1s} + r_{2s} e^{2i\delta}}.$$
(1.45)

В выражении (1.45) индекс «1» соответствует границе раздела между внешней средой и пленкой, а индекс «2» — границе раздела пленка-подложка (полубесконечная однородная среда). Коэффициенты Френеля, входящие в это выражение, могут быть определены по формулам (1.7, 1.8):

$$r_{1p} = \frac{N_1 \cos \varphi_0 - N_0 \cos \varphi_1}{N_1 \cos \varphi_0 + N_0 \cos \varphi_1},$$
(1.46)

$$r_{1s} = \frac{N_0 \cos \varphi_0 - N_1 \cos \varphi_1}{N_0 \cos \varphi_0 + N_1 \cos \varphi_1},$$
(1.47)

$$r_{2p} = \frac{N_2 \cos \varphi_1 - N_1 \cos \varphi_2}{N_2 \cos \varphi_1 + N_1 \cos \varphi_2},$$
 (1.48)

$$r_{2s} = \frac{N_1 \cos \varphi_1 - N_2 \cos \varphi_2}{N_1 \cos \varphi_1 + N_2 \cos \varphi_2},$$
(1.49)

где N_0 , N_1 и N_2 — комплексные показатели преломления окружающей среды, пленки и подложки соответственно, φ_0 — угол падения луча, φ_1 и φ_2 — углы распространения луча в пленке и подложке соответственно. Углы φ_0 , φ_1 и φ_2 связаны законом Снеллиуса (1.6):

$$N_2 \sin \varphi_2 = N_1 \sin \varphi_1 = N_0 \sin \varphi_0. \tag{1.50}$$

Соотношение, стоящее в левой части выражения (1.45) полностью характеризует изменение поляризации отраженной волны. Эта величина в общем случае является комплексной, посему можем записать:

$$\left(\frac{E_{0s}}{E_{0p}}\right) \cdot \left(\frac{E_{1p}}{E_{1s}}\right) = tg \,\psi \,e^{i\Delta} \,, \tag{1.51}$$

$$tg\,\psi\,e^{i\Delta} = \frac{r_{1p} + r_{2p}\,e^{2i\delta}}{1 + r_{1p}\,r_{2p}\,e^{2i\delta}} \cdot \frac{1 + r_{1s}\,r_{2s}\,e^{2i\,\delta}}{r_{1s} + r_{2s}\,e^{2i\,\delta}} \,. \tag{1.52}$$

Очевидно, что углы Ψ и Δ однозначно определяются параметрами отражающей системы. Уравнение (1.52) называется основным уравнением эллипсометрии.

Комплексные показатели преломления, используемые в приведенных формулах, имеют вид (1.13), однако в практических вычислениях принято использовать комплексно сопряженные их величины:

$$N^* = n - ik \,, \tag{1.53}$$

при этом в уравнении (1.52) знак в показателе экспоненты меняется:

$$tg\,\psi\,e^{i\Delta} = \frac{r_{1p} + r_{2p}\,e^{-2i\delta}}{1 + r_{1p}\,r_{2p}\,e^{-2i\delta}} \cdot \frac{1 + r_{1s}\,r_{2s}\,e^{-2i\delta}}{r_{1s} + r_{2s}\,e^{-2i\delta}} \,. \tag{1.54}$$

Уравнение (1.54) также является основным уравнением эллипсометрии. Подробнее переход от (1.52) к (1.54) рассмотрен в [6]. Углы Ψ , определяемые из (1.52) и (1.54) одинаковы, а углы Δ отличаются знаком.

Очевидно, что углы Ψ и \varDelta являются функциями вещественных параметров системы:

$$tg \psi e^{i\Delta} = f(n_0, \lambda, \varphi_0, d, n_1, n_2, k_1, k_2)$$
 (1.55)

Измеряя Ψ и Δ и решая уравнение (1.55) можно определить любые два неизвестных параметра отражающей системы. В этом заключается метод эллипсометрического исследования.

Следует отметить, что при $d \to 0$ уравнение (1.52) (также, как и (1.54)) принимает вид:

$$tg\,\psi\,e^{i\Delta} = r_{\rm in}/r_{\rm is}\,.\tag{1.56}$$

Используя выражение (1.56) можно получить аналитическое решение задачи определения оптических параметров полубесконечной среды:

$$n_1^2 - k_1^2 = n_0^2 \sin^2 \varphi_0 \left[1 + tg^2 \varphi_0 \frac{\cos^2 \psi - \sin^2 2 \psi \sin^2 \Delta}{(1 + \sin 2 \psi \cos \Delta)^2} \right], \tag{1.57}$$

$$2n_1 k_1 = n_0^2 \sin^2 \varphi_0 t g^2 \varphi_0 \frac{\sin 4 \psi \sin \Delta}{(1 + \sin 2 \psi \cos \Delta)^2}.$$
 (1.58)

1.3 МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР

В настоящее время существует множество физических методов исследования материалов. Всё многообразие методов исследований можно разделить на следующие группы [7]:

- Методы исследования оптических, электрофизических и физико-химических свойств материалов;
- Методы исследования состава и кристаллической структуры материалов;
- Методы исследования поверхности;
- Методы исследования концентрации и структуры дефектов.

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.

1.3.1 Определение толщины пленки методом интерферометрии

При наблюдении двух стеклянных пластин прижатых друг к другу видны разноцветные полосы. Если при этом одна из прижатых поверхностей очень гладкая и ровная, то, пользуясь выражением (1.38), можно определить рельеф другой поверхности. Это обусловлено тем, что между двумя поверхностями имеет место интерференция, причем при освещении белым светом хорошо видны только полосы малых порядков, т.е. с малыми значениями *т* в (1.38), поскольку при больших порядках интерференции максимумы и минимумы освещенности обуславливаются светом разных длин волн, в результате их сложения контраст полос снижается.

Показано, что контраст полос зависит от коэффициентов отражения обоих поверхностей, причем он становится больше при увеличении коэффициентов отражения. Поэтому на поверхность пластин иногда наносят металлические слои: полупрозрачный на верхнюю и непрозрачный на нижнюю. Экстремумы интенсивности между ними описываются формулой, подобной (1.38):

$$2\operatorname{dn}_{1}\cos\varphi_{1}/\lambda = m/2 + \chi \,\,\,(1.59)$$

где χ - поправка, вносимая сдвигами фаз на обеих поверхностях.

Возникающие интерференционные полосы в зависимости от условий освещения и наблюдения называются полосами равной толщины или равного наклона. Если освещать плоскопараллельную пластину светом с разными углами его падения на образец и собирать отраженный свет линзой, то в ее фокальной плоскости будут наблюдаться полосы равного наклона. При освещении пластины с малой клиновидностью параллельным пучком света,при его отражении будут наблюдаться полосы равной толщины. Рассмотрим этот случай подробнее.

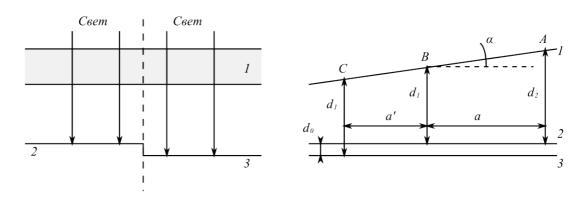


Рисунок 1.8 — Схема для наблюдения интерференционных полос: 1 — полупрозрачное зеркало, 2 — верхняя поверхность «ступеньки» высотой d_0 , 3 — нижняя поверхность «ступеньки». d_1 — расстояние между поверхностями 1-2, 1-3, при которых выполняется условие (3.8) для заданного m; d_2 — расстояние 1-2 для интерференции порядка m+2; a — расстояние между полосами; a' — сдвиг полос.

Рассмотрим систему, состоящую из полупрозрачного зеркала и отражающей поверхности, имеющей ступеньку (рис. 1.8). Если установить полупрозрачное зеркало почти параллельно отражающей поверхности и осветить эту систему параллельным пучком монохроматического света, то будут видны экстремумы освещенности,

определяемые формулой (1.59). Положение полос и расстояние между ними определяются взаимным расположением исследуемой поверхности и полупрозрачного зеркала. Отрегулируем систему так, чтобы угол между ними отличался от нуля только вдоль плоскости среза ступеньки.

Пусть расстояние d_1 определяется выражением:

$$2d_1 n_1/\lambda = m/2 + \chi \tag{1.60}$$

Следующий такой экстремум будет наблюдаться при d_2 , удовлетворяющем требованию:

$$2d_2 n_1 / \lambda = (m+2)/2 + \chi . \tag{1.61}$$

Разница расстояний между поверхностями для соседних полос равна:

$$d_2 - d_1 = (m+2) \frac{\lambda}{4n_1} - m \frac{\lambda}{4n_1} = \frac{\lambda}{2n_1}.$$
 (1.62)

Расстояние между полосами равно a, тогда угол между двумя поверхностями определяется согласно выражению:

$$tg \alpha = \frac{\lambda}{2an_1} \,. \tag{1.63}$$

Теперь рассмотрим интерференцию между плоскостями 1 и 3. Экстремум интерференции для m-ой полосы также определяется соотношением (1.60). Так как расстояние 1-3 больше чем 1-2 на высоту ступеньки d_0 , то полоса сдвигается на расстояние a', определяемое выражением:

$$a' = \frac{d_0}{tg \alpha} \,. \tag{1.64}$$

Из (1.63) и (1.64) следует, что высота ступеньки связана со сдвигом полос:

$$d_0 = \frac{a'}{a} \frac{\lambda}{2n_1} \,. \tag{1.65}$$

Пользуясь данным выражением, можно определить высоту ступеньки либо показатель преломления малого объема среды n_1 при известном d_0 .

Метод интерферометрии достаточно стар. Однако его простота дает возможность использовать его для быстрого анализа образца. Подробнее метод интерферометрии наряду с другими методами анализа тонких слоев рассмотрен в [5].

1.3.2 Эллипсометрический анализ поверхности

Эллипсометрический метод основан на соотношениях, подробно описанных в пункте 1.2.4. Метод был предложен еще Друде и, можно сказать, является завидным долгожителем. Современное эллипсометрическое оборудование во многом отличается от классического эллипсометра, а количество методик эллипсометрического анализа очень велико [8]. Однако принципы, заложенные в начале века, остаются неизменными.

В классической эллипсометрии параметры поляризации света при отражении света от поверхности образца определяются с помощью приборов, называемых эллипсометрами. Оптическая схема типичного эллипсометра, выполненного по схеме PQSA (поляризатор — компенсатор — образец — анализатор) с фиксированным компенсатором, представлена на рисунке 1.8.

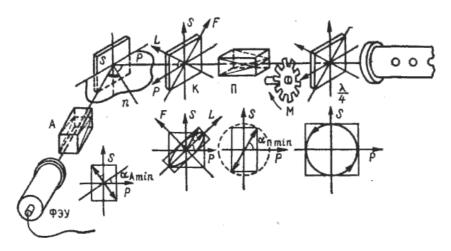


Рисунок 1.9 – Оптическая схема эллипсометра.

Вся конструкция эллипсометра может быть условно разделена на две части: плечо поляризатора, куда входят элементы оптической схемы до образца S (по ходу распространения луча света), и плечо анализатора, содержащее элементы оптической схемы после образца. Источник монохроматического излучения, в качестве которого сейчас используются квантовые оптические генераторы (лазеры), располо-

жен в плече поляризатора. Световое излучение на выходе лазера поляризовано линейно, поэтому в рассматриваемой схеме сразу после источника света поставлена четвертьволновая пластина, ориентированная таким образом, что луч света, прошедший через пластину, становится поляризованным циркулярно.

Модулятор излучения M, изготовленный в виде диска с прорезями, превращает непрерывный световой поток в переменный, что облегчает усиление и последующую регистрацию полезного сигнала, снимаемого с выхода фотоэлектронного умножителя (ФЭУ).

Перед тем как попасть на светочувствительный датчик (ФЭУ), лазерное излучение проходит последовательно через поляризатор Π (P), компенсатор K (Q) и затем, отразившись от поверхности образца S, через анализатор A. Выбранная таким образом последовательность элементов и определила название оптической схемы — PQSA.

Поляризатор, анализатор и компенсатор установлены на лимбах, позволяющих фиксировать угол их поворота (азимут) относительно плоскости падения пучка света с высокой точностью. Наиболее распространен нулевой способ измерения параметров поляризации, который и рассмотрим более подробно.

Если рассмотреть эллипсометр с компенсатором, то при отражении света от любого образца всегда существует 32 комбинации положений поляризатора, анализатора и компенсатора, при которых на приемник падает минимальная освещенность. Расчет параметров поляризации производится из двух комбинаций. При этом один из элементов (поляризатор, анализатор или компенсатор) остается неподвижным (обычно это компенсатор с азимутом $\pm 45^{\circ}$). В случае схемы PQSA с фиксированным компенсатором для расчета параметров могут быть следующие формулы (выведены при анализе модели отражения света в PQSA системе):

$$\Delta = -arctg \left[ctg \left(2P - 2P_0 \right) \right], \tag{1.66}$$

$$\Psi = arctg \left| ctg \left(A - A_0 \right) \right| , \qquad (1.67)$$

где A и P — положения анализатора и поляризатора при измерении, A_0 и P_0 — положения поляризатора и анализатора, при котором их плоскость поляризации совпадает с плоскостью падения луча. В [5] и [6] даются выражения для расчета углов Ψ и Δ по двум измерениям, уменьшающие влияние некоторых методических погрешностей.

После определения углов Ψ и Δ определяют желаемые параметры образца. Используя формулы (1.57) и (1.58) можно легко рассчитать оптические параметры полубесконечной среды (подложки). Для определения параметров пленок могут быть использованы различные аналитические выражения, соответствующие различным упрощениям или определенным классам образцов, либо номограммы, предназначенные для определенных комбинаций 6-и из 8-ми параметров функции (1.55) (общий вид номограммы показан на рисунке 1.10). Однако для наиболее точного определения параметров пленок необходимо решить так называемую *обратную задачу эллипсометрии*, т.е. численно решить уравнение (1.52).

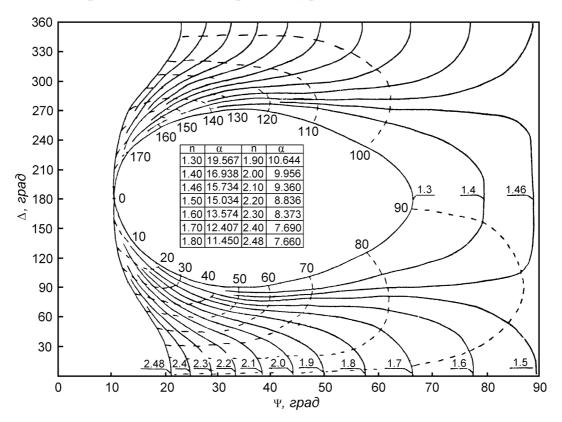


Рисунок 1.10 – Общий вид номограммы для определения толщины и показателя преломления непоглощающей пленки.

Практические приложения эллипсометрии, демонстрирующие высокую эффективность данного метода для исследования наноструктур, можно условно разделить на следующие направления:

- определение толщины сверхтонких прозрачных слоев;
- определение толщины переходного слоя пленка-подложка;
- количественная оценка структурных свойств слоев (в частности пористости) по показателю преломления;
- исследование состава слоев по показателю преломления.

1.3.3 Колебательная спектроскопия

Колебательные спектры молекул экспериментально изучаются методами инфракрасной (ИК) спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) света (в зарубежной литературе явление КР света и спектры КР называют Raman—effect и Raman—spectra [9]). Эти спектры связаны с пере-ходами между колебательными энергетическими состояниями или, в классической интерпретации, с колебаниями атомных ядер относительно равновесных положений и определяются строением молекулы.

Достоинством методов колебательной спектроскопии является то, что они допускают исследование практически любого неорганического или органического вещества в любом агрегатном состоянии — газе, жидкости, растворах, кристаллах или аморфной фазе.

Метод ИК-спектроскопии основан на изучении колебательно-вращательных спектров. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом приводит к изменению энергии молекулы. Этот эффект проявляется в спектре вещества.

Спектры комбинационного рассеяния (КР) связаны с электронной поляризацией под действием УФ и видимого излучения. Когда молекула облучается монохро-

матическим светом с частотой ω_{θ} , в результате индуцируемой этим падающим светом электронной поляризации она рассеивает излучение как с частотой ω_{θ} (релеевское рассеяние), так и с частотами $\omega_{\theta} \pm \omega$ (комбинационное рассеяние), где ω – колебательная частота [10].

Рис. 1.11 иллюстрирует квантовомеханическое объяснение обычного и резонансного комбинационного рассеяния. В случае обычного рассеяния энергия возбуждающего излучения гораздо ниже той, которая требуется для перехода в первое возбужденное состояние. Во втором случае энергия возбуждающего излучения выше энергии перехода.

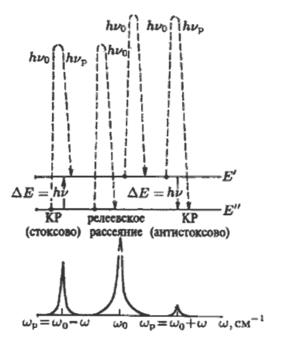


Рисунок 1.11 — Схема возникновения рэлеевского и комбинационного рассеяния.

Спектры КР строятся относительно пика используемого возбуждающего излучения. Такие спектры несут информацию о наличии и плотности определенных молекулярных связей в образце (рис. 1.12 [9]). Качественный анализ по ИК— и КР спектрам проводится с целью идентификации чистых веществ или для определения степени чистоты. К области качественного анализа относится также установление структуры вещества.

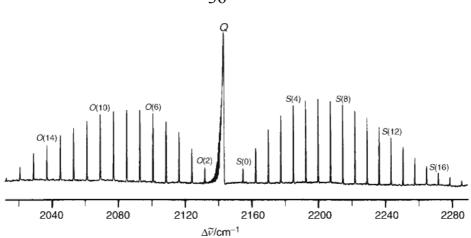


Рисунок 1.12 – Вибрационный КР спектр СО.

ИК-спектр молекулы представляет собой ряд узких полос поглощения, каждая из которых соответствует определенному колебанию какой-либо группы атомов. Отнесение отдельных колебаний к определенным полосам поглощения в спектре проводят на основании общих закономерностей вероятных частот различных типов колебаний (рис. 1.13). Путем сопоставления ИК-спектров, структуры химических соединений и теоретических расчетов доказано, что у определенных атомных групп, входящих в различные молекулы, колебания атомов отличаются незначительно, т.е. мало зависят от того, в какое соединение входит данная группа атомов. Такие полосы поглощения называют характеристическими.

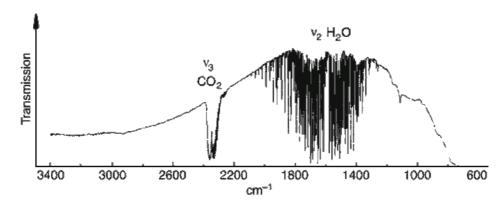


Рисунок 1.13 — ИК-спектр пропускания воздуха (видны характерные линии связей молекул CO_2 и H_2O).

В области ниже 1600 см⁻¹ проявляются полосы поглощения, обусловленные растяжением одинарных связей (С-С, С-N, С-О и т.д.), а также деформацией угла между связями. Силы всех одинарных связей приблизительно одного порядка. Низкочастотная область инфракрасного спектра (1300–650 см-1) известна как «область

отпечатков пальцев» («finger print») – каждое соединение имеет в этой области свою специфическую спектральную кривую.

Частота колебаний атомов в молекуле зависит от их массы и силы связи. Чем сильнее связь и меньше масса атома, тем выше частота поглощения данной связи, т.е. больше энергии надо затратить на изменение колебаний. При переходе от одинарной связи к двойной и тройной соответственно возрастают частоты валентных колебаний от 700–1500 до 1600–1800 и до 2000–2500 см⁻¹.

ИК-спектроскопия позволяет проводить по спектрам не только качественный, но и количественный анализ. Для оптических спектров имеются общие законы поглощения, излучения, дающие соотношение между величиной поглощения и количеством поглощающего вещества.

Количественный анализ с помощью ИК—спектров можно проводить, используя закон Бугера—Ламберта—Бера, связывающий интенсивности монохроматического светового потока без исследуемого поглощающего вещества I_0 и светового потока при поглощении света искомым соединением I, с молярным коэффициентом поглощения ε (л/моль·см) поглощающего вещества, концентрацией вещества в образце C (моль/л) и толщиной слоя d (см):

$$I = I_0 \exp(-\varepsilon C d) . \tag{1.68}$$

Либо в логарифмической форме:

$$-\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = D = \varepsilon C d, \qquad (1.69)$$

где величина D называется оптической плотностью.

При использовании выражения (1.69) в реальной практике сложно точно определить величину I_0 . Для точного ее определения требуется однозначно определить вид спектра без исследуемого пика. В большинстве случаев рекомендуется «срезать» пик по касательной и использовать проведенную прямую (базовую линию) для определения интенсивности I_0 (рис. 1.14) [11]. Данный метод дает простой

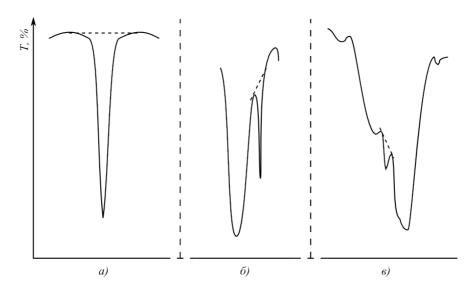


Рисунок 1.14 - Проведение базовой линии для исследуемой линии: a - одиночная линия, b - две близко лежащие полосы, b - сложное перекрытие полос.

инструмент количественной оценки, однако, в случае сложного перекрытия полос, подобная аппроксимация неоправдана (рис. 1.14.в).

Количественный анализ по спектрам КР основывается на прямой пропорциональности интенсивности I линий КР числу молекул N в единице объема, т.е. на зависимости вида:

$$I = ik N, (1.70)$$

где i — интенсивность рассеиваемого света на одну молекулу, k — коэффициент, зависящий от условий эксперимента (оптических характеристик прибора, спектральной чувствительности приемника и т.д.).

Использование этой зависимости на практике затруднено, прежде всего, из-за сложности нахождения k. Учитывая, что для всех линий спектров КР, полученных в одних и тех же условиях эксперимента на одной и той же установке, коэффициент k остается постоянным, реализуют возможность определения относительных величин.

1.3.4 Электронно-оптическая спектроскопия

Электронно-оптическая спектроскопия используется как метод исследования оптических и электрических параметров, а также толщин тонких пленок.

Группа методов ЭО спектроскопии охватывает оптические спектры в видимой, ультрафиолетовой и ближней ИК-областях, связанные с переходами между различными электронными состояниями атомов и молекул. Излучение, возникающее при переходах возбужденных атомов в основное электронное состояние, дает линейчатый спектр, используемый для качественного и количественного элементного анализа.

Если говорить о молекулярных электронных спектрах, то такие эмиссионные спектры при высокотемпературном возбуждении могут быть получены в основном только для достаточно прочных простых молекул. Электронные спектры многоатомных молекул исследуются обычно как спектры поглощения или спектры люминесценции. Первые возникают в результате переходов из основного электронного состояния в возбужденные за счет поглощения квантов электромагнитного излучения из сплошного спектра источника, а вторые — в результате перехода молекулы из возбужденного состояния в основное с испусканием электромагнитного излучения. В этом релаксационном процессе предусматривается предварительный перевод молекул в возбужденное состояние.

Оптическая область электромагнитного спектра, в которой наблюдаются электронные переходы, охватывает интервал длин волн от ~120 нм, т.е. от жесткого УФ-излучения, до ~1200 нм, т.е. теплового излучения ближней ИК-области; это соответствует волновым числам ~80 000 до ~8000 см⁻¹ (энергиям от ~10 до ~1 эВ). Границей видимой и УФ-областей считают 400 нм, а видимой и ИК-областей – 750 нм. Ниже 180 нм лежит далекая или вакуумная УФ-область, так как при этой длине волны начинается поглощения излучения атмосферным кислородом, а ниже 160 нм – азотом, и возникает необходимость в вакуумных спектрометрах. Для исследования всей указанной области в каждой ее части необходима своя техника эксперимента, включая различные источники, приемники излучения и т.д. Виды основных компонентов спектрометров для разных диапазонов представлены в таблице 1.2 [9].

Tаблица 1.2 — Элементы спектрометрического оборудования в разных спектральных областях.

Спектральная область	Источник	Кювета	Диспергирующий элемент	Детектор	
Микроволновая	Клистрон, лампа обратной волны	Слюда	Нет	Полупроводни-ковый диод	
Миллиметровая	Клистрон, лампа обратной волны	Слюда, полимер	Нет	Полупроводни- ковый диод, термопара, пироэлектрик, болометр, ячейка Голлея	
Дальняя ИК	Ртутная дуга	Полимер	Дифракционная решетка, интерферометр	Полупроводни- ковый диод, термопара, пироэлектрик, болометр	
Средняя и ближ- няя ИК	Нить Нернста, глобар	NaCl или KBr	Дифракционная решетка, интерферометр	Полупроводни- ковый диод, термопара, пироэлектрик, болометр, фотопроводящий полупроводник	
Видимый свет	Вольфрамовая нить, ксеноновая дуга	Стекло	Призма, дифракционная решетка, интерферометр	Фотоумножитель, фотодиод, фотопластина	
Ближняя УФ	Дейтериевый разряд, ксеноновая дуга	Кварц	Призма, дифракционная решетка, интерферометр	Фотоумножитель, фотодиод, фотопластина	
Дальняя УФ	Микроволновый разряд в инертных газах, лаймановский разряд	LiF	Дифракционная решетка,	Фотоумножитель, фотодиод, фотопластина	

Проводить идентификацию какого-то неизвестного вещества, опираясь толь-ко на его спектр в видимой и УФ-областях, невозможно. В то же время метод абсорбционной ЭО спектроскопии часто может служить хорошим дополнением и в сочетании с другими методами, например ИК, ЯМР и масс-спектроскопии, способствовать надежной идентификации и установлению строения исследуемых веществ.

При качественном анализе необходимо исследовать спектры пробы в широкой области длин волн. Задача определения состава многокомпонентной системы по УФ–спектрам поглощения является весьма сложной и требует специальных математических методов количественной обработки спектральных кривых.

Количественный анализ по электронно оптическим спектрам весьма затруднителен вследствие эффектов, описанных в разделе 1.1.5. Однако ЭО спектры применяются для определения электрических параметров, таких как ширина запрещенной зоны.

Количественный анализ по УФ-спектрам проводится так же, как и по ИК и КР спектрам. То есть измерение интенсивности в электронных спектрах поглощения в видимой и УФ-областях основывается на законе Бугера-Ламберта-Бера (1.69).

1.3.5 Спектральный анализ по методу Крамерса-Кронига

Метод Крамерса-Кронига является аналитическим приложением к спектроскопическим методам исследования. В применении к спектроскопии пропускания использование соотношений Крамерса-Кронига (1.27, 1.28) позволяет рассчитать показатель преломления образца по спектру поглощения, используя соотношения (1.18) и (1.19). К сожалению, как показывает практика, данное приложение не всегда эффективно в следствие невозможности полного учета доли отраженного излучения.

Более перспективным является приложение метода к спектроскопии отражения [3]. В случае использования спектроскопии отражения для получения исходных данных следует рассмотреть связь энергетического коэффициента отражения (определяется экспериментально) с оптическими параметрами образца:

$$R = |r|^2 = \rho^2 \,, \tag{1.71}$$

$$r(\omega) = \sqrt{R(\omega)} e^{i\theta(\omega)}, \qquad (1.72)$$

где $R(\omega)$ — экспериментально наблюдаемый коэффициент отражения, $\theta(\omega)$ — фаза, определяемая с использованием выражения (1.30).

В общем случае при рассмотрении отражения света от поверхности, луч разделяется на две составляющие, характеризующиеся разными коэффициентами отражения: r_p (колебания электрического вектора в плоскости падения луча) и r_s (колебания перпендикулярно плоскости падения). При этом составляющие определяются соотношениями Френеля (1.7, 1.8), и суперпозиция характеризуется выражением:

$$r(\omega) = \sqrt{\frac{r_p^2(\omega) + r_s^2(\omega)}{2}}.$$
 (1.73)

Расчет параметров образца (определение зависимости $N(\omega)$) может быть произведен на основе экспериментально полученного спектра отражения с помощью приведенных соотношений. Однако подобное решение не может быть найдено аналитическими методами, а также осложнено неоднозначностью определения фазы комплексного корня в выражении (1.73).

Наиболее простой вид зависимость $r(\omega) = f(N(\omega))$ имеет в случае нормального падения луча на поверхность образца ($\varphi_0 = 0$) в воздушной среде ($n_0 = 1$). При этом соотношения (1.7, 1.8, 1.73) сводятся к формуле вида:

$$r(\omega) = r_p(\omega) = r_s(\omega) = \sqrt{R(\omega)} e^{i\theta(\omega)} = \frac{N-1}{N+1}.$$
 (1.74)

Для n и k получим в таком случае можно получить следующие выражения:

$$n(\omega) = \frac{1 - R(\omega)}{\left(1 - \sqrt{R(\omega)}\right)^2 + 4\sqrt{R(\omega)}\sin^2\frac{\theta(\omega)}{2}},$$
(1.75)

$$k(\omega) = \frac{2\sqrt{R(\omega)}\sin\theta(\omega)}{\left(1 - \sqrt{R(\omega)}\right)^2 + 4\sqrt{R(\omega)}\sin^2\frac{\theta(\omega)}{2}}.$$
 (1.76)

Также более пригодны для практических вычислений выражения, получаемые при условии применения поляризованного излучения. В данном случае для вполяризованного излучения имеем:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) = n_0 \sqrt{1 - \frac{4\sqrt{R_s(\omega)}e^{i\theta(\omega)}}{\left[1 + \sqrt{R_s(\omega)}e^{i\theta(\omega)}\right]^2}\cos^2\varphi_0}.$$
 (1.77)

Это выражение можно представить в виде системы уравнений для n и k без использования комплексных величин:

$$n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi_0 = a^2 - b^2$$
, $n \cdot k = a \cdot b$, (1.78)

$$a = \frac{\left(1 - R_s(\omega)\right)\cos\varphi_0}{1 + R_s(\omega) - 2\sqrt{R_s(\omega)}\cos\theta(\omega)} , b = \frac{-2\sqrt{R_s(\omega)}\sin\theta(\omega)\cos\varphi_0}{1 + R_s(\omega) - 2\sqrt{R_s(\omega)}\cos\theta(\omega)}.$$
 (1.79)

Для p-поляризованного света $N(\omega)$ находится как решение биквадратного уравнения:

$$N^{4}(\omega) \left(\frac{1 - \sqrt{R_{p}(\omega)} e^{i\theta(\omega)}}{1 + \sqrt{R_{p}(\omega)} e^{i\theta(\omega)}} \right)^{2} \cos^{2} \varphi_{0} - N^{2}(\omega) n_{0}^{2} - n_{0}^{4} \sin^{2} \varphi_{0} = 0.$$
 (1.80)

Вычисление спектра фазы из соотношений Крамерса-Кронига

Основной задачей, которую необходимо решить для определения спектров оптических постоянных, является расчет спектра фазы $\theta(\omega)$ по экспериментально полученному спектру отражения. При выполнении этой операции возникают различные сложности.

При вычислении фазы $\theta(\omega)$ из спектра отражения, интеграл (1.30) можно разбить на три участка:

$$\theta(\omega_r) = \frac{2\omega_r}{\pi} \int_0^{\omega_1} \frac{\ln \rho(\omega')}{\omega'^2 - \omega_r^2} d\omega' + \frac{2\omega_r}{\pi} P \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{\ln \rho(\omega')}{\omega'^2 - \omega_r^2} d\omega' + \frac{2\omega_r}{\pi} \int_{\omega_2}^{\infty} \frac{\ln \rho(\omega')}{\omega'^2 - \omega_r^2} d\omega' =$$

$$= \theta_1(\omega_r) + \theta_2(\omega_r) + \theta_3(\omega_r)$$

$$(1.81)$$

Средний член суммы ($\theta_2(\omega_r)$) относится непосредственно к спектру отражения, полученному экспериментально, а $\theta_1(\omega_r)$ и $\theta_3(\omega_r)$ — к частотам, при которых измерение не проводилось. Нахождение интеграла в области измерения является вычислительной задачей и при должном подходе не представляет значительной трудности.

Наибольшие же трудности представляют оценки $\theta_1(\omega_r)$ и $\theta_3(\omega_r)$. Данная проблема рассматривается в множестве работ. Существуют варианты, предлагающие экстраполяцию спектра отражения постоянными значениями на концах наблюдаемо-

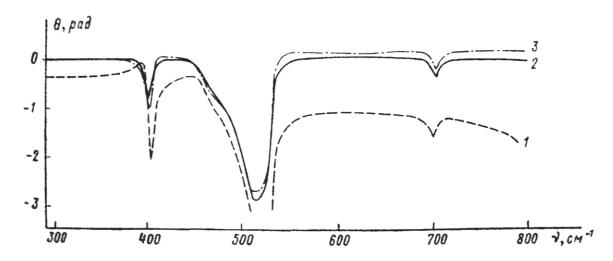


Рисунок 1.15 — Пример спектра фазы $\theta(\omega)$: 1 - спектр фазы, рассчитанный при экстраполяции исходного спектра постоянными значениями на концах интервала; 2 - «истинный» спектр, рассчитанный по точным значениям n u k; 3 - спектр, рассчитанный только по данным интервала наблюдения.

го интервала, применение различных полиномиальных и степенных функций, а также применение теории элементарных осцилляторов для моделирования данных спектральных зон. Так как не существует единственно верного способа оценки этих величин, для разных классов материалов экстраполяция спектра отражения за пределы измеренного интервала должна производиться с учетом примерной структуры образца. Уточнение вида модельных функций и значений их параметров производится с помощью привязочных точек, для которых значения фазового угла известны из независимых соображений (например, во всей области высокой прозрачности фазовый угол по определению равен нулю) или измерений. Известно, что в целом результаты применения метода Крамерса-Кронига весьма чувствительны к локальным ошибкам анализируемого спектра отражения. Наличие таких ошибок может привести к получению ложных экстремумов в спектрах оптических постоянных [2]. Впрочем, как показано в [3], при достаточно большой ширине наблюдаемого спектра, вычисление спектра фазы только по данным интервала дает достаточно малую ошибку, и применение простых вариантов экстраполяции только искажает результат (рис. 1.15).

В [12] приводятся результаты исследования влияния типа экстраполяции спектра на результаты анализа. Этот анализ показывает, что выбор метода экстрапо-

ляции спектра влияет на форму результирующей кривой в основном в краевых областях спектра. Однако абсолютные значения, получаемые при анализе, сильно зависят от значения членов $\theta_I(\omega_r)$ и $\theta_3(\omega_r)$. Данное обстоятельство в некоторой степени ограничивает применимость метода. Из сказанного следует, что полученные в результате вычислений спектры необходимо корректировать хотя бы по одной известной точке. При обработке спектров поглощения с применением соотношений (1.27, 1.28) проблема нахождения абсолютного значения n стоит еще более остро.

Получаемые с помощью метода Крамерса-Кронига результаты целиком ограничиваются спектрами оптических постоянных. Если исследователю нужно найти не только спектры оптических постоянных как таковые, но также значения частот и интенсивностей полос, перекрывающихся между собой в сложном спектре мнимой части диэлектрической проницаемости, он должен разложить этот спектр на такие индивидуальные полосы с помощью уже какого-то другого, независимого метода разложения. В этом случае итоговая погрешность расчета параметров полос будет равна сумме погрешностей метода вычисления оптических постоянных (в частности, метода Крамерса-Кронига) и метода разложения сложного спектра.

1.3.6 Метод дисперсионного анализа

Метод дисперсионного анализа может применяться как к спектру коэффициента отражения $R(\omega)$, так и к спектру коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$. В методе дисперсионного анализа той независимой дополнительной информацией, которая необходима для решения задачи вычисления оптических постоянных, является конкретная аналитическая модель дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости. Она выбирается исследователем среди имеющихся моделей как наиболее подходящая для исследуемого материала. С помощью модели дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости производится вычисление начального модельного спектра отражения или поглощения при произвольно взятых значениях параметров этой модели. Сущность вычислительной процедуры метода дисперсионного анализа состоит в минимизации отклонений модельного спектра от экспе-

риментального путем итерационного процесса последовательной вариации всех параметров модели. Впервые метод дисперсионного анализа был реализован в работе Спитцера и Клейнмана в 1961 году для спектров отражения кристаллов на основе классической модели дисперсии диэлектрической проницаемости, причем вариация параметров осуществлялась еще вручную методом проб и ошибок. В дальнейшем, естественно, был осуществлен переход к машинной вариации параметров по некоторому оптимальному алгоритму. В связи с этим потребовалось количественно характеризовать отклонения модельного спектра от экспериментального с помощью какой-либо функции невязки. Например, для случая анализа спектра отражения $R(\omega)$ удобно использовать [2] функцию невязки Q вида:

$$Q = \sqrt{\frac{1}{b-a} \int_{a}^{b} \left[R_{mod}(\omega) - R_{exp}(\omega) \right]^{2} d\omega}, \qquad (1.82)$$

где a и b — границы исследуемого спектра.

Можно видеть, что данная функция представляет собой среднеквадратичную ошибку, усредненную по всему анализируемому интервалу. Отсюда следует очевидное условие достижения наивысшего возможного качества подгонки анализируемого спектра:

$$Q < \Delta R_{\rm exp}, \qquad (1.83)$$

где Δr_{exp} — случайная ошибка экспериментального измерения.

Принципиальная схема работы компьютерной программы дисперсионного анализа приведена на рисунке 1.16, примеры качества аппроксимации экспериментальных спектров стекол, достигаемого с помощью метода дисперсионного анализа на основе модели свертки, приведены на рисунке 1.17. Несомненное достоинство метода дисперсионного анализа заключается в том, что и спектры оптических постоянных, и значения всех параметров полос сложного спектра рассчитываются, в отличие от метода Крамерса-Кронига, в ходе одной и той же вычислительной процедуры. Следовательно, погрешности расчета всех искомых величин определяются только погрешностью самой этой процедуры.

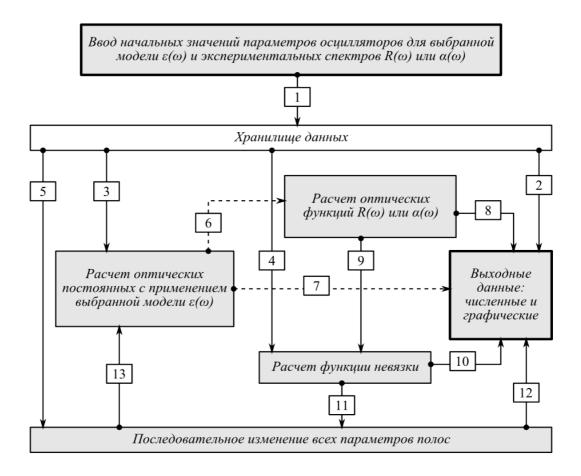


Рисунок 1.16 — Принципиальная схема работы компьютерной программы дисперсионного анализа. Цифры указывают последовательность шагов.

Важно также, что результаты применения метода дисперсионного анализа, в отличие от метода Крамерса-Кронига, практически нечувствительны к локальным ошибкам анализируемого спектра отражения. Существует множество различных версий метода дисперсионного анализа, различающихся как выбором конкретной модели дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости (и соответственно пригодностью для того или иного класса веществ), так и алгоритмами минимизации функции невязки.

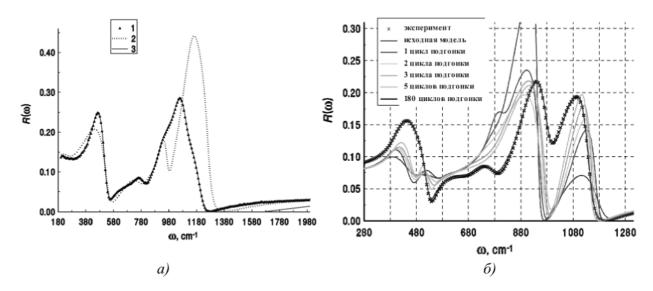


Рисунок 1.17 — Примеры обработки ИК спектров методом дисперсионного анализа: на рисунке а: 1 — экспериментальный спектр (точки), 2 — модельный спектр, построенный по начальным приближениям параметров, 3 — модельный спектр после завершения аппроксимации.

1.4 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как видно из рассмотренного выше, существует множество методов неразрушающего оптического анализа. Каждый из методов представляет свои преимущества и недостатки. Так, к примеру, анализ Крамерса-Кронига имеет множество преимуществ но нуждается в поддержке при коррекции абсолютных величин. Также, можно отметить, что при объединении возможностей спектроскопии разных спектральных областей можно перевести дисперсионные аналитические методики на новый уровень. А применение эллипсометрического метода для коррекции получаемых путем расчета данных является почти очевидным. Когда разные физические методы исследования используются совместно, они составляют чрезвычайно мощный инструмент; сочетание этих методов намного более ценно, чем сумма их индивидуальных достоинств.

В настоящее время существует огромное множество спектрометрической аппаратуры, однако производители за частую совершенно не заботятся о взаимной совместимости. Данное обстоятельство, наряду с отсутствием универсального аналитического инструментария, значительно осложняет объединение различных мето-

дик в комплекс. Безусловно, многие исследовательские лаборатории создают для себя инструментарий, а также грамотно строят стратегию оснащения оборудованием. В открытом доступе аналитический инструментарий размещается крайне редко. Посему создание комплекса алгоритмов анализа — отдельная забота каждой лаборатории.

Таким образом, можно обозначить следующие конкретные цели:

- Создание инструментария, включающего алгоритмы анализа данных оптических экспериментов;
- Объединение разных методов исследования в комплексную методику;
- Апробирование комплексной методики анализа в условиях лаборатории.

ГЛАВА 2. ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

2.1 ОБРАБОТКА ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Эллипсометрические исследования могут быть использованы как метод экспресс анализа или контроля структур на производстве. В случае исследования монолитных материалов обработка получаемых с эллипсометра данных сводится к решению системы уравнений (1.57, 1.58).

При анализе слоистых структур аналитическое выражение параметров отражающей системы из уравнения (1.52) невозможно, поэтому решается так называемая обратная задача эллипсометрии, которая заключается в численном моделировании конечного числа вариантов набора искомых параметров и сравнении результатов вычисления эллипсометрических углов с экспериментально измеренными.

Для решения данной задачи для модели однослойной пленки был разработан алгоритм на языке паскаль и приложение для ОС Windows (разработка велась в среде Borland Delphi 7 и Borland Development Studio 2006) (рис. 2.1). Листинг основных расчетных процедур программы приведены в приложении.

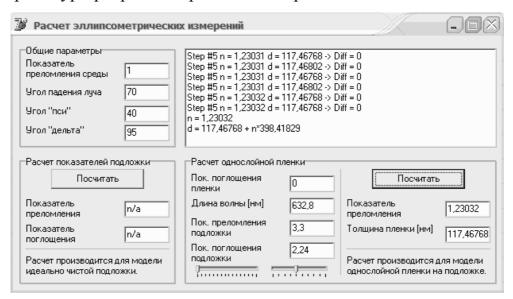


Рисунок 2.1 – Вид интерфейса ПО для эллипсометрического анализа.

Разработанный алгоритм построен по рекурсивно уточняющему принципу: на первом шаге поиск решения идет во всей области параметров d и n, на последующих шагах область сужается вокруг наиболее близко найденного решения предыду-

щего шага. Двумерная область параметров d и п разбивается на сетку с шагом, задаваемым пользователем как число разбиений сетки. В каждой точке сетки вычисляются значения углов Ψ и Δ и за решение текущего шага принимается точка с наименьшим отклонением, вычисляемым по формуле:

$$diff = \sqrt{(\psi - \psi_C)^2 + (\Delta - \Delta_C)^2}, \qquad (2.1)$$

где Ψ, Δ - параметры искомой точки; Ψ_C, Δ_C - параметры, вычисленные в текущей итерации.

Далее вокруг найденной точки выстраивается область для построения сети следующего шага. Очевидно, что при постоянном числе разбиений каждый следующий шаг на порядки уточняет значение найденной в предыдущем.

Логично предположить, что для зоны уточнения необходимо взять область, занимающую 4-ре клетки разбиения исходной сети. Этого было бы достаточно, если бы отклонения рассчитывались в координатах сети. Однако в связи с особенностями трансляции сети параметров d и n в координаты Ψ и Δ такой подход, как показали эксперименты, в множестве случаев создает зону уточнения не включающую искомую точку. Для решения данной проблемы был внедрен дополнительный блок кода, направленный на поиск четырех точек в сети разбиения d и n, которые при трансляции в координаты Ψ и Δ являлись вершинами четырехугольника охватывающего искомую точку. Согласно координат d и n этих точек и выбирается прямоугольная зона уточнения в координатах d, d0. Этой зоне соответствует область сложной формы в координатах d0 (рисунок 2.2).

Применение рекурсивного уточнения позволило добиться отклонения на уровне $1\cdot 10^{-5}$ после трех циклов уточнения при числе разбиений по n равном 25 (разбиение по d производится с переменной плотностью). При этом общее число итераций, включающих работу с комплексными числами, составляет около 15000. Для достижения подобной точности разбиением всей области параметров d и n потребовалось бы около 10^{14} итераций.

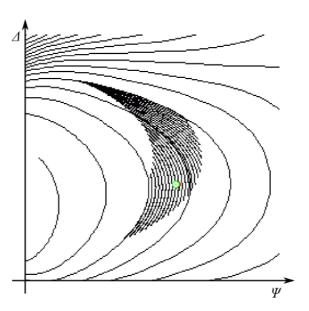


Рисунок 2.2 — Зона уточнения первого уровня в координатах $[\Psi, \Delta]$.

Разбиение по d изначально производилось с большей плотностью. Данный подход был обусловлен тем, что зависимость от этого параметра сильно неравномерна. Однако даже применение большей плотности оставляло в области номограммы «сложные места», в которых точность соответствия была низка. Результатом дальнейшей модернизации явилось внедрение алгоритма реактивного изменения шага разбиения по d. Был введен дополнительный блок, отслеживающий смещение рабочей точки в координатах Ψ , Δ и изменяющий на основе этих данных шаг разбиения. Таким образом, в случае большого смещения шаг уменьшается пропорционально норме продвижения, задаваемой для каждого уточнения, а в случае малого смещения шаг увеличивается. Внедрение алгоритма реактивного контроля позволило снизить время работы алгоритма в стабильных областях номограммы и исключить «сложные места» [13].

2.2 ОБРАБОТКА СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

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 обра-

ботки 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. Список разработанных процедур модуля обработки данных *SpectraParsers* представлен в таблице 2.1. 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 Фурьеспектрометра Infralum и поддерживаемый ПО от AvaSoft.

Таблица 2.1 – Процедуры обработки данных модуля SpectraParsers.

Имя процедуры	Описание			
Sp_PercInvert	Инверсия спектра, выраженного в процентах, $Y_1 = 100 - Y_0$. Используется для грубого преобразования «пропускание \leftrightarrow поглощение»			
Sp_ToEV, Sp_ToNM, Sp_ToCM	Преобразование абсциссы спектра в эВ, нм и см-1 соответственно.			
Sp_ToPerc, Sp_ToEnerg, Sp_ToAmpl	Преобразование ординаты спектра в проценты по интенсивности (энергии) излучения, доли по интенсивности и доли по амплитуде соответственно.			
Sp_ToACM	Преобразование ординаты спектра поглощения в α , см ⁻¹ .			
Sp_Reverse, Sp_Sort	Процедуры контроля порядка данных в массиве: «реверс» и сортировка.			
Sp_Trim	Обрезка спектра по оси абсцисс			
Sp_Norm	Нормировка спектра по оси ординат			
Sp_Link, Sp_Compose	Слияние и объединение спектров соответственно. Объединение может производиться сложением, вычитанием или отношением исходных спектров.			
Sp_Shift	Сдвиг спектра по оси абсцисс и оси ординат.			
Sp_FurFilter	Фильтрация с применением Фурье преобразований.			
Sp_KramersR	Алгоритм Крамерса-Кронига для спектра отражения, восстанавливает фазу показателя отражения.			
Sp_KramersA	Алгоритм Крамерса-Кронига для спектра поглощения, преобразует спектр α , см ⁻¹ в спектр комплексного показателя преломления.			
Sp_Frenel	Алгоритм преобразования комплексного спектра отражения в спектр оптических постоянных с применением соотношений Френеля.			

Основные алгоритмы обработки спектров не слишком сложны, однако принципы, заложенные в некоторые из наиболее сложных следует рассмотреть подробнее.

2.2.1 Обработка с использованием соотношений Крамерса-Кронига

Рассмотрим более подробно возможные сложности при интегрировании по (1.30). Как говорилось ранее, фактическое вычисление идет только в области измеренного спектра:

$$\theta_2(\omega_r) = \frac{2\,\omega_r}{\pi} P \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{\ln \rho(\omega')}{\omega'^2 - \omega_r^2} d\,\omega'. \tag{2.2}$$

Следует обратить внимание на разрыв подынтегрального выражения при ω_r . Согласно [3] в окрестности данной точки при линейной аппроксимации $\ln \rho(\omega)$ интеграл может быть вычислен следующим образом:

$$\int_{\omega_{r}-d\omega}^{\omega_{r}+d\omega} \frac{A(\omega')}{\omega'^{2}-\omega_{r}^{2}} d\omega' = -\frac{A(\omega_{r}+d\omega)-A(\omega_{r}-d\omega)}{2\omega_{r}}.$$
 (2.3)

Для дискретного набора значений при интегрировании будем применять линейную аппроксимацию $\ln \rho(\omega)$ в пределах интервала $\Delta\omega$ (интеграл в котором будем вычислять аналитически), при этом два ближайших к ω_r интервала объединим в один и применим к нему формулу (2.3) (параллельно добавив две точки в окрестности ω_r , используя линейную интерполяцию для определения значения логарифма в этих точках):

$$\theta_{r} = \frac{2\omega_{r}}{\pi} \left[\sum_{i=0}^{r-2} \int_{\omega_{i}}^{\omega_{i+1}} \frac{\ln \rho_{i} + \frac{\omega' - \omega_{i}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} \ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}}}{\omega'^{2} - \omega_{r}^{2}} d\omega' + \sum_{i=r+1}^{n-1} \int_{\omega_{i}}^{\omega_{i+1}} \frac{\ln \rho_{i} + \frac{\omega' - \omega_{i}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} \ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}}}{\omega'^{2} - \omega_{r}^{2}} d\omega' \right] + \theta_{r}^{*},$$

$$\theta_{r}^{*} = \frac{2\omega_{r}}{\pi} \frac{\ln \rho_{r-1} - \ln \rho_{r+1}}{2\omega_{r}}.$$
(2.4)

Приведем линейную аппроксимацию $ln \rho(\omega)$ к виду kx + b:

$$\ln \rho_{i} + \frac{\omega' - \omega_{i}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} \ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}} = \omega' \cdot \frac{\ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} + \ln \rho_{i} - \omega_{i} \cdot \frac{\ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}},$$

$$k = \frac{\ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}}, \quad b = \ln \rho_{i} - \omega_{i} \cdot \frac{\ln \frac{\rho_{i+1}}{\rho_{i}}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}}.$$

$$(2.5)$$

В таком случае интегралы по интервалам будут иметь следующее аналитическое решение (использован аналитический процессор Maxima 5.17.1):

$$\int_{\omega_{i}}^{\omega_{i+1}} \frac{k \cdot \omega' + b}{\omega'^{2} - \omega_{r}^{2}} d\omega' = -\frac{b \cdot \ln \left[\frac{(\omega_{r} - \omega_{i})(\omega_{r} + \omega_{i+1})}{(\omega_{r} + \omega_{i})(\omega_{r} - \omega_{i+1})} \right] + k \cdot \omega_{r} \cdot \ln \left[\frac{\omega_{r}^{2} - \omega_{i}^{2}}{\omega_{r}^{2} - \omega_{i+1}^{2}} \right]}{2\omega_{r}}.$$
(2.6)

Также следует заметить что подынтегральная функция в (2.2) имеет высокие абсолютные значения в области разрыва и низкие ближе к краям диапазона интегрирования. Так как в точке разрыва функция резко меняет знак, то области расположенные симметрично относительно данной точки будут во многом компенсироваться. Это нужно учитывать и при суммировании двигаться по диапазону не от края до края, а параллельно в обе стороны от точки ω_r , что позволит избежать ошибок возникающих вследствие особенностей представления чисел с плавающей точкой в современных ЭВМ (рис. 2.3) [14].

Описанный механизм используется при реализации процедуры $Sp_KramersR$ модуля SpectraParsers. Для обработки спектров пропускания согласно (1.27) (процедура $Sp_KramersA$) задача была проанализирована подобным образом и получены следующие соотношения:

$$n_{r} = \frac{2}{\pi} \left[\sum_{i=0}^{r-2} \int_{\omega_{i}}^{\omega_{i+1}} \frac{\omega' \left[k_{i} + \frac{\omega' - \omega_{i}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} (k_{i+1} - k_{i}) \right]}{\omega'^{2} - \omega_{r}^{2}} d\omega' + \sum_{i=r+1}^{n-1} \int_{\omega_{i}}^{\omega_{i+1}} \frac{\omega' \left[k_{i} + \frac{\omega' - \omega_{i}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} (k_{i+1} - k_{i}) \right]}{\omega'^{2} - \omega_{r}^{2}} d\omega' \right] + n_{r}^{*}, (2.7)$$

$$n_{r}^{*} = \frac{2}{\pi} \frac{\omega_{r-1} k_{r-1} - \omega_{r+1} k_{r+1}}{2 \omega_{r}}.$$

$$k_{i} + \frac{\omega' - \omega_{i}}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} \left(k_{i+1} - k_{i} \right) = \omega' \cdot \frac{\left(k_{i+1} - k_{i} \right)}{\omega_{i+1} - \omega_{i}} + \ln \rho_{i} - \omega_{i} \cdot \frac{\left(k_{i+1} - k_{i} \right)}{\omega_{i+1} - \omega_{i}},$$

$$k = \frac{\left(k_{i+1} - k_{i} \right)}{\omega_{i+1} - \omega_{i}}, \quad b = k_{i} - \omega_{i} \cdot \frac{\left(k_{i+1} - k_{i} \right)}{\omega_{i+1} - \omega_{i}}.$$

$$(2.8)$$

$$\int_{\omega_{i}}^{\omega_{i+1}} \frac{\omega'(k \cdot \omega' + b)}{\omega'^{2} - \omega_{r}^{2}} d\omega' = -\frac{k \cdot \omega_{r} \cdot \ln\left[\frac{(\omega_{r} - \omega_{i})(\omega_{r} + \omega_{i+1})}{(\omega_{r} + \omega_{i})(\omega_{r} - \omega_{i+1})}\right] + b \cdot \ln\left[\frac{\omega_{r}^{2} - \omega_{i}^{2}}{\omega_{r}^{2} - \omega_{i+1}^{2}}\right] + k \cdot (2\omega_{i} - 2\omega_{i+1})}{2}. \quad (2.9)$$

Интегрирование по (1.27) производится также согласно схеме, изображенной на рисунке 2.3.

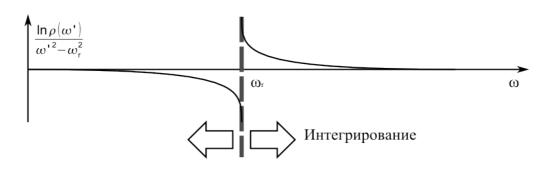


Рисунок 2.3 — Используемый в ПО порядок интегрирования для расчетов по методу Крамерса-Кронига.

2.2.2 Фильтрация с применением преобразований Фурье

При разработке приложения использована обычная схема дискретного преобразования Фурье, подробно изложенная в [15]. Фильтрация производится обрезкой Фурье-образа в частотной и амплитудной областях согласно заданным параметрам. Такая фильтрация хоть и грубо, но все же позволяет корректировать шумы.

Из особенностей примененного алгоритма стоит отметить специальную структуру дискретизации исходных данных. Так как данные спектра могут иметь неоднородный шаг по оси абсцисс, то возникают сложности при интегрировании, а также при восстановлении данных из отфильтрованного Фурье-образа. Для преодоления этих трудностей используется схема дискретизации с минимальным шагом и интерполяцией данных в более широких интервалах разбиения.

2.2.3 Обработка с применением соотношений Френеля

В процедуре Sp_Frenel модуля SpectraParsers реализован алгоритм обработки комплексного спектра коэффициента отражения с целью вычисления спектра оптических постоянных. Данный алгоритм расчета построен по итерационно уточняющему принципу подобно алгоритму анализа эллипсометрического отражения (рис. 2.4).

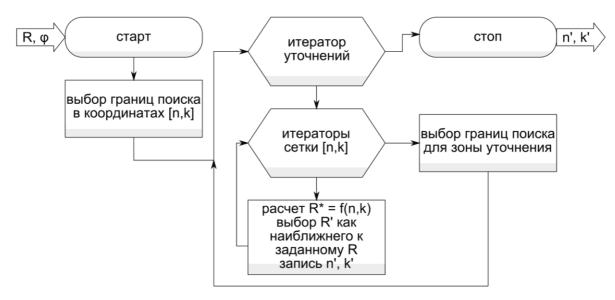


Рисунок 2.4 — Блок-схема алгоритма вычисления оптических постоянных с применением итерационного уточнения.

Исходный код данного алгоритма наравне с другими сложными процедурами представлен в приложении.

2.2.4 Интерфейс ПО

Интерфейс программного комплекса разрабатывался с учетом многих пожеланий операторов ЦКП по спектроскопии ТУСУР. Программа позволяет одновременно работать с несколькими спектрами, предоставляет удобный доступ к основным функциям через панель инструментов (рис. 2.5). Разработанное приложение является кроссплатформенным и может быть скомпилировано как для Windows так и для Linux или Macintosh OSX.

Программа поддерживает отображение 12 видов спектров с 3-мя типами оси абсцисс. В зависимости от типа спектра программа позволяет делать те или иные преобразования, также предусмотрен механизм ручной установки типа спектра для случаев неверного указания типа оборудованием (например, спектрометр Инфралюм не различает спектры отражения и пропускания, так как разница обусловлена только наличием механической приставки). Для сохранения данных используется специально разработанный формат файла, дающий возможность описания многокомпонент-

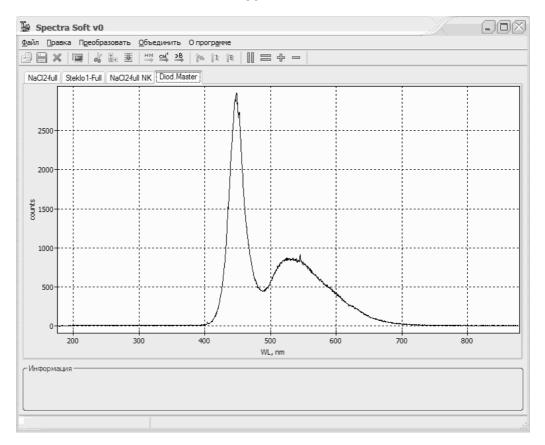


Рисунок 2.5 – Общий вид интерфейса SpectraSoft.

ного типизированного спектра с неограниченным количеством дополнительных информационных полей.

Для отображения информации используются специально разработанный компонент *SpecTabber*, реализующий систему вкладок с графиками. Для отображения графиков используется расширенный автором компонент TChart.

Приложение построено с применением строгой иерархии, что позволяет легко расширять его, добавляя новые алгоритмы анализа/преобразования. В частности, к внедрению готовится алгоритм полуавтоматического анализа электрических параметров материалов по оптическим спектрам, а также количественный анализатор для ИК спектров.

2.3 ПОБОЧНЫЕ ПРОДУКТЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

В ходе решения основных задач реализации и подробного изучения моделей процессов исследуется множество факторов, модулируются различные процессы и

т.д. Отметим некоторые побочные продукты, созданные в процессе разработки основной темы работы.

Одним из полезных продуктов можно считать разработанный алгоритм прямого моделирования эллипсометрического эксперимента. Данный алгоритм, оснащенный генератором погрешностей, был использован для построения компьютерного приложения, обучающего работе на эллипсометре (рис. 2.6). Это приложение позволяет развивать важные навыки работы с прибором (юстировка и измерения) без риска повреждения или расстройки реального прибора, либо при полном его отсутствии.

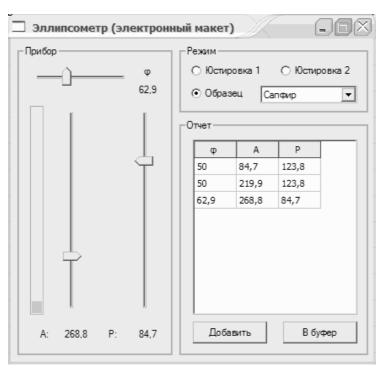


Рисунок 2.6 – Электронный макет эллипсометра.

Также с применением знаний, полученных в результате разработки темы, и указанного макета были разработаны методические указания для проведения лабораторных работ по дисциплине «исследование материалов».

ГЛАВА 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ

3.1 ПРИМЕНЕНИЕ БАЗОВЫХ АЛГОРИТМОВ

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.

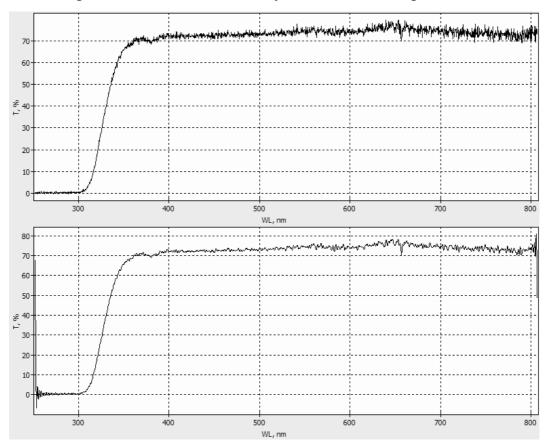


Рисунок 3.1 – Применение Фурье-фильтра.

Алгоритм фильтрации шума методом Фурье был испытан на различных типах спектров. Частотная фильтрация оказалась достаточно полезной при работе со

спектрами оптического диапазона, снимаемыми со спектрофотометра OceanOptics USB2000 (рис. 3.1). Как видно из рисунка, фильтрация снижает уровень шума, оставляя наиболее заметные пики.

Применение Фурье-фильтра к спектрам с резкими пиками (например, ИКспектры) показало неудовлетворительный результат, так как резкие переходы при этом сильно искажаются. Однако, в общем, данный метод может быть достаточно полезен в определенных ситуациях.

3.2 ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КРАМЕРСА-КРОНИГА

К сожалению, полностью испытать методику Крамерса-Кронига на данный момент не удалось в следствие ограничений материальной базы. Попытка смоделировать полное отражение при угле падения 45° (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 (рис. 3.2).

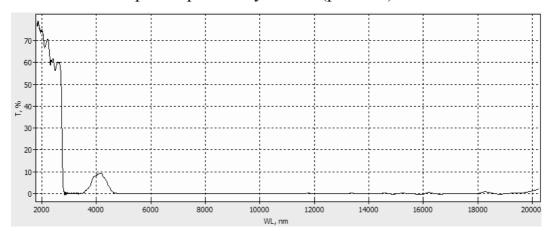


Рисунок 3.2 – ИК спектр пропускания поляризатора.

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

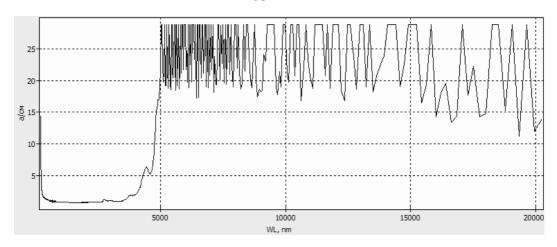


Рисунок 3.3—Спектр коэффициента поглощения кварцевого стекла. Отчетливо видно влияние шума в зоне малого пропускания.

после прохождения образца интенсивность света падает ниже уровня шума фотоприемника (рис. 3.3). На рисунке 3.4 показан спектр оптических постоянных, рассчитанный по доступному для анализа участку спектра поглощения, форма кривых хорошо согласуется с данными представленными в [2].

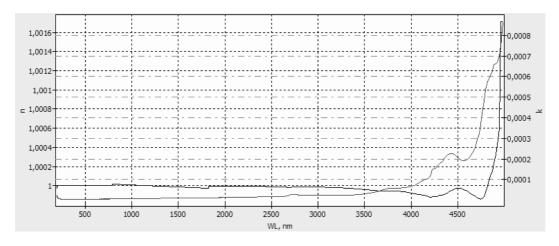


Рисунок 3.4— Спектр оптических постоянных кварцевого стекла, рассчитанный методом Крамерса-Кронига из спектра поглощения в области прозрачности.

3.3 ПРОБЛЕМЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Базовые алгоритмы разработанного приложения фактически направлены на объединение спектроскопического оборудования в комплекс и некоторую универсализацию процесса обработки. С отработкой применения этих методик никаких

проблем возникнуть практически не могло. Однако тестирование специальных алгоритмов анализа оказалось затруднительно вследствие недостаточных аппаратных возможностей, а именно:

- отсутствие возможности снятия спектров отражения при нормальном падении;
- отсутствие возможности поляризации излучения в ИК спектрометре;
- отсутствие возможности снятия спектров отражения в оптическом диапазоне;
- недостоверность спектроскопических данных при сильном поглощении.

Обобщая сказанное выше, следует отметить, что представленные выше примеры показывают общую состоятельность специальных методов анализа, реализованных в пределах проекта. Это позволяет применять разработанное ПО при анализе различных структур, показывает его общую полезность и применимость.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проделанной 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 *SpectraSoft*, 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. Отмечены и локализованы существующие в ЦКП проблемы реализации и применения оптических методов анализа, требующие первостепенного решения.

В процессе разработки темы созданы также побочные продукты:

- составлены методические указания для проведения лабораторных работ по эллипсометрии;
- создан электронный обучающий макет эллипсометра.

Все результаты и продукты данной работы применяются или будут применяться в ЦКП по спектроскопии ТУСУР.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000. 494 с.
- 2. Ефимов А.М. Оптические свойства материалов и механизмы их формирования. СПб: СПбГУИТМО, 2008. 103 с.
- 3. Власов А.Г., Флоринская В.А. Структура и физико-химические свойства неорганических стекол. Ленинград: Химия, 1974. 360 с.
- Денисова Н.А., Резвое А.В. О соотношениях Крамерса-Кронига для спектрального коэффициента отражения слоистой диспергирующей среды // Математическое моделирование, 1990, том 2, №6. С. 90 96
- 5. Шелпакова И.Р., Эделевич И.Г., Аюпов Б.М. Послойный анализ материалов электронной техники. Н.: Наука, 1984. 180 с.
- 6. Ржанов А.В. Некоторые проблемы физики и химии поверхности полупроводников. Н.: Наука, 1972. 250 с.
- 7. Смирнов С.В. Методы исследования материалов и структур электроники: Учебное пособие. – Томск: ТМЦДО, 2006. – 176 с.
- 8. Скалецкая И.Е. Введение в прикладную эллипсометрию: учебное пособие по курсу «ОПТИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ». СПб: СПБГУИТМО, 2007. 172 с.
- 9. Hollas J. M. MODERN SPECTROSCOPY. England: Wiley, 2004. 452 c.
- 10. Сущинский М.М. Спектры комбинационного рассеяния молекул и кристаллов. М.: Наука, 1969. 576 с.
- 11. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия: Пер. с англ. М.: Мир, 1982. 328 с.
- 12. Соловьева Г.С., Либов В.С. О методе применения соотношения Крамерса-Кронига для расчета оптических постоянных конденсированных сред из спектра отражения // Оптика и спектроскопия, 1972, том XXXIII, №3. — С. 513 - 519

- 13. 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
- 14. 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
- 15. Жуков А.И. Метод Фурье в вычислительной математике. М.: Наука, $1992.-176~\mathrm{c}.$

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Процедуры обработки спектров модуля SpectraParsers (обязательное)


```
function Sp_Compose(var Data: TSpectraPoints; OnData: TSpectraPoints; cType:
               TSComposeType = scPerc; complType: TSComplexType = sctNone): boolean;
 i, l, l1: integer;
 tmp, tmp1: complex;
 lastJ: integer = 1;
 lastX: double = 0;
 function OnDataVal(x: double): complex;
    j, js: integer;
   y, y1: double;
   doExit: boolean;
 begin
    if x > lastX then
     js:= lastJ
   else
     js:= 1;
    for j:= js to l1 do
      if (OnData[j].X > x) or (j = 11) then begin
        lastX:= x; // minimizing the time used
        lastJ:= j;
        y := OnData[j-1].Y + (OnData[j].Y - OnData[j-1].Y) *(x - OnData[j-1].X)/
               (OnData[j].X - OnData[j-1].X);
        y1:= OnData[j-1].Y1 + (OnData[j].Y1 - OnData[j-1].Y1)*(x - OnData[j-1].X)/
               (OnData[j].X - OnData[j-1].X);
        case complType of
          sctNone: Result:= y;
          sctPhase: Result:= cnewma(y, y1);
          sctIm: Result:= cnew(y, y1);
        end;
        exit;
      end;
 end;
begin
 1:= length(Data) - 1;
 11:= length(OnData) - 1;
 Sp_Sort(Data);
 Sp_Sort(OnData);
 for i:= 0 to 1 do begin
   case complType of
      sctNone: tmp:= Data[i].Y;
      sctPhase: tmp:= cnewma(Data[i].Y, Data[i].Y1);
     sctIm: tmp:= cnew(Data[i].Y, Data[i].Y1);
   end;
   case cType of
     scPerc: begin
        tmp1:= OnDataVal(Data[i].X);
        if cmod(tmp1) > 0 then
```

```
tmp:= tmp/OnDataVal(Data[i].X)
        else
          tmp:= 1;
      end;
      scSubst: tmp:= tmp - OnDataVal(Data[i].X);
      scAdd: tmp:= tmp + OnDataVal(Data[i].X);
    end;
    case complType of
      sctNone: Data[i].Y:= tmp.re;
      sctPhase: begin
        Data[i].Y:= cmod(tmp);
        Data[i].Y1:= carg(tmp);
      sctIm: begin
        Data[i].Y:= tmp.re;
        Data[i].Y1:= tmp.im;
     end;
    end;
  end;
  Result:= true;
end;
 Листинг А.2 – Процедура Фурье-фильтра
function Sp_FurFilter(var Data: TSpectraPoints; aLevel: double = 0; fLevel: double =
               0): boolean;
begin
 Result:= Sp FurFilter(Data, aLevel, fLevel, @Dummy.foo);
function Sp_FurFilter(var Data: TSpectraPoints; aLevel: double; fLevel: double;
               CallBack: TCallBack): boolean;
 i, l, l1, k: integer;
 outData: TSpectraPoints;
  furData: array of complex;
 xMin, xMax, xCur: double;
 xDelta: double;
  kAmpl: integer;
  nOmega, cOmega, fTmp: double;
  tmp: complex;
  fAmpl: double;
  itr: integer;
  lastJ: integer = 1;
  lastX: double = 0;
```

function DataVal(x: double; secAxis: boolean = false): double;

if (Data[j].X > x) or (j = 1-1) then begin

var

begin

else

js:= 1;

j, js: integer; y, y1: double; doExit: boolean;

if x > lastX then js:= lastJ

for j:= js to 1-1 do

```
lastX:= x; // minimizing the time used
        lastJ:= j;
        if secAxis then
          Result:= Data[j-1].Y1 + (Data[j].Y1 - Data[j-1].Y1) *(x - Data[j-1].X)/
                (Data[j].X - Data[j-1].X)
        else
          Result:= Data[j-1].Y + (Data[j].Y - Data[j-1].Y) *(x - Data[j-1].X)/
               (Data[j].X - Data[j-1].X);
        exit;
      end;
  end;
begin
  itr:= CBonItr;
  Result:= false;
  Sp Sort(Data);
 1:= length(data);
 xMin:= Data[0].X;
  xMax:= Data[1-1].X;
  //Sp_Shift(Data, -xMin);
 xDelta:= Min(Data[1].X - Data[0].X, Data[1-1].X - Data[1-2].X);
  //xDelta:= (Data[1].X - Data[0].X + Data[1-1].X - Data[1-2].X + 6*xDelta)/8;
 nOmega:= pi/xDelta;
  kAmpl:= round((xMax - xMin)/xDelta) div 2;
 SetLength(furData, 2*kAmpl+1);
 fAmpl:= 0;
  for k:= -kAmpl to kAmpl do begin
    cOmega:= nOmega*k/kAmpl;
    furData[k+kAmpl]:= 0;
    tmp:= 0;
    if abs(cOmega) < nOmega*(1-fLevel) then begin // frequency filter
      xCur:= xMin;
      while xCur < xMax do begin
        // iterational control
        itr -= 1;
        if (itr < 0) then begin
          if not CallBack((k+kAmpl)/(4*kAmpl)) then
            exit
          else
            itr:= CBonItr;
        end;
        tmp:= tmp + DataVal(xCur)*cexp(cnew(0, -cOmega*xCur));
        xCur+= xDelta;
      end;
      furData[k+kAmpl]:= tmp*xDelta;
      if cmod(tmp) > fAmpl then // amplitude determining
        fAmpl:= cmod(tmp);
    end;
  end;
  for k:= -kAmpl to kAmpl do begin
    if cmod(furData[k+kAmpl]) < fAmpl*aLevel then // amplitude filtering</pre>
      furData[k+kAmpl]:= 0;
  end:
  11:= round((xMax - xMin)/xDelta)+1;
```

```
SetLength(outData, 11);
  for i:= 0 to l1-1 do begin
    xCur:= xMin + i*xDelta;
    tmp:= 0;
    for k:= -kAmpl to kAmpl do begin
      // iterational control
      itr -= 1;
      if (itr < 0) then begin
        if not CallBack(i/(2*1)+0.5) then
        else
          itr:= CBonItr;
      end;
      cOmega:= nOmega*k/kAmpl;
      tmp:= tmp + furData[k+kAmpl]*cexp(cnew(0, cOmega*xCur))
    end;
    outData[i].X:= xCur;
    outData[i].Y:= (tmp*nOmega/(kAmpl*2*pi)).re;
    outData[i].Y1:= DataVal(xCur, true);
  end;
 Data:= outData;
  Result:= true;
end;
```

Листинг А.3 – Алгоритм Крамерса-Кронига для спектра отражения

```
function Sp_KramersR(var Data: TSpectraPoints; isEnPerc: boolean = false): boolean;
begin
 Result:= Sp_KramersR(Data, isEnPerc, @Dummy.foo);
end;
function Sp_KramersR(var Data: TSpectraPoints; isEnPerc: boolean; CallBack:
               TCallBack): boolean;
var
  i, j, l, l1, k: integer;
  logData, kData, bData, oData: array of double;
  sum, sub_sum, tmp: double;
  omega_r, omega_j1: double;
  itr: integer;
begin
  itr:= CBonItr;
  Result:= false;
  1:= length(Data) - 1;
  SetLength(logData, l+1);
  SetLength(oData, 1+1);
  for i:= 0 to 1 do begin // building a set of logarypmes and omega
     tmp:= Data[i].Y;
      if (tmp <= 0) then
        tmp:= 0.01;
     if (isEnPerc) then // if Y is energetical in %
        tmp:= sqrt(tmp/100);
     if (tmp > 1) then
        tmp:= 1;
     Data[i].Y:= tmp;
      logData[i]:= ln(tmp);
      omega_r:= 2*pi*c_c*100*Data[i].X; // X is in 1/cm
```

```
oData[i]:= 2*pi*c_c*100*Data[i].X; // X is in 1/cm
            end;
            SetLength(kData, 1+1);
            SetLength(bData, 1+1);
            for i:= 0 to l-1 do begin // building a set of k&b foefs for intervals
                        kData[i]:= (logData[i+1] - logData[i])/(oData[i+1] - oData[i]);
                        bData[i]:= logData[i] - oData[i]*kData[i];
            end;
            for i:= 1 to 1-1 do begin // calculating phase values
                        sum:= 0;
                        omega_r:= oData[i];
                        // middle integral
                        sum+= (logData[i-1] - logData[i+1])/100;
                        // integrating from the middle to sides
                        l1:= l-i-1; //number of cycles
                        if (i-1 > 11) then 11:= i-1;
                        for k:= 0 to 11 do begin
                                    // iterational control
                                    itr -= 1;
                                    if (itr < 0) then begin
                                            if not CallBack(i/l) then
                                                    exit
                                            else
                                                    itr:= CBonItr;
                                    end;
                                    sub_sum:= 0;
                                    //right one
                                    j:= i+k;
                                    if (j < 1) then begin
                                                omega_j:= oData[j];
                                                omega_j1:= oData[j+1];
                                                if (k = 0) then
                                                            omega_j+= (omega_j1 - omega_j)/100;
                                                sub\_sum-= bData[j]*ln(((omega\_r - omega\_j)*(omega\_r + omega\_j1))/((omega\_r - omega\_j)*(omega\_r + omega\_j1))/((omega\_r - omega\_j1)/((omega\_r - omega\_j1))/((omega\_r - omega\_j1)/((omega\_r - omega\_r - omega\_r - omega\_r - omega\_r - omega
                                                              + omega_j)*(omega_r - omega_j1))) + kData[j]*omega_r*ln((sqr(omega_r) -
                                                              sqr(omega_j))/(sqr(omega_r) - sqr(omega_j1)));
                                    end;
                                    j := i-k-1;
                                    if (j > 0) then begin
                                                omega j:= oData[j];
                                                omega_j1:= oData[j+1];
                                                if (k = 0) then
                                                            omega_j1-= (omega_j1 - omega_j)/100;
                                                sub\_sum-= bData[j]*ln(((omega\_r - omega\_j)*(omega\_r + omega\_j1))/((omega\_r - omega\_j)*(omega\_r + omega\_j1))/((omega\_r - omega\_j1)/((omega\_r - omega\_j1))/((omega\_r - omega\_j1)/((omega\_r - omega\_r - omega\_r - omega\_r - omega\_r - omega
                                                              + omega_j)*(omega_r - omega_j1))) + kData[j]*omega_r*ln((sqr(omega_r) -
                                                              sqr(omega_j))/(sqr(omega_r) - sqr(omega_j1)));
                                    end;
                                    sum+= sub_sum;
                        end;
                        sum:= sum/pi;
                       Data[i].Y1:= sum;
            end;
            Data[0].Y1:= Data[1].Y1;
            Data[1].Y1:= Data[1-1].Y1;
            Result:= true;
end;
```

Листинг А.4 – Алгоритм Крамерса-Кронига для спектра поглощения

```
function Sp KramersA(Data: TSpectraPoints; out outData: TSpectraPoints): boolean;
begin
 Result:= Sp KramersA(Data, outData, @Dummy.foo);
end;
function Sp KramersA(Data: TSpectraPoints; out outData: TSpectraPoints; CallBack:
               TCallBack): boolean;
var
  i, j, l, l1, k: integer;
  inData, kData, bData, oData: array of double;
  sum, sub_sum, tmp: double;
  omega_r, omega_j1: double;
  itr: integer;
begin
  itr:= CBonItr;
  Result:= false;
  1:= length(Data) - 1;
  SetLength(inData, l+1);
  SetLength(oData, 1+1);
  SetLength(outData, 1+1);
  for i:= 0 to 1 do begin // building a set of k and omega
     tmp:= Data[i].Y; // Y is in a/cm
     tmp:= tmp/(4*pi*Data[i].X); // converting to k = a * lambda / 4pi
     outData[i].Y1:= tmp;
     outData[i].X:= Data[i].X;
      inData[i]:= tmp;
     oData[i]:= 2*pi*c_c*100*Data[i].X; // X is in 1/cm
  end;
  SetLength(kData, 1+1);
  SetLength(bData, 1+1);
  for i:= 0 to l-1 do begin // building a set of k&b foefs for intervals
      kData[i]:= (inData[i+1] - inData[i])/(oData[i+1] - oData[i]);
     bData[i]:= inData[i] - oData[i]*kData[i];
  end;
   for i:= 1 to 1-1 do begin // calculating phase values
     sum:= 0;
     omega_r:= oData[i];
     // middle integral
     sum+= (oData[i-1]*inData[i-1] - oData[i+1]*inData[i+1])/(omega_r*100);
      // integrating from the middle to sides
     11:= l-i-1; //number of cycles
      if (i-1 > 11) then 11:= i-1;
      for k:= 0 to 11 do begin
        // iterational control
        itr -= 1;
        if (itr < 0) then begin
           if not CallBack(i/l) then
            exit
          else
             itr:= CBonItr;
        end;
        sub_sum:= 0;
```

```
//right one
         j:= i+k;
         if (j < 1) then begin
            omega_j:= oData[j];
            omega_j1:= oData[j+1];
            if (k = 0) then
               omega_j+= (omega_j1 - omega_j)/100;
            sub_sum-= kData[j]*omega_r*ln(((omega_r - omega_j)*(omega_r + omega_j1))/
                ((omega\_r + omega\_j)*(omega\_r - omega\_j1))) + bData[j]*ln((sqr(omega\_r)))
                - sqr(omega_j))/(sqr(omega_r) - sqr(omega_j1))) + kData[j]*(2*omega_j -
                2*omega_j1);
         end;
         j:= i-k-1;
         if (j > 0) then begin
            omega j:= oData[j];
            omega_j1:= oData[j+1];
            if (k = 0) then
               omega_j1-= (omega_j1 - omega_j)/100;
            sub_sum-= kData[j]*omega_r*ln(((omega_r - omega_j)*(omega_r + omega_j1))/
                ((omega\_r + omega\_j)*(omega\_r - omega\_j1))) + bData[j]*ln((sqr(omega\_r)
                - sqr(omega_j))/(sqr(omega_r) - sqr(omega_j1))) + kData[j]*(2*omega_j -
                2*omega_j1);
         end;
         sum+= sub_sum;
      end;
      sum:= sum/pi;
      outData[i].Y:= sum + 1;
   end;
   outData[0].Y:= outData[1].Y;
   outData[1].Y:= outData[1-1].Y;
   Result:= true;
end;
```

Листинг A.5 — Aлгоритм преобразования комплексного спектра отражения по соотношениям Френеля

```
function Frenel_NtoR(inN: complex; inN0, inPhi: real): complex;
  cosPhi0, cosPhi1: complex;
  Rp, Rs: complex;
begin
  cosPhi0:= cos(inPhi);
  cosPhi1:= csqrt(1 - csqr(inN0*sin(inPhi)/inN));
  Rp:= (inN*cosPhi0 - inN0*cosPhi1)/(inN*cosPhi0 + inN0*cosPhi1);
 Rs:= (inN0*cosPhi0 - inN*cosPhi1)/(inN0*cosPhi0 + inN*cosPhi1);
  //Result:= Rp;
 Result:= csqrt((csqr(Rp) + csqr(Rs))/2);
  //Result:= cosPhi1;
end;
function Sp_Frenel(inR: TSpectraPoints; inPhi: real; out outN: TSpectraPoints):
               boolean;
begin
  Result:= Sp_Frenel(inR, inPhi, outN, @Dummy.foo);
end;
function Sp_Frenel(inR: TSpectraPoints; inPhi: real; out outN: TSpectraPoints;
               CallBack: TCallBack): boolean;
var
```

```
R, needR, Rdiff: complex;
 N, nearN: complex;
 zoneN: array [0..3] of complex;
  zoneD: array [0..3] of double;
 zoneG: shortInt;
 zoneB: shortInt;
 N0: real;
 diff, mindiff: real;
 i, j, k, l, t, itr: integer;
  gotOne: boolean;
 nSz, nMin, kMin, nMax, kMax, kSz: double;
const
 netSize = 50; iters = 5;
begin
 N0 := 1;
  1:= length(inR) - 1;
  SetLength(outN, 1+1);
  Result:= false;
  itr:= CBonItr;
 for k:= 0 to 1 do begin
    needR:= cnewma(inR[k].Y, inR[k].Y1); // mod+arg
    //needR:= csqrt(csqr(needR)); // tricky
    gotOne:= false;
    zoneG:= 0;
    nMin:= N0;
    kMin:= 0:
    nMax:= 10;
    kMax := 1;
    for t:= 1 to iters do begin
      nSz:= nMax - nMin;
      kSz:= kMax - kMin;
      for i:= 1 to netSize do
        for j:= 0 to netSize do begin
          N:= cnew(i*nSz/netSize + nMin, -j*kSz/netSize - kMin);
          //N:= cnew(k*maxN/100 + N0, 0.02);
          itr -= 1;
          if (itr < 0) then begin
            if not CallBack(k/l) then
              exit
            else
              itr:= CBonItr;
          end;
          // calculating frenel
          R:= Frenel_NtoR(N, N0, inPhi);
          Rdiff:= R - needR;
          diff:= sqrt(sqr(cmod(R) - cmod(needR)) + sqr(carg(R) - carg(needR))/100);
          if (not gotOne) OR (diff < mindiff) then begin
            mindiff:= diff;
            gotOne:= true;
            nearN:= N;
          zoneB:= Ord(Rdiff.re > 0)*2 + Ord(Rdiff.im > 0);
          if ((zoneG and (1 shl zoneB)) = 0) or (diff < zoneD[zoneB]) then begin
            zoneD[zoneB]:= diff;
            zoneG:= zoneG or (1 shl zoneB);
            zoneN[zoneB]:= N;
```

```
end;
        end;
      if (zoneG = 15) then begin
        nMin:= nearN.re - nSz/(2*netSize);
        nMax:= nearN.re + nSz/(2*netSize);
        kMin:= nearN.im - kSz/(2*netSize);
        kMax:= nearN.im + kSz/(2*netSize);
        nMin:= min(zoneN[0].re, min(zoneN[1].re, min(zoneN[2].re, min(zoneN[3].re,
               nMin))));
        nMax:= max(zoneN[0].re, max(zoneN[1].re, max(zoneN[2].re, max(zoneN[3].re,
               nMax))));
        kMin:= min(zoneN[0].im, min(zoneN[1].im, min(zoneN[2].im, min(zoneN[3].im,
               kMin))));
        kMax:= max(zoneN[0].im, max(zoneN[1].im, max(zoneN[2].im, max(zoneN[3].im,
               kMax))));
      end else begin
        nMin:= nearN.re - 2*nSz/netSize;
        nMax:= nearN.re + 2*nSz/netSize;
        kMin:= nearN.im - 2*kSz/netSize;
        kMax:= nearN.im + 2*kSz/netSize;
      end;
    end;
    outN[k].X:= inR[k].X;
    outN[k].Y:= nearN.re;
    outN[k].Y1:= nearN.im;
  Result:= true;
end;
```

приложение Б

Интерфейс разработанного ПО (справочное)

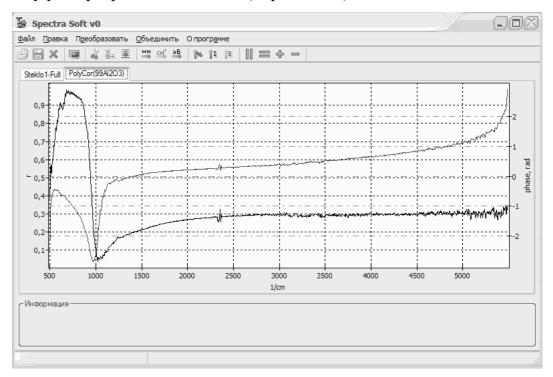
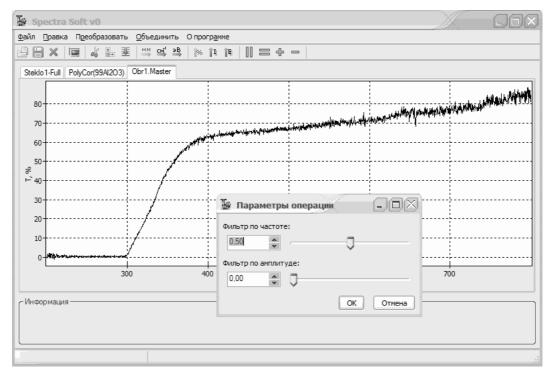


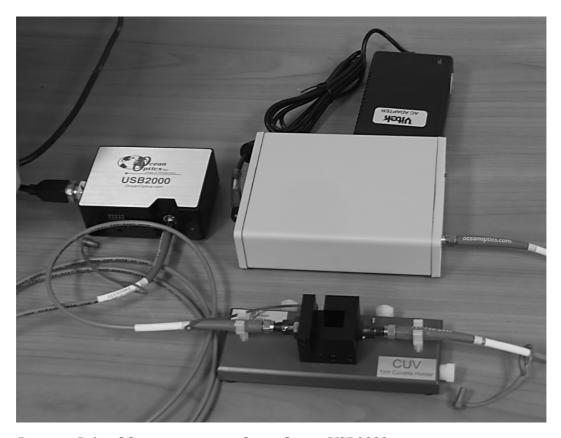
Рисунок Б. $I-\Gamma$ лавное окно. Загружен комплексный спектр отражения Al_2O_3



Pисунок E.2-3апрос параметров операции. Загружен спектр пропускания полимерного стекла.

приложение в

Экспериментальное оборудование и его характеристики (справочное)



Pисунок B.1-OЭ-спектрометр OceanOptics USB2000.

Таблица В.1 – Характеристики спектрометра USB2000

Источник света	Галогенная лампа		
Рабочий диапазон	200-870 нм		
Отношение сигнал/шум	250:1		
Абсолютное отклонение линии 100% пропускания	0,05%		
Абсолютная погрешность градуировки длины волны	не более ±0,1 нм		
Оптическое разрешение	0,3-10 нм		



Pисунок B.2- UK Фурье-спектрометр Infralum FT-801

Таблица В.2 – Характеристики спектрометра Infralum FT-801

Источник света	Глобар		
Рабочий диапазон	500-5500 см-1		
Отношение сигнал/шум	10000:1		
Абсолютное отклонение линии 100% пропускания	0,05%		
Абсолютная погрешность градуировки волновых чисел	не более ±0,05 см ⁻¹		
Коэффициент усиления сигнала	1, 2, 4, 8		
Спектральное разрешение	1, 2, 4, 8 см ⁻¹		
Время сканирования	не более 4,5 с		

приложение г

Методические указания для проведения л/р (справочное)

Методические указания для проведения лабораторной работы «Эллипсометрические измерения» приложены к работе в качестве отдельного документа.

		2								
SH.			(С ОДЕРЖ А	АНИЕ					
Перв. примен.		ВВЕДЕНИЕ							4	
Перв.		ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ОБЗОР							7	
		1.1 Принципы взаимодействия света с веществом							7	
		1.1.1 Волновая теория света. Поляризация света.							7	
		1.1.2 Виды взаимодействия света с веществом							9	
		1.1.3 Оптические явления на границе раздела сред							11	
		1.1.4 Поглощение света в веществе							12	
Оправ. №		1.1.5 Поглощение света кристаллами								13
Спр		1.2 Сложные эффекты, законы, соотношения							21	
		1.2.1 Соотношения Крамерса-Кронига						•••••	21	
		1.2.2 Двухлучевая интерференция							22	
	1.2.3 Многолучевая интерференция					23				
				1.2.4 Поляри	изация 1	волні	ы, отраженной от пленки на	поверхі	ности	
		полубесконечной среды. Основное уравнение эллипсометрии					рии	25		
и дата		1.3 Методы исследования структур							28	
5		1.3.1 Определение толщины пленки методом интерферометрии						28		
Подпи		1.3.2 Эллипсометрический анализ поверхности							31	
JI.		1.3.3 Колебательная спектроскопия							34	
Инв. № дубл.		1.3.4 Электронно-оптическая спектроскопия						38		
Инв.		1.3.5 Спектральный анализ по методу Крамерса-Кронига					41			
№		1.3.6 Метод дисперсионного анализа						45		
Взам. инв. №		1.4 Постановка задачи						48		
Взам		ГЛАВА 2. ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ						50		
		2.1 Обработка эллипсометрических данных						50		
и дата										
Подпись и дата										
Πo,		Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	ФЭТ ВКР.415114.001 ПЗ			
ŢŪ.		Разра	б.	Купрейчик	Подпись	дана		Лит.	Лист	Листов
Инв. № подл.		Провер. Реценз.		Смирнов			Диагностика наноразмерных структур оптическими		2	89
Инв.		Н. Контр. методами ТУСУР, ФЭТ, к Утверд.			ФЭТ, каф. (ФЭ, гр.373-мф				