

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 535.016,535.321.9,681.7.064.3

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2025-61-2-128-138>

Поступила в редакцию 02.07.2024

Received 02.07.2024

Д. В. Понкратов¹, А. Б. Сотский¹, Н. И. Стаськов¹, А. А. Сергейчик²¹Могилевский государственный университет имени А. А. Кулешова, Могилев, Республика Беларусь²ГЦ «Белмикросистемы», ОАО «Интеграл», Минск, Республика Беларусь

ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ ПОДЛОЖКИ С НАНОРАЗМЕРНЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

Аннотация. Сформулировано аналитическое решение обратной задачи эллипсометрии об определении комплексной диэлектрической проницаемости подложки при наличии на ее поверхности наноразмерного слоя с неизвестными заранее характеристиками. Поверхностный слой учитывается одним интегральным параметром, восстанавливаемым одновременно с диэлектрической проницаемостью подложки. Решение использует эллипсометрические параметры Δ и Ψ , измеренные при двух углах падения света на структуру. Оптимальные значения углов падения устанавливаются из условия минимальности коэффициента ошибки восстановления диэлектрической проницаемости подложки. Эффективность решения проиллюстрирована в вычислительных и реальных экспериментах по эллипсометрии кремниевых подложек с различными поверхностными слоями. В частности, определена ширина запрещенной зоны кремниевой подложки, легированной бором и подвергнутой быстрой термической обработке для стабилизации поверхностного слоя.

Ключевые слова: обратная задача эллипсометрии, наноразмерный поверхностный слой, кремниевая подложка, оптимальные углы падения, ширина запрещенной зоны

Для цитирования. Эллипсометрия подложки с наноразмерным поверхностным слоем / Д. В. Понкратов, А. Б. Сотский, Н. И. Стаськов, А. А. Сергейчик // Весті Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Сэрыя фізіка-матэматычных навук. – 2025. – Т. 61, № 2. – С. 128–138. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2025-61-2-128-138>

Dmitry V. Ponkratov¹, Alexander B. Sotsky¹, Nikolay I. Staskov¹, Hanna A. Siarheichyk²¹Mogilev State A. Kuleshov University, Mogilev, Republic of Belarus²SC “Belmicroanalysis”, JSC “INTEGRAL”, Minsk, Republic of Belarus

ELLIPSOmetry OF SUBSTRATE WITH NANOSCALE SURFACE LAYER

Abstract. An analytical solution of the inverse ellipsometry problem on determining the complex permittivity of a substrate in the presence of a nanosized surface layer with previously unknown characteristics is formulated. The layer is taken into account only by one integral parameter, which is restored simultaneously with the substrate permittivity. The solution uses ellipsometric parameters Δ and Ψ , measured at two angles of light incidence on the structure. The optimal values of the incident angles are established from the condition of the minimum of the error coefficient of the substrate permittivity reconstruction. The efficiency of the solution is checked in numerical simulations and real experiments on the ellipsometry of silicon substrates with various surface layers. In particular, the band gap of a silicon substrate doped with boron and subjected to a rapid heat treatment to stabilize the surface layer is determined.

Keywords: inverse ellipsometry problem, nano-sized surface layer, silicon substrate, optimal angles of incidence, band gap

For citation. Ponkratov D. V., Sotsky A. B., Staskov N. I., Siarheichyk H. A. Ellipsometry of substrate with nanoscale surface layer. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2025, vol. 61, no. 2, pp. 128–138 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2025-61-2-128-138>

Введение. Эллипсометрия является распространенным методом контроля параметров тонкопленочных структур. Для ряда приложений в оптике и микроэлектронике представляет интерес определение спектров комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_s(\lambda)$ объемных материалов с плоскими границами и параметров наноразмерных поверхностных слоев, неизбежно присутствующих на указанных границах. В частности, такая информация необходима для изучения контактных явлений в полупроводниках [1], оптимального проектирования интерференционных покрытий [2], решения обратных оптических задач в оптике металлических пленок [3]. Но здесь метод эллипсометрии сталкивается с проблемой существенного влияния на измеряемые

поляризационные углы Δ и Ψ наноразмерных поверхностных слоев с неизвестными заранее характеристиками [4]. Для учета этого влияния предложены различные электродинамические модели поверхностных слоев, содержащие несколько параметров, значения которых определяются в результате решения обратных задач спектральной либо многоугловой эллипсометрии. К ним относятся модель плоскопараллельного однородного слоя [4–7], модель Ферми для представления изменения диэлектрической проницаемости по толщине слоя [8], модель слоя поляризованных диполей [9]. Но указанные модели приводят к не совпадающим результатам для $\epsilon_s(\lambda)$, и какому из них следует отдать предпочтение в конкретной ситуации – не очевидно.

Как известно, достоверность и устойчивость к погрешностям измерений Δ и Ψ решений обратных задач эллипсометрии возрастает по мере уменьшения числа параметров в используемой модели тонкопленочной структуры [4, 5]. В настоящей работе рассматривается предельно простая интегральная модель поверхностного слоя, в которой влияние слоя на Δ и Ψ учитывается всего одним комплексным параметром J . Получено аналитическое решение обратной оптической задачи об определении J и $\epsilon_s(\lambda)$ по углам Δ и Ψ , измеренным на данной длине волны при двух углах падения света на структуру θ_1 и θ_2 . Значения θ_1 и θ_2 выбираются из условия минимума модуля $|\delta\epsilon_s(\lambda)|$, где $\delta\epsilon_s(\lambda)$ – ошибка определения $\epsilon_s(\lambda)$. Решение протестировано в вычислительных экспериментах по определению $\epsilon_s(\lambda)$ для кремниевого образца с наноразмерными оксидными слоями. Затем выполнено экспериментальное исследование функции $\epsilon_s(\lambda)$ для пластины кремния, легированного бором, поверхность которой стабилизирована быстрой термической обработкой.

Интегральная модель поверхностного слоя. На рис. 1 подложка с диэлектрической проницаемостью ϵ_s отделена от однородной среды с диэлектрической проницаемостью ϵ_a в общем случае неоднородным слоем толщиной $d \ll \lambda$. Диэлектрическая проницаемость слоя $\epsilon(y)$ и константа ϵ_s могут быть комплексными, а ϵ_a – некоторое известное вещественное число. Структура возбуждается монохроматической плоской волной с длиной волны λ и амплитудой a , падающей под углом θ . Зависимость электромагнитного поля от времени t и координаты z дается фактором $\exp[ik_0(ct - \beta z)]$, где $k_0 = 2\pi/\lambda$, c – скорость света, $\beta = \sqrt{\epsilon_a} \sin \theta$. Этот фактор в дальнейших выкладках опущен.

Волны p -поляризации во всем пространстве подчиняются уравнению [10]

$$\epsilon \frac{d}{dy} \frac{1}{\epsilon} \frac{d}{dy} H_x + \kappa^2 H_x = 0, \quad (1)$$

где H_x – компонента магнитного поля p -волн, $\kappa^2 = k_0^2(\epsilon - \beta^2)$, $\epsilon = \epsilon(y)$ – диэлектрическая проницаемость слоистой среды. В однородных средах уравнение (1) имеет решение

$$H_x = a \exp(ik_0 k_{ya} y) + b \exp(-ik_0 k_{ya} y) \quad (y \geq 0), \quad (2)$$

$$H_x = c \exp(ik_0 k_{ys} y) \quad (y \leq -d), \quad (3)$$

где b и c – амплитуда волны, отраженной от слоя и прошедшей сквозь слой соответственно, $k_{ya,s} = \sqrt{\epsilon_{a,s} - \beta^2}$. Для определения b и c заметим, что уравнение второго порядка (1) эквивалентно системе двух уравнений первого порядка

$$\frac{du}{dy} = \frac{\epsilon}{\epsilon_s} v, \quad \frac{dv}{dy} = -k_0^2 \frac{\epsilon_s}{\epsilon} (\epsilon - \beta^2) u \quad (4)$$

относительно непрерывных функций

$$u(y) = H_x(y), \quad v(y) = \frac{\epsilon_s}{\epsilon(y)} \frac{dH_x(y)}{dy}.$$

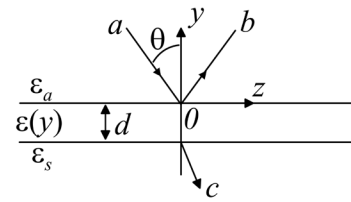


Рис. 1. Структура с поверхностным слоем и система координат

Fig. 1. Structure with surface layer and coordinate system

Введем в рассмотрение функции $A(y)$, $B(y)$ по правилу

$$u = A \exp(ik_0 k_{ys} y) + B \exp(-ik_0 k_{ys} y), \quad (5)$$

$$v = ik_0 k_{ys} [A \exp(ik_0 k_{ys} y) - B \exp(-ik_0 k_{ys} y)]. \quad (6)$$

Подстановка (5), (6) в (4) приводит к уравнениям

$$\frac{dA}{dy} = \frac{1}{2} \exp(-ik_0 k_{ys} y) \left[\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_s} - 1 \right) v + \frac{k_0 \beta^2}{ik_{ys}} \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon} - 1 \right) u \right], \quad (7)$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{1}{2} \exp(ik_0 k_{ys} y) \left[\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_s} - 1 \right) v - \frac{k_0 \beta^2}{ik_{ys}} \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon} - 1 \right) u \right]. \quad (8)$$

Согласно (3), (5)–(8), в области $y \leq 0$

$$A(y) = c + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^y \exp(-ik_0 k_{ys} y') \left\{ \left[\frac{\varepsilon(y')}{\varepsilon_s} - 1 \right] v(y') + \frac{k_0 \beta^2}{ik_{ys}} \left[\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon(y')} - 1 \right] u(y') \right\} dy', \quad (9)$$

$$B(y) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^y \exp(ik_0 k_{ys} y') \left\{ \left[\frac{\varepsilon(y')}{\varepsilon_s} - 1 \right] v(y') - \frac{k_0 \beta^2}{ik_{ys}} \left[\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon(y')} - 1 \right] u(y') \right\} dy'. \quad (10)$$

Эффективный промежуток интегрирования в (9), (10) имеет протяженность порядка d . Поэтому в соответствии с (3), (5), (6), (9), (10) всюду в области $-d \leq y \leq 0$

$$u(y) = c + O(d/\lambda), \quad v(y) = ik_0 k_{ys} c + O(d/\lambda). \quad (11)$$

Учитывая (2), (3), (5), (6), (11) и непрерывность функций $u(y)$, $v(y)$ на границе раздела сред $y = 0$, для коэффициента отражения от структуры волн p -поляризации имеем

$$\begin{aligned} r_p &= \frac{b}{a} = \frac{A(0)(1 - \Delta_p) + B(0)(1 + \Delta_p)}{A(0)(1 + \Delta_p) + B(0)(1 - \Delta_p)} = \\ &= \frac{1 - \Delta_p + ik_0 \Delta_p \int_{-\infty}^0 \left\{ k_{ys} \left[\varepsilon(y) \varepsilon_s^{-1} - 1 \right] + \beta^2 k_{ys}^{-1} \left[\varepsilon_s \varepsilon^{-1}(y) - 1 \right] \right\} dy}{1 + \Delta_p + ik_0 \Delta_p \int_{-\infty}^0 \left\{ k_{ys} \left[\varepsilon(y) \varepsilon_s^{-1} - 1 \right] - \beta^2 k_{ys}^{-1} \left[\varepsilon_s \varepsilon^{-1}(y) - 1 \right] \right\} dy} + O[(d/\lambda)^2], \end{aligned} \quad (12)$$

где $\Delta_p = \varepsilon_a k_{ys} (\varepsilon_s k_{ya})^{-1}$.

Волны s -поляризации во всем пространстве подчиняются уравнению [10]

$$\frac{d^2}{dy^2} E_x + \kappa^2 E_x = 0,$$

где E_x – компонента электрического поля s -волн,

$$E_x = a \exp(ik_0 k_{ya} y) + b \exp(-ik_0 k_{ya} y) \quad (y \geq 0),$$

$$E_x = c \exp(ik_0 k_{ys} y) \quad (y \leq -d).$$

Повторяя преобразования, аналогичные рассмотренным выше, для коэффициента отражения волн s -поляризации от структуры получаем

$$r_s = \frac{b}{a} = \frac{1 - \Delta_s - ik_0 \Delta_s k_{ys}^{-1} \int_{-\infty}^0 [\varepsilon(y) - \varepsilon_s] dy}{1 - \Delta_s + ik_0 \Delta_s k_{ys}^{-1} \int_{-\infty}^0 [\varepsilon(y) - \varepsilon_s] dy} + O[(d/\lambda)^2], \quad (13)$$

где $\Delta_s = k_{ys} k_{ya}^{-1}$.

Поляризационные углы Δ и Ψ связаны с r_p и r_s уравнением [4, 5]

$$\rho_0(\theta) = r_p r_s^{-1} = \tan \Psi \exp(i\Delta). \quad (14)$$

Из (12)–(14) заключаем, что с точностью до величин порядка d/λ

$$\rho_0(\theta) = \rho(\varepsilon_s, \theta) - JB(\varepsilon_s, \theta), \quad (15)$$

где

$$B(\varepsilon_s, \theta) = k_{ya} \beta^2 (\beta^2 + k_{ya} k_{ys})^{-2}, \quad (16)$$

$$\rho(\varepsilon_s, \theta) = (\beta^2 - k_{ya} k_{ys}) (\beta^2 + k_{ya} k_{ys})^{-1}, \quad (17)$$

$$J = 2i\varepsilon_s k_0 (\varepsilon_s - \varepsilon_a)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} [\varepsilon(y) - \varepsilon_s] [1 - \varepsilon_a \varepsilon^{-1}(y)] dy. \quad (18)$$

Таким образом, влияние наноразмерного поверхностного слоя на поляризационные углы Δ и Ψ в главном приближении определяется одним лишь интегральным параметром J , имеющим порядок d/λ и не зависящим от угла падения света на структуру.

Пусть измерения величин $\rho_0(\theta)$ выполнены при двух углах падения $\theta = \theta_1$ и $\theta = \theta_2$. Исключив J из двух уравнений (15), относящихся к $\theta = \theta_1$ и $\theta = \theta_2$, приходим к нелинейному уравнению относительно ε_s :

$$B(\varepsilon_s, \theta_1) [\rho(\varepsilon_s, \theta_2) - \rho_0^{(2)}] - B(\varepsilon_s, \theta_2) [\rho(\varepsilon_s, \theta_1) - \rho_0^{(1)}] = 0, \quad (19)$$

где $\rho_0^{(1),(2)} = \rho_0(\theta_{1,2})$. Однако численное исследование комплексных корней уравнения (19) для различных поверхностных слоев на кремнии методом контурного интегрирования [10] показало, что это уравнение имеет два близких корня, которые вырождаются в один двукратный корень при $d \rightarrow 0$. При конечных d выбор нужного корня из пары вычисляемых корней проблематичен. В таких условиях более эффективным оказывается представленный ниже метод решения уравнения (15), основанный на его линеаризации.

Уравнение (15) содержит малый параметр J , что дает основание искать его решение в виде разложения ε_s по степеням этого параметра [11]:

$$\varepsilon_s = \varepsilon_s^{(0)}(\theta) + \alpha_1(\theta)J + \alpha_2(\theta)J^2 + \dots \quad (20)$$

Подставляя (20) в (15) и приравнявая к нулю коэффициенты при одинаковых степенях J , получаем уравнения для коэффициентов $\varepsilon_s^{(0)}(\theta)$ и $\alpha_1(\theta)$:

$$\rho_0(\theta) = \rho[\varepsilon_s^{(0)}(\theta), \theta], \quad (21)$$

$$\rho'[\varepsilon_s^{(0)}(\theta), \theta] \alpha_1(\theta) + B[\varepsilon_s^{(0)}(\theta), \theta] = 0, \quad (22)$$

где $\rho'(\varepsilon_s, \theta) = \partial \rho / \partial \varepsilon_s = -B(\varepsilon_s, \theta) / k_{ys}$. Из (17), (21) находим

$$\varepsilon_s^{(0)}(\theta) = \beta^2 \{1 + [1 - \rho_0(\theta)]^2 [1 + \rho_0(\theta)]^{-2} \beta^2 k_{ya}^{-2}\}. \quad (23)$$

Выражение (23) представляет собой известное [4] решение обратной задачи эллипсометрии по определению диэлектрической проницаемости подложки ε_s в нулевом порядке теории возмущений, т. е. в пренебрежении поверхностным слоем. Однако при подстановке в (23) экспериментальной функции $\rho_0(\theta)$ наличие поверхностного слоя проявляется в зависимости $\varepsilon_s^{(0)}$ от θ . Это позволяет уточнить ε_s в первом порядке теории возмущений.

Пусть измерения $\rho_0(\theta)$ выполнены при двух углах падения $\theta = \theta_1$ и $\theta = \theta_2$, и на основании (23) найдены $\varepsilon_s^{(0)}(\theta_1)$ и $\varepsilon_s^{(0)}(\theta_2)$. Удерживая в разложении (20) два главных члена и учитывая (21), (22), приходим к системе двух линейных уравнений относительно ε_s и J :

$$\varepsilon_s + B_1(\rho'_1)^{-1} J = \varepsilon_{s1}^{(0)}, \quad (24)$$

$$\varepsilon_s + B_2(\rho'_2)^{-1} J = \varepsilon_{s2}^{(0)}, \quad (25)$$

где

$$\varepsilon_{s1,2}^{(0)} = \varepsilon_s^{(0)}(\theta_{1,2}), \quad B_{1,2} = B(\varepsilon_{s1,2}^{(0)}, \theta_{1,2}), \quad \rho'_{1,2} = \rho'[\varepsilon_{s1,2}^{(0)}, \theta_{1,2}].$$

Решение системы (24), (25) имеет вид

$$\varepsilon_s = \bar{\varepsilon}_s^{(0)} + 0,5 \Delta \varepsilon_s (B_1 \rho'_2 + B_2 \rho'_1) (B_1 \rho'_2 - B_2 \rho'_1)^{-1}, \quad (26)$$

$$J = \rho'_1 \rho'_2 \Delta \varepsilon_s (B_1 \rho'_2 - B_2 \rho'_1)^{-1}, \quad (27)$$

где $\bar{\varepsilon}_s^{(0)} = 0,5(\varepsilon_{s1}^{(0)} + \varepsilon_{s2}^{(0)})$, $\Delta \varepsilon_s = \varepsilon_{s2}^{(0)} - \varepsilon_{s1}^{(0)}$.

Выражения (23), (26), (27) дают аналитическое решение обратной задачи эллипсометрии об определении комплексной диэлектрической проницаемости подложки с плоской границей при наличии на этой границе поверхностного слоя толщиной $d \ll \lambda$ с произвольной зависимостью $\varepsilon(y)$ внутри него. Решение предполагает измерение углов Δ и Ψ при двух углах падения света на структуру θ_1, θ_2 на данной длине волны и сводится к последовательному использованию формул (23), (26), (27). Однако в (26), (27) входят отношения разностей близких чисел, что предполагает прецизионное измерение Δ, Ψ и оптимальный выбор углов θ_1, θ_2 . В качестве критерия такого выбора можно принять условие достижения минимума коэффициента ошибки $E(\theta_1, \theta_2)$ в оценке [12]

$$|\delta \varepsilon_s| \leq E(\theta_1, \theta_2) \max_i |\delta \rho_0^{(i)}|,$$

где $i = 1, 2$,

$$E(\theta_1, \theta_2) = \left| \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \rho_0^{(1)}} \right| + \left| \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \rho_0^{(2)}} \right|, \quad (28)$$

$\delta \rho_0^{(1)}, \delta \rho_0^{(2)}$ – погрешности измерений $\rho_0^{(1)}, \rho_0^{(2)}$. Производные в (28) допускают аналитический расчет на основании (16), (17), (23), (26):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial \varepsilon_{s1,2}^{(0)}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} + \left\{ \left[(B_{1,2} \rho'_{2,1} + B_{2,1} \rho'_{1,2}) \frac{\partial \varepsilon_{s1,2}^{(0)}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} - \left(\frac{\partial B_{1,2}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} \rho'_{2,1} + B_{2,1} \frac{\partial \rho'_{1,2}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} \right) \Delta \varepsilon_s \right] \times \right. \\ &\quad \times (B_{2,1} \rho'_{1,2} - B_{1,2} \rho'_{2,1}) + (B_{1,2} \rho'_{2,1} + B_{2,1} \rho'_{1,2}) \left(B_{2,1} \frac{\partial \rho'_{1,2}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} - \rho'_{2,1} \frac{\partial B_{1,2}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} \right) \Delta \varepsilon_s \left. \right\} \times \\ &\quad \times [4(B_{2,1} \rho'_{1,2} - B_{1,2} \rho'_{2,1})]^{-2}, \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_{1,2}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} &= -0,5 \frac{\partial \varepsilon_{s1,2}^{(0)}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} \left[\frac{k_{ya} \beta^2}{(\beta^2 + k_{ya} k_{ys})^3} \right]_{\varepsilon_s = \bar{\varepsilon}_s^{(0)}, \theta = \theta_{1,2}}, \\ \frac{\partial \rho'_{1,2}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} &= \frac{\partial \varepsilon_{s1,2}^{(0)}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} \left[\frac{k_{ya} \beta^2 (3k_{ya} k_{ys} + \beta^2)}{2[k_{ys} (k_{ya} k_{ys} + \beta^2)]^3} \right]_{\varepsilon_s = \bar{\varepsilon}_s^{(0)}, \theta = \theta_{1,2}}, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{s1,2}^{(0)}}{\partial \rho_0^{(1),(2)}} = - \frac{4(1 - \rho_0^{(1),(2)})}{(1 + \rho_0^{(1),(2)})^3} \left(\frac{\beta^2}{k_{ya}} \right)_{\theta=\theta_{1,2}}^2.$$

Согласно (29) функция (28) однозначно определяется по экспериментальной зависимости $\rho_0(\theta)$.

Полученное решение обратной задачи эллипсометрии имеет асимптотический характер, поэтому его точность будет снижаться по мере увеличения толщины поверхностного слоя. Оценки погрешностей решения представлены в следующем разделе.

Результаты расчетов. Для тестирования предложенного метода мы выполнили вычислительные эксперименты по решению прямой и обратной задач эллипсометрии кремниевой (Si) подложки с поверхностным оксидным (SiO_2) слоем. Слой считался однородным. В прямой задаче диэлектрическая проницаемость слоя $\varepsilon_f(\lambda)$ задавалась по трехчленной формуле Селлмейера [13], а для $\varepsilon_s(\lambda)$ использовались известные табличные данные [14]. Область $y > 0$ (см. рис. 1) предполагалась занятой воздухом ($\varepsilon_a = 1,0006$). Расчет поляризационных углов Δ , Ψ и функции $\rho_0(\theta)$ выполнен с использованием рекуррентных формул [10]. Точные значения Δ , Ψ округлены до трех разрядов после запятой по градусной шкале. Такое округление соответствует погрешностям определения поляризационных углов $\pm 0,0005^\circ$, характерным для автоматизированных эллипсометров [4].

На рис. 2, *a* представлена зависимость решений обратной задачи эллипсометрии от выбора углов падения θ_1 , θ_2 . Приведенные графики соответствуют $d = 2$ нм, $\lambda = 400$ нм, $\theta_1 = 42,2^\circ$. При указанных значениях интервалы корреляции отсчетов Δ и Ψ на шкале θ_2 не превосходят $0,01^\circ$. В результате ошибки округления Δ и Ψ вызывают быстрые колебания зависимости $\varepsilon_s(\theta_2)$ в масштабах рис. 2, *a*. Амплитуда этих колебаний существенно зависит от θ_2 . Например, наблюдается резкий рост данной амплитуды при $\theta_2 \rightarrow \theta_1$ и при $\theta_2 \rightarrow 90^\circ$, вызванный плохой обусловленностью системы (24), (25) в указанных пределах. Это подтверждает необходимость выбора оптимальных углов падения θ_1 , θ_2 . В частности, из рис. 2, *a* видно, что при $\theta_2 \approx 80^\circ$ решение (26), (27) существенно уточняет нулевое приближение $\bar{\varepsilon}_s^{(0)}$.

Спектральные зависимости оптимальных углов θ_1 , θ_2 и соответствующего минимального значения коэффициента ошибки $E(\theta_1, \theta_2)$, равного $E_{\min}$ в диапазоне $300 \text{ нм} \leq \lambda \leq 800 \text{ нм}$, иллюстрирует рис. 2, *b*. Графики на нем рассчитаны на основании (28), (29) при толщине оксидного слоя $d = 2$ нм и $d = 6$ нм.

Согласно рис. 2, *b* оптимальные углы падения слабо зависят от толщины поверхностного слоя и от длины волны. В такой ситуации во всем спектральном диапазоне можно использовать

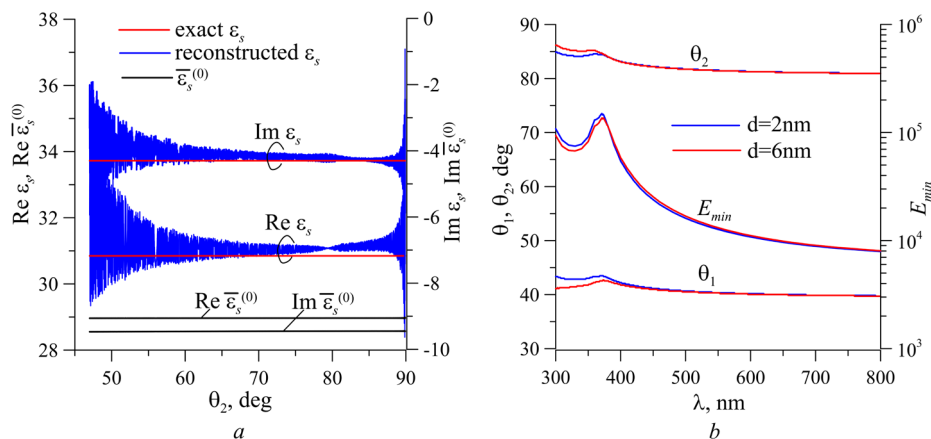


Рис. 2. К выбору углов падения света: шумы при восстановлении ε_s (*a*) и оптимальный выбор углов падения, минимизирующий шумы (*b*)

Fig. 2. On the choice of light incidence angles: reconstruction ε_s noise (*a*) and optimal choice of incidence angles that minimizes noise (*b*)

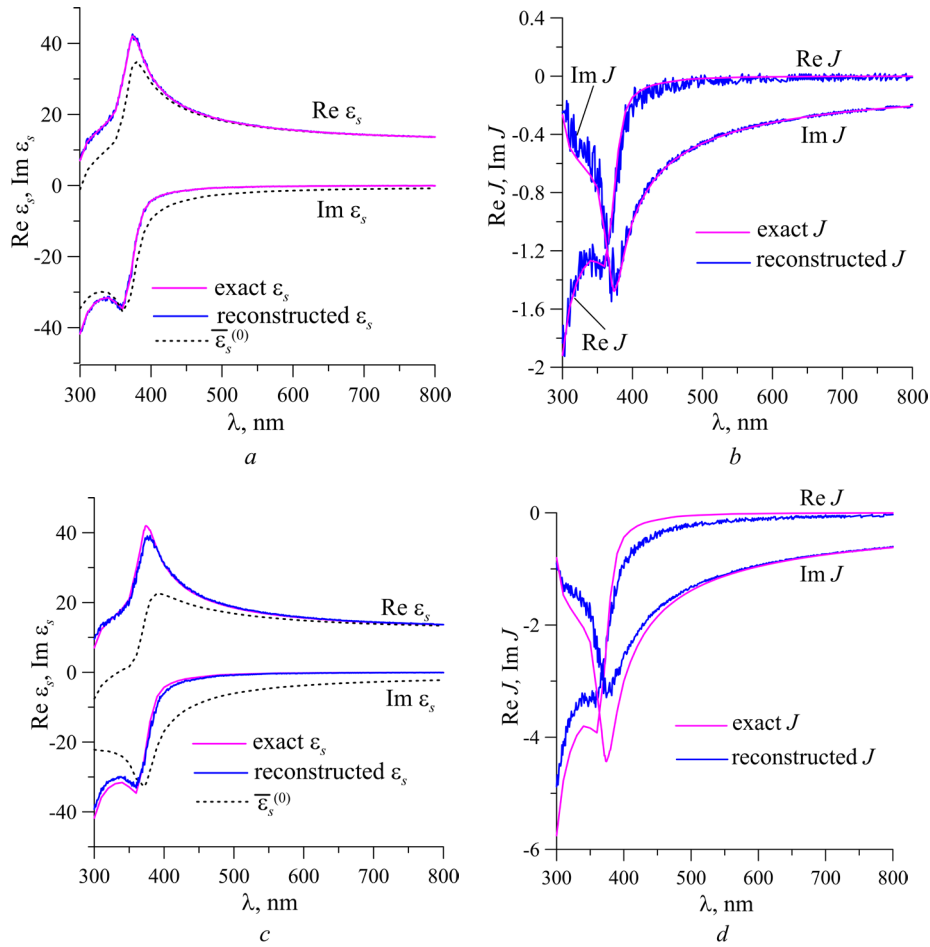


Рис. 3. Решение обратной задачи эллипсометрии кремниевой подложки с оксидным слоем толщиной 2 (a, b) и 6 (c, d) нм

Fig. 3. Solution of the inverse problem of ellipsometry of a silicon substrate with an oxide layer with thickness 2 (a, b) and 6 (c, d) nm

не перестраиваемые, в соответствии с графиками на рис. 2, b, а фиксированные углы падения, равные усредненным с весовой функцией $E_{\min}(\lambda)$ оптимальным углам падения:

$$\bar{\theta}_{1,2} = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \theta_{1,2}(\lambda) E_{\min}(\lambda) d\lambda \left(\int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} E_{\min}(\lambda) d\lambda \right)^{-1},$$

где $\lambda_{\min}$, $\lambda_{\max}$ – границы спектрального диапазона, $\theta_{1,2}(\lambda)$ – зависимости, приведенные на рис. 2, b. Для толщин слоя $d = 2$ нм и $d = 6$ нм $\bar{\theta}_1 = 42,2^\circ$, $\bar{\theta}_2 = 83,3^\circ$ и $\bar{\theta}_1 = 41,4^\circ$, $\bar{\theta}_2 = 83,6^\circ$ соответственно.

Рис. 3 иллюстрирует погрешности решения обратной задачи эллипсометрии (26), (27) в рассмотренном спектральном диапазоне. Кривые на рис. 3 рассчитаны при углах падения, равных указанным выше $\bar{\theta}_1$, $\bar{\theta}_2$.

При толщине оксидного слоя 2 нм графики точного и восстановленного спектров $\varepsilon_s(\lambda)$ визуально практически совпадают (рис. 3, a). При этом они существенно отличаются от графиков функции $\bar{\varepsilon}_s^{(0)}(\lambda)$, рассчитанной без учета поверхностного слоя на основании (23). Достаточно близкое соответствие также имеет место между точным

$$J = 2i\varepsilon_s k_0 (\varepsilon_f - \varepsilon_s) (1 - \varepsilon_a \varepsilon_f^{-1}) (\varepsilon_s - \varepsilon_a)^{-1}$$

и восстановленным спектрами интегрального параметра поверхностного слоя J (рис. 3, b). Заметный шум восстановленной функции $J(\lambda)$ вызван округлением поляризационных углов. При

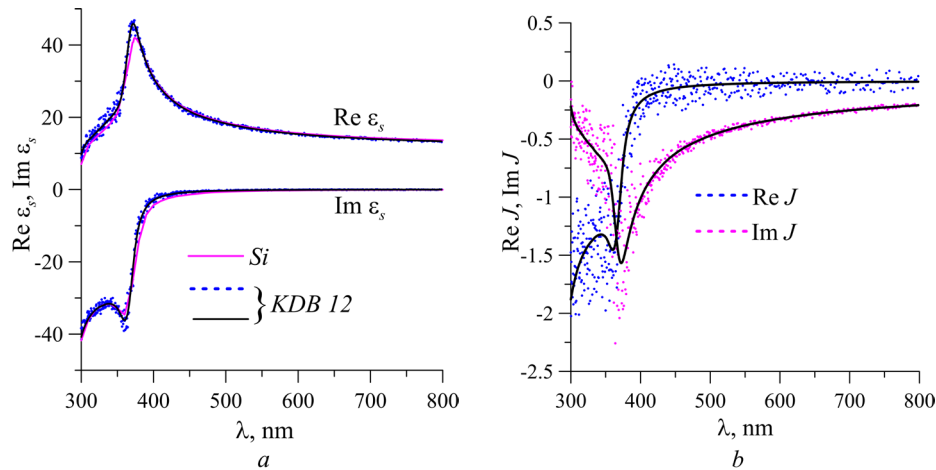


Рис. 4. Решение обратной задачи эллипсометрии для пластины марки КДБ12:
сплошные линии – спектр чистого кремния (а) и полиномиальная интерполяция дискретных данных
для восстановленных спектров $\varepsilon_s(\lambda)$ (а) и $J(\lambda)$ (b)

Fig. 4. Solution of the inverse ellipsometry problem for the KDB12 – type plate:
solid lines are the spectrum of pure silicon (a) and polynomial interpolation of discrete data
for reconstructed spectra $\varepsilon_s(\lambda)$ (a) and $J(\lambda)$ (b)

$d = 6$ нм, несмотря на довольно большие погрешности восстановления функции $J(\lambda)$ на рис. 3, d , точность восстановления спектра $\varepsilon_s(\lambda)$ на рис. 3, с приемлема для инженерных оценок.

Разработанный метод применен к экспериментальному исследованию оптических характеристик кремния, легированного бором, марки КДБ12. Образец был выращен по методу Чохральского. Он представлял собой плоскопараллельную пластину ориентации 100 с полированной рабочей и матированной обратной поверхностями. Для стабилизации поверхности образец был подвергнут быстрой термической обработке в атмосфере аргона [15].

Эллипсометрия образца выполнена на спектральном эллипсометре Uvicel 2 (Horiba, Франция). Спектры $\Delta(\lambda)$ и $\Psi(\lambda)$ были измерены с шагом 0,36 нм с погрешностью $\pm 0,0005^\circ$. В силу технологических ограничений использованы углы падения $\theta_1 = 73^\circ$, $\theta_2 = 80^\circ$. Результаты обработки экспериментальных данных по формулам (26), (27) представлены на рис. 4.

Зависимости на рис. 4 довольно близки к зависимостям на рис. 3 а, b, хотя и характеризуются гораздо более значительным шумом, вызванным использованием не оптимальных углов θ_1 и θ_2 . Это позволяет заключить, что поверхностный слой на исследованном образце также имеет толщину около 2 нм.

Практический интерес представляет оценка влияния тепловой обработки и примеси бора на ширину запрещенной зоны кремния. С этой целью на рис. 5 построена диаграмма Тауца [16].

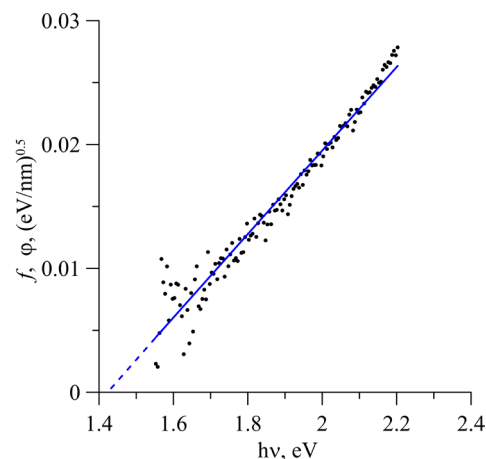


Рис. 5. Графики Тауца для пластины марки КДБ12

Fig. 5. Tauc graphs for KDB12 – type plate

Дискретными точками на рис. 5 представлена зависимость $f(h\nu) = h\nu\sqrt{4\pi(-\text{Im}\sqrt{\epsilon_s})(ch)^{-1}}$, где $h\nu$ – энергия фотона, c – скорость света, $\epsilon_s(\lambda) = \epsilon_s(ch/h\nu)$ – восстановленная функция (см. рис. 4, а). Прямая линия – линейная интерполяция дискретных данных для $f(h\nu)$, определенная методом наименьших квадратов. Она соответствует функции $\phi(h\nu) = B(h\nu - E_g)$, где B – параметр Тауца, отвечающий за степень упорядоченности материала, E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника [16]. Приведенным графикам отвечают $B = 0,034$ ($1/\sqrt{\text{эВ} \cdot \text{нм}}$), $E_g = 1,42$ эВ. Последнее значение заметно превышает ширину запрещенной зоны для чистого кристаллического кремния, которая по разным оценкам находится в диапазоне от 1,06 до 1,2 эВ [17, 18]. Объяснить увеличение величины E_g пластины марки КДБ12 можно появлением в поверхностном слое двухфазного кремния, состоящего из аморфного и кристаллического кремния.

Закключение. Получено аналитическое решение обратной задачи эллипсометрии о восстановлении комплексной диэлектрической проницаемости подложки ϵ_s при наличии на ее поверхности наноразмерного слоя с неизвестными заранее характеристиками. В нем влияние слоя на измеряемые поляризационные углы учитывается всего одним интегральным параметром, который восстанавливается одновременно с ϵ_s . Решение предполагает измерение поляризационных углов Δ и Ψ на заданной длине волны при двух углах падения света на структуру θ_1, θ_2 . Особенностью решения является его высокая чувствительность к ошибкам измерения Δ и Ψ . Снижение этой чувствительности предполагает оптимальный выбор θ_1 и θ_2 . Предложен и проиллюстрирован расчетами критерий такого выбора, предполагающий минимизацию коэффициента ошибки определения ϵ_s . Эффективность решения проверена в вычислительных и реальных экспериментах по исследованию кремниевых подложек с наноразмерными поверхностными слоями. В частности, получена оценка ширины запрещенной зоны кремниевой подложки, легированной бором, при формировании поверхностного слоя быстрой термической обработкой.

Благодарности. Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований «Фотоника и электроника для инноваций», подпрограмма «Фотоника и ее применение» (1.1. «Развитие физических основ и разработка методов волноводной спектроскопии тонкопленочных структур и сред»).

Acknowledgements. This work was financially supported by the State Program of Scientific Research “Photonics and Electronics for Innovations”, subprogram “Photonics and its Applications” (1.1. “Advancement of Physical Principles and Development of Methods for Waveguide Spectroscopy of Thin-Film Structures and Media”).

Список использованных источников

1. A model for spectroscopic ellipsometry analysis of plasma-activated Si surfaces for direct wafer bonding // N. Rauch, E. Andersen, I. G. Vicente-Gabás [et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2022. – Vol. 121, № 8. – P. 081603-1–081603-6. <https://doi.org/10.1063/5.0101633>
2. Сотский, А. Б. Соотношение взаимности для интерференционных покрытий / А. Б. Сотский, Е. А. Чудаков // *Весті Національної академії наук України. Серія фізико-математичних наук*. – 2022. – Т. 59, № 2. – С. 158–167. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2023-59-2-158-167>
3. Сотский, А. Б. Аномальный скин-эффект в металлических пленках / А. Б. Сотский, Е. А. Чудаков, Л. И. Сотская // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2024. – Т. 91, № 2. – С. 581–593.
4. *Handbook of Ellipsometry* / eds.: H. G. Tompkins, E. A. Irene. – New York: William Andrew, Inc., 2005. – 891 p. <https://doi.org/10.1007/3-540-27488-x>
5. Hiroyuki Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications* / Hiroyuki Fujiwara. – John Wiley & Sons, 2007. – 388 p. <https://doi.org/10.1002/9780470060193>
6. Aspnes, D. E. Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV / D. E. Aspnes, A. A. Studna // *Physical Review B*. – 1983. – Vol. 27, № 2. – С. 985–1009. <https://doi.org/10.1103/physrevb.27.985>
7. Jellison, G. E. Spectroscopic ellipsometry data analysis: measured versus calculated quantities / G. E. Jellison // *Thin Solid Films*. – 1998. – Vol. 313–314. – P. 33–39. [https://doi.org/10.1016/s0040-6090\(97\)00765-7](https://doi.org/10.1016/s0040-6090(97)00765-7)
8. Оптические характеристики естественного поверхностного слоя на кремниевой подложке // Н. И. Стаськов, А. Б. Сотский, Л. И. Сотская [и др.] // *Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины*. – 2006. – № 6–2 (39). – С. 60–62.
9. Стаськов, Н. И. Трехкомпонентная модель эффективной среды для определения состава слоев на кремниевых пластинах / Н. И. Стаськов, Л. И. Сотская // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2017. – Т. 84, №5. – С. 703–709.
10. Сотский, А. Б. Теория оптических волноводных элементов: монография / А. Б. Сотский. – Могилев: МГУ им. А. А. Кулешова, 2011. – 455 с.

11. Найфэ, А. Введение в методы возмущений: пер. с англ. / А. Найфе. – М.: Мир, 1984. – 535 с.
12. О выборе диапазонов измерения отражательной способности призмы связи при волноводной спектроскопии тонких пленок / А. Б. Сотский, Л. М. Штейнгарт, С. О. Парашков [и др.] // Известия РАН. Серия физическая. – 2016. – Т. 80, № 4. – С. 465–469.
13. Адамс, М. Введение в теорию оптических волноводов: пер. с англ. / М. Адамс. – М.: Мир, 1984. – 512 с.
14. Palik, E. D. Handbook of Optical Constants of Solids / E. D. Palik. – Orlando: Academic Press, 1985. – 1086 p. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-054721-3.50005-8>
15. Изменение оптических параметров кремния после быстрой термической обработки / В. М. Анищик, В. А. Горушко, В. А. Пилипенко [и др.] // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2021. – № 3. – С. 81–85. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2021-3-81-85>
16. Определение зонной структуры и проводимости нанокompозита Si@O@Al / А. С. Рудый, А. Б. Чурилов, С. В. Курбатов [и др.] // Журнал технической физики. – 2023. – Т. 93, вып. 10. – С. 1447–1458.
17. Fundamental Optical Properties of Materials I / W. C. Tan, K. Koughia, J. Singh, S. O. Kasap // Optical Properties of Condensed Matter and Applications / ed. J. Singh. – John Wiley & Sons, Ltd, 2006. – P. 1–25. <https://doi.org/10.1002/0470021942.ch1>
18. Kocovski, V. Transition between direct and indirect band gap in silicon nanocrystals / V. Kocovski, O. Eriksson, J. Ruzs // Physical Review B. – 2013. – Vol. 87. – P. 245401-1–245401-9. <https://doi.org/10.1103/physrevb.87.245401>

References

1. Rauch N., Andersen E., Vicente-Gabás I. G., Duchoslav J., Minenkov A., Gasiorowski J., Flötgen C. [et al.]. A model for spectroscopic ellipsometry analysis of plasma-activated Si surfaces for direct wafer bonding. *Applied Physics Letters*, 2022, vol. 121, no. 8, pp. 081603-1–081603-6. <https://doi.org/10.1063/5.0101633>
2. Sotsky A. B., Chudakov E. A. Reciprocity relations for interference coatings. *Vestsi Natsyynal'naiakademii navuk Belarusi. Seryya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2023, vol. 59, no. 2, pp. 158–167 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2023-59-2-158-167>
3. Sotsky A. B., Chudakov E. A., Sotskaya L. I. The anomalous skin effect in metallic films. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2024, vol. 91, no. 4, pp. 812–825. <https://doi.org/10.1007/s10812-024-01789-7>
4. Tompkins H. G., Irene E. A. (eds.). *Handbook of Ellipsometry*. New York, William Andrew, Inc., 2005. 891 p. <https://doi.org/10.1007/3-540-27488-x>
5. Hiroyuki Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications*. John Wiley & Sons, 2007, 388 p. <https://doi.org/10.1002/9780470060193>
6. Aspnes D. E., Studna A. A. Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV. *Physical Review B*, 1983, vol. 27, no. 2, pp. 985–1009. <https://doi.org/10.1103/physrevb.27.985>
7. Jellison, G. E. Spectroscopic ellipsometry data analysis: measured versus calculated quantities. *Thin Solid Films*, 1998, vol. 313–314, pp. 33–39. [https://doi.org/10.1016/s0040-6090\(97\)00765-7](https://doi.org/10.1016/s0040-6090(97)00765-7)
8. Stas'kov N. I., Sotskij A. B., Sotskaya L. I., Ivashkevich I. V., Krekoten' N. A., Bujko L. D. Optical characteristics of a natural surface layer on a silicon substrate. *Izvestiya Gomel'skogo gosudarstvennogo universiteta imeni F. Skoriny = Proceedings Francisk Skorina Gomel State University*, 2006, no. 6 (39), pp. 60–62 (in Russian).
9. Staskov N. I., Sotskaya L. I. Three-Component Model of an Effective Medium for Determining the Composition of Layers on Silicon Wafers. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2017, vol. 84, no. 5, pp. 764–769. <https://doi.org/10.1007/s10812-017-0542-z>
10. Sotskij A. B. *Theory of Optical Waveguide Elements*. Mogilev, Mogilev State A. Kuleshov University, 2011. 455 p. (in Russian).
11. Nayfeh Ali H. *Introduction to Perturbation Techniques*. Wiley-VCH, 1993. 536 p.
12. Sotsky A. B., Steingart L. M., Parashkov S. O., Sotskaya L. I. Choosing the ranges for measuring the reflectivity of a prism coupler in the waveguide spectroscopy of thin films. *Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya = Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2016, vol. 80, no. 4, pp. 465–469 (in Russian). <https://doi.org/10.7868/s036767651604030x>
13. Adams M. J. *An Introduction to Optical Waveguide*. John Wiley & Sons Inc, 1981. 401 p.
14. Palik E. D. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Orlando, Academic Press., 1985. 1086 p. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-054721-3.50005-8>
15. Anishchik V. M., Harushka V. A., Pilipenko U. A., Ponariadov V. V., Saladukha V. A., Omelchenko A. A. Variation of the silicon optical parameters after rapid heat treatment. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika = Journal of the Belarusian State University. Physics*, 2021, no. 3, pp. 81–85 (in Russian). <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2021-3-81-85>
16. Rudy A. S., Churilov A. B., Kurbatov S. V., Mironrenko A. A., Naumov V. V., Kozlov E. A. Determination of the band structure and conductivity of a nanocomposite Si@O@Al. *Technical Physics*, 2024, vol. 69, pp. 1753–1764. <https://doi.org/10.1134/s1063784224060379>
17. Tan W. C., Koughia K., Singh J., Kasap S. O. *Fundamental Optical Properties of Materials I. Optical Properties of Condensed Matter and Applications*. John Wiley & Sons, Ltd, 2006. 25 p.
18. Kocovski V., Eriksson O., Ruzs J. Transition between direct and indirect band gap in silicon nanocrystals. *Physical Review B*, 2013, vol. 87, pp. 245401-1–245401-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.245401>

Информация об авторах

Понкратов Дмитрий Васильевич – аспирант, Могилевский государственный университет имени А. А. Кулешова (ул. Космонавтов, 1, 212022, Могилев, Республика Беларусь). E-mail: d.v.ponkratov@yandex.by

Сотский Александр Борисович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики и компьютерных технологий, Могилевский государственный университет имени А. А. Кулешова (ул. Космонавтов, 1, 212022, Могилев, Республика Беларусь). E-mail: ab_sotsky@mail.ru

Стасков Николай Иванович – кандидат физико-математических наук, профессор кафедры физики и компьютерных технологий, Могилевский государственный университет имени А. А. Кулешова (ул. Космонавтов, 1, 212022, Могилев, Республика Беларусь). E-mail: ni_staskov@mail.ru

Сергейчик Анна Александровна – ведущий инженер ГЦ «Белмикроанализ», ОАО «Интеграл» (ул. Казинца, 121а, 220108, Минск, Республика Беларусь). E-mail: anna.omelchenko.13177@mail.ru

Information about the authors

Dmitry V. Ponkratov – Postgraduate Student, Mogilev State A. Kuleshov University (1, Kosmonavtov Str., 212022, Mogilev, Republic of Belarus). E-mail: d.v.ponkratov@yandex.by

Alexander B. Sotsky – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Professor of the Department of Physics and Computer Technologies, Mogilev State A. Kuleshov University (1, Kosmonavtov Str., 212022, Mogilev, Republic of Belarus). E-mail: ab_sotsky@mail.ru

Nikolay I. Staskov – Ph. D. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Physics and Computer Technologies, Mogilev State A. Kuleshov University (1, Kosmonavtov Str., 212022, Mogilev, Republic of Belarus). E-mail: ni_staskov@mail.ru

Hanna A. Siarheichyk – Leading Engineer at the State Center “Belmicroanalysis”, JSC “INTEGRAL” (121a, Kazintsa St., 220108, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: anna.omelchenko.13177@mail.ru