

ГЛАВА 5. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОТРАЖЕНИЯ СВЕТА ОТ РЕЛЬЕФНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ДИЭЛЕКТРИКОВ, ПОЛУПРОВОДНИКОВ И МЕТАЛЛОВ

Настоящая глава посвящена разработке нескольких методов моделирования отражения поляризованного света от шероховатой поверхности: 1) графоаналитическим методом; 2) методом эквивалентной пленки и 3) методом имитационного моделирования, т.е. путем создания вытравленного рельефа разной глубины.

Впервые для создания двумерного рельефа шероховатой поверхности автором была предложена в качестве модели случайная фазовая маска (СФМ), представляющая двумерную ортогональную решетку со случайным законом распределения высоких и низких квадратных ячеек со стороной a . Экспериментальные результаты подтвердили теоретически полученные соотношения. Измерения неровностей является очень важной задачей как при подготовке зеркально-гладких поверхностей, так и на разных этапах технологического процесса изготовления тонкопленочных гетероструктур, полупроводниковых и биологических наноструктур, и новых метаматериалов⁹. Из существующих методов оценки микронеровностей

⁹

1. V.G. Veselago, The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of n and μ , *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 (1968).
2. J.B. Pendry, A.J. Holden, D.J. Robbins, and W.J. Stewart, Magnetism from Conductors and Enhanced Nonlinear Phenomena, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **47**, 2075 (1999).
3. R. A. Shelby, D. R. Smith, and S. Schultz, Experimental Verification of a Negative Index of Refraction, *Science* **292**,77 (2001)
4. S. Linden, C. Enkrich, M. Wegener, J. Zhou, T. Koschny, and C.M. Soukoulis, Magnetic Response of Metamaterials at 100 Terahertz, *Science* **306**, 1351 (2004).
5. C. Enkrich, M. Wegener, S. Linden, S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, J. Zhou, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, Magnetic metamaterials at telecommunication and visible frequencies, [Phys. Rev. Lett., Vol. 95, 203901 \(2005\)](#)

можно выделить три большие группы: а) механические (измерение рельефа с помощью зонда атомно силового микроскопа или профилометра); б) оптические (регистрация интенсивности диффузного или полного интегрального рассеяния, интерферометрической или спекловой картины; измерение поляризационных характеристик и индикатрисы рассеянного света)¹⁰ и метод поверхностных плазмонов (для шероховатой поверхности или синусоидальной решетки)¹¹, где для возбуждения поверхностных плазмонов в тонких металлических (Ag, Au) пленках используется контактная стеклянная (кварцевая) призма.

Наличие микрорельефа на поверхности, как известно, изменяет электрические, механические и оптические свойства этой поверхности. Большая чувствительность поляризационных характеристик отраженного света к наличию неровностей позволила использовать эллипсометрический метод для оценки качества подготовки поверхности. Однако, аналитические соотношения между статистическими параметрами неровностей поверхности и эллипсометрическими углами, измеренными на той же поверхности [18], не получили практического применения, прежде всего, из-за трудности статистического описания шероховатой поверхности [198, 199].

В любом случае, если поверхность статистически неоднородна, то необходимо решить задачу ее описания, т.е. выбрать достаточное число параметров, однозначно ее описывающих. Способы решения обратной задачи эллипсометрии для шероховатых поверхностей делятся на два класса: а) аналитические, использующие математическое моделирование на основе формул Френеля, учитывающих тип поляризации света; и б) физические, использующие моделирование шероховатой поверхности для установления

¹⁰ Франсон М. Оптика спеклов. М., "Мир", 1980.; Г. ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами. - Москва, ИЛ, 1961, с.536.

¹¹ Heinz Raether, **Surface Plasmons** on Smooth and Rough Surfaces and on gratings, Springer-Verlag, 1988, p. 1-135.

корреляционной связи между состоянием поляризации отраженного света и известными параметрами модели.

Неоднократно предпринимались попытки моделировать шероховатую поверхность с помощью периодического рельефа с известной геометрией: дифракционных решеток прямоугольного [200] и синусоидального [201] , и треугольного (эшелетт) профиля [202, 203] и т.д.

Для описания статистически неровной поверхности, распределение высот ξ неровностей которой подчиняется нормальному закону, достаточно следующего набора параметров: дисперсии σ , среднего угла наклона микронеровностей γ , радиуса корреляции l и типа корреляционной функции W . Корреляционная функция $W(\xi_1, \xi_2)$ определяется как среднее от произведения высот неровностей в двух различных пространственно разнесенных точках поверхности и в простейшем случае для гауссовой корреляции равна $W(\xi) = \exp[-\xi^2/l^2]$. Шероховатая поверхность описывается, как правило, совокупностью случайной и периодической функций, соотношение между которыми определяется набором технологических факторов [198, 200, 203]. В этом случае приведенные статистические параметры дают очень приблизительное описание поверхности [197, 198]. Автором был предложен новый метод оценки качества обработки поверхности, использующий инвариантность оптических констант идеальной поверхности и было показано, что нельзя однозначно связать изменение параметров произвольной шероховатой поверхности с изменениями эллипсометрических углов Ψ и Δ и/или оптических констант n и k .

§ 5.1. Метод математического моделирования шероховатой поверхности эквивалентной пленкой

Метод эквивалентной среды (пленки) впервые предложен, по-видимому, Гарнеттом (1904 г.) [58] для объяснения цветов металлических пленок и двухкомпонентных смесей: металлических стекол и коллоидных растворов

благородных металлов. Гарнетт использовал формулу Лоренц – Лорентца (1880 г.), которая связывает показатель преломления среды $(n^2 - 1)/(n^2 + 2) \equiv \alpha = 4\pi N \alpha_{\text{эл}} / 3$ с электронной поляризуемостью $\alpha_{\text{эл}}$ для N составляющих частиц. В случае смеси k веществ, правая часть заменяется суммой k членов, каждый из которых относится лишь к одному из веществ:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \equiv \sum_i^k \alpha_{\text{эл}}^i = \frac{4\pi}{3} \sum_i^k N_i \alpha_{\text{эл}}^i .$$

Позднее Бруггеман (1935 г.) [59] расширил рамки применения этого метода для описания оптических свойств гетерогенных кристаллических структур, содержащих i - компонент.

Для шероховатой поверхности в 1948 г. Фейнбергом [204] была предложена замена оптически неровной поверхности на эквивалентную ей идеальную поверхность с эффективным импедансом, определяемым параметрами неровной поверхности. В настоящее время существует большое число работ, где используется метод эквивалентной среды, например, [18, 205-209] для описания субмонослойных и несплошных (островковых) пленок, поликристаллических пленок и неровных поверхностей. Метод эквивалентной среды (пленки) основан на принципе аддитивности: поляризуемость единичного объема вещества α_{AC} , состоящего из частиц (молекул) двух сортов, равна сумме поляризуемостей единичных объемов этих частиц α_A и α_C . Гарнетт [58] полагал, что распределение частиц сорта А в среде, состоящей из частиц С, является случайным и однородным, и поэтому считал независимыми от координаты концентрации μ_A и μ_C , а **расстояние между частицами предполагал много меньше длины волны света**. Поляризуемость двухкомпонентного вещества, согласно **принципу аддитивности**, выражается формулой (129):

$$\alpha_{AC} = \alpha_A q_A + \alpha_C q_C , \quad q_A + q_C = 1, \quad (129)$$

где q_A и q_C - объемные доли частиц А и С.

Основной смысл метода, предложенного Гарнеттом, состоит в замене неоднородной среды или пленки на однородную среду или пленку с оптическими свойствами, определяемыми статистическим характером распределения, размером и оптическими свойствами частиц. Правомерность замены шероховатого слоя на изотропную эквивалентную пленку можно обосновать тем, что исследуемые поверхности имеют существенно анизотропную диаграмму рэлеевского рассеяния отношение зеркальной (когерентной) к диффузной (некогерентной) компоненте в отраженной волне составляет $10^2 - 10^4$. Из этого сразу следует, что высота неровностей $h < \lambda$ и расстояние между неровностями l сравнимо с высотой h [210]. Другими словами, такие поверхности заведомо удовлетворяют критерию шероховатости Рэлея для разности фаз $\delta = (4\pi h \cos \varphi / \lambda) < \pi/2$.

Очевидно, что при косом падении разброс по фазам будет гораздо меньше, чем при нормальном падении света, благодаря малости $\cos \varphi$, следовательно, детали поверхности будут мало различимы и их влияние на отражение уменьшится [57, 211]. При изменении угла падения света φ от 45° до 85° для $\lambda = 0.633$ мкм из условия Рэлея $h < (\lambda/8 \cos \varphi)$ получим, что оно будет выполняться для высот h от 0.112 мкм до 0.908 мкм, соответственно.

При диаметре светового луча ~ 1 мм зондируемая площадь поверхности составляет несколько мм^2 и содержит более 10^6 случайно распределенных дефектов, что позволяет допустить слабую зависимость отражающих свойств поверхности от координаты [212], следовательно, нет необходимости абсолютно подробного описания шероховатого слоя поверхности, достаточно приписать ему некоторые средние свойства, определяемые лишь небольшим числом параметров [57].

5.1.1. Анализ метода: оптические свойства эквивалентных пленок

Шероховатый слой можно заменить эквивалентной пленкой (Рис. 61), описываемой двумя независимыми параметрами: некоторой усредненной толщиной d_e и объемным коэффициентом заполнения q , характеризующим,

какую часть объема пленки занимают "дефекты", состоящие из материала подложки. Оптические параметры эквивалентной пленки n_e и k_e однозначно определяются коэффициентом q и моделью, связывающей поляризуемость эквивалентной пленки с поляризуемостью составляющих ее частиц.

Остановимся на физической сути принятой модели и оптических свойствах эквивалентной пленки. Параметр q , с одной стороны, описывает макроскопические свойства эквивалентной пленки, такие как: число дефектов на единицу площади, некоторый усредненный профиль шероховатого слоя; а с другой стороны, q описывает микроскопические свойства пленки: плотность, поляризуемость единичного объема пленки, и определяет параметры волнового вектора электромагнитной волны в пленке. Заметим, что эквивалентная толщина d_e не равна толщине шероховатого слоя, определяемого максимальной высотой неровности R_{max} , поэтому d_e нельзя непосредственно сравнивать с результатами интерферометрической оценки [213] без статистической обработки. Параметр q характеризует плотность дефектов на единицу зондируемой площади и позволяет судить о некотором усредненном профиле шероховатой поверхности.

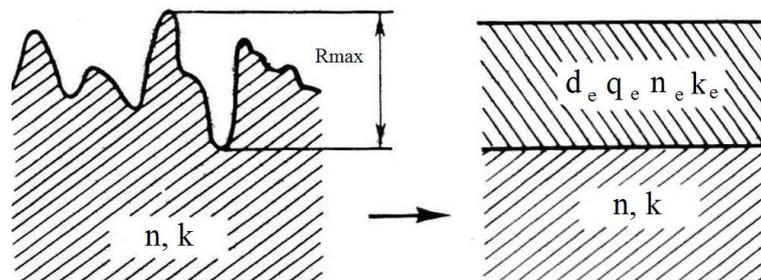


Рис. 61. Схема замены шероховатого слоя эквивалентной пленкой

Поэтому с точки зрения макро представлений, пленка есть совокупность пустот и некоторого числа частиц произвольной формы с характерными размерами меньше длины волны. Одновременно, с точки зрения микро представлений эта же пленка является изотропной смесью частиц двух типов (воздуха и вещества подложки), поляризуемость которых α_v и α_s постоянна и

не зависит от плотности вещества, а для поляризуемости единичного объема эквивалентной пленки α_e выполняется условие аддитивности (129): $\alpha_e = q\alpha_s + (1-q)\alpha_v$. Если пустоты заполнены воздухом, то $\alpha_v \approx 0$ и $\alpha_e = q\alpha_s$, т.е. поляризуемость эквивалентной пленки линейно зависит от q , т.к. $\alpha_s = \text{const}$. Вспомогательные параметры описания эквивалентной пленки — это оптические константы n_e и k_e ; вычисленные из условия аддитивности поляризуемости пленки (129).

В этом параграфе рассмотрены две модели, основанные на двух способах определения поляризуемости вещества: первая с поправкой Г. А. Лорентца - $\alpha = 3 \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}$ и вторая без поправки - $\alpha = \varepsilon - 1$. Поправка Лорентца учитывает влияние электрического поля, создаваемого окружающими частицами. Во второй модели действующее на частицу поле равно падающему. Исходя из двух способов определения поляризуемости, рассмотрены две модели шероховатого слоя. Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_e = \varepsilon'_e - i\varepsilon''_e$ и комплексный показатель преломления $N_e = n_e - ik_e$ для первой модели определяются следующим образом [см. глава 1 §1.4]:

$$\frac{\varepsilon_e - 1}{\varepsilon_e + 2} = q \frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_s + 2} \equiv q\alpha_s, \quad (38)$$

$$N_e = n_e - ik_e = \sqrt{\frac{1 + 2q\alpha_s}{1 - q\alpha_s}} = \left(1 + 2q \frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_s + 2}\right)^{1/2} / \left(1 - q \frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_s + 2}\right)^{1/2} \quad (39)$$

и для второй модели:

$$\varepsilon_e = q(\varepsilon_s - 1) + 1 \equiv q\alpha_s + 1, \quad (130)$$

$$N_e = \sqrt{1 + q\alpha_s} = \sqrt{1 + q(\varepsilon_s - 1)}, \quad (131)$$

где ε_s и α_s — диэлектрическая проницаемость и поляризуемость единичного объема материала подложки.

Анализ уравнений (38, 39, 130 и 131) показывает, что в диэлектриках ($k_s=0$) никогда не будет наблюдаться явление резонанса от концентрации. Концентрационный резонанс возможен только для поглощающих

материалов при выполнении следующих условий для материала подложки:

1) если показатель преломления $0 < n_s < 1$ и $n_s < k_s$, но $k_s > 2$, как, например, для меди,

$$q = q^*, \quad n_s > 1/k_s, \quad (132)$$

2) если $n_s > 1$ и $n_s \leq k_s$. но $k_s > 2$, как, например, для молибдена,

$$q = q^*, \quad \sqrt{k_s^2 - 2} > n_s > \sqrt{k_s^2 - 4}. \quad (133)$$

Наиболее яркий резонанс может наблюдаться при выполнении условия (132) для таких материалов, как **медь, серебро, золото**. Аналогичные условия выполняются {см. ссылку [4]} для резонансного отражения при возбуждении поверхностных плазмонов. Известно аналогичное явление концентрационной зависимости оптических свойств в неупорядоченных металлических сплавах [214, §20-21] и явление опалесценции, сопровождающееся резким усилением рассеяния света чистыми веществами, находящимися в критической точке газ-жидкость [215].

Для иллюстрации особенностей оптических свойств эквивалентных пленок были проведены эллипсометрические измерения серии образцов, изготовленных из материалов с различными значениями действительной ε'_s и мнимой ε''_s частей диэлектрической функции:

а) из меди- $\varepsilon'_s < 0$, $\varepsilon''_s \gg 1$ или $n_s < k_s$ и $n_s < 1$;

б) из молибдена- $\varepsilon'_s \approx 0$, $\varepsilon''_s > 1$ или $n_s \approx k_s$ и $n_s > 1$; $k_s > 1$, т. е. вблизи

плазменной частоты ω_p ;

в) и из плавленого кварца- $\varepsilon'_s > 0$, $\varepsilon''_s = 0$ или $n_s > 1$ и $k_s = 0$.

На рисунках 62 и 62а приведены расчетные зависимости действительной ε'_e и мнимой ε''_e частей диэлектрической проницаемости и комплексного показателя преломления эквивалентной пленки для двух металлов: меди молибдена, используя формулы для первой модели (38, 39) и для второй модели (130, 131). Для шероховатой поверхности оптические свойства любой эквивалентной пленки определяются только параметрами

воздуха при $q=0$: $\varepsilon'_e = n_e^2 = 1$ и $\varepsilon''_e = k_e^2 = 0$; и параметрами только подложки при $q=1$: $\varepsilon'_e = \varepsilon'_s$, $\varepsilon''_e = \varepsilon''_s$ и $n_e = n_s$, $k_e = k_s$. Для расчетов оптические константы материалов на длине волны 0.633 мкм взяты из работ [216-218].

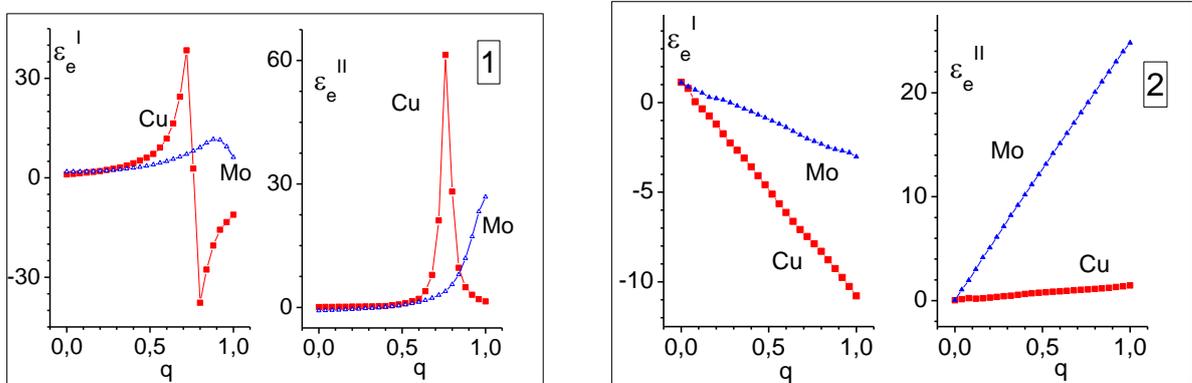


Рис. 62. Расчетные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической функции ε'_e и ε''_e эквивалентной пленки от объемной доли q материала **меди** и **молибдена**, рассчитанные по двум моделям: 1- первая модель, $N_e = [(1 + 2q\alpha_s)/(1 - q\alpha_s)]^{1/2}$, где в ε'_e и ε''_e для меди возникает концентрационный резонанс при $q=0,72$ и $q=0,76$, соответственно; 2- вторая модель, $N_e = (1 + q\alpha_s)^{1/2}$. Длина волны 0.633 мкм.¹²

Как видно из рисунков 62 и 62а, для первой модели в эквивалентной пленке может возникать концентрационный резонанс, т.е. зависимости $n_e(q)$ и $k_e(q)$ могут принимать экстремальные значения при некотором значении q^* , величина которого находится из уравнений (38 и 39) для каждого материала. Особенно важно отметить, что вещественная часть диэлектрической функции меди не только имеет близко расположенные минимум и максимум, но и при этом проходит через ноль, так, как если бы в пленке все электроны были свободны.

¹² В работе [Wissmann P., Wittmann E. Observation of negative values of the changes of the ellipsometric phase differences during gas absorption on rough metal films. –Surf. Sci., **152-153**, 1985, p. 638-646] приведен график неоднозначного поведения диэлектрической функции при адсорбции газа на шероховатой металлической поверхности.

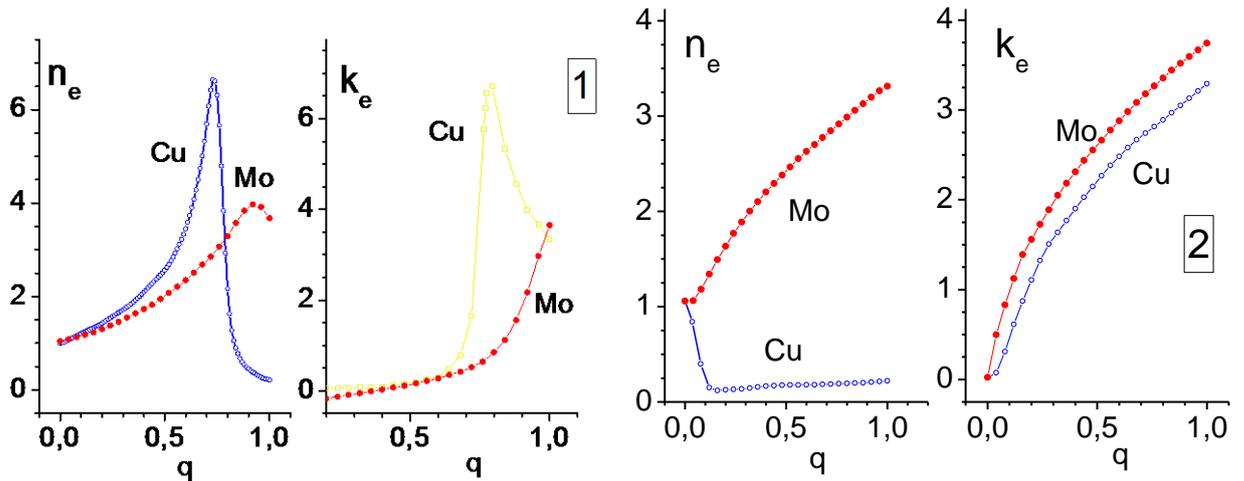


Рис. 62а. Зависимости оптических констант n_e и k_e эквивалентной пленки от объемной доли q материала **меди** и **молибдена**, рассчитанные по двум моделям: 1- первая модель, $N_e = [(1 + 2q\alpha_s)/(1 - q\alpha_s)]^{1/2}$; 2-вторая модель, $N_e = (1 + q\alpha_s)^{1/2}$. Длина волны 0.633 мкм.

Для второй модели резонансов не наблюдается. Действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости эквивалентной пленки $\varepsilon'_e(q)$ и $\varepsilon''_e(q)$ линейно зависят от коэффициента заполнения q , как следует из (131), а $n_e(q)$ и $k_e(q)$ монотонно возрастают для всех материалов, кроме меди.

Чтобы понять, как распространяется свет в эквивалентной пленке, рассмотрим параметры волнового вектора электромагнитной волны. Введем основные обозначения и формулы для геометрических законов отражения и преломления на границе поглощающих сред. При падении на плоскую границу поглощающей среды возникают две волны: однородная **отраженная** с вектором k'_1 и неоднородная **преломленная** волна с комплексным вектором $k = k' - ik''$, являющаяся суперпозицией двух волн.



Рис. 63.

Прошедшая волна затухает в направлении вектора k'' , который перпендикулярен плоскости равных амплитуд и составляет вещественный угол преломления χ с вектором k' .

$$k' = k_1 \frac{\sin \varphi}{\sin \chi} = \frac{\omega}{c} n_\varphi, \quad k'' = \frac{\omega}{c} k_\varphi, \quad (134)$$

где n_φ - показатель преломления и k_φ - коэффициент поглощения, определяющий глубину проникновения света в поглощающую среду h_φ , на которой интенсивность света прошедшей волны убывает в e раз, согласно закону Бугера-Ламберта:

$$I = I_0 e^{-i\alpha z}, \quad I = I_0 / e|_{z=h_\varphi}, \quad \text{где } h_\varphi = \lambda_0 / 4\pi k_\varphi \equiv 1/\alpha \quad (135)$$

и где α - коэффициент затухания. На Рис. 63 было показано, что световая волна в поглощающей среде неоднородна и для нее вводится комплексный волновой вектор и вещественный угол преломления χ [218], а также показатель преломления n_φ и коэффициент поглощения k_φ , определяющий глубину проникновения света в поглощающую среду h_φ , которые вычисляются согласно выражению (136).

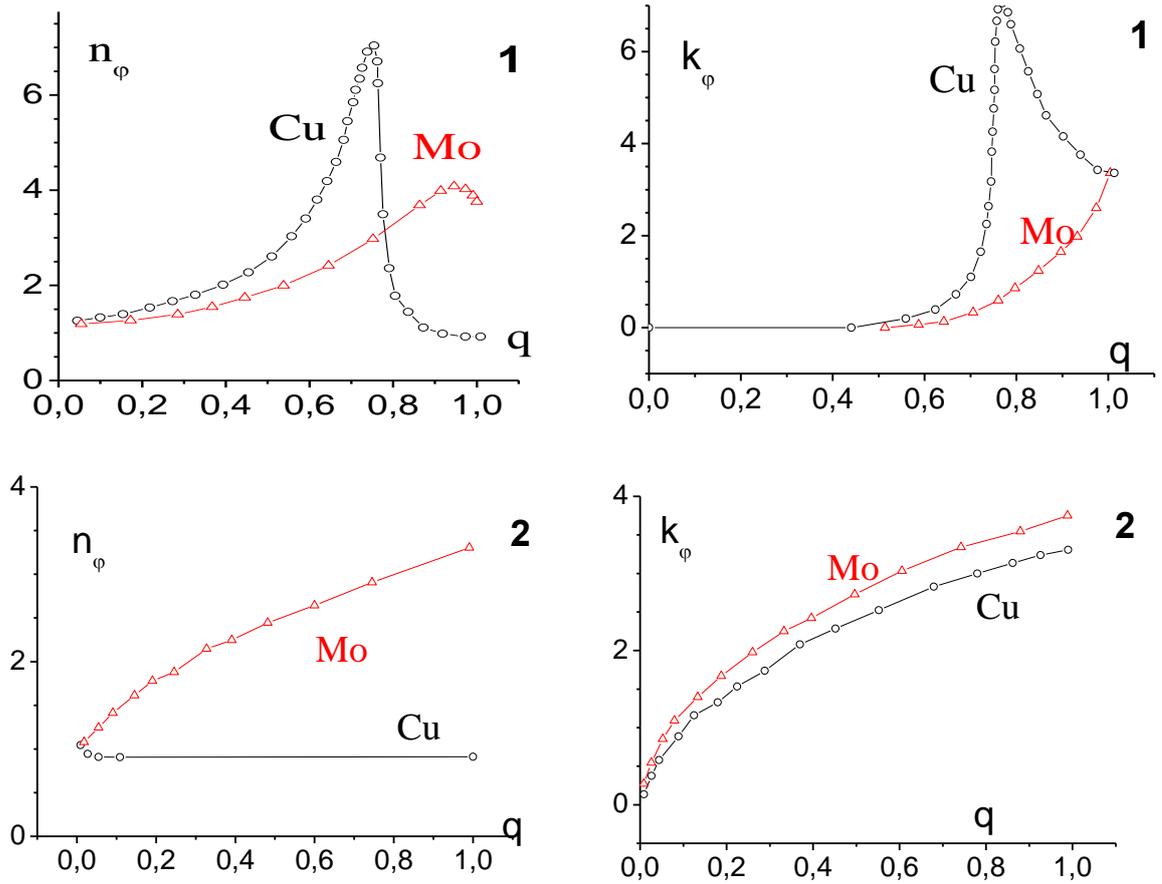


Рис. 64а. Параметры волнового вектора n_φ и k_φ эквивалентной пленки от коэффициента заполнения q для первой модели (с поправкой Г. А. Лорентца) при угле падения света $\varphi_0=70^\circ$ для двух металлов подложки.

$$k = k' - ik'', \quad k' = k_1 n_\varphi, \quad k'' = k_1 k_\varphi, \quad \chi = \arcsin[\sin \varphi / n_\varphi],$$

$$h_\varphi = \lambda_0 / 4\pi k_\varphi \equiv 1/\alpha, \quad I = I_0 e^{-\alpha z}, \quad I|_{z=h_\varphi} = I_0 / e,$$

$$n_\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{(\varepsilon'_e - \sin^2 \varphi)^2 + \varepsilon'_e + \sin^2 \varphi} \right]^{1/2} \quad (136)$$

$$k_\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{(\varepsilon'_e - \sin^2 \varphi)^2 - \varepsilon'_e + \sin^2 \varphi} \right]^{1/2}$$

Показатель преломления n_φ и коэффициент поглощения k_φ , а также вещественный угол преломления χ вычислены, используя значения ε'_e и ε''_e , найденные по формулам (38, 39) и (130, 131). Результаты расчетов параметров, определяющих распространение преломленной волны в эквивалентной пленке, приведены на рисунке 64 для двух материалов и для

двух моделей при условии падения волны с вектором k_I под углом $\varphi_0=70^\circ$ к нормали поверхности, как показано на Рис 63.

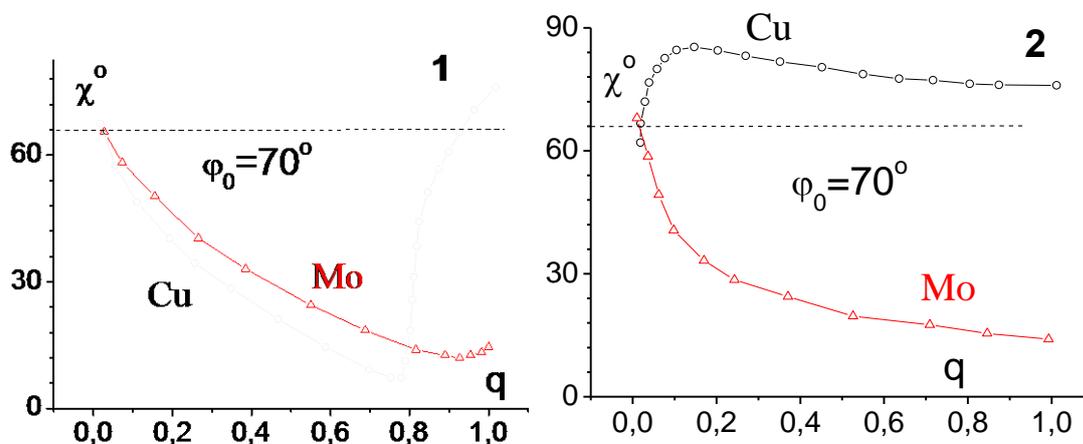


Рис. 64б. Параметр волнового вектора χ эквивалентной пленки от коэффициента заполнения q для первой модели (1) при угле падения света $\varphi_0=70^\circ$ для двух металлов подложки и для второй модели (2).

По первой модели в окрестности $q \approx q^*$ для меди затухание света в эквивалентной пленке может быть больше, чем в материале подложки, а глубина проникновения света (скин-слой) гораздо меньше, вещественный угол преломления при этом очень мал, что означает распространение волны в пленке почти перпендикулярно поверхности.

Следует обратить внимание еще на одну особенность: во второй модели поглощение для меди в эквивалентной пленке не превышает величину исходного материала, но при этом возникает волна, распространяющаяся почти вдоль поверхности. Вещественный угол преломления при этом близок к 90° .

Основные выводы по оптическим свойствам эквивалентных пленок
к разделу 5.1.1

Проведенный анализ позволяет сделать следующие выводы:

1. Действительная ε'_e и мнимая ε''_e составляющие комплексной диэлектрической проницаемости эквивалентной пленки линейно зависят

от q , без учета поправки Г.А. Лоренца (вторая модель) для действующего на частицу электрического поля. С учетом поправки Лорентца (первая модель) эти же величины существенно нелинейны и ε'_e может менять знак, а диэлектрические потери ε''_e могут иметь ярко выраженный максимум.

2. Комплексный показатель преломления эквивалентной пленки может иметь экстремумы в зависимостях $n_e(q)$ и $k_e(q)$, особенно ярко проявляющиеся в первой модели для сильно-поглощающих материалов. Концентрационный резонанс может наблюдаться не для любых материалов, а только, когда выполняется условие: $k_s > 2$, а $n_s < k_s$.
3. Наличие аномально-высокого поглощения в тонком слое эквивалентной пленки на зеркально-гладкой поверхности может приводить к коллапсу при отражении мощного пучка света от такой поверхности.
4. Особенно интересно поведение вещественного угла преломления χ , определяющего угол между векторами k' и k'' . Для меди χ , характеризующий распространение волны электромагнитного излучения, может быть меньше, равным и большим, чем угол падения света φ_0 .
5. При моделировании шероховатости металлических поверхностей с помощью эквивалентной пленки следует помнить о возможности неоднозначности интерпретации эллипсометрических измерений и необходимости дополнительного анализа для устранения неоднозначности.

5.1.2. Графоаналитический метод определения параметров наноразмерных неровностей металлических поверхностей (метод эквивалентной пленки)

Задача настоящего раздела рассмотреть возможности графического решения обратной задачи эллипсометрии, т.е. восстановление параметров шероховатости зеркально-гладкой поверхностей по измеренным эллипсометрическим углам Ψ и Δ , используя две модели (38, 39) и (130, 131),

основанные на разных способах определения поляризуемости эквивалентной пленки α_e , и затем рассмотреть также область применимости модели эквивалентной пленки.

В общем случае графическое решение обратной задачи эллипсометрии с помощью номограмм на плоскости $\Psi - \Delta$ для системы "однородная поглощающая пленка - поглощающая подложка" невозможно, поскольку номограммы будут состоять из семейства трех ($d=\text{const}$, $n=\text{const}$, $k=\text{const}$) взаимно пересекающихся линий, не дающих однозначного значения параметров пленки для любой пары экспериментальных значений эллипсометрических углов.

Преимущество предлагаемого метода графического решения обратной задачи по определению параметров шероховатого слоя состоит в том, что он дает возможность однозначного решения, поскольку из четырех параметров эквивалентной пленки только два — d_e и q — являются независимыми, а n_e и k_e однозначно связаны с q в рамках выбранных моделей.

Таким образом, эквивалентная пленка характеризуется в нашей модели четырьмя параметрами d_e , n_e , k_e и q , каждый из которых несет информацию о свойствах шероховатой поверхности.

Построение номограмм на плоскости для однослойной системы "однородная поглощающая пленка- поглощающая подложка" состоит из ряда последовательных вычислений значений пары эллипсометрических углов Ψ и Δ для различных комбинаций двух параметров эквивалентной пленки: толщины d_e , и коэффициента заполнения q , согласно основному

$$\rho \equiv \frac{R_p}{R_s} = \text{tg} \Psi e^{i\Delta} = \frac{r_{01p} + r_{12p} e^{-2i\delta}}{1 + r_{01p} r_{12p} e^{-2i\delta}} \cdot \frac{1 + r_{01s} r_{12s} e^{-2i\delta}}{r_{01s} + r_{12s} e^{-2i\delta}},$$

где r_{01} , r_{12} -коэффициенты отражения Френеля p - и s -поляризованного света на границах "воздух-пленка" и "пленка-подложка", соответственно, а δ -разность фаз p - и s -компонент. В этом случае на плоскости $\Psi - \Delta$ получим два семейства линий: равной толщины ($d_e = \text{const}$) и равного коэффициента

заполнения ($q = \text{const}$). В рамках выбранной модели параметры n_e и k_e связаны соотношениями – 38, 39, и 130, 131 с коэффициентом заполнения q (Рис.62).

Для меди (см. Рис. 65) и молибдена (см. Рис. 66) приведены номограммы, для построения которых варьировались два независимых параметра d_e и q эквивалентной пленки. Точки $q = 0$ и $q = 1$ совпадают, так как соответствуют отсутствию пленки на идеально гладкой исследуемой поверхности.

На Рис. 66-II, показана **неоднозначность** решения по второй модели для **молибдена**: линии равной толщины для $q < 0,1$ и для $q > 0,2$ образуют два семейства взаимно пересекающихся кривых. Линии равного коэффициента заполнения также образуют два семейства взаимно пересекающихся кривых. Все экспериментальные точки ложатся на линию $d_e = 1000 \text{ \AA}$, что не отражает реальную ситуацию, так как в процессе полировки высота неровностей шероховатого слоя должна уменьшаться. Учитывая эти соображения, на Рис. 66-III, приведена часть номограммы для $q < 0,2$.

На номограммы рис. 65 и 66 нанесены результаты экспериментальных измерений эллипсометрических углов Ψ и Δ , выполненных на эллипсометре ЛЭФ-ЗМ с рабочей длиной волны 0.63 мкм на разных стадиях полировки меди и молибдена. Начальная стадия полировки в нашем случае (точка 1) относится к поверхности, уже имеющей зеркальный блеск, конечная стадия близка к предельно достижимому качеству полировки исследуемого материала.

Определенные из номограммы параметры эквивалентной пленки d_e и q , а также значения n_e и k_e , соответствующие найденному q , для всех исследуемых образцов приведены в одной таблице 23 для первой и для второй модели.

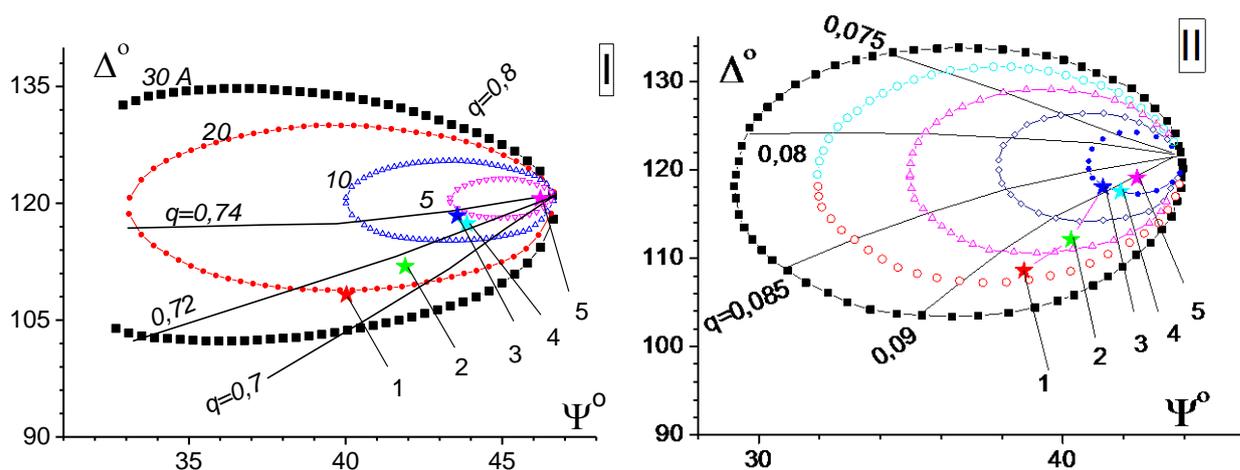


Рис. 65. Номограммы для меди. Экспериментальные точки ☆1-☆5 получены: 1- в начале и 5- в конце полировки типичного образца, имеющего зеркально-гладкую поверхность; I-первая модель, II-вторая модель; угол падения света $\varphi_0=65^\circ$; $\lambda = 0,63$ мкм.

Точность определения параметров в силу нелинейности системы зависит от величины этих параметров и составляет 0,001 по q и $0,1 \text{ \AA}$ по d_e . Согласно результатам измерений, толщина d_e последовательно уменьшается по мере улучшения качества полировки металлов, тогда как коэффициент заполнения пленки обнаруживает только слабую тенденцию роста, что может указывать на сохранение профиля шероховатости поверхности при уменьшении общей толщины шероховатого слоя в данном процессе полировки. Оптические константы n_e и κ_e эквивалентной пленки характеризуют комплексный волновой вектор $k = k' - ik''$ неоднородной электромагнитной волны, распространяющейся в ней. Вещественный угол преломления χ , образованный векторами k' и k'' , равный согласно (31) $\chi = \arcsin[\sin\varphi/n_\varphi]$, как было показано, для двух металлов по **первой модели** всегда меньше, угла падения φ . По **второй модели** для меди $\chi \approx 90^\circ$, поскольку n_φ меньше единицы; а в случае молибдена для обеих моделей волна затухает в пленке медленнее, чем в материале подложки.

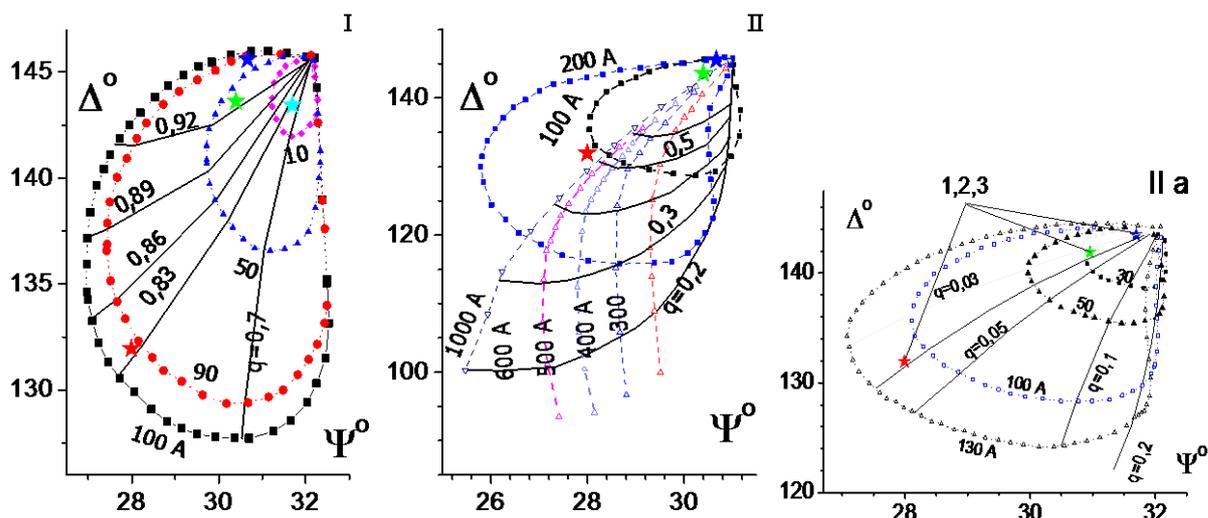


Рис. 66. Номограммы для молибдена. Экспериментальные точки $\star 1$ - $\star 3$ получены: 1- в начале и 3- в конце полировки типичного образца, I-первая модель, II-вторая модель, угол падения света $\varphi_0=65^\circ$; $\lambda = 0,63$ мкм; IIa- часть номограммы II для $q \leq 0.2$.

Полученные данные свидетельствуют о пригодности графического метода и выше приведенных моделей для количественного описания степени шероховатости зеркально-гладких поверхностей. Важно отметить, что наши данные хорошо коррелируют с результатами статистической обработки интерферограмм и профилограмм полированных поверхностей ряда материалов, в том числе и меди, полученными в работах [201, 203].

В то же время предлагаемый нами метод контроля не требует сложного аппаратного оснащения и отличается незначительной трудоемкостью. Это позволяет рекомендовать эллипсометрический метод измерений в сочетании с предложенной графической методикой обработки результатов для массового контроля шероховатости полированных поверхностей. Однако, следует отметить случаи, когда возникает неоднозначность решения. Эта неоднозначность может быть устранена проведением анализа решений с точки зрения их физического смысла.

5.1.3. Метод оценки наноразмерных шероховатостей МЛЭ пленок (Ge-Ge)

Моделирование осцилляций эллипсометрических углов Ψ и Δ при эпитаксиальном росте германия на германиевой подложке

Приведем пример применения метода эквивалентной пленки для интерпретации измеренных эллипсометрических углов в процессе роста монослойных покрытий методом молекулярно-лучевой эпитаксии, когда шероховатость поверхности лежит в субнанометровом диапазоне. На Рис.67 показано изменение углов Ψ и Δ на плоскости $\delta\Psi$ - $\delta\Delta$ при росте одного монослоя германия на германиевой подложке.

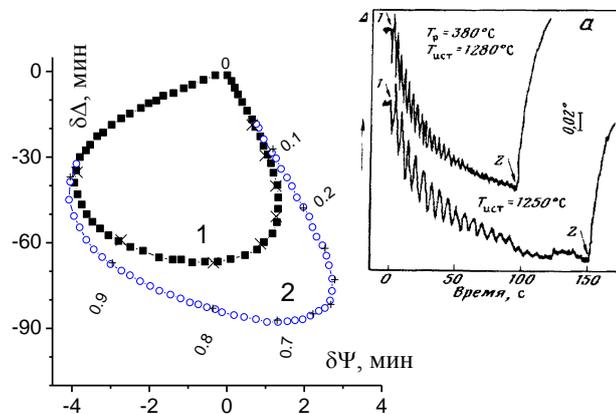


Рис. 67. Изменения эллипсометрических углов Ψ и Δ , вычисленные по двум моделям, на плоскости $\delta\Psi$ - $\delta\Delta$ в процессе роста одного монослоя германия, выращенного эпитаксией из молекулярного пучка на Ge. Цифры около кривых соответствуют различным значениям q . Приращения эллипсометрических углов $\delta\Psi$ и $\delta\Delta$ выражены в угловых минутах. На вставке показаны экспериментальные осцилляции угла $\Delta(t)$, полученные в работе [220] при температуре подложки 400°C .

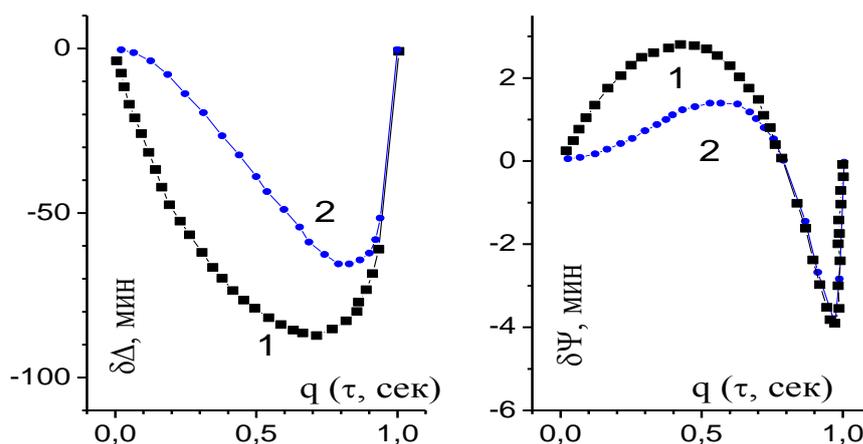


Рис. 68. Приращения $\delta\Psi$ и $\delta\Delta$ эллипсометрических углов Ψ и Δ за счет роста эпитаксиального слоя Ge как функции коэффициента заполнения q . Показаны два варианта расчета: 1-толщина пленки постоянна $d_e = \text{const}$; 2- с учетом дефектов роста - $d_e = 5.65 q$.

Оптические константы для атомарно-чистой поверхности германия взяты из работы [219]. Кривая 1 построена из предположения, что монослойная пленка толщиной равной 5.65 \AA растет путем последовательного заполнения вакантных узлов кристаллической решетки германия, т.е. $d_e = \text{const}$, а q изменяется от нуля до единицы. Кривая 2 построена для пленки с учетом образования дефектов роста. При этом толщина пленки связана с коэффициентом заполнения q соотношением $d_e = 5.65 q$. Если считать, что коэффициент заполнения q пропорционален времени при постоянном потоке частиц, то зависимости $\Psi(q)$ и $\Delta(q)$ будут аналогичны зависимостям $\Psi(t)$ и $\Delta(t)$, которые наблюдались в эксперименте [220]. На Рис.68 для плоскости $(\delta\Psi - q)$ и для плоскости $(\delta\Delta - q)$ приведены зависимости $\delta\Psi(q) = \Psi(0) - \Psi(q_i)$ и $\delta\Delta(q) = \Delta(0) - \Delta(q_i)$, соответственно, в процессе роста одного монослоя пленки. Из этих зависимостей следует вывод, что в процессе эпитаксиального роста можно наблюдать осцилляции эллипсометрических углов Ψ и Δ . Характер осцилляций слабо зависит от

выбранных моделей роста пленки при том, что диапазон изменений составляет $\approx 1.5^\circ$ для $\delta\Delta$ и несколько угловых минут для $\delta\Psi$. Именно поэтому, в эксперименте регистрируется только осцилляции эллипсометрического угла Δ . Осцилляции Ψ и Δ могут уменьшиться и даже совсем исчезнуть, как показано на вставке из экспериментальной работы [220], если формирование каждого следующего монослоя пленки будет идти с накоплением дефектов роста, что приведет к несовпадению начальной точки $q=0$ с точкой $q=1$ и к уменьшению амплитуд $\delta\Psi(q)$ и $\delta\Delta(q)$.

5.1.4. Применимость метода эквивалентной пленки

Следует отметить, что принятая модель не учитывает эффектов адсорбции и влияния случайных загрязнений поверхности, которые могут вносить существенные погрешности в результаты измерений. Для их уменьшения необходима стандартизация температуры и состава газовой смеси атмосферы при проведении измерений, а также защита от попадания пыли и других загрязнений поверхность.

Сравнение результатов расчета по двум моделям, приведенным в Таблице 23, для металлов показало, что и для первой и для второй модели толщины пленок d_e получаются очень близкими по значению; а значения q существенно отличаются: по первой модели = 0,7-0,9, тогда как по второй модели $q < 0,1$. По-видимому, следует отдать предпочтение первой модели, так как трудно представить профиль шероховатого слоя со столь малым коэффициентом заполнения. Малые значения q можно интерпретировать как одиночные выпуклые дефекты на гладкой поверхности, а большие (близкие к единице) значения q можно рассматривать как ямки на гладкой поверхности.

Таблица 23. Экспериментально определенные параметры эквивалентной пленки для двух металлов: Cu и Mo из номограмм, приведенных на Рис. 65 и Рис. 66. Результаты приведены по двум моделям:

I модель / II модель

Параметры пленки	Cu					Mo		
	1	2	3	4	5	1	2	3
n/n								
$d_e, \text{Å}$	21/ 18	16/ 13	6/ 5	7/ 6	1/ 1	95/ 115	15/ 25	2/ 1
q	0.71/ 0.09	0.71/ 0.09	0.73/ 0.09	0.72/ 0.09	0.72/ 0.09	0.84/ 0.04	0.9/ 0.04	0.91/ 0.04
n_e	6.26/ 0.18	6.46/ 0.17	7.01/ 0.2	6.85/ 0.19	6.68/ 0.19	3.62/ 1.04	3.99/ 1.02	4.02/ 1.04
k_e	1.95/ 0.36	2.24/ 0.38	3.47/ 0.31	3.01/ 0.34	2.55/ 0.32	1.19/ 0.49	1.94/ 0.43	2.12/ 0.49
$\lambda=0.63 \text{ мкм}$	$N_{Cu}=0.21+i 3.31$					$N_{Mo}=3.63+i 3.86$		

§ 5.2. Имитационное моделирование шероховатой поверхности вытравленным рельефом случайной фазовой маски

В данном параграфе разработан метод моделирования шероховатой поверхности с помощью искусственно вытравленного рельефа, все параметры которого априори известны и могут быть математически описаны.

Трудности решения обратной задачи - нахождения параметров шероховатой поверхности по измеренным характеристикам отраженного от нее излучения – были преодолены в радиочастотном диапазоне [197, 204]; однако, в оптическом диапазоне не найдено однозначного решения этой задачи. Известны многочисленные попытки обойти трудности решения обратной задачи путем нахождения корреляционных зависимостей между параметрами шероховатости и оптическими характеристиками света,

отраженного от шероховатой поверхности. Для этого решалась прямая задача - измерения оптических характеристик для поверхности, параметры неровностей которой хорошо известны. В первую очередь, изучались свойства отраженного света от поверхности с периодическим рельефом. Моделью шероховатой поверхности служили: синусоидальная решетка [201], эшелетт [202, 203] и дифракционная решетка [199, 221].

В данной главе в качестве модели шероховатой поверхности впервые предложена случайная фазовая маска. Случайная фазовая маска (СФМ) используется для увеличения плотности голографической записи цифровой информации и улучшения качества восстанавливаемого изображения, а также как кодер-декодер изображения [222-224]. СФМ – прозрачна и вносит только фазовые изменения в пучки света, проходящие через различные ее участки.

5.2.1. Описание случайной фазовой маски

Для создания двумерного рельефа шероховатой поверхности в нашей работе использовался фотошаблон двухуровневой фазовой маски (СФМ), представляющий двумерную ортогональную решетку со случайным законом ($2^{-(n+1)}$) распределения в строке черных и белых квадратных ячеек стороной a . Поле фотошаблона СФМ формируется с помощью генератора случайных чисел построчно и вероятность появления в строке прямоугольника $a \times na$ равняется $2^{-(n+1)}$. Прямоугольники одного цвета в горизонтальных строках образуют на поле фотошаблона разнообразной конфигурации массивы черного и белого цвета (Рис.69).

Очевидно, квадраты со стороной a являются наиболее вероятными и площадь, занимаемая ими равна четверти от общей площади. На Рис.70 и 71 показаны вероятности появления в строке черных (или белых) прямоугольников $a \times na$ и их площадей na^2 . Суммарные площади черного и белого полей равны.

Технология изготовления образцов, на которых проводились измерения, широко применяется при изготовлении СФМ на кварце [223-225]. На полированную поверхность плавленого кварца в вакууме напыляется пленка хрома толщиной $\sim 3000 \text{ \AA}$. С помощью фотолитографии на нее переносится изображение с фотошаблона и далее кварц травится через хромовую маску на заданную глубину в буферном травителе (смеси HF , H_2O и NH_4F) при регулируемой температуре. Скорость травления плавленого кварца можно варьировать от 10 \AA/мин до 100 \AA/мин . По окончании травления кварца маскирующая пленка хрома удаляется. Глубина вытравленного фазового рельефа контролировалась на МИИ-11. Профиль вытравленного рельефа в идеальном случае должен быть прямоугольным, однако, как показано в [226, 227] профиль травления изотропного материала, каким является плавленый кварц, представляет собой сферическую поверхность с радиусом равным глубине травления. Наличие хромовой маски на поверхности плавленого кварца нарушает изотропность травления и приводит к зависимости профиля от глубины травления. В нашей работе проводились специальные исследования по изучению профиля травления, которые подтвердили анизотропность травления и наличие цилиндрических боковых граней [227]. Сначала мы рассмотрели более простую задачу, где полагали боковые грани рельефа плоскостями, наклоненными под углом α к нижней грани (доньшку) ячейки [228-230]. Условия травления боковых граней абсолютно одинаковы, поэтому основное внимание уделим симметричному рельефу, хотя для общности подхода рассматривался рельеф, боковые грани которого наклонены под разными углами α_1 и α_2 .

Поскольку наши измерения на таких поверхностях проводились на эллипсометре ЛЭФ-3М при косом падении света, то следует рассматривать особенности дифракции когерентного света на случайной фазовой маске с произвольным фазовым сдвигом.

Отраженное поле СФМ представляет собой суперпозицию дифракционных картин, получающихся в результате дифракции на квадратном отверстии, наиболее вероятный размер которого a .

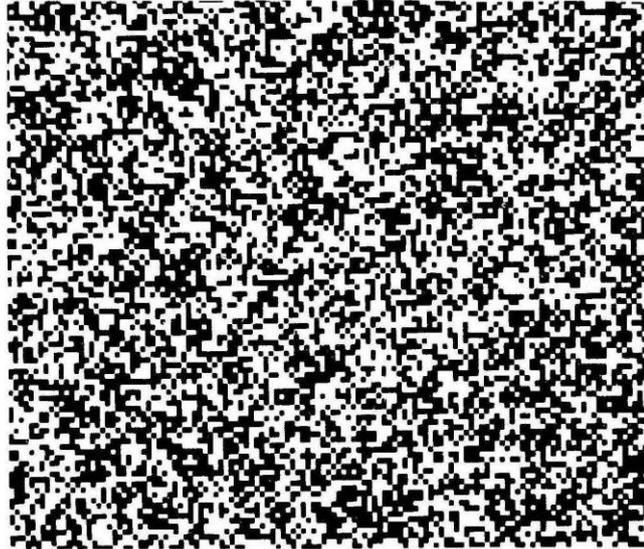


Рис. 69. Поле двухуровневой случайной фазовой маски (СФМ). Высокие площадки - черного цвета; вытравленные углубления – белого цвета.

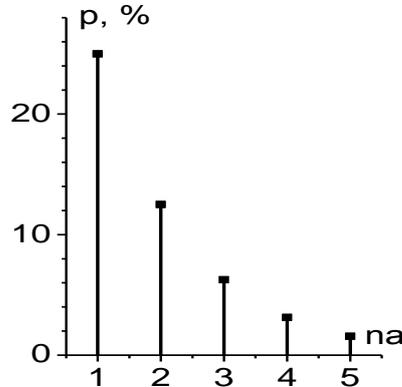


Рис. 70. Вероятность появления в строке подряд n черных или белых квадратов $a \times a$.

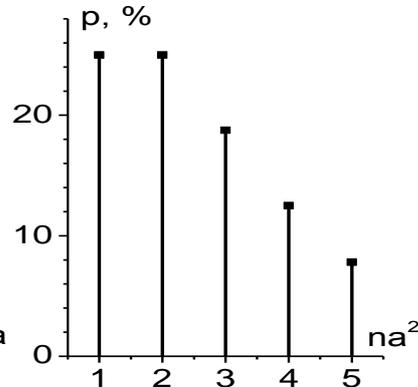


Рис. 71. Распределение площадей в строке для прямоугольника $a \times na$.

Картина отражения от наших образцов очень похожа на дифракционную картину Фраунгофера от 56 одинаковых отверстий в плоском экране с упорядоченной ориентировкой [231, стр. 436]. Все наши измерения относятся только к нулевому порядку дифракции, т.е. к зеркально отраженным лучам.

Поэтому целесообразно начать анализ отражения света от СФМ с рассмотрения отражения света от элементарной ячейки с трапециидальным рельефом в нулевой порядок дифракции.

5.2.2. Метод оценки условий отражения света в зеркальную компоненту от поверхности с трапециидальным рельефом

Наличие рельефа на отражающей поверхности вызывает рассеяние света, когда часть света отражается под углами, не равными углу падения. При травлении прямоугольной ячейки ее боковые грани не сохраняют вертикальность и, в первом приближении, их можно полагать наклонными, а ячейка становится трапециидальной. Поэтому рассмотрим отражение света от поверхности с трапециидальным рельефом (Рис. 72) и выясним условия, при которых свет, падающий на боковые грани может переотражаться в зеркальную компоненту. Свет, рассеянный на ребрах, образованных верхней и боковой гранями, рассматривать не будем.

На Рис. 72 показаны возможные случаи рассеяния падающего света в зеркальную компоненту с участием *двух* (а, в, г) или *трех* (б) граней и записаны условия попадания рассеянного света в зеркальную компоненту, определяемые геометрией рельефа. Если для симметричной ячейки угол падения $\varphi_0 > 2\alpha - \pi/2$, то луч отражается только двумя боковыми гранями и при этом угол отражения $\varphi'_0 = \pi/2 - \varphi_0$. Легко показать, что при углах падения света $\varphi_0 > \alpha_2$, боковые грани несимметричной трапециидальной ячейки не дадут вклада в зеркальную компоненту. Рассеяние в зеркальную компоненту (РЗК) появится, если $\varphi_0 < \alpha_2$ и здесь можно рассмотреть три основных случая для угла падения γ на нижнюю грань: $\gamma < \pi/2$, $\gamma = \pi/2$, $\gamma > \pi/2$, как показано на Рис. 72. Наиболее интересными являются случаи в) - когда в отражении участвует вся плоскость боковой грани, и случай б) - когда площадь боковых граней, не участвующих в рассеянии, невелика, т.е. затенение мало.

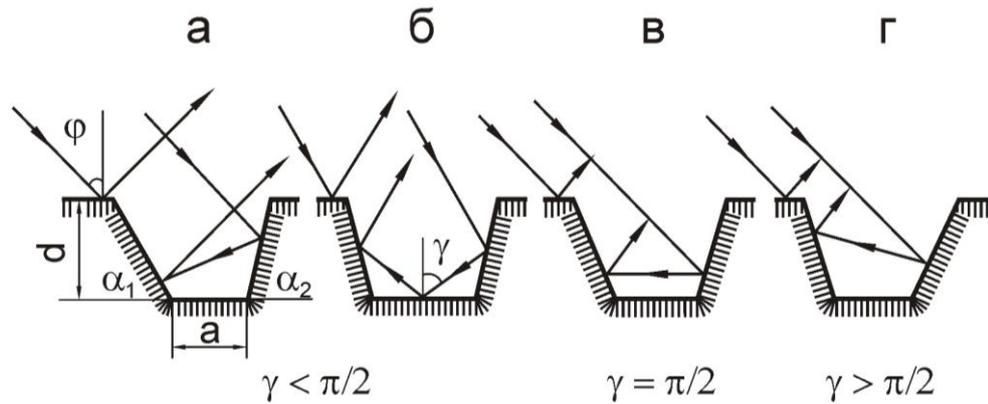


Рис. 72. Отражение света от трапецидальной ячейки. Падающий параллельный пучок света отражается параллельным пучком света, состоящим из зеркально отраженного плоскими верхними гранями и рассеянного боковыми и нижней гранями. a , d , α_1 и α_2 – параметры, определяющие геометрию ячейки; φ – угол падения, γ – угол падения рассеянного света на нижнюю грань.

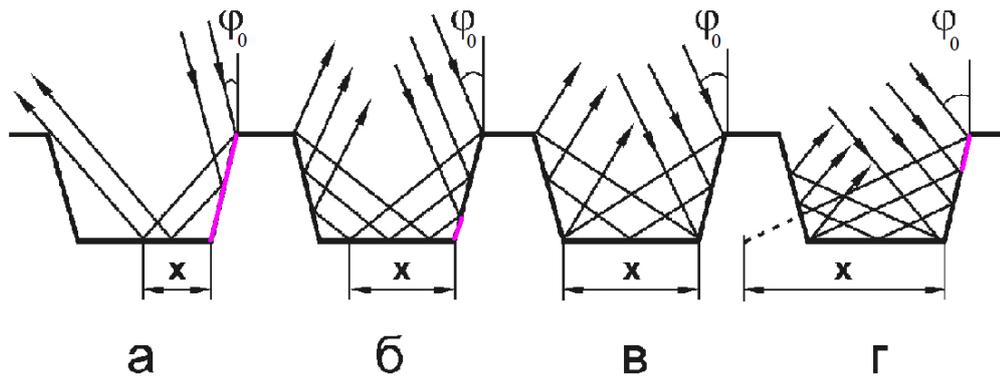


Рис. 73. Затенение боковых граней определяет площадь, дающую вклад рассеянного света в зеркальную компоненту: а) $x \leq a/2$ – полное затенение; б) $x > a/2$ – тень на нижней части правой боковой грани; в) $x = a$ – отсутствие тени; г) $x > a$ – тень на верхней части правой боковой грани. Обозначения те же, что на Рис. 72: x – координата падения на нижнюю грань луча, отраженного от самого верхнего участка боковой грани, $x = d(\operatorname{tg} \gamma - \operatorname{ctg} \alpha)$; a – размер нижней грани элементарной трапецидальной ячейки.

На рисунке 72 показаны две несимметричные ячейки: а) и г); и две симметричные ячейки: б) и в). Рассеяние в зеркальную компоненту

выполняется для углов падения света φ_0 в следующих случаях: а) $\varphi_0 = \alpha_1 + \alpha_2 - \pi/2$; б) $\arctg[a/2d + \operatorname{ctg} \alpha] + \pi - 2\alpha \leq \varphi_0 \leq 2\alpha - \pi/2$, с учетом затенения; в) $\varphi_0 = 2\alpha - \pi/2$; г) $\varphi_0 = \alpha_1 + \alpha_2 - \pi/2$.

Заметим, что три грани могут рассеивать в зеркальную компоненту весь падающий свет, если выполняется условие отсутствия затенения $\operatorname{tg} \gamma - \operatorname{ctg} \alpha = a/d$, как видно из Рис. 73 при $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. Таким образом, геометрия рельефа определяет область, где выполняется условие рассеяния в зеркальную компоненту. Не рассматривая вопрос об индикатрисе рассеянного света, поскольку нас интересует только зеркально отраженный свет, подробно остановимся на вопросе о величине площадей граней элементарной трапециидальной ячейки, участвующих в отражении и рассеянии света в зеркальную компоненту. Введем геометрические коэффициенты: k_1 для верхней грани, k_2 для нижней грани, k_3 и k_4 для боковых граней, учитывающие отражающие площади соответствующих граней. Площадь верхней грани уменьшается за счет растравливания и не зависит от угла падения света. Площадь нижней грани остается без изменения, однако, не вся ее поверхность участвует в отражении, благодаря затенению, поэтому коэффициент k_2 определяется из условий рассеяния и затенения.

Для боковой грани вводятся два коэффициента: k_3 (случай рассеяния тремя гранями, показанный на Рис. 72б) - для всей области углов падения φ_0 . Коэффициент k_4 (случай рассеяния только двумя гранями, показанный на Рис. 72в) - для одного угла падения $\varphi_0 = 2\alpha - \pi/2$.

$$k_1 = \left(1 - \frac{2d}{a} \operatorname{ctg} \alpha\right), k_2^2 = 1 - \frac{2d}{a} (\operatorname{tg} \varphi - \operatorname{ctg} \alpha) \text{ и } k_4^2 = \frac{d}{a} \left(1 - \frac{d}{a} \operatorname{ctg} \alpha\right). \quad (137)$$

5.2.3. Метод оценки угловой зависимости эллипсометрических параметров Ψ и Δ при отражении поляризованного света от элементарной трапециидальной ячейки СФМ

При рассмотрении угловой зависимости эллипсометрических параметров поляризованного света, отраженного от элементарной ячейки СФМ под углом, равным углу падения φ_0 , разобьем всю область значений φ_0 от 0° до 90° на несколько интервалов, каждый из которых будет характеризоваться наличием или отсутствием рассеянных лучей в зеркальной компоненте. Предыдущий анализ показал, что существует интервал значений углов падения, где возможно рассеяние света тремя гранями в зеркальную компоненту, а также существует один фиксированный угол для данной геометрии СФМ, при котором в зеркальную компоненту свет рассеивается двумя боковыми гранями. В остальной области значений углов падения не выполняется условие попадания рассеянного света в зеркальную компоненту. Совершенно очевидно, что интенсивность рассеянных лучей невелика и ее вклад в зеркальную компоненту мало заметен, кроме особых ситуаций, когда наблюдается минимум интерференции света, отраженного верхней и нижней гранями. Рассмотрим условия интерференции, когда Δ_1 - разность хода лучей, отраженных верхней и нижней гранями, кратна π .

$$\Delta_1 = 4\pi \frac{d}{\lambda} \cos \varphi_0 = n\pi \xrightarrow{k_1=k_2} \varphi_{\text{интерф}} = \arccos \frac{\lambda n}{4d}, \quad n = 1, 3, 5... \quad (138)$$

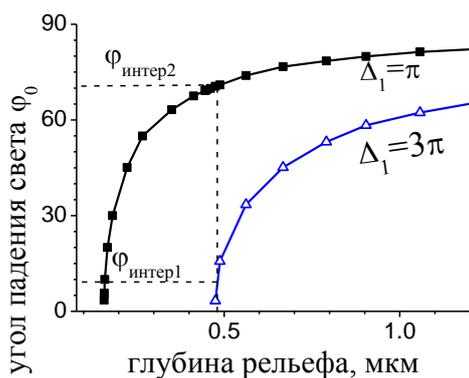


Рис. 74. Зависимость угла падения $\varphi_{\text{интерф}}$, при котором $\Delta_1 = \pi$, или 3π , от глубины рельефа d ; $\lambda = 0.633$ мкм. На рисунке отмечены два угла $\varphi_{\text{интерф}1}$ и $\varphi_{\text{интерф}2}$ для глубины вытравленного рельефа $d \approx 0.486$ мкм без учета рассеянного света.

5.2.3.1. Метод оценки условий интерференции при рассеянии света тремя гранями

В интервале углов падения света от $\{\arctg [a/2d + \text{ctg } \alpha] + \pi - 2\alpha\}$ до $2\alpha - \pi/2$, где существует волна, рассеянная **тремя** гранями в зеркальную компоненту,

как показано на рисунке 72б, суммарная отраженная волна будет суперпозицией волн E_{12} , отраженных верхней и нижней гранями, и волны E_3 . Запишем выражение для волны E_3 :

$$E_3 = E_0 R_3 k_3 e^{i(\Delta_3 + \omega t)}, \quad R_3 = (R'_3)^2 \cdot R''_3, \quad (139)$$

где k_3 – геометрический коэффициент для боковой грани с учетом затенения, R'_3 – коэффициент отражения Френеля от боковых граней, угол падения на которые равен $(\alpha - \varphi_0)$, и R''_3 – то же самое для нижней грани, где угол падения равен $[\varphi_0 + (\pi - 2\alpha)]$, Δ_3 – разность хода рассеянных лучей по отношению к лучам, отраженным от верхней грани (Рис. 75а).

Нетрудно показать (Рис. 75), разность фаз между лучом, отраженным от верхней грани, и лучом, рассеянным в зеркальную компоненту тремя гранями, не зависит от координаты падения луча. Для всех лучей, рассеянных тремя гранями, разность фаз постоянна и равна:

$$\Delta_3 = \frac{4\pi d}{\lambda} \left[\cos \varphi + \frac{a}{d} \sin \alpha \cos(\alpha - \varphi) \right]. \quad (140)$$

Тогда общее выражение суммарной волны E_{13} , отраженной от элементарной ячейки с трапециидальным рельефом для случая, показанного на Рис. 72б, запишется в виде в соответствующем диапазоне углов φ_0 :

$$\begin{aligned} E_{13} &= E_{12} + E_3 = E_0 R_{12} k_{12} e^{i(\theta_{12} + \omega t)} + E_0 R_3 k_3 e^{i(\Delta_3 + \omega t)} = \\ &= E_0 e^{i\omega t} (R_{12} k_{12} e^{i\theta_{12}} + R_3 k_3 e^{i\Delta_3}) = E_0 e^{i\omega t} R_{13} e^{i\theta_{13}}, \\ R_{13} &= \sqrt{(R_{12} k_{12})^2 + (R_3 k_3)^2 + 2R_{12} R_3 k_{12} k_3 \cos(\theta_{12} - \Delta_3)}, \\ \theta_{13} &= \arctg \frac{R_{12} k_{12} \sin \theta_{12} + R_3 k_3 \sin \Delta_3}{R_{12} k_{12} \cos \theta_{12} + R_3 k_3 \cos \Delta_3}, \\ \pi - 2\alpha + \arctg \left[\frac{a}{2d} + \operatorname{ctg} \alpha \right] &\leq \varphi_0 < 2\alpha - \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (141)$$

Используя (141), можно записать выражения для эллипсометрических углов как функции угла падения φ_0 и геометрии элементарной ячейки (a , d , α).

$$\begin{aligned}
tg\Psi_{13} &= \frac{E_0 e^{i\omega t} R_{13p}}{E_0 e^{i\omega t} R_{13s}} = \sqrt{\frac{(R_{12p}k_{12})^2 + (R_{3p}k_3)^2 + 2R_{12p}R_{3p}k_{12}k_3 \cos(\theta_{12} - \Delta_3)}{(R_{12s}k_{12})^2 + (R_{3s}k_3)^2 + 2R_{12s}R_{3s}k_{12}k_3 \cos(\theta_{12} - \Delta_3)}}, \\
\Delta_{13} = \theta_{13p} - \theta_{13s} &= arctg \frac{R_{12p}k_{12} \sin \theta_{12} + R_{3p}k_3 \sin \Delta_{3p}}{R_{12p}k_{12} \cos \theta_{12} + R_{3p}k_3 \cos \Delta_{3p}} - \\
&\quad - arctg \frac{R_{12s}k_{12} \sin \theta_{12} + R_{3s}k_3 \sin \Delta_{3s}}{R_{12s}k_{12} \cos \theta_{12} + R_{3s}k_3 \cos \Delta_{3s}}, \\
\pi - 2\alpha + arctg \left[\frac{a}{2d} + ctg\alpha \right] &\leq \varphi_0 < 2\alpha - \frac{\pi}{2}.
\end{aligned} \tag{142}$$

где R_{jp} и R_{js} -коэффициенты Френеля для p и s -поляризованного света. Выражения (142) можно использовать для расчета угловых зависимостей Ψ и Δ для света, отраженного от трапециидальной ячейки.

В общем случае, $R_{12} \cdot R_3 = (R_3')^2 \cdot R_3''$, поэтому вкладом рассеянных лучей в суммарную волну можно пренебречь. Интересно рассмотреть случаи, когда интенсивность рассеянных лучей сравнима с интенсивностью лучей, отраженных плоскими гранями (верхней и нижней). В рассматриваемом интервале углов падения влияние рассеянных лучей может быть заметным, только для значений d , сравнимых с a , т.е. когда геометрический коэффициент k_3 достаточно велик, а произведение $R_{12}k_{12}$ -мало. Как видно из анализа выражения (142), амплитуда Ψ_{13} принимает минимальное значение либо при условии (143), когда разность фазовых углов $\theta_{12} - \Delta_3 = \pi$ и R_{13} минимален; либо, либо вблизи угла Брюстера, где R_{12p} минимален или равен нулю (для диэлектрика -кварца); либо, когда осциллирующий множитель k_{12} минимален, при выполнении условия (138).

$$\begin{aligned}
tg\Psi_{13} \xrightarrow{R_{13}=\min} &= tg\Psi_{13\min}, \quad tg\Psi'_{13} \xrightarrow{\frac{\varphi_0=\varphi_B}{R_{12p}=0}} = tg\Psi_{13\min}, \\
tg\Psi''_{13} \xrightarrow{\frac{k_{12}=\min}{(24)}} &= tg\Psi_{13\min}, \\
tg\Psi'''_{13} = tg\Psi_{13\min} &\xrightarrow{\theta_{12}-\Delta_3=\pi} \frac{R_{12p}k_{12} - R_{3p}k_3}{R_{12s}k_{12} - R_{3s}k_3}.
\end{aligned} \tag{142a}$$

Кроме того, Ψ'''_{13} меняет знак вблизи φ_B или при $k_{12\min}$; а при $R_{12s}k_{12} \approx R_{3s}k_3$ угол Ψ'''_{13} устремляется к $\pi/2$.

$$\theta_{12} - \Delta_3 = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \tag{143}$$

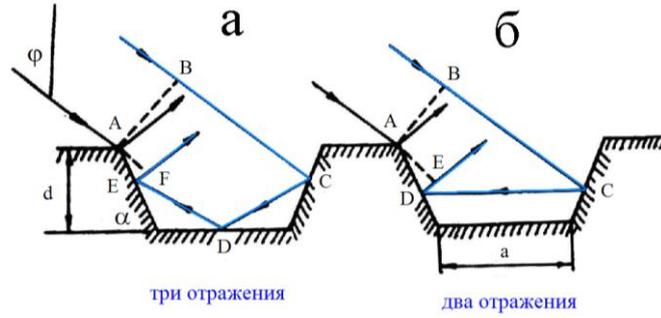


Рис. 75. Определение разности хода рассеянных лучей, попадающих в

зеркальную компоненту: б) $\Delta_4 = \frac{2\pi}{\lambda}(BC + CD + DE) = \frac{4\pi}{\lambda}[a \sin \alpha + 2d \cos \alpha] \sin \alpha$;

а) $\Delta_3 = \frac{2\pi}{\lambda}(BC + CD + DE + EF) = \frac{4\pi}{\lambda}[a \sin \alpha \cos(\alpha - \varphi) + d \cos \varphi]$;

Анализ выражения (142) в общем виде труден из-за громоздкости выражения для Δ_{13} . Легко показать, что фаза суммарной волны Δ_{13} может иметь минимумы и максимумы:

$$\operatorname{tg} \Delta_{13} = \frac{k_{12} k_3 (R_{12p} R_{3s} - R_{12s} R_{3p})}{k_{12} R_{12p} R_{12s} + k_3 R_{3p} R_{3s}}, \quad \varphi_0 > \varphi_B \rightarrow \delta_p = \delta_s = \pi, \quad (144a)$$

$$\operatorname{tg} \Delta_{13} = \frac{k_{12} k_3 (R_{12p} R_{3s} + R_{12s} R_{3p})}{k_{12} R_{12p} R_{12s} - k_3 R_{3p} R_{3s}}, \quad \varphi < \varphi_B, \delta_p = 0, \delta_s = \pi. \quad (144б)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \Delta_{13} &= \operatorname{tg}(\theta_{13p} - \theta_{13s}) = \frac{\operatorname{tg} \theta_{13p} - \operatorname{tg} \theta_{13s}}{1 + \operatorname{tg} \theta_{13p} \operatorname{tg} \theta_{13s}} = \\ &= \frac{k_{12} k_3 \sin(\theta_{12} - \Delta_3)(R_{12p} R_{3s} - R_{12s} R_{3p})}{k_{12}^2 R_{12p} R_{12s} + k_3^2 R_{3p} R_{3s} + (R_{12p} k_{12} R_{3s} + R_{3p} k_3 R_{12s}) \cos(\theta_{12} - \Delta_3)}, \end{aligned} \quad (144в)$$

$$\pi - 2\alpha + \operatorname{arctg} \left[\frac{a}{2d} + \operatorname{ctg} \alpha \right] \leq \varphi_0 < 2\alpha - \frac{\pi}{2},$$

$$\left\{ \begin{aligned} \operatorname{tg} \Delta'_{13} \xrightarrow{\theta_{12} - \Delta_3 = \pi/2} &= \frac{k_{12} k_3 (R_{12p} R_{3s} - R_{12s} R_{3p})}{k_{12}^2 R_{12p} R_{12s} + k_3^2 R_{3p} R_{3s}}, \\ \operatorname{tg} \Delta''_{13} \xrightarrow{R_{12p} = 0} &= \frac{k_{12} R_{12s} R_{3p} \sin(\Delta_3 - \theta_{12})}{k_3 R_{3p} R_{3s} + R_{3p} R_{12s} \cos(\Delta_3 - \theta_{12})}, \\ \operatorname{tg} \Delta'''_{13} \xrightarrow[\substack{\theta_{12} - \Delta_3 = \pi/2 \\ R_{12p} = 0}]{} &= -\frac{k_{12} R_{12s}}{k_3 R_{3s}} \end{aligned} \right. \quad (144г)$$

Основные выводы к разделу 5.2.3.1. Учет света, рассеянного тремя гранями, приводит к искажению угловых зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$.

1. Минимальное значение Ψ приходится на угол падения, не равный углу Брюстера, поскольку в выражении (142) для $\text{tg } \Psi_{13}$ минимум числителя равен $(R_{12p} - R_{3p} k_3)$.
2. Зависимость $\Psi(\varphi_0)$ может иметь не один, а несколько экстремумов; когда амплитуды волн, отраженных плоскими гранями и рассеянных боковыми гранями, приблизительно равны по величине.
3. $\Delta(\varphi_0)$ может иметь максимумы и минимумы только при малых отношениях a/d , т.е. для глубоких ячеек.
4. Область существования рассеяния тремя гранями мала при больших отношениях a/d и может не содержать угол Брюстера.

5.2.3.2. Метод оценки интерференции при рассеянии света в зеркальном направлении двумя боковыми гранями трапециидальной ячейки: $\varphi_0 = 2\alpha - \pi/2$

Рассмотрим последний случай, показанный на Рис.72в, где угол падения света, равный $\varphi_0 = 2\alpha - \pi/2$, при котором наблюдается рассеяние двумя гранями в зеркальную компоненту. Запишем для этого случая волну E_4 , рассеянную двумя гранями:

$$E_4 = E_0 R_4^2 k_4^2 e^{i(\Delta_4 + \alpha x)}, \quad \Delta_4 = \frac{4\pi d \sin \alpha}{\lambda} (2 \cos \varphi_0 + \frac{a}{d} \sin \alpha), \quad \varphi_0 = 2\alpha - \frac{\pi}{2}, \quad (145)$$

где k_4 -геометрический коэффициент, R_4 коэффициент отражения от боковых граней, угол падения на которые равен $(\pi/2 - \alpha)$, и Δ_4 - разность хода лучей (Рис.75б). Суммарная волна, отраженная в зеркальную компоненту, E_{14} будет иметь вид:

$$\begin{aligned}
E_{14} &= E_{12} + E_4 = E_0 R_{12} k_{12} e^{i(\theta_{12} + \alpha t)} + E_0 (R_4 k_4)^2 e^{i(\Delta_4 + \alpha t)} = \\
&= E_0 e^{i\alpha t} (R_{12} k_{12} e^{i\theta_{12}} + (R_4 k_4)^2 e^{i\Delta_4}) = E_0 R_{14} e^{i(\theta_{14} + \alpha t)}, \\
R_{14} &= \sqrt{(R_{12} k_{12})^2 + (R_4 k_4)^4 + R_{12} k_{12} (R_4 k_4)^2 \cos(\theta_{12} - \Delta_4)}, \\
\theta_{14} &= \arctg \frac{R_{12} k_{12} \sin \theta_{12} + (R_4 k_4)^2 \sin \Delta_4}{R_{12} k_{12} \cos \theta_{12} + (R_4 k_4)^2 \cos \Delta_4}, \quad \varphi_0 = 2\alpha - \frac{\pi}{2}.
\end{aligned} \tag{146}$$

Эллипсометрические углы Ψ_{14} и Δ_{14} , характеризующие состояние поляризации волны E_{14} , запишем следующим образом:

$$\begin{aligned}
\varphi_0 = 2\alpha - \frac{\pi}{2}, \quad \operatorname{tg} \Psi_{14} e^{i\Delta_{14}} &= \frac{R_{14p}}{R_{14s}} e^{i(\theta_{14p} - \theta_{14s})}, \\
\operatorname{tg} \Psi_{14} &= \sqrt{\frac{(R_{12p} k_{12})^2 + (R_{4p} k_4)^4 + R_{12p} R_{4p}^2 k_{12} k_4^2 \cos(\theta_{12p} - \Delta_4)}{(R_{12s} k_{12})^2 + (R_{4s} k_4)^4 + R_{12s} R_{4s}^2 k_{12} k_4^2 \cos(\theta_{12s} - \Delta_4)}}.
\end{aligned} \tag{147a}$$

$$\Delta_{14} = \arctg \frac{R_{12p} k_{12} \sin \theta_{12p} + (R_{4p} k_4)^2 \sin \Delta_4}{R_{12p} k_{12} \cos \theta_{12p} + (R_{4p} k_4)^2 \cos \Delta_4} - \arctg \frac{R_{12s} k_{12} \sin \theta_{12s} + (R_{4s} k_4)^2 \sin \Delta_4}{R_{12s} k_{12} \cos \theta_{12s} + (R_{4s} k_4)^2 \cos \Delta_4}. \tag{147б}$$

Опуская подробный анализ (146-147) приведем только основные выводы к разделу 5.2.3.2.

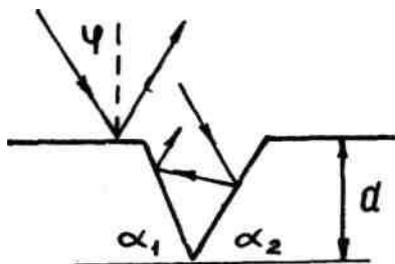
1. Вся площадь **двух** боковых граней участвует в рассеянии.
2. Благодаря малости $(R_4 k_4)^2$ вклад рассеянных лучей в суммарную волну заметен лишь только, когда $R_{12p} k_{12}$ мало и сравнимо по величине с $(R_{4p} k_4)^2$. Такая ситуация возникает, если: **а)** осциллирующий множитель $k_{12} = \min$ при выполнении условия интерференции (138); **б)** угол падения света равен или близок к углу Брюстера, т.е. $R_{12p} \approx 0$ или $R_{12p} = R_{12p\min}$;
3. Вклад рассеянных лучей приводит к сдвигу Ψ_{\min} от положения угла Брюстера и изменению самой величины Ψ_{\min} . При малых глубинах рельефа d геометрический коэффициент k_4 мал и величина Ψ незначительно отличается от Ψ_0 для гладкой поверхности.
4. Если $\cos(\theta_{12s} - \theta_{4s}) \approx -1$ и $\cos(\theta_{12p} - \theta_{4p}) = \pm 1$, то в зависимости $\Psi_{14}(\varphi_0)$ появляются экстремумы, аналогичные (144а, 144б).

5. Геометрические коэффициенты k_1 и k_4 , учитывающие величину площади рассеивающих граней, сильно зависят от отношения a/d , таким образом, что чем меньше это отношение, тем больше поправки к Ψ и Δ .

5.2.3.3. Метод оценки условий интерференции в области больших углов падения $\varphi_0 > 2\alpha - \pi/2$ и при наличии ступеньки или треугольной царапины

В диапазоне углов падения $\varphi_0 > 2\alpha - \pi/2$ рассеяние в зеркальную компоненту отсутствует для трапециидальной ячейки и поляризационные характеристики света, отраженного СФМ поверхностью, будут аналогичны выражениям, полученным для интервала малых значений углов падения.

От общей задачи с элементарной трапециидальной ячейкой можно перейти к некоторым частным случаям, например, рассмотреть влияние ступеньки или треугольной царапины. Выше было показано, что в отсутствие рассеянного света наличие рельефа на поверхности вообще не изменяет состояние поляризации отраженного луча для модели трапециидальной ячейки. Наличие ступеньки на поверхности приведет к изменению только параметра Δ , но, если можно положить $k_1 \approx k_2$, то тогда следует: $\Psi_{12} \approx \Psi_0$. Следовательно, одиночная ступенька на большой гладкой поверхности вносит незначительные изменения и $\Delta_{12} \approx \Delta_0$.



Аналогичный результат получается и в случае треугольной царапины. Рассеянный свет попадет в зеркальную компоненту отраженного света только при условии, что угол падения равен $\varphi = \alpha_1 + \alpha_2 - \pi/2$ и $\alpha_2 > \pi/2 - \alpha_1$. Если k_1 -геометрический коэффициент для верхней грани, а k_2 учитывает площадь рассеивающих граней и $k_1 \approx k_2$, т.е. одиночная царапина на большой гладкой поверхности, тогда $k_{12} \approx k_1$ и из предыдущего анализа $E_{12} \approx E_1$. Из (145) $E_1 \approx E_4$, из (146) $E_{14} \approx E_1$, и $\Delta_{14} \approx \Delta_0$, т.е. влиянием одиночной царапины можно пренебречь, если глубина ее много меньше длины волны.

Однако, ситуация резко изменится, если царапин или ступенек будет достаточно много и величиной k_2 уже нельзя будет пренебречь.

5.2.3.4. Метод оценки влияния параметров ячейки трапециидального рельефа на поляризационные зависимости $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$

Используя выражения (139)-(146), можно рассчитать эллипсометрические параметры Ψ и Δ рельефной поверхности для реального образца. Оговорим трудности, которые возникают при расчете. Они связаны с точностью задания параметров рельефа: a , d , α . Технология изготовления образцов обеспечивает ширину ячейки, a с точностью ~ 0.2 мкм; глубина рельефа d измеряется с точностью ± 0.02 мкм, угол α не измерялся. Поскольку при определении разности хода Δ_1 , Δ_2 , Δ_3 и геометрических коэффициентов k_1 , k_2 , k_3 , и k_4 используются отношения d/λ , a/λ , a/d или d/a и α , поэтому необходимо рассмотреть влияние этих параметров на результаты расчета. С этой целью были выполнены три серии расчетов для кварцевой поверхности, чтобы выяснить влияние небольших вариаций: размера ячейки a ; глубины рельефа d , угла наклона боковой грани α .

- На Рис. 76 приведены расчетные зависимости $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ для образца на *кварце*, глубина рельефа которого $d = 0.306$ мкм, угол $\alpha = 75^\circ$, а размер a варьируется от 2.0 до 2.5 мкм. Область углов φ_0 , где учитывается рассеянный свет, составляет примерно 15° , верхняя граница этой области равна $\sim 60^\circ$, а нижняя граница изменяется от 44.2° до 47.1° для $a = 2,0$ мкм и 2,5 мкм, соответственно. Расчетные Ψ и Δ зависят от рельефа только в этой области, на границах области могут изменяться скачком, а **вне этой области** $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ **не отличаются** от поляризационных характеристик гладкой поверхности, не имеющей рельефа. На Рис. 76-с показано, что изменение

размера ячейки a даже на 0,01 мкм приводит к изменению Δ на несколько градусов вблизи φ_B .

- Варьирование параметра d в пределах точности его определения при расчете зависимостей $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ для образца с размером $a=2.5$ мкм и углом наклона боковой грани $\alpha=75^\circ$ приводит к изменению Δ на десятки градусов вблизи угла интерференции, который также зависит от d . На Рис. 77 приведены расчетные зависимости $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ для $d_1=0.2860$ мкм ($\varphi_{\text{интерф}1}=56.4^\circ$), $d_2=0.3060$ мкм ($\varphi_{\text{интерф}2}=58.8^\circ$) и $d_3=0.3260$ мкм ($\varphi_{\text{интерф}3}=60.9^\circ$). Ширина области углов падения, где учитывается рассеянный свет, и ее нижняя граница, как следует из (40) и (41), мало меняются. Верхняя граница углов падения постоянна. Внутри этой области изменяются не только величины Δ и Ψ , но и появляются дополнительные экстремумы. Изменяется величина и положение минимума угла Ψ .

- Влияние параметра α на расчетные $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ видно из Рис. 78 для образца с размерами $a=2.5$ мкм и $d=0.3060$ мкм. Наклон боковой грани трапециидальной ячейки варьировался от $\alpha_1=73^\circ$ до $\alpha_3=79^\circ$. Во-первых, ширина области, где учитывается рассеянный свет, слабо зависит от α и практически, сохраняется для всех расчетных зависимостей. Нижние и верхние границы, соответствующие четырем образцам с различными углами наклона боковых граней, этой области смещаются, как показано на Рис. 78. Во-вторых, также как и в предыдущем случае, появляются дополнительные экстремумы в $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$. Следует обратить внимание на тот факт, что в этой области наличие рельефа может очень мало менять поляризационные характеристики отраженного от него света для углов падения, удаленных от "особых точек" (φ_B и $\varphi_{\text{интер}}$). Например, на Рис. 78 зависимость $\Psi(\varphi_0)$ для $\varphi > 63^\circ$ мало отличается от аналогичных зависимостей гладкой поверхности.

Фактически на Рис. 76 -Рис. 78 можно проследить влияние величины разности хода лучей Δ_3 на зависимости $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$, потому что Δ_3 наиболее

чувствительна к изменению параметров геометрии рельефа трапециидальной ячейки, как видно из (140), где $a \gg \lambda$, и $d \leq \lambda$. Из всех приведенных расчетных графиков к экспериментальному образцу, параметры которого заложены в основу расчета, ближе всего Рис. 76(аб). В пределах точности задания параметров расчет позволяет получить хорошее качественное согласие модели и эксперимента.

Таблица к Рис. 76.

Размер ячейки	a_1	a_2	a_4	a_5	a_6	a_{3-1}	a_{3-2}	a_{3-3}
мкм (Рис. 76)	2	2.1	2.3	2.4	2.5	2.20	2.21	2.22
нижняя граница φ_0	44.2°	44.8	46.0°	46.5°	47.1°	45.4°		
верхняя граница φ_0	59.8°	60.0°	60.2°	60.4°	60.5°	60.1°		
Глубина рельефа $d=0.306$ мкм, наклон боковой грани $\alpha=75^\circ$; $\lambda=0.63$ мкм								

Для образцов с размером $a = 25$ мкм несоответствие модели и эксперимента состоит, прежде всего, в том, что узкая область углов падения φ_0 , где существует рассеяние (141 и 145), может не попадать в область интерференции, тем более двух пиков. Следовательно, строго заданные границы области рассеяния для модели трапециидального рельефа не соответствуют реальному положению вещей. Это служит подтверждением нашего предположения, что боковые грани не являются плоскими. Вопрос об отражении от рельефа с цилиндрическими боковыми гранями рассмотрен отдельно.

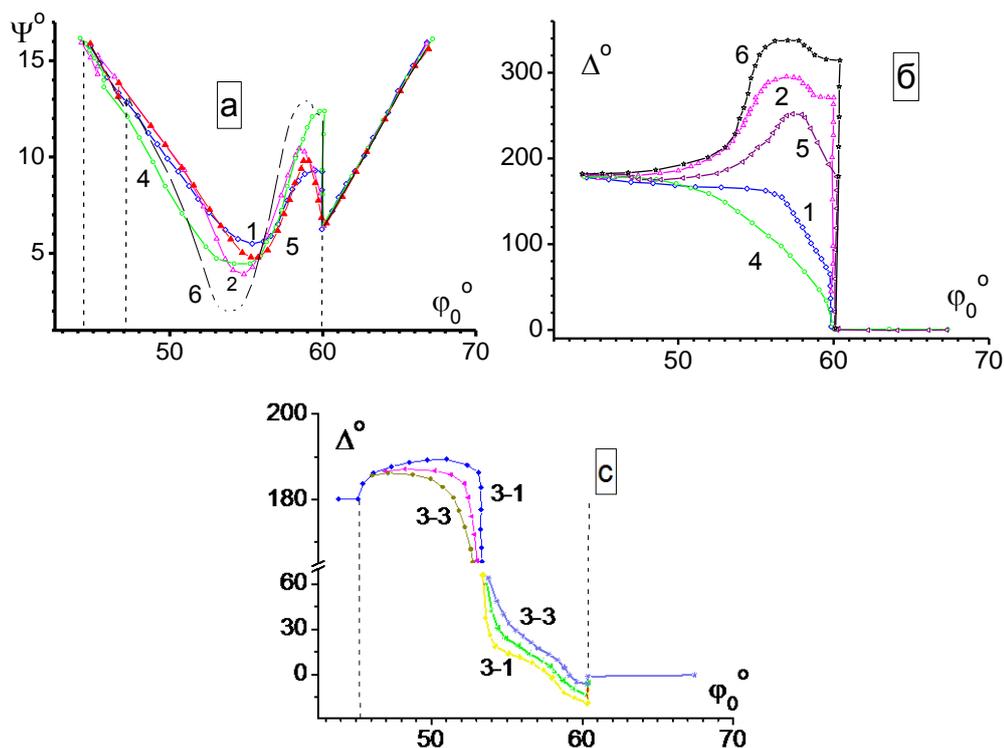


Рис. 76. Влияние **размера a** трапецидальной ячейки на расчетные поляризационные характеристики рельефной поверхности **кварца**: а) - зависимость $\Psi(\varphi_0)$; б)- зависимость $\Delta(\varphi_0)$ и с) - зависимость $\Delta(\varphi_0)$ для очень малых изменений размера a , сравнимых с точностью изготовления образцов. Величины a варьируются от 2.0 до 2.5 мкм и показаны в Таблице к Рис. 76. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа.

Таблица к Рис. 77.

Глубина рельефа в мкм	d_1	d_2	d_3
		0,286	0,306
нижняя граница φ_0	46.7°	47.3°	47.9°
верхняя граница φ_0	60.3°	60.3°	60.3°
$\varphi_{\text{интерф}}$	56.4°	58.8°	60.9°
Размер ячейки $a=2.5$ мкм (Рис. 77) наклон боковой грани $\alpha=75^\circ$; $\lambda=0.63$ мкм			

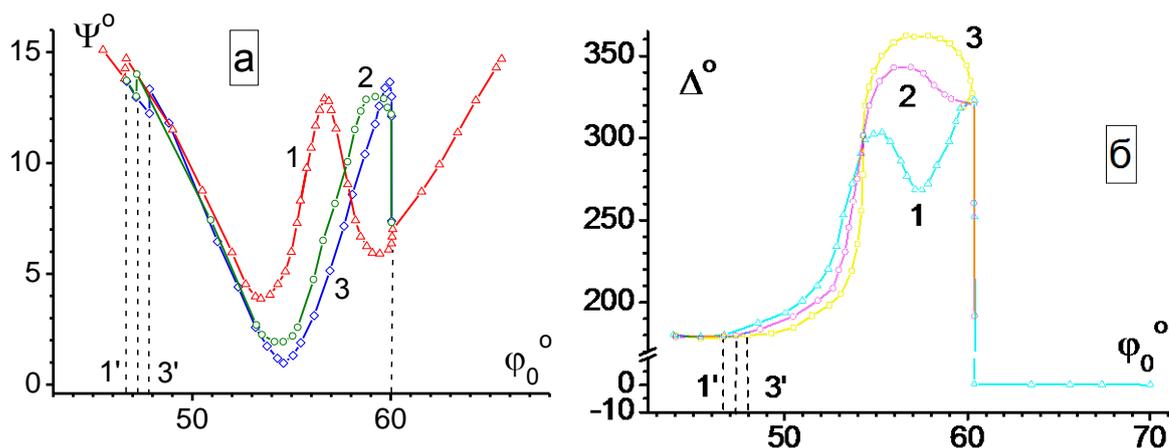


Рис. 77. Влияние **глубины** рельефа d трапецидальной ячейки на расчетные поляризационные характеристики рельефной поверхности **кварца**: а) - зависимость $\Psi(\varphi_0)$: б)- зависимость $\Delta(\varphi_0)$. Величины d варьируются и показаны в Таблице к Рис. 77. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа.

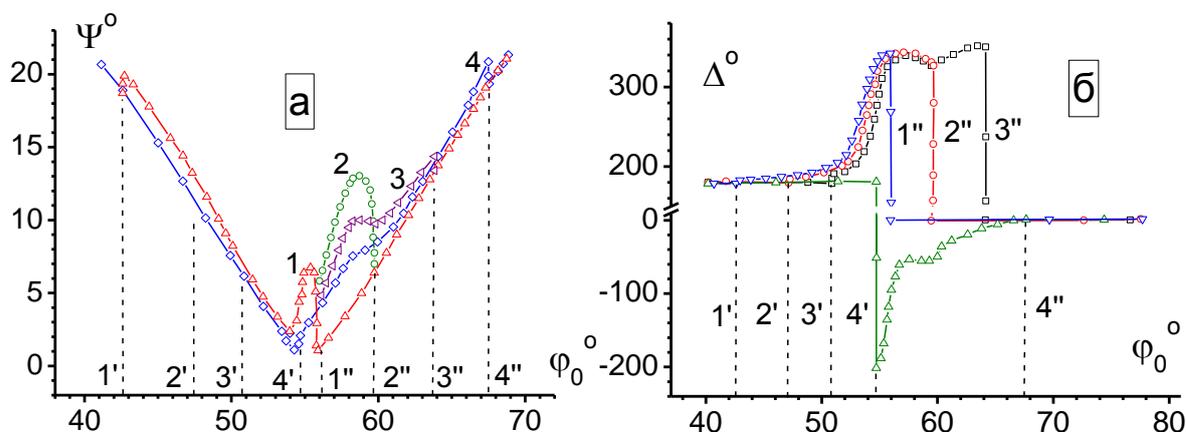


Рис. 78. Влияние **наклона** боковой грани α трапецидальной ячейки на расчетные поляризационные характеристики рельефной поверхности **кварца**: а) - зависимость $\Psi(\varphi_0)$: б)- зависимость $\Delta(\varphi_0)$. Величины α варьируются и показаны в Таблице к Рис. 78. Пунктиром отмечены области углов падения, где учитывается рассеянный свет для данной геометрии рельефа. Нижняя ($1' - 4'$) и верхняя ($1'' - 4''$) границы φ_0 перемещаются, как показано в Таблице к Рис. 78.

Таблица к Рис. 78.

Угол наклона боковой грани в градусах	α_1	α_2	α_3	α_4
	73	75	77	79
нижняя граница φ_0	42.6°	47.4°	50.8°	54.7°
верхняя граница φ_0	56.1°	59.8°	63.7°	67.8°
ширина области φ_0	13.5°	12.4°	12.9°	13.1°
Размер ячейки $a=2.5$ мкм (Рис. 78). Глубина $d=0.306$ мкм; $\lambda=0.63$ мкм				

Таким образом, случайная фазовая маска с трапециидальным профилем как модель шероховатой поверхности позволяет точно вычислить эллипсометрические параметры отраженного света, учесть влияние затенения и выявить ситуации, когда в угловых зависимостях появляются экстремумы.

5.2.4. Метод оценки угловой зависимости эллипсометрических параметров Ψ и Δ поляризованного света, отраженного от элементарной ячейки СФМ с **цилиндрическими** гранями

В настоящем параграфе приведены результаты расчета $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ - поляризационных характеристик света, отраженного от поверхности с рельефом случайной фазовой маски (СФМ), используемой в качестве модели шероховатой поверхности. При расчете учтены: а) кривизна боковых граней элементарной ячейки СФМ, б) изменение скважности дефектов за счет ухода размеров в процессе получения рельефа СФМ, в) наличие нескольких сортов "дефектов" разной геометрии.

Поскольку наши измерения проведены на эллипсометре ЛЭФ-3М и касаются состояния поляризации света, отраженного под углом, равным углу падения, иными словами, отраженного в зеркальном направлении, то необходимо найти условия, при которых рассеянный свет попадет на детектор эллипсометра, т.е. когда свет будет рассеян в зеркальном направлении.

5.2.4.1. Анализ влияния рассеянного света на точность измерений

Случайная фазовая маска, предложенная нами ранее [228-230, 293-294, 300-301] в качестве модели шероховатой поверхности, представляет собой поверхность со случайно распределенными дефектами, одинаковыми по высоте и ориентации на плоскости, но образующими массивы произвольной конфигурации. Одиночный дефект в идеальном случае должен быть параллелепипедом с высотой d и квадратным основанием со стороной a . Однако, технологические условия изготовления рельефной поверхности травлением через специальный шаблон приводили к искажению формы боковых граней. В первом приближении мы считали, что боковые грани дефектов при травлении остаются плоскими, но наклонены к основанию под некоторым углом. Тогда элементарная отражающая ячейка, образованная двумя соседними дефектами в строке СФМ, имеет трапециидальный профиль. Особенности отражения поляризованного света от трапециидальной ячейки рассмотрены в предыдущем разделе и ранее в [228, 230] и выявлен недостаток модели, заключающийся в том, что существует ограниченная область углов падения света φ_0 , внутри которой возможно рассеяние в зеркальную компоненту света, падающего на боковые грани.

Сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей эллипсометрических параметров Ψ и Δ рельефной поверхности от угла падения света φ_0 показало, что в отличие от экспериментальных зависимостей расчетные зависимости имеют резкие границы области рассеяния, за пределами которых, наличие рельефа не сказывается [230].

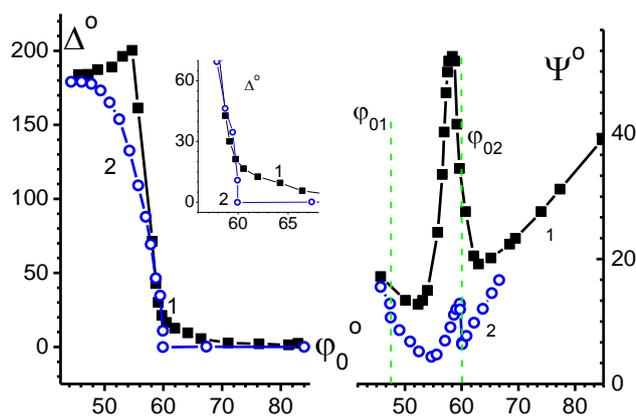


Рис. 79. Сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей поляризационных характеристик света, отраженного от рельефной поверхности: 1)- экспериментальные ($d=0.306$ мкм и $a=2.5$ мкм) и 2)- расчетные зависимости поляризационных углов Ψ и Δ для света, отраженного от поверхности плавленого кварца с рельефом СФМ. Длина волны $\lambda=0.633$ мкм. Расчетная геометрия СФМ трапециидальной ячейки: $d=0.306$ мкм, $a=2.3$ мкм и $\alpha=75^\circ$. Углы падения φ_{01} и φ_{02} ограничивают область, где свет, рассеянный боковыми гранями, попадает в зеркальную компоненту. На вставке: зависимость $\Delta(\varphi_0)$ около φ_{02} .

На Рис.79 приведены для сравнения **расчетные** и **экспериментальные** зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для поверхности кварца с трапециидальным рельефом СФМ.

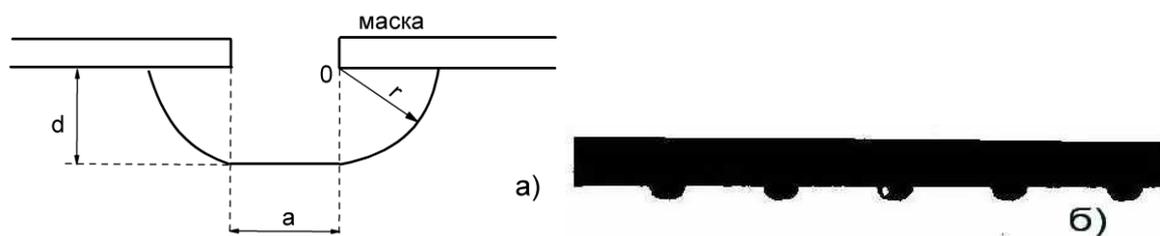


Рис. 80. а) - Схема, иллюстрирующая технологию получения рельефа СФМ, и б) - фотография профиля рельефа, вытравленного в кварце, с размерами $a=60$ мкм, $d=30$ мкм.

81, поэтому необходимо учитывать апертуру приемника (ФЭУ) эллипсометра, как показано на Рис. 82 и Рис. 83. Кроме того, для большей части наших экспериментов при $b \gg d$ и точка F , является практически общим фокусом для пучков света, отраженных от площадок dS_C и dS_T .

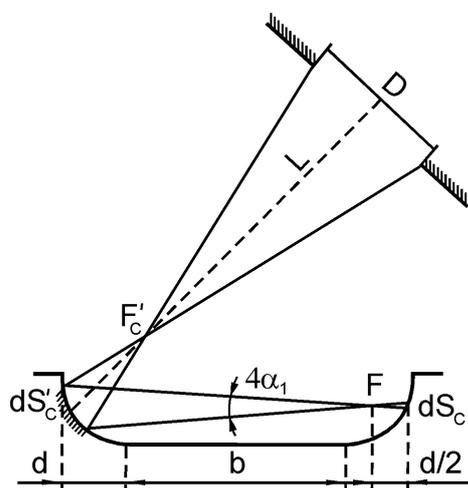


Рис. 82. Влияние апертуры приемника эллипсометра на величину рассеивающей площадки для луча C , параллельного донышку ячейки.

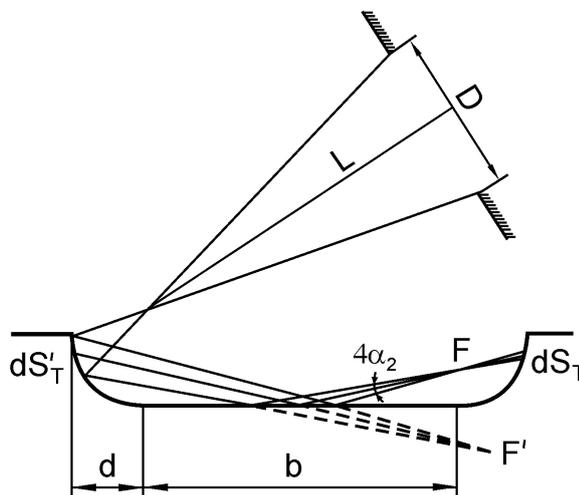


Рис. 83. Влияние апертуры приемника эллипсометра на величину рассеивающей площадки для луча T .

Влияние апертуры приемника эллипсометра ЛЭФ-3М на интенсивность сигнала, принимаемого от расходящегося пучка скажется, прежде всего, на величине отражающих площадок dS_C и dS_T (Рис.81).

Если на рельефную поверхность падает волна E_0 , то от элементарной **симметричной** ячейки для любого фиксированного угла падения отражаются волны: E_1 - от верхней грани, E_2 - от нижней грани, E_C – от площадки в окрестности линии C на цилиндрической боковой грани. Для углов падения света меньших, чем φ_{0T} от площадки в окрестности линии T цилиндрической боковой грани отражается волна E_T .

$$E_1 = E_0 R_1 k_1, \quad E_2 = E_0 R_2 k_2 e^{i\Delta_1}, \quad E_3 = E_C + E_T = E_0 (R_C k_C e^{i\Delta_C} + R_T k_T e^{i\Delta_T}),$$

$$\varphi_{0T} = \arctg \frac{d+b/2}{d}, \quad \xrightarrow{b \ll d} \varphi_{0T} \approx \arctg (b/2d). \quad (148)$$

где $R_1 = R_2$, R_C и $R_T \sim$ комплексные коэффициенты Френеля; k_1 , k_2 , k_C и k_T - геометрические коэффициенты, учитывающие отражающие площади соответствующих граней; Δ_1 , Δ_C и Δ_T - геометрические разности хода между лучом, отраженным от верхней грани, и лучами, отраженными от нижней и боковых граней, соответственно.

$$k_1^2 = \frac{b+2\xi-2d}{b}, \quad k_C^2 = 4\alpha_1 \frac{a-2d}{a}, \quad k_T^2 = 4\alpha_2 \frac{a-2d}{a},$$

$$k_2^2 = \frac{b-2\xi-2d(\operatorname{tg}\varphi_0-1)}{b}, \quad \text{а́ннè} \quad \pi/2 \leq \varphi_0 \leq \arctg(1+b/2d). \quad (149)$$

Очевидно, что от нижней грани элементарной ячейки не будет отражаться свет при $k_2=0$; чем глубже ячейка, тем при меньших значениях углов φ_0 , наступит полное затенение нижней грани. Разность хода лучей, отраженных от верхней и нижней граней, Δ_1 определяется для данного угла φ_0 глубиной ячейки и длиной волны падающего света по формуле (138).

Амплитуды и фазы волн E_C и E_T , отраженных от площадок боковой грани S_C и S_T , зависят от координат точек падения лучей C и T для каждого фиксированного угла падения φ_{0i} . Запишем суммы парциальных значений этих волн в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_C = \sum_{\alpha_C-\alpha_1}^{\alpha_C+\alpha_1} E_0 k_{C_i} R_{C_i}^2 e^{i\Delta_{C_i}}, \\ 0 \leq \varphi_{0i} \leq \pi/2, \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{l} E_T = \sum_{\alpha_T-\alpha_2}^{\alpha_T+\alpha_2} E_0 k_{T_i} R_{T_i}^2 e^{i\Delta_{T_i}}, \\ 0 \leq \varphi_{0i} \leq \varphi_{0T}, \end{array} \right\} \quad (150)$$

где E_0 -падающая волна, R_{C_i} и $R_{T_{1i}}$ -коэффициенты отражения света при его падении на i -площадку боковой грани в окрестности C или T лучей, соответственно; $R_{T_{2i}}$ - тоже при отражении луча T от доньшка ячейки. Разности хода лучей Δ_{C_i} и Δ_{T_i} зависят от координаты точки отражения луча и от угла падения света.

$$\Delta_{Ci} = \frac{4\pi}{\lambda} [b \sin^2 \alpha_i + d \sin 2\alpha_i], \quad \Delta_{Ti} = \frac{4\pi}{\lambda} [b \sin \alpha_i \cos(\alpha_i - \varphi_{0i}) + d \cos \varphi_{0i}]. \quad (151)$$

Запишем выражение для суммарной волны с учетом рассеяния:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = E_{12} + E_3, \quad E_{12} = E_0 R_1 \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2 \cos \Delta_1} e^{i\theta_{12}} = E_0 R_1 k_{12} e^{i\theta_{12}}, \quad (152)$$

$$k_{12} = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2 \cos \Delta_1}, \quad \theta_{12} = \arctg [(k_2 \sin \Delta_1 / k_1) + k_2 \cos \Delta_1] + \delta_R,$$

где $R_I = R_2$ и δ_R - модули и фаза коэффициентов Френеля.

Верхний и нижний пределы суммирования в (150) отличаются на $2\alpha_1$ или $2\alpha_2$, поскольку $\alpha_1 = \alpha_C$ и $\alpha_2 = \alpha_T$, то можно считать, что E_C и E_T практически не изменяются в указанных пределах. Для вычисления E_C и E_T достаточно заменить в (150) α_i на α_C и α_T , соответственно. Причем, геометрические коэффициенты $k_C \approx k_T$, при $D=L$ и $d \leq b = na$.

Поляризация суммарной волны будет зависеть от суммы p - и s -компонент, составляющих ее волн.

$$E_p = E_{12p} + E_{3p}, \quad E_s = E_{12s} + E_{3s}. \quad (153)$$

В выражениях (150, 152) геометрические коэффициенты k_{12} , k_C и k_T и разности хода Δ_1 , Δ_{Ci} и Δ_{Ti} не зависят от типа поляризации. Коэффициенты отражения R_1 , R_{Ci} и R_{Ti} зависят от типа поляризации. Общий вид коэффициентов Френеля (при измерении на воздухе) для материала с диэлектрической функцией ε имеют вид:

$$R_p = \frac{\varepsilon \cos \beta - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \beta}}{\varepsilon \cos \beta + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \beta}}, \quad R_s = \frac{\cos \beta - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \beta}}{\cos \beta + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \beta}}, \quad (154)$$

$$E_{12p} = E_{0p} R_{1p} k_{12} e^{i\theta_{12p}}, \quad E_{12s} = E_{0s} R_{1s} k_{12} e^{i\theta_{12s}},$$

$$E_{3p} = E_{0p} \left[\sum_{\alpha_C - \alpha_1}^{\alpha_C + \alpha_1} k_{Ci} R_{Cpi}^2 e^{i\Delta_{Ci}} + \sum_{\alpha_T - \alpha_2}^{\alpha_T + \alpha_2} k_{Ti} R_{T1pi}^2 R_{T2pi} e^{i\Delta_{Ti}} \right] = E_{0p} R_{3p} k_3 e^{i\Delta_{3p}}, \quad (155)$$

$$E_{3s} = E_{0s} \left[\sum_{\alpha_C - \alpha_1}^{\alpha_C + \alpha_1} k_{Ci} R_{Csi}^2 e^{i\Delta_{Ci}} + \sum_{\alpha_T - \alpha_2}^{\alpha_T + \alpha_2} k_{Ti} R_{T1si}^2 R_{T2si} e^{i\Delta_{Ti}} \right] = E_{0s} R_{3s} k_3 e^{i\Delta_{3s}},$$

где β нужно заменить в выражениях (155) на величины, указанные в Таблице 24, для вычисления соответствующих коэффициентов:

Таблица 24

при вычислении	$R_1 = R_2$	R_{Ci}	R_{Ti}	R_{T2i}
β заменить на	φ_{0i}	$\alpha_{Ci} - \varphi_{0i}$	$\alpha_{Ti} - \varphi_{0i}$	$\pi + \varphi_{0i} - 2\alpha_{Ti}$

Зная p - и s - составляющие суммарной отраженной волны можно вычислить поляризационные характеристики пучка света, отраженного от ячейки с цилиндрическими боковыми гранями $tg \bar{\Psi}_{13} e^{i\bar{\Delta}_{13}}$:

$$\begin{aligned}
 tg \bar{\Psi}_{13} e^{i\bar{\Delta}_{13}} &= \frac{E_{12p} + E_{3p}}{E_{12s} + E_{3s}} \bigg/ \frac{E_{0p}}{E_{0s}} = \frac{R_{1p} k_{12} e^{i\theta_{12p}} + R_{3p} k_3 e^{i\Delta_{3p}}}{R_{1s} k_{12} e^{i\theta_{12s}} + R_{3s} k_3 e^{i\Delta_{3s}}}, \\
 tg \bar{\Psi}_{13} &= \sqrt{\frac{(R_{1p} k_{12})^2 + (R_{3p} k_3)^2 + 2R_{1p} k_{12} R_{3p} k_3 \cos(\theta_{12p} - \Delta_{3p})}{(R_{1s} k_{12})^2 + (R_{3s} k_3)^2 + 2R_{1s} k_{12} R_{3s} k_3 \cos(\theta_{12s} - \Delta_{3s})}}, \\
 \bar{\Delta}_{13} &= \theta_{13p} - \theta_{13s} = arctg \frac{R_{12p} k_{12} \sin \theta_{12} + R_{3p} k_3 \sin \Delta_{3p}}{R_{12p} k_{12} \cos \theta_{12} + R_{3p} k_3 \cos \Delta_{3p}} - \\
 &\quad - arctg \frac{R_{12s} k_{12} \sin \theta_{12} + R_{3s} k_3 \sin \Delta_{3s}}{R_{12s} k_{12} \cos \theta_{12} + R_{3s} k_3 \cos \Delta_{3s}},
 \end{aligned} \tag{155}$$

или с учетом малости α_1 и α_2 :

$$tg \bar{\Psi}_{13} e^{i\bar{\Delta}_{13}} \approx \frac{R_{1p} k_{12} e^{i\theta_{12p}} + R_{Cp}^2 k_C e^{i\Delta_C} + R_{T1p}^2 R_{T2p} k_T e^{i\Delta_T}}{R_{1s} k_{12} e^{i\theta_{12s}} + R_{Cs}^2 k_C e^{i\Delta_C} + R_{T1s}^2 R_{T2s} k_T e^{i\Delta_T}}, \tag{155a}$$

Анализ выражения (155) показывает, что также как в случае трапецидальной ячейки, вклад рассеянной волны E_3 может быть заметен только в "особых" точках, когда $|E_{12}|$ обращается в нуль или очень мало, поскольку амплитуда E_3 всегда мала вследствие малости геометрических коэффициентов k_C и k_T .

Рассмотрим возможные случаи, когда $|E_{12}|$ мало или равно нулю:

1. если геометрический коэффициент k_{12} минимален. Только для $\Delta_1 = \pi$ коэффициент k_{12} принимает минимальное значение, причем его значение возрастает с увеличением глубины рельефа. По определению k_1 меньше k_2 и

для углов падения $\varphi_0 < 45^\circ$ отсутствует затенение нижней грани, т.е. нижняя грань освещается полностью. При углах падения $\varphi_0 > \varphi_{0T}$ наступает полное затенение для луча T и $k_T = 0$. Значение угла падения φ_0 , при котором вклад света, рассеянного рельефной поверхностью максимален, задается выражением:

$$k_1 < k_2, \quad k_2 \left(\varphi_0 < \frac{\pi}{4} \right) = 1, \quad \Delta_1 = n\pi, \quad \varphi_{\text{и́д}} = \arccos \frac{\lambda}{4d} n, \quad n = 1, 3, 5,$$

что соответствует минимуму интерференции парциальных волн E_1 и E_2 .

2. если R_1 обращается в нуль; в нуль может обращаться только p -компонента коэффициента Френеля R_{1p} на угле падения света, равном углу Брюстера и только для диэлектриков; R_{1p} близка к нулю для слабо поглощающих полупроводников и заметно отличается от нуля для металлов. Следовательно, это условие выполняется не всегда.

Чтобы учесть влияние ячеек с произвольным размером, введем коэффициент C_n , равный $C_n = 2^{-(n+1)}$ и учитывающий вероятность появления в строке ячейки с размером b , Обозначим через $C_n E_{pn}$ и $C_n E_{sn}$ – p - и s -компоненты отраженного электрического поля от ячейки с размером $b \times a$, где $b = na$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Полное отраженное поле будет являться суммой

$$E_p = \sum_1^n C_n E_{pn}, \quad E_s = \sum_1^n C_n E_{sn}. \quad (156)$$

Ограничимся суммированием по n до $n = 5$, поскольку C_n быстро убывает.

Основные выводы к 5.2.4.1.

Учет вклада в зеркальную компоненту рассеянных лучей от ячеек с размерами $a, 2a, 3a, \dots, 4a, 5a$ приведет:

- а) к увеличению значения φ_{0Tn} , согласно выражению (148), и, следовательно, к увеличению диапазона углов φ_{0i} , где есть вклад рассеянного света;

- б) к уменьшению геометрических коэффициентов k_{Cin} и k_{Tin} (149), за счет уменьшения в n раз углов α_1 и α_2 , т. е. более жесткие условия на расходимость пучка света;
- в) к изменению в n раз первых слагаемых в выражениях для фазовых сдвигов Δ_{Ci} и Δ_{Ti} , которые пропорциональны $4\pi an/\lambda$;
- г) к небольшому изменению положения одной из "особых точек" - минимума интерференции за счет изменения положения минимума k_{I2} ;
- д) к уменьшению затенения (149), что приведет к более глубокому минимуму интерференции волн E_1 и E_2 и сделает более заметным вклад рассеянных лучей.

5.2.4.2. Влияние параметров рельефа на расчетные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для меди с вытравленным рельефом с учетом **кривизны** граней

Напомним, что зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для зеркально-гладкой поверхности меди имеют вид, представленный на Рис. 84. Наличие рельефа на поверхности приводит к искажению формы зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, и к появлению экстремумов в "особых точках". Для модели отражающей ячейки с цилиндрическими боковыми гранями при любых углах падения необходимо учитывать влияние рассеянного света. В отличие от модели трапециидальной ячейки, где интервал углов падения, для которых возможно попадание рассеянного света в зеркальную компоненту, ограничен и равен $[\arctg[a/2d + \operatorname{ctg} \alpha] + \pi - 2\alpha < \varphi \leq 2\alpha - \pi/2$.

Для элементарной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями, размер которой $b=na$, по формулам (155), полученным выше, были рассчитаны зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для поверхности **меди** с варьируемой глубиной рельефа (d_1, d_2, d_3) и учетом изменения размеров ячейки при фотолитографии (ξ_1, ξ_2), но с сохранением расстояния между центрами соседних ячеек. Размер ячейки тоже варьировался: в первом случае $a_1=2.5$ мкм, а во втором случае

на порядок больше- $a_2=25$ мкм. Все расчетные параметры ячейки представлены в Таблицах 25 и 26. В этих же таблицах показаны расчетные значения углов падения (φ_{01} , φ_{02} , φ_{03}), при которых $\Delta_1=\pi$, вычисленные по формуле (138) для каждой глубины рельефа (d_1 , d_2 , d_3), соответственно. Как показал предыдущий анализ, именно вблизи этих углов падения должны наблюдаться аномально большие искажения в зависимостях поляризационных характеристик $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ отраженного света, вызванные наличием рельефа. Для луча Т на рисунке 46 показано изменение угла φ_{0Tn} для ячеек с размерами a_1 и a_2 .

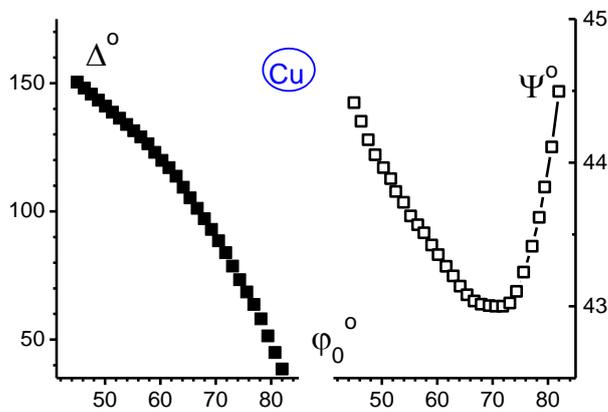


Рис. 84. Угловые зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для зеркально-гладкой поверхности меди.

Минимальное значение Ψ определяет угол псевдо-Брюстера, равный $\approx 70^\circ$.

Благодаря сильному

поглощению меди на длине волны 0.633 мкм p -компонента отраженного света не обращается в нуль, и поляризационный угол $\Psi_{\min} \approx 43^\circ$, что соответствует $|R_p|/|R_s| \approx 0.93$.

На рисунках 86 (а, б, в, г) и 87 (а, б, в, г) представлены расчетные поляризационные характеристики света, отраженного от поверхностей меди, параметры рельефа которых показаны в Таблице 25 и Таблице 26, соответственно. Рассмотрим влияние каждого из параметров рельефа: глубины рельефа d ; изменения скважности за счет параметра ξ , т.е. ухода размера a при травлении рельефа; размера ячейки a ; параметра $b=na$, который в свою очередь определяет целый ряд параметров: φ_{0T} , k_1 , k_2 и C_n .

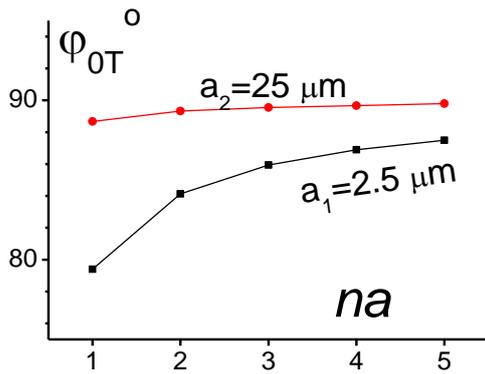


Рис. 85. Расчетное значение максимально возможного угла падения φ_{0T} , при котором свет, рассеянный боковой гранью из точки Т, попадает в зеркальную компоненту. φ_{0T} представлен как функция геометрии рельефа $b=na$ элементарных ячеек с цилиндрическими

боковыми гранями. Для размера $a_2=25$ мкм эффект затенения минимален и $\varphi_{0T} > 88^\circ$, т.е. почти при любом угле падения часть рассеянного света попадает на детектор эллипсометра.

Основные выводы к разделу 5.2.4

- Влияние глубины рельефа проявляется, прежде всего, в положении "особых точек" (φ_{01} , φ_{02} , φ_{03}), которые сдвигаются в сторону бо'льших углов падения при увеличении глубины d . Кроме того, глубина опосредованно влияет на величину экстремума через эффект затенения, изменяя геометрический коэффициент отражения k_T . Очевидно, с увеличением размера элементарной ячейки затенение играет меньшую роль.

- Сравним расчетные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для поверхности с "однотипными дефектами" $b=a_1$ (Рис. 86а и Рис. 86в) и $b=a_2$ (Рис. 87 а и Рис. 87в), которые отличаются только параметром ξ , уменьшающим верхнюю грань ячейки. Изменение размера верхней грани учитывается геометрическим коэффициентом k_1 и влияет на величину экстремума через k_{12} . Очевидно, что с увеличением размера ячейки a относительное изменение $2\xi/a$ падает, поскольку $a \gg \xi$. т.е. при $b=na$, влияние ξ на поляризационные характеристики поверхности уменьшается при увеличении размера элементарной ячейки a : зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для $a_2=25$ мкм почти полностью совпадают, отличаясь только в значении экстремумов.

- Существенное значение имеет размер отражающей (рассеивающей) ячейки: $a_1=2.5$ мкм или $a_2=25$ мкм и это отчетливо видно при

сравнении Рис. 86а с Рис. 87а или Рис. 86в с Рис. 87в, где $b=a$. Следует заметить, что одна и та же зондируемая площадка для $a_1=2.5\text{мкм}$ содержит в 100 раз больше рассеивателей, чем для $a_2=25\text{мкм}$, поэтому расчетные зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ выглядят более гладкими. Увеличение размера a приводит к резкому изменению эллипсометрических углов вблизи "особых точек".

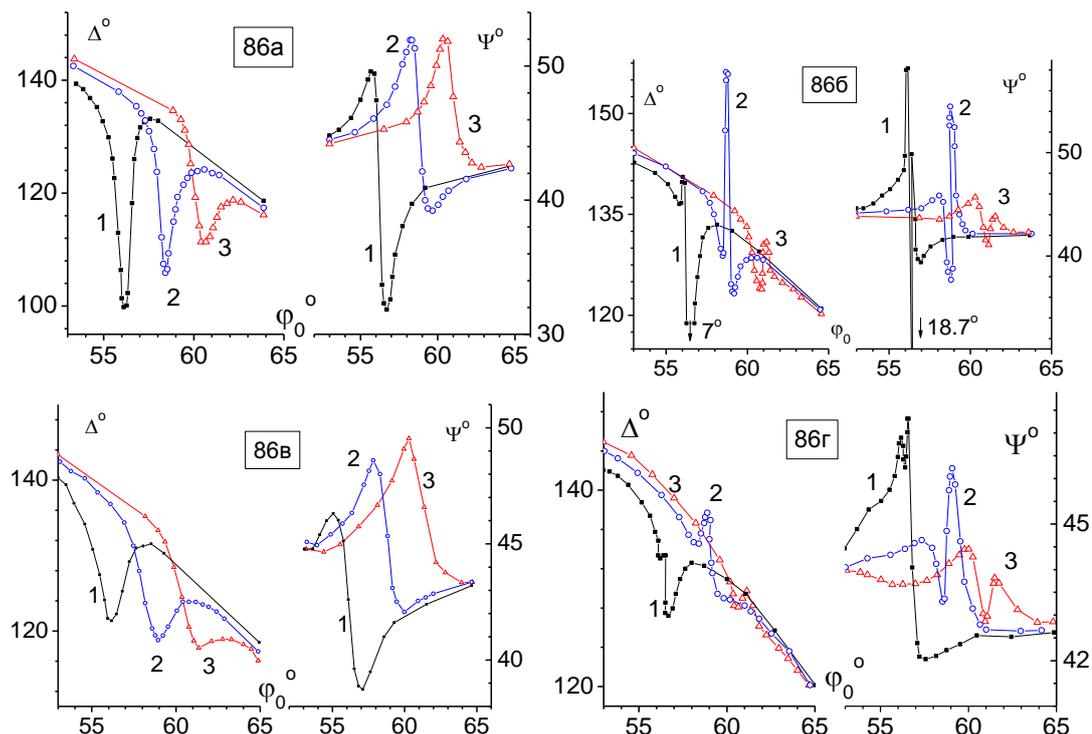


Таблица 25

	φ_{01}	φ_{02}	φ_{03}	d_1	d_2	d_3	ξ	b	
Рис. 86				в микрометрах					$a_1=2.5 \text{ мкм}$
а	56.4°	58.9°	60.9°	0.286	0.306	0.326	0.105	$b=a$	$\lambda=0.63 \text{ мкм}$
б								$b=na$	
в							$b=a$		
г								$b=na$	

Рис. 86. Расчетные поляризационные характеристики Ψ и Δ от угла падения света φ_0 для поверхности меди с рельефом 2.5 СФМ ($a=2.5 \text{ мкм}$) для трех различных глубин рельефа: d_1, d_2, d_3 , с учетом изменения скважности ξ и с учетом типа дефектов: $b = a$ или $b=na$, ($n = 1, 2, 3, 4, 5$). Длина волны света $\lambda = 0.633 \text{ мкм}$. Все параметры рельефа показаны в Таблице 25.

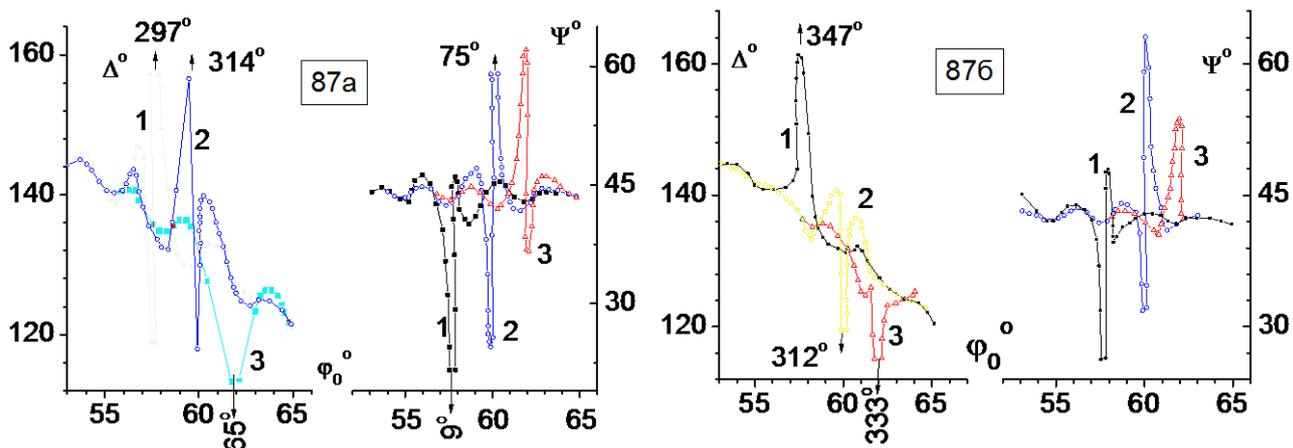


Таблица 26

Рис. 87	φ_{01}	φ_{02}	φ_{03}	d_1	d_2	d_3	ξ	b	$a_2=25 \text{ мкм}$ $\lambda=0.63 \text{ мкм}$ $n=1,2,3,4,5$
	в микрометрах								
а	57.7°	59.9°	61.9°	0.296	0.316	0.336	0.105	$b=a$	
б								$b=na$	
в							0.150	$b=a$	
г								$b=na$	

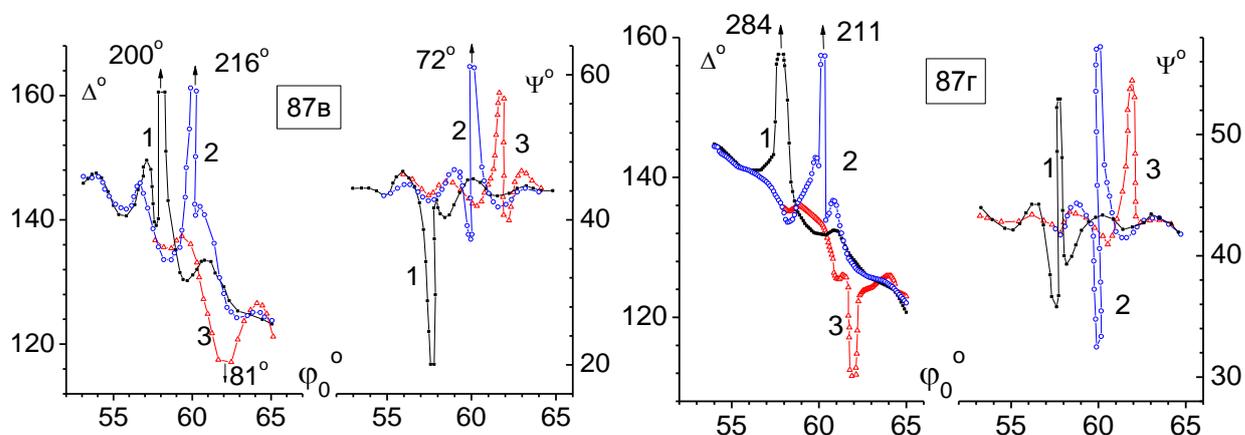


Рис. 87. Расчетные зависимости Ψ и Δ от угла падения света φ_0 для поверхности меди с рельефом 25 СФМ ($a = 25 \text{ мкм}$). Размер элементарной ячейки с **цилиндрическими** боковыми гранями в десять раз больше, чем на Рис. 86. Расчет сделан для трех различных **глубин** рельефа: 1- d_1 , 2- d_2 , 3- d_3 , с учетом изменения скважности ξ и с учетом типа дефектов: однотипные дефекты ($b = a$) и разнотипные дефекты ($b=na$). Длина волны света 0,633 мкм. Все параметры рельефа показаны в Таблице 26.

- Учет парциальных волн рассеянного света от ячеек с размерами кратными n ($n=1,2,3,4,5$) приводит к появлению дополнительных близко расположенных экстремумов в зависимостях $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, как можно видеть при сравнении пар Рис. 86а и Рис. 86б или пар Рис. 86в и Рис. 86г, где $a_1=2.5\text{мкм}$.

Аналогичные изменения в расчетных зависимостях $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для $a_2=25\text{мкм}$ можно видеть при сравнении пар Рис. 87а и Рис. 87б или пар Рис. 87в и Рис. 87г. При одной и той же геометрии СФМ учет распределенных "разнотипных дефектов" дает сильный эффект при $a \geq d$ и заметный, но слабый эффект при $a < d$. Для рельефа СФМ, где $a < d$ достаточно рассчитать зависимость поляризационных углов Ψ и Δ только для одного наиболее вероятного размера дефектов: $b=a$.

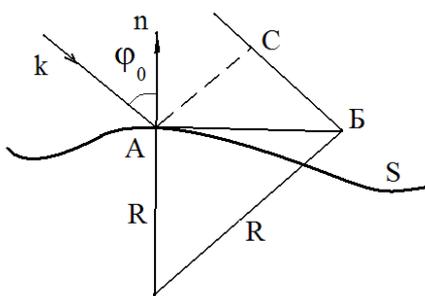
Учет кривизны боковых граней элементарной ячейки СФМ позволяет устранить недостаток, присущий расчетам поляризационных характеристик рельефной поверхности по модели трапециидальной ячейки СФМ [228-230], проявляющийся в резком ограничении области углов падения света φ_0 , в которой наличие рельефа на отражающей поверхности изменяет поляризационные характеристики отраженного от нее света. Изменение размера a на 4% за счет параметра ξ заметно влияет на поляризационные характеристики рельефной поверхности, если размер элементарной ячейки мал ($a_1=2.5\text{ мкм}$).

§ 5.3. Измерение поляризационных характеристик света, отраженного от поверхности с вытравленным рельефом

В этом параграфе приведены результаты измерения экспериментальных зависимостей поляризационных характеристик, т.е. эллипсометрических углов Ψ и Δ для поверхностей диэлектрика и металла с рельефом случайной

фазовой маски (СФМ) с известными параметрами, используемой в качестве модели шероховатой поверхности. Исследованы угловые зависимости $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ как функции параметров рельефа СФМ на одной длине волны.

При отражении электромагнитного излучения от поверхности жидкого или твердого тела необходимо учитывать неровности, которые всегда присутствуют на реальной отражающей поверхности. Высота, форма и плотность (количество на единицу площади) неровностей определяют параметры отраженного сигнала: индикатрису рассеяния, интенсивность сигнала в заданном направлении, степень и тип поляризации, и изменение частоты падающего излучения. Из всего многообразия аналитических методов необходимо выделить два основных: метод касательной плоскости (или метод Кирхгофа) и метод малых возмущений. Первый из методов применим для поверхностей, когда отражение от неровной поверхности можно рассматривать в приближении касательной плоскости, т.е., чтобы локальные радиусы кривизны поверхности S превышали длину волны: $R \gg \lambda$. Существенное ограничение метода Кирхгофа связано с тем, что он **не учитывает возможные затенения поверхности и многократные отражения.**



Для учета затенений вводят **условную эффективную функцию плотности распределения высот** и тангенсов углов наклона освещенной части поверхности, зависящую от угла падения, как от параметра.

Эта функция имеет простой геометрический смысл, она выражает отношение суммарной площади проекций на среднюю плоскость $z = 0$ освещенных участков поверхности к площади проекции всей поверхности на эту же плоскость. Для метода касательной плоскости сложно оценить точность решения в отличие от метода малых возмущений. Метод малых возмущений применим для неровностей меньших длины волны. В

основе обоих методов лежит использование формулы Грина, позволяющей выразить решение $U(r)$ уравнения Гельмгольца $\Delta U + k^2 U = 0$ в заданной области Σ через значения этого же решения и его нормальной производной на границе S области Σ .

$$U(r) = \int_s \left[U(s) \frac{\partial V(r,s)}{\partial v} + V(r,s) \frac{\partial U(s)}{\partial v} \right], \quad V(r,s) = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|r-s|)}{|r-s|}.$$

где $\partial/\partial v$ - дифференцирование по нормали к s , направленной внутрь области Σ . Аналитические методы дают качественно верное описание отраженной волны, но не учитывают многократного рассеяния и последующих дифракций падающих и отраженных волн. Решение по методу Кирхгофа не самосогласованно, поскольку поля и их производные не принимают на границе тех значений, которые вкладываются в формулу Грина для их вычисления. Метод Кирхгофа не позволяет, например, объяснить наличие экстремумов в угловых зависимостях света, отраженного от поверхности с длинными ($L > \lambda$) ступеньками, составляющими малый ($\sim 15^\circ$) угол со средней поверхностью [202].

Большое число работ посвящено математическому моделированию шероховатой поверхности эффективной средой или эквивалентной пленкой. Суть модели, и параметры шероховатого слоя, которые можно определить на основе этой модели, подробно рассмотрены в § 5.1. Модель не является универсальной, хотя в ряде случаев очень полезна для количественной оценки шероховатого слоя. Неоднократно предпринимались попытки имитации шероховатой поверхности с помощью периодического рельефа с известной геометрией: дифракционных решеток прямоугольного [200, 222, 232-235] и синусоидального [204], и треугольного (эшелетт) профиля [202, 203] и т.д.

В настоящем параграфе исследуются экспериментальные зависимости поляризационных характеристик поверхности, для которой в качестве модели выбрана случайная фазовая маска. Рельеф случайной фазовой маски

(СФМ) формируется построчно (Рис. 69) по случайному закону. Вероятность появления в строке белого или черного квадратика размером a равна $1/2^{n+1}$ (Рис. 70), квадратики черного и белого цвета образуют на поверхности массивы произвольной конфигурации соответствующего цвета. В § 5.2 подробно рассмотрены случаи, когда вклад рассеянного света настолько существенен, что он не только искажает форму зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, но и приводит к возникновению экстремумов в "особых точках". "Особые точки" возникают, если выполняется условие интерференции (138) и (151) для зеркально отраженного света, и/или если его p -компонента обращается в нуль, либо принимает минимальное значение на угле Брюстера. Угол Брюстера определяется оптическими константами отражающего материала, для диэлектрика $\varphi_B = \text{arctgn}$, для поглощающего материала угол псевдо Брюстера определяется модулем комплексного показателя преломления N : $\varphi_{\text{псевдоБ}} \approx \text{arctg}|N|$.

Особое внимание было уделено форме боковых рассеивающих граней. Вначале полагали, что боковые грани симметрично наклонены к доньшку ячейки под углом α , и получили условия (144) и (146) рассеяния в зеркальную компоненту с учетом затенения в ограниченной области углов падения света φ_0 : $\pi - 2\alpha + \text{arctg} \left[\frac{a}{2d} + \text{ctg}\alpha \right] \leq \varphi_0 \leq 2\alpha - \frac{\pi}{2}$.

Затем получили условия рассеяния зеркальную компоненту для ячейки с цилиндрическими боковыми гранями: а) для лучей, рассеянных параллельно доньшку ячейки, нет ограничений на углы падения; б) и плюс для света, рассеянного с участием нижней грани, для углов падения света $0 < \varphi_0 \leq \varphi_{0T}$. Максимально возможный угол φ_{0T} определяется размерами ячейки (148), и его зависимость от параметров ячейки показана на Рис. 85.

В разделе 5.2.3.4 исследовано влияние параметров ячейки трапециидального рельефа на расчетные поляризационные характеристики на примере поверхности кварца, как показано на Рис. 76 – Рис. 78.

В разделе 5.2.4.2 исследовано влияние параметров ячейки на расчетные поляризационные характеристики для поверхности меди с вытравленным рельефом с учетом **кривизны** боковых граней. Результаты расчета показаны на Рис. 86 и Рис. 87.

5.3.1. Экспериментальные результаты: зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ от параметров рельефа

Экспериментальная зависимость поляризационных характеристик света, отраженного рельефной поверхностью случайной фазовой маски, от угла падения света изучалось на четырех типах образцов, полученных на двух материалах: на диэлектрике-**кварце** и металле-**алюминии**, с размером элементарной ячейки СФМ 25x25 мкм и 2.5x2.5 мкм на каждом из материалов. Глубина рельефа изменялась от 0.02 мкм до 1.005 мкм. Всего было изготовлено и измерено 74 образца.

Переход от одного размера СФМ к другому означает изменение площади элементарной ячейки в 100 раз, что соответствует изменению в ~ 100 раз плотности "дефектов" на исследуемой поверхности.

Переход от одного материала к другому означает существенное изменение модуля и фазы коэффициентов отражения *p*- и *s*- поляризованного света, а также изменение интенсивности рассеянного света, поскольку отражательная способность кварца составляет $\sim 4\%$, а алюминия $\sim 90\%$ при нормальном падении.

Варьирование глубины рельефа означает изменение отношения a/d , ответственного за область углов падения света, где возможно рассеяние в зеркальную компоненту, и изменение условия интерференции.

Предполагается, что профиль рельефа изменяется по одному и тому же закону для всех образцов. Если считать скорости травления в горизонтальном и вертикальном направлениях постоянными, но не равными,

то угол наклона боковой грани к донышку ячейки $\alpha = \text{const}$. Анализ, проведенный в разделах 5.2.3 и 5.2.4 для простого случая - симметричного трапециидального рельефа и для цилиндрической поверхности боковой грани, позволяет понять результаты эксперимента на более сложной реальной поверхности. Главный вывод, который следует из этого анализа, - существование ограниченной области углов падения, определяемой геометрией рельефа. Но, по-видимому, боковая стенка не остается плоской, а ее поверхность приобретает кривизну благодаря изотропности травления. В этом случае для цилиндрической поверхности боковой грани условия рассеяния сильно отличаются от условий рассеяния на плоской грани, т.к. угол падения света на боковую грань будет зависеть от радиуса кривизны и координаты. Для света, падающего на боковую грань, вместо одного угла падения, равного $(\alpha - \varphi_0)$, будет набор углов падения $(\alpha_i - \varphi_0)$, где α_i - угол, образуемый касательной плоскостью в данной точке цилиндрической поверхности с горизонталью. Очевидно, для каждого φ_0 на цилиндрической поверхности найдется $(\alpha_i - \varphi_0)$, где возможно рассеяние в зеркальном направлении, но по-прежнему, рассеянные лучи дадут заметный вклад только в "особых точках" (интерференция, угол Брюстера). Кроме того, в данном случае существуют еще лучи света, показанные ранее на Рис. 81 и Рис. 83 для симметричной ячейки с цилиндрическими боковыми гранями, для углов падения меньших, чем φ_{0T} (148), т.е. область углов падения, где учитывается рассеяние, имеет вид:

$$0 \leq \varphi_0 \leq \frac{\pi}{2} \xrightarrow{+} 0 \leq \varphi_0 \leq \varphi_{0T}, \quad \varphi_{0T} = \arctg \frac{d + b/2}{d}, \xrightarrow{b \ll d} \varphi_{0T} \approx \arctg \frac{b}{2d}.$$

Таким образом, согласно модели, рассмотренной в §5.2, рассеянные лучи могут попадать в зеркальную компоненту практически во всем диапазоне углов падения света.

При измерении образцы с рельефом СФМ устанавливалась на предметном столике эллипсометра, так чтобы строка СФМ находилась в

плоскости падения, и результаты измерений можно было бы анализировать с помощью выражений, полученных в разделах 5.2.3 и 5.2.4. Точность позиционирования образца составляла 1-2 угловых минуты и обеспечивалась с помощью микроскопа, установленного на эллипсометре ЛЭФ-3М. Все измерения проводились на длине волны 0.63 мкм. Напомним, что измерения относятся **только к зеркальной компоненте отраженного света.**

Поскольку наши измерения на таких поверхностях проводятся на эллипсометре ЛЭФ-3М при косом падении света, то следует рассматривать особенности дифракции когерентного света на случайной фазовой маске с произвольным фазовым сдвигом. Все наши измерения относятся только к **нулевому порядку дифракции**, т.е. к зеркально отраженным лучам.

Результаты экспериментальных зависимостей поляризационных характеристик света, отраженного от рельефной поверхности СФМ, для малых глубин вытравленного рельефа приведены на рисунках: Рис. 88, Рис. 89 (а, б); а также на рисунках: Рис. 90 (а, б, с) и Рис. 91.

Для одного и того же рельефа (одинаковых a и d) получено по два образца на различных материалах (**кварце** и **алюминии**), что очень удобно при сравнении угловых зависимостей $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$, поскольку значение имеет не только геометрия ячейки, но и отражательная способность материала, т.е. коэффициенты Френеля R_s и R_p , а также угол Брюстера φ_B .

5.3.1.1. Сравнение поляризационных характеристик диэлектрика и металла с вытравленным рельефом случайной фазовой маски 25×25 мкм

Отметим, прежде всего, **общие эффекты**, наблюдаемые для всех образцов с размером ячейки $a=25$ мкм и $a=2.5$ мкм.

- Для малой глубины рельефа $d < \lambda/4$ (т.е. с учетом минимального угла падения $d < 223.7$ нм), малые изменения угловых зависимостей $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$

наблюдаются только вблизи угла Брюстера, для кварца равного 55.6° и для алюминия угол псевдо Брюстера равен $\sim 81^\circ$: Рис. 88, Рис. 89, Рис. 90, Рис. 91.

- При глубине рельефа $d > \lambda/4$ в угловых зависимостях $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ появляется сначала один, а затем два экстремума и даже три экстремума, находящиеся вблизи углов интерференции $\varphi_{\text{интерф}}$.

- Положение экстремумов $\Delta_{\text{max}}(\varphi_0)$ и $\Psi_{\text{max}}(\varphi_0)$, как правило, не совпадают, поскольку Δ характеризует фазовые, а Ψ амплитудные особенности отраженного света.

- Особенно большие изменения наличие рельефа на поверхности вносит в поляризационные характеристики, если угол интерференции $\varphi_{\text{интерф}}$ совпадает или находится вблизи угла Брюстера, соответствующего данному материалу.

Теперь остановимся на основных **различиях** в наблюдаемых угловых поляризационных характеристиках.

Различия эти связаны, прежде всего, с оптическими константами отражающей поверхности, определяющими как отражающие, так и поляризационные свойства поверхности. Во-первых, отражательная способность кварца при нормальном падении $R \sim 4\%$, а алюминия $R \sim 90\%$, очевидно, что интенсивность лучей, рассеянных с участием трех граней для кварца составит не более $0,006\%$, а для алюминия $\sim 72\%$ от интенсивности падающего излучения.

- Поэтому для образцов на алюминии более существенны изменения модуля относительного коэффициента отражения $|\rho| = \text{tg}\Psi$ и более яркие изменения наблюдаются в угловой зависимости $\Psi(\varphi_0)$.
- Для кварца основные изменения наблюдаются в фазовых соотношениях $\Delta(\varphi_0)$. Кроме того, для кварца как для диэлектрика R_p равно нулю на угле Брюстера 55.6° и $\Psi=0$, тогда как для алюминия R_p никогда не обращается в нуль и даже на угле псевдо Брюстера (81.5°) R_p лишь на 18% меньше R_s , т.е. во всем диапазоне измерений $R_p \approx R_s$.

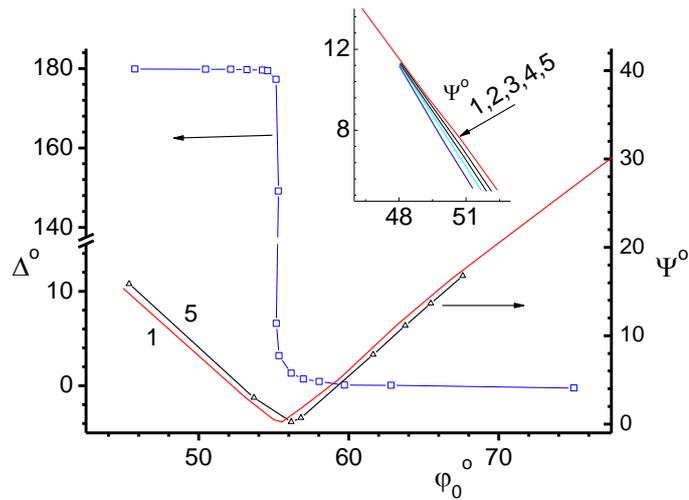


Рис. 88. Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного поверхностью **кварца** с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 25×25 мкм. Глубина рельефа **кварца**: $d_1=20$ нм, $d_2=40$ нм, $d_3=50$ нм, $d_4=80$ нм, $d_5=110$ нм. При увеличении глубины смещается положение Ψ_{\min} .

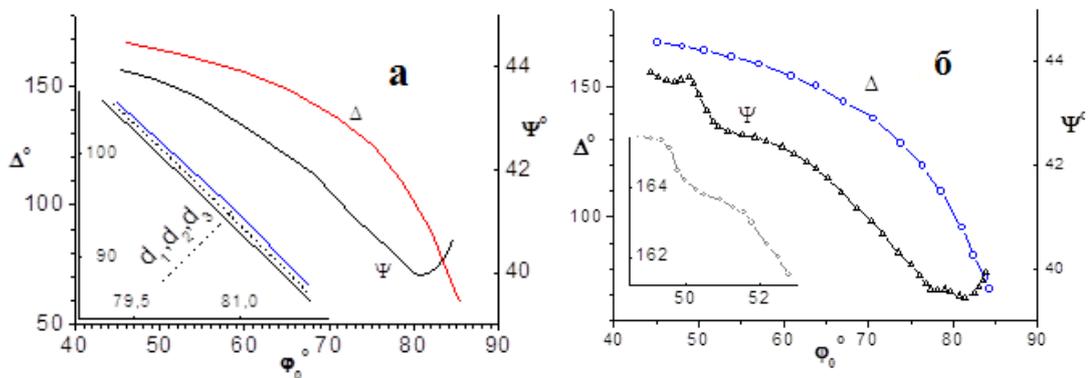


Рис. 89 а) Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного поверхностью **алюминия** с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 25×25 мкм. Глубина рельефа **алюминия**: $d_1=20$ нм, $d_2=40$ нм, $d_3=80$ нм. На вставке показано поведение Δ вблизи псевдо Брюстера, равного для алюминия $\sim 81^\circ$, при этом $\Delta \approx 90^\circ$. б) Глубина рельефа **алюминия**: $d_1=224$ нм. На вставке показано поведение Δ вблизи первого экстремума в $\Psi(\varphi_0)$.

- Различия, связанные с десятикратным уменьшением размера элементарной ячейки, проявляются в том, что для углов падения $\varphi_0 > 70^\circ$, т.е. вблизи угла псевдо-Брюстера на **алюминии** нет выраженных экстремумов, из-за затенения.
- Общая тенденция для рельефа с размером $a=2.5$ мкм - более заметное искажение угловых зависимостей $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ по сравнению с рельефом $a=25$ мкм при примерно одинаковой глубине d .

Наблюдаемые в эксперименте зависимости $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$ еще раз подтверждают правильность выбранной модели расчета.

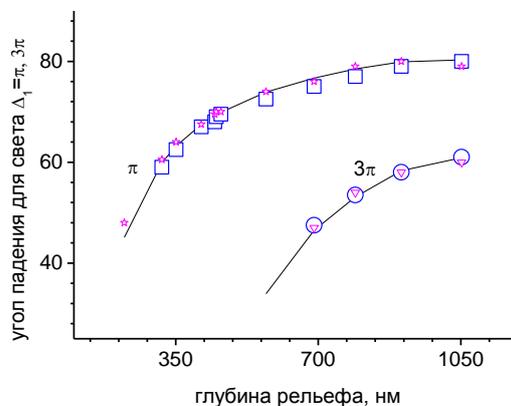


Рис. 74а. Расчетные значения углов падения φ_0 из условия интерференции (сплошные линии), показанные на Рис. 74, и экспериментальные значения: \square и \circ -кварц 25 мкм и 2.5 мкм, соответственно; \star и ∇ - алюминий 25 мкм и 2.5 мкм, соответственно.

5.3.1.2. Сравнение поляризационных характеристик диэлектрика и металла с вытравленным рельефом случайной фазовой маски 2.5×2.5 мкм

Уменьшение размера ячейки в 10 раз приводит к увеличению интенсивности света, рассеянного поверхностью **кварца**, и влияет на увеличение роли амплитудных соотношений поляризованного света $\Psi(\varphi_0)$. Для **алюминия** же, наоборот, увеличивается роль фазовых соотношений и заметно увеличивается ширина экстремумов. Есть еще одна характерная

деталь, отличающая поляризационные характеристики кварца от алюминия - это ширина экстремумов. Поскольку интенсивность рассеянного света на кварце значительно меньше, то и его влияния сказывается в более узкой области углов падения вблизи интерференционного минимума.

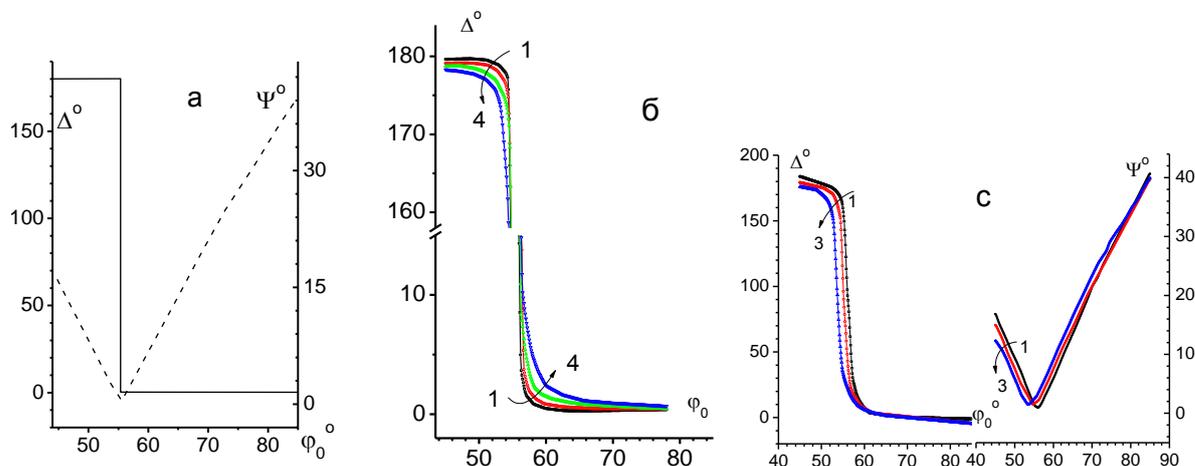


Рис. 90. а) Зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного чистой поверхностью **кварца** без рельефа; б)

Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Delta(\varphi_0)$ для **кварца** с размером ячейки СФМ 2.5×2.5 мкм; глубина рельефа: $d_1=21$ нм, $d_2=40$ нм, $d_3=55$ нм, $d_4=80$ нм;

с) глубина рельефа **кварца**: $d_1=103$ нм, $d_2=143$ нм, $d_3=208$ нм.

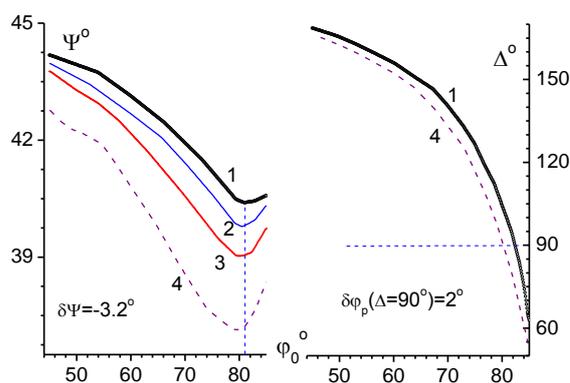


Рис. 91. Экспериментальные зависимости поляризационных углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ для света, отраженного поверхностью **алюминия** с вытравленным рельефом СФМ; размер элементарной ячейки 2.5×2.5 мкм; глубина рельефа:

$d_1=0$ нм, $d_2=55$ нм, $d_3=103$ нм, $d_4=143$ нм. Пунктиром отмечено а) значение угла Брюстера, где $\delta\Psi_{\min} = \Psi_{1\min} - \Psi_{4\min} = -3.2^\circ$ и б) значение $\Delta=90^\circ$, чтобы показать смещение главного угла падения φ_p : $\delta\varphi_p \approx 2^\circ$.

5.3.2. Поверхностная анизотропия рельефной поверхности

Рельеф с малым размером a обладает бо́льшими анизотропными свойствами. Для иллюстрации анизотропных свойств образец вращался вокруг нормали к его поверхности. Очевидно, что такое вращение эквивалентно изменению профиля рельефа, при этом циклически (через 90°) меняется разность хода рассеянных лучей, и часть отраженного света уходит из плоскости падения. На Рис. 92 видно, что анизотропия Δ и Ψ от угла поворота θ вокруг нормали к поверхности образца может составлять от нескольких минут при малых глубинах рельефа до нескольких градусов при $d=451$ нм. В работе [227] было экспериментально обнаружено, что анизотропия в зависимостях $\Delta(\theta)$ и $\Psi(\theta)$ резко возрастает (\sim в 5 раз), если угол падения $\varphi_0=62.5^\circ$, на котором проводились измерения анизотропии, находится вблизи угла интерференции, где $\Psi(\varphi_0)$ максимально.

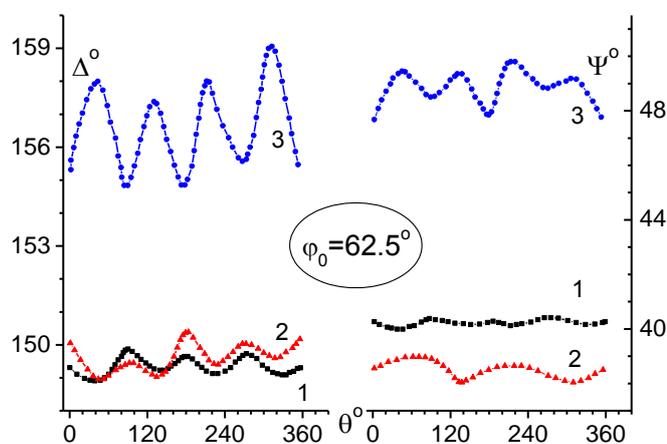


Рис. 92. Экспериментальные анизотропные зависимости поляризационных характеристик $\Delta(\theta)$ и $\Psi(\theta)$ для рельефной поверхности **алюминия** от угла поворота θ строки СФМ относительно плоскости падения вокруг нормали к плоскости образца. Размер элементарной ячейки-2.5 мкм; глубина рельефа: $d_1=143$ нм, $d_2=208$ нм, $d_3=451$ нм; угол падения света $\varphi_0=62.5^\circ$; длина волны 0,63 мкм.

§ 5.4 Метод эллипсометрии для измерения аномального поглощения и отрицательного показателя преломления в наноструктурных системах

В данном параграфе впервые спектральным эллипсометрическим методом обнаружено и измерено аномально высокое поглощение кремниевых наноструктур в области энергий фотонов, где Si относительно прозрачен, т.е. не поглощает свет, а также было обнаружено наличие областей в видимом диапазоне спектра отрицательного показателя преломления, что характерно только для усиливающих оптических сред.

5.4.1. Описание нановискеров; их параметры и свойства

Кремниевые нано-вискеры (также называемые нано-проводами, нано-столбами или нано-дорожками), выращенные молекулярно лучевой эпитаксией, рассматриваются как многообещающие структуры для изготовления post-CMOS логических элементов, благодаря их потенциальной совместимости с существующей CMOS технологией, что позволяет осуществить вертикальную архитектуру интегральных схем [236-238].

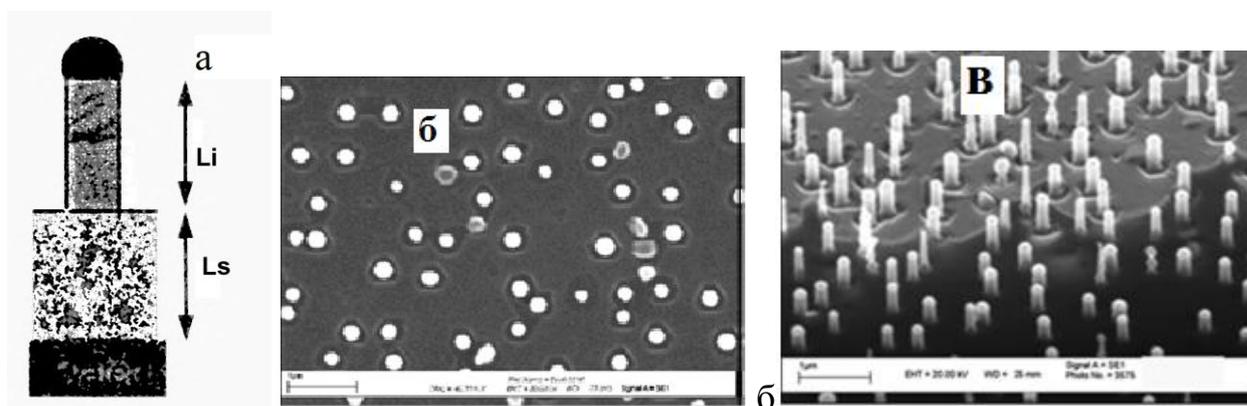


Рис. 93. а) SEM изображение одного Si-вискера с полусферической капелькой Au на вершине; б) SEM изображения структуры (вид сверху), каждый вискер расположен в гексагональной ямке; в) SEM изображения структуры (при косом падении) Длина вискеров $580 \div 990$ нм.

В наших работах [239-243, 295, 297-299] были исследованы электрические и оптические свойства, а также морфология таких структур с помощью сканирующей электронной микроскопии (SEM), спектральной эллипсометрии и измерения вольтамперных характеристик.

5.4.2. Интерпретация аномального кажущегося поглощения и отрицательного показателя преломления в области относительной прозрачности кремния

В эллипсометрических спектрах псевдо-диэлектрической функции таких структур, приведенных в этих работах, в области энергий фотонов от 1.5 эВ до 4.77 эВ наблюдалось аномально большое поглощение для структур, в которых кремниевые высокие (580÷990 нм) нановискеры были выращены на кремниевой подложке. Аномальное кажущееся поглощение наблюдалось в области относительной прозрачности кремния (0.45÷0.83 мкм, где для кристаллического кремния $\varepsilon_2 \approx 0$), только для высоких нановискеров и отсутствовало для нановискеров меньшей высоты (150-250 нм). Авторы объясняли эти аномалии интерференционным эффектом. Описание спектральных свойств диэлектрической функции слоя нановискеров с помощью метода эффективной среды, не дало хороших результатов. Возвращаясь к интерпретации полученных ранее эллипсометрических спектров и используя фазовые соотношения для интерферирующих лучей света, сравним длины волн, на которых наблюдаются аномалии в эксперименте и расчетные длины волн, полученные исходя из длины вискером, как показано в Таблице к Рис. 94.

Псевдо - диэлектрической функции и псевдо- показатель преломления вычисляются по формуле (156):

$$\varepsilon_{i\bar{n}\hat{a}\hat{a}\hat{i}} = (\varepsilon_1 + i\varepsilon_2)_{i\bar{n}\hat{a}\hat{a}\hat{i}} = \operatorname{tg}^2 \varphi_0 \left[1 - \frac{(4\rho \sin^2 \varphi_0)}{(1 + \rho)^2} \right], \quad \rho = \frac{R_p}{R_s}, \quad n_{i\bar{n}\hat{a}\hat{a}\hat{i}} = \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon_{i\bar{n}\hat{a}\hat{a}\hat{i}}} \quad (156)$$

если не учитывается реальная структура образца, т. е. структура полагается однородной и полубесконечной. На Рис. 94а видно, что для структур с длинными (~ 1 мкм) вискерами возникает участок «отрицательного» показателя преломления, однако, это всего лишь следствие интерференционных явлений.

В таблице к Рис. 94б приведены расчетные длины волн интерференции λ_1 и λ_2 , когда геометрическая разность хода лучей, отраженных от кремниевой подложки и от вершины) вискером, также между лучами, отраженными от вершин вискером разной высоты, кратна π (π или 2π). Положение экспериментальных экстремумов в спектре ε_2 взято из Рис. 94б. Как видно из Таблицы к Рис. 94б, использование фазовых соотношений для интерпретации аномального поведения псевдо - диэлектрической функции в области относительной прозрачности кремния хорошо согласуется с экспериментом.

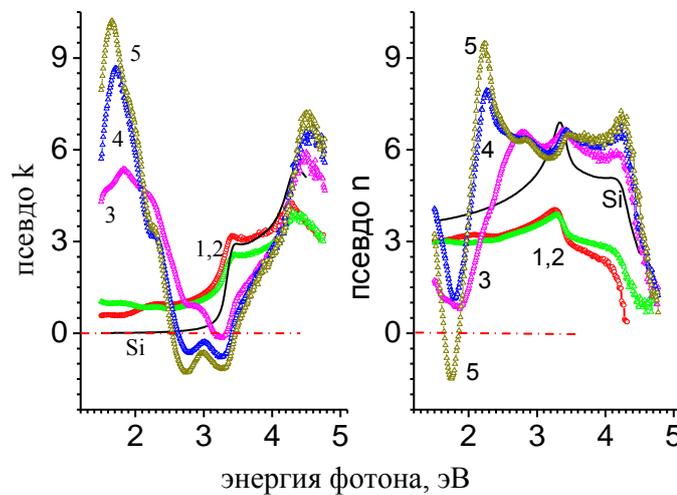


Рис. 94а. Спектральная зависимость реальной и мнимой частей комплексного показателя преломления монокристаллического Si(100) и кремниевых наноструктур с вискерами разной длины: 1,2- $L_{1,2} \in 0.2 \div 0.3$ мкм; 3,4,5- $L_{3,4,5} \in 0.99 \div 0.58$ мкм. Для вискером (3, 4, 5) максимальной длины возникает участок «отрицательного» показателя преломления и отрицательного коэффициента поглощения или кажущегося гигантского поглощения в области относительной прозрачности кремния.

Необходимо учесть, что точность определения длины вискеро́в хуже, чем точность позиционирования экстремумов в спектре.

Таблица к Рис. 94 б.

длина вискеро́в, мкм	Длина волны интерференции, мкм		Положение экстремумов в спектре	
	$\lambda_1 (\Delta=\pi)$	$\lambda_2 (\Delta=2\pi)$	$\varepsilon_2(\lambda)$	
$L_1=0.99$	1.39	0.699		0.688
$L_2=0.58$	0.82	0.41	0.805	0.416
$L_3= L_1- L_2=0.41$	0.579	0.289	0.576	0.287

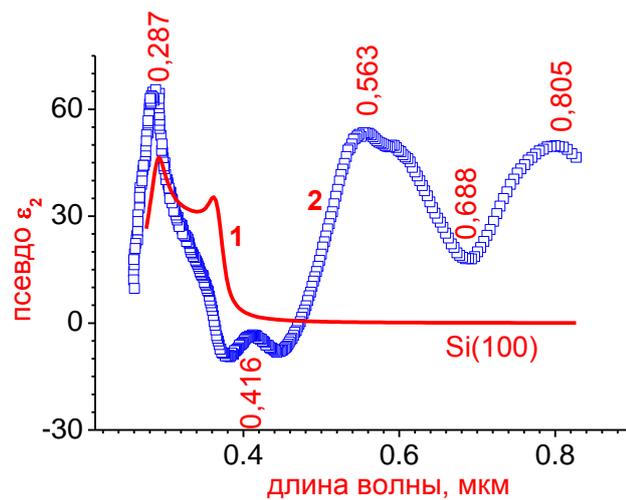


Рис. 94б. Спектр мнимой части 1) – диэлектрической функции чистой поверхности кристаллического кремния Si (100) и 2) -псевдо-диэлектрической функции ε_2 для поверхности кремния с выращенными на ней кремниевыми вискерами.

Выводы к главе 5

1. Экспериментально показано влияние поверхностного рельефа на поляризационные характеристики отраженного света методом многоугловых (MAI) эллипсометрических измерений на одноволновом лазерном эллипсометре. Шероховатость поверхности моделировалась с помощью

вытравленного рельефа, сформированного случайной фазовой маской (СФМ), все параметры которой априори известны.

2. Теоретически найдены и сформулированы условия, при которых влияние рельефа максимально: это условие интерференции отраженного и рассеянного (рассеянного в зеркальную компоненту) света.

3. Построены теоретические зависимости угла падения φ_0 от глубины рельефа d , при котором наблюдается интерференция света ($\Delta_1=\pi$ и $\Delta_1=3\pi$), вычисленные методом сложения парциальных волн, при варьировании угла падения света φ для $\lambda=0.633$ мкм.

4. Экспериментально показано, что условия интерференции, т. е. значения углов падения $\varphi_{\text{интер}1}$ и $\varphi_{\text{интер}2}$, при которых $\Delta_1= \pi$ или 3π определяются суперпозицией двух парциальных волн, отраженных от верхней и нижней граней, и не зависят от:

а) диэлектрической функции поверхности (диэлектрика или металла),

б) размера ячейки СФМ, площадь которой изменялась в 100 раз.

5. Экспериментально показано, что угловые зависимости поляризационных параметров Ψ и Δ сильно зависят от: глубины рельефа, диэлектрической функции поверхности (диэлектрика или металла), размера ячейки СФМ, площадь которой изменялась в 100 раз; и их отличия составляют десятки градусов для тех же самых углов на идеально-гладкой поверхности.

6. Теоретически обосновано и экспериментально показано, что главной характеристикой, влияющей на аномальное поведение поляризационных углов отраженного света, является глубина рельефа, которая варьировалась в диапазоне от 0 до 1 мкм.

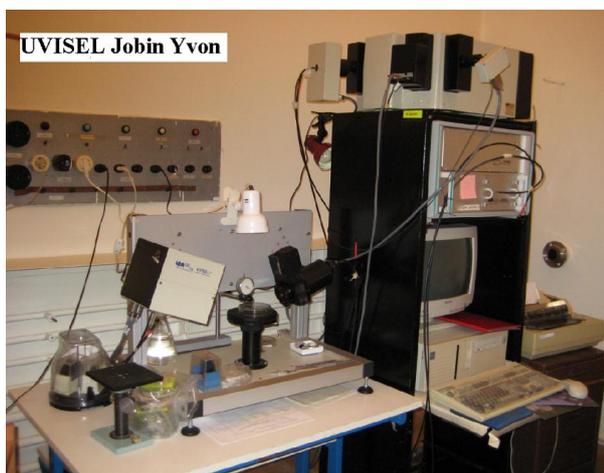
7. Экспериментально показано, что поверхностная анизотропия, определяемая углом поворота строки СФМ относительно плоскости падения света, сильно зависит от глубины рельефа.

8. Найдены условия, когда шероховатостью можно пренебречь.

9. Показано, что использование фазовых соотношений для интерпретации аномального большого поглощения в области относительной прозрачности кремния для наноструктур (Si- кремниевые вискеры) хорошо согласуется с экспериментом.

ГЛАВА 6. МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ ФОТОНОВ 1.5-4.75 эВ

В этой главе разработано несколько методов эллипсометрических спектральных измерений для сложных систем GaAs, полученных молекулярно-лучевой эпитаксией и содержащих сверхрешетки, и для неомогенных полиморфных пленок окислов титана. Обсуждается причина выбора метода интерпретации с учетом априорной информации. Кроме того, разработаны способы применения корреляционного метода интерпретации состава AlGaN и ростовых дефектов в МЛЭ пленках AlN. Измерения были выполнены на спектральном эллипсометре UVISEL фирмы Jobin Yvon в диапазоне энергий фотонов 1.5-4.75 эВ.



Развитие спектральной эллипсометрии потребовало не только создания целой серии эллипсометров [17-20], принципиально отличающихся точностью, быстродействием, областью энергий источника излучения (от радиочастот [23] до синхротронного диапазона ~ 40 эВ [244-246 и др.]), но и математическим обеспечением как для управления прибором, так и для

интерпретации экспериментальных данных. Развитие микро- и наноэлектроники потребовало развития методов и математических моделей для интерпретации измерений на сложных структурах. Одной из проблем был и остается способ описания диэлектрической функции (ДФ) кристаллических, поликристаллических и аморфных пленок. В одноволновой эллипсометрии для описания диэлектрической функции необходимо было знать только пару ее значений (действительную и мнимую части) на одной длине волны, а для спектральных измерений необходимо, как правило, более трех сот пар значений, поэтому ДФ задавалась табличным файлом. Условия синтеза пленки влияют на ее кристаллическую структуру и состав, что, следовательно, приводит к существенным изменениям спектрального вида $\varepsilon(\lambda)$. Практически невозможно создать библиотеку ДФ всех известных и МЛЭ синтезируемых новых материалов на все случаи жизни. Проблема была решена путем описания ДФ математически [247-258]: в виде функции с ограниченным набором параметров (коэффициентов), что позволяет легко модифицировать спектральный вид $\varepsilon(\lambda)$ в зависимости от условий синтеза. Аналитическое представление диэлектрического отклика не только удобно, но и полезно для определения состава эпитаксиальных слоев и управления МЛЭ ростом в режиме реального времени, используя обратную связь [256].

§ 6.1. Метод описания диэлектрической функции при интерпретации спектральных измерений

Теоретически все диэлектрические функции должны иметь общую спектрально выраженную форму, см. [247]: Cardona M. Modulation Spectroscopy, Academic Press, New York, 1969:

$$\varepsilon(E) = 1 + \sum_j \frac{\omega_{pj}^2}{\omega_{gj}^2 - \omega^2 - 2i\omega\Gamma_j}, \quad \text{и} \quad \varepsilon(\omega) \approx 1 + \sum_j \frac{\omega_{pj}^2}{(\omega_{gj} - \omega - i\Gamma_j)(\omega_{gj} + \omega + i\Gamma_j)}, \quad (157)$$

где $E = \hbar\omega$ - энергия фотона, ω_{pj} - плазменная частота, ω_{gj} - частота критической точки, Γ_j - параметр уширения j -осциллятора. Правая часть уравнения (157a) является хорошей аппроксимацией, если $\omega_{gj} \ll \omega_j$. Примеры

использования этих уравнений для интерпретации оптических спектров включены в работы [248, 250-256 и др.]. Уравнения (157) автоматически удовлетворяют принципу причинности [258], четности и автоматически соотношению Крамерса-Кронига, однозначно связывающего действительную и мнимую части диэлектрической функции во всем диапазоне измерений. Правда, в этих уравнениях не выполняется правило сумм на бесконечности, поэтому классическая дисперсионная модель аппроксимации диэлектрической функции может быть использована и в модифицированном виде, с выделением в отдельное слагаемое Друде осциллятора:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0\omega} + \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 + i\Gamma_D\omega} + \sum_1^n \frac{f_j\omega_{0j}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\gamma_j\omega}, \quad (158)$$

где первые два слагаемых описывают один осциллятор, третье слагаемое характеризует модель Друде для металлов и последнее – сумма n осцилляторов Лорентца; ε_{∞} , ε_s – значения высокочастотной и статической диэлектрической константы, соответственно; Γ_0 , Γ_D , γ_j – демпинг факторы, характеризующие полуширину пика мнимой части; Γ_0 , $\gamma_j > 0$, $\Gamma_D < 0$; f_j – сила j -осциллятора; ω_{0j} – собственная частота j -осциллятора; ω_T – частота межзонного перехода и ω_p – плазменная частота. Частоты выражены в эВ.

Для параметризации ДФ материалов, обладающих слабой дисперсией оптических констант, используются более простые формулы, но все они получены из теоретического выражения (157) путем использования некоторых приближений, допустимых для данного материала.

6.1.1. Метод Форохи и Блумера (Forouhi A.R., Bloomer I.) для описания спектрального вида ДФ кристаллических и аморфных материалов

Формализм, предложенный в [250, 251] для описания спектральной зависимости оптических свойств аморфных и кристаллических полупроводников и диэлектриков, основан на зонной теории твердого тела.

Для **аморфного** материала коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$, вызванный поглощением фотона при межзонном переходе, может быть представлен выражением:

$$\alpha = \frac{\Phi(\omega) \cdot \Theta}{I_0}, \quad (159)$$

где $\Phi(\omega)$ –поглощенная энергия в частотном диапазоне от ω до $\omega+\delta\omega$ в единицу времени; Θ - число возможных переходов в единичном объеме в слое толщиной Δx ; и I_0 интенсивность падающего излучения (фотонов). Полагая, что возбужденное состояние, в которое переходит электрон, имеет конечное время жизни τ , выражение (159) принимает вид:

$$\Phi(\omega) = \frac{8\pi^2}{3\hbar c} e^2 \omega I_0 |\langle b|x|a \rangle|^2 \frac{\hbar^2 \gamma}{2\pi(E_b - E_a - \hbar\omega)^2 + \hbar^2 \gamma^2 / 4}, \quad (160)$$

где $|a\rangle$ представляет начальное состояние энергии E_a электрона, $\langle b|$ представляет конечное состояние энергии электрона E_b и $\gamma=1/\tau$ - величина, обратная времени жизни.

Из уравнения (160) видно, что $\Phi(\omega)$ имеет максимум, когда $\hbar\omega = E_b - E_a$.

Полагая закон распределения состояний в валентной зоне и в зоне проводимости параболическим, а коэффициент экстинкции k комплексного показателя преломления $N=n-ik$, равным $k=\alpha c/2\omega$, для **аморфных** полупроводников и диэлектриков было получено выражение:

$$k(E) = \frac{A(E - E_g)^2}{E^2 - BE + C}, \quad A = \text{const} \times \gamma, \quad B = 2E_g, \quad C = E_g^2 + \hbar^2 \gamma^2 / 4. \quad (161)$$

Принцип причинности, как известно, приводит к соотношению Крамерса-Кронига, которое связывает действительную и мнимую части комплексного показателя преломления $n(E)$ и $k(E)$. В результате $n(E)$ определяется из полученного выражения (161) для $k(E)$ с помощью преобразования Гильберта:

$$n(E) - n(\infty) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k(E') - k(\infty)}{E' - E} dE', \quad (162)$$

где P – главное значение интеграла Коши и, как было показано позже, $n(\infty) > 1$. Далее показатель преломления $n(E)$, полученный из уравнения (162), записан в виде:

$$n(E) - n(\infty) = \frac{B_0 E + C_0}{E^2 - B E + C}, \quad (163)$$

где коэффициенты определены выражениями (163а)

$$B_0 = \frac{A}{Q} \left[-\frac{B^2}{2} + E_g B - E_g^2 + C \right], C_0 = \frac{A}{Q} \left[\frac{B}{2} (E_g^2 + C) - 2E_g C \right], Q = \frac{\sqrt{4C - B^2}}{2}. \quad (163a)$$

Дисперсионные соотношения для $n(E)$ и $k(E)$ успешно были применены для описания экспериментальных спектров целого ряда аморфных материалов, таких как $a\text{-Si}$, $a\text{-Si:H}$, $a\text{-Si}_3\text{N}_4$ и $a\text{-TiO}_2$ по всей экспериментальной области энергий фотонов [251].

Авторы в [251] полагали, что пик в спектре $k(E)$ для кристаллических полупроводников и диэлектриков имеет место, когда поглощенная энергия имеет локальный максимум, а переход электронов происходит при условии

$$\hbar\omega \approx E_c(\mathbf{k}_{crit}) - E_v(\mathbf{k}_{crit}), \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_{crit}.$$

В **кристаллических** полупроводниках и диэлектриках благодаря существованию дальнего порядка в структуре $k(E)$ возникают несколько пиков, следовательно, поглощенная энергия $\Phi(\omega)$ может быть представлена суммой нескольких слагаемых, причем полагали, что **число слагаемых равно числу пиков**.

$$k(E) = \left[\sum_{i=1}^q \frac{A_i}{E^2 - B_i E + C_i} \right] (E - E_g)^2, \quad q = \text{число пиков}, \quad (164)$$

$$A_i = \text{const} \times \gamma, \quad B_i = 2[E_c(k_{crit}) - E_v(k_{crit})]_i, \quad C_i = [E_c(k_{crit}) - E_v(k_{crit})]_i^2 + \hbar^2 \gamma^2 / 4$$

Показатель преломления для **кристаллических** полупроводников и диэлектриков получены аналогичным образом из соотношения Крамерса-Кронига с помощью преобразования Гильберта:

$$n(E) = n(\infty) + \sum_{i=1}^q \frac{B_{0i}E + C_{0i}}{E^2 - B_iE + C_i}, \quad \left\{ \begin{array}{l} B_{0i} = \frac{A_i}{Q_i} \left[-\frac{B_i^2}{2} + E_g B_i - E_g^2 + C_i \right], \\ C_{0i} = \frac{A_i}{Q_i} \left[\frac{B_i}{2} (E_g^2 + C_i) - 2E_g C_i \right], \\ Q_i = \frac{\sqrt{4C_i - B_i^2}}{2}. \end{array} \right. \quad (165)$$

Важно отметить, что как в случае аморфных, так и в случае кристаллических материалов, авторы не считали $n(E=\infty)=1$, как предсказывает теория.

Дальнейшее развитие метода параметризации диэлектрической функции показало, что **число слагаемых под знаком суммы, как правило, не равно числу пиков в спектре поглощения.**

6.1.2. Метод дисперсионной аппроксимации диэлектрической функции

Математическое обеспечение спектрального эллипсометра UVISEL фирмы Jobin Yvon, работающего в диапазоне 1.5-4.75 эВ, содержит восемь дисперсионных соотношений для описания диэлектрической функции пленки или подложки.

1. Классическая дисперсионная модель аппроксимации диэлектрической функции

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0\omega} + \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 + i\Gamma_D\omega} + \sum_1^n \frac{f_j\omega_{0j}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\gamma_j\omega}, \quad (166)$$

где первые два слагаемых описывают один осциллятор, третье слагаемое характеризует модель Друде для металлов и последнее – сумма осцилляторов Лорентца; ε_∞ , ε_s – значения высокочастотной и статической диэлектрической константы, соответственно; Γ_0 , Γ_D , γ_j – демпинг факторы: Γ_0 , $\gamma_j > 0$, $\Gamma_D < 0$; f_j – сила j -осциллятора; ω_{0j} – собственная частота j -осциллятора; ω_T – частота межзонного перехода и ω_p – плазменная частота; частоты выражены в эВ.

2. Для аморфных полупроводников в *видимой* и ближней *УФ* области спектра используется дисперсионное соотношение, аналогичное формуле Таука, и полученное Forouhi A.R. и Bloomer I. [251] в виде (161-163а):

$$\begin{cases} k(E) = \frac{A(E - E_g)^2}{E^2 - BE + C}, & n(E) = \sqrt{\varepsilon_\infty} + \frac{B_0 E + C_0}{E^2 - BE + C}, \\ k(E \leq E_g) = 0, \end{cases} \quad (167)$$

$$B_0 = \frac{A}{Q} \left[-\frac{B^2}{2} + E_g B - E_g^2 + C \right], \quad C_0 = \frac{A}{Q} \left[\frac{B}{2} (E_g^2 + C) - 2E_g C \right], \quad Q = \frac{\sqrt{4C - B^2}}{2}.$$

Коэффициенты для подгонки: А, В, С, E_g .

3. Для прозрачных сред в спектральном интервале, который не содержит резонансных частот, используется соотношение Зельмейера (см. например, дисперсионная формула **Зельмейера** [231], стр. 121-123):

$$n^2(\lambda) = A + B \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2}, \quad k = 0. \quad (168)$$

Коэффициенты для подгонки: А, В.

4. Для поглощающих сред используется соотношение **Зельмейера с поглощением**:

$$n^2(\lambda) = \frac{1 + A}{1 + B/\lambda^2}, \quad k(\lambda) = \frac{C}{nD\lambda + E/\lambda + I/\lambda^3}. \quad (169)$$

Коэффициенты для подгонки: А, В, С, D, E, I.

5. Для непоглощающих сред используется соотношение **Коши**:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad k(\lambda) = 0. \quad (170)$$

Коэффициенты для подгонки: А, В, С.

6. Формула **Коши** применима к слабо поглощающим средам и имеет вид:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad k(\lambda) = D + \frac{E}{\lambda^2} + \frac{F}{\lambda^4}. \quad (171)$$

Коэффициенты для подгонки: А, В, С, E, F.

7. Формула **Конради** для прозрачных сред имеет вид:

$$n(\lambda) = A + \frac{B * 10^2}{\lambda} + \frac{C * 10^9}{\lambda^{3.5}}, \quad k = 0, \lambda[\text{nm}]. \quad (172)$$

Коэффициенты для подгонки: А, В, С.

8. Дисперсионная формула **Скотта-Бриота** для непоглощающих сред вычисляется следующим образом:

$$n^2(\lambda) = A_0 + A_1\lambda^2 + \frac{A_2}{\lambda^2} + \frac{A_2}{\lambda^4} + \frac{A_3}{\lambda^4} + \frac{A_4}{\lambda^6} + \frac{A_5}{\lambda^8}, \quad k=0. \quad (173)$$

Коэффициенты для подгонки: $A_0, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5$.

Автором к существующим моделям было **добавлено** несколько новых дисперсионных соотношений, например, описание ДФ из работы [254]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{C_0}{\omega^2} \left[\begin{array}{l} e^{i\beta} (\omega_g - \omega - i\Gamma)^\mu + e^{-i\beta} (\omega_g + \omega + i\Gamma)^\mu - 2 \operatorname{Re} \left[e^{-i\beta} (\omega_g + i\Gamma)^\mu \right] \\ -2i\mu\omega \operatorname{Im} \left[e^{-i\beta} (\omega_g + i\Gamma)^{\mu-1} \right] \end{array} \right]. \quad (174)$$

6.1.3. Практика применения метода параметризации ДФ

В настоящее время для большинства полупроводников и диэлектриков многими авторами получены *аналитические* выражения описания диэлектрических функций в различных диапазонах энергий. Следует заметить, что коэффициенты в этих выражениях зависят от границ энергий спектра, поэтому их нельзя применять, если в эксперименте используется другой спектральный диапазон.

В литературе [см. Erman M., Theeten J.B., Chambon P., Kelso S.M., Aspnes D.E. **Optical properties and analysis of GaAs single crystal partly amorphized by ion implantation.** J. Appl. Phys., **56**, No. 10, 1984, p. 2664-2671] для описания диэлектрической функции частично **аморфизованного GaAs** при имплантации ионами As^+ использовалась более сложная модель: классическая модель из суммы семи осцилляторов, в которой параметры осцилляторов являются функциями x – нормализованной дозы облучения [250]

$$\varepsilon(E) = 1 + \sum_{k=1}^7 A_k \left(\frac{1}{E + E_k + i\Gamma_k} - \frac{1}{E - E_k + i\Gamma_k} \right), \quad (175)$$

$$A_k = A_k^0 + a_k x + b_k x^2 + c_k x^3, \quad \Gamma_k = \Gamma_k^0 + d_k x + e_k x^2 + f_k x^3.$$

где A_k и Γ_k – сила осциллятора и его демпинг фактор. Для описания диэлектрической функции монокристаллического c-GaAs (доза облучения $x=0$) потребовалось 21 параметр, причем, в качестве **четырех из семи**

собственных частот осцилляторов были использованы хорошо известные энергии основных оптических переходов: E_1 , $E_1 + \Delta_1$, E_0' и E_2 .

Таблица 27. Аппроксимация НОА (harmonic oscillators approximation) диэлектрической функции монокристаллического с-GaAs и аморфного а-GaAs арсенида галлия семью осцилляторами в диапазоне энергий {1.5-5.5} эВ [250].

i - осциллятор	1	2	3	4	5	6	7
E_g	2.9207	3.1267	3.5036	4.050	4.479	4.821	6.5595
с	с- A_i	0.8688	2.3366	3.2010	2.1293	2.6305	5.3206
	с- Γ_i	0.1249	0.2160	0.4114	0.4015	0.2693	0.2918
а	а- A_i	3,2177	5,9566	25,0222	4,6861	2,6657	23,2024
	а- Γ_i	0.8914	1.1797	1.4832	1,5049	0,8443	2,6169

На Рис. 95. показана аппроксимация диэлектрической функции кристаллического и аморфного арсенида галлия по формуле (175) для двух крайних случаев $x=0$ и $x=1$, а вычисленные параметры всех осцилляторов для диапазона энергий фотонов (1.5-5.5 эВ) показаны в таблице 29; в качестве аппроксимируемой экспериментальной зависимости использована $\epsilon(E)$ из работы [250].

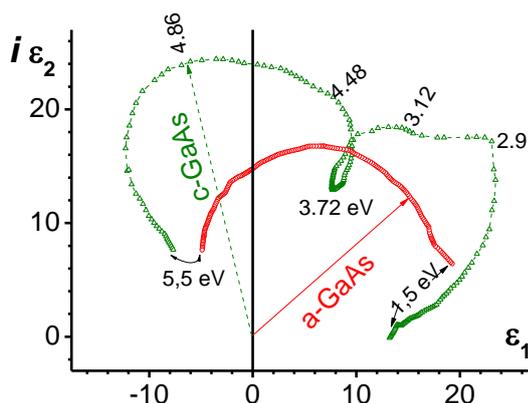


Рис. 95. Движение вектора диэлектрической функции кристаллического с-GaAs и аморфного а-GaAs арсенида галлия в диапазоне энергий 1.5-5.5 эВ (с шагом 0.2 эВ) на комплексной плоскости ϵ_1 и ϵ_2 . Параметры осцилляторов (175) для $x=0$ и $x=1$ показаны в Таблице 27. Внимание! Эти кривые не пересекаются в 3D-пространстве $\{E, \epsilon_1, \text{ и } \epsilon_2\}$.

На Рис. 96 показана диэлектрическая функция одного осциллятора и основные обозначения его параметров.

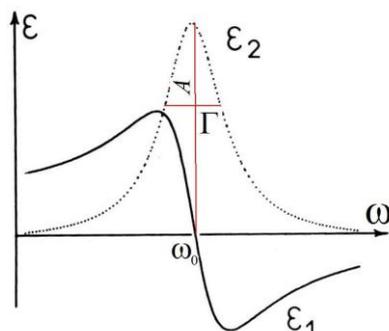


Рис. 96. Диэлектрическая функция одного осциллятора (Лоренца): A -сила осциллятора с собственной частотой ω_0 , Γ -параметр затухания. $\varepsilon_1 = \partial\varepsilon_2 / \partial\omega$ -условие Крамерса-Кронига.

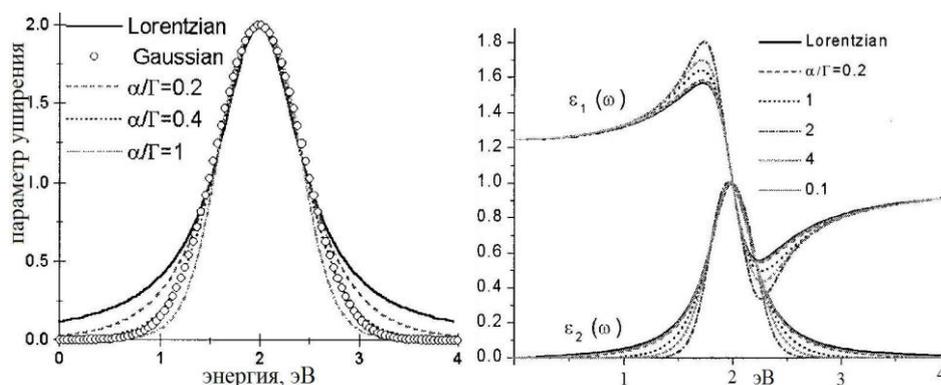


Рис. 97. Иллюстрация влияния частотной зависимости демпинг-фактора Γ осциллятора на форму линии: сравнение различных способов задания параметра уширения [254].

Точность описания диэлектрической функции зависит от формы задания осциллятора, в частности, задания формы линии параметра уширения. Особенно это важно при описании края поглощения, поэтому было предложено несколько модификаций классической модели параметризации ДФ [253-255, 257], в которых постоянное значение демпинг фактора Γ для осциллятора Лоренца заменялось на частотно зависимую функцию $\Gamma(\omega)$,

Рис. 98. Иллюстрация влияния формы линии демпинг- фактора Γ осциллятора на реальную ε_1 и мнимую ε_2 части диэлектрической функции [254].

например, Ким et al. [254] использовал следующую аналитическую форму задания параметра уширения:

$$\Gamma'(E) = \Gamma \exp\left[-\alpha \left(\frac{E - E_g}{\Gamma}\right)^2\right], \quad (176)$$

где α и Γ -подгоночные параметры модели, а E_g –энергия критической точки, в которой имеет место оптический переход. Подобный подход приводит к изменениям формы линии для энергий удаленных от собственной частоты осциллятора, как показано на Рис. 97 и Рис.98.

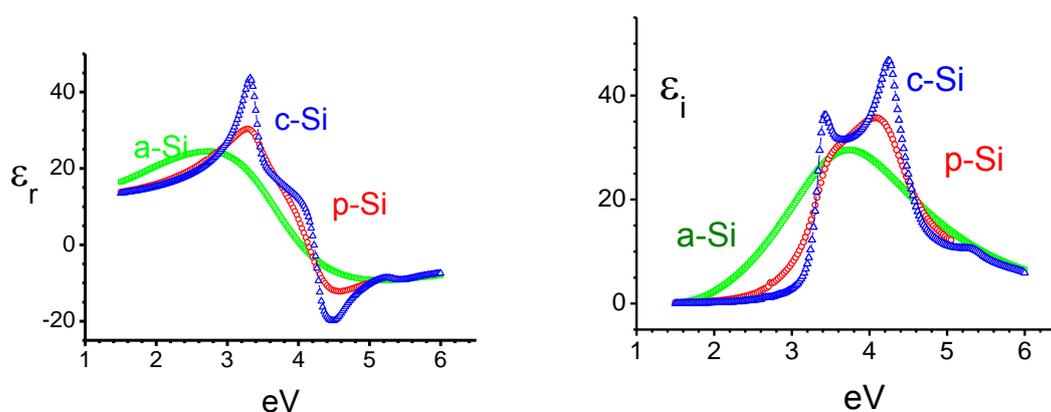


Рис. 99. Зависимость диэлектрических функций кремния от структуры: монокристаллический (c-Si), поликристаллический (p-Si) и аморфный (a-Si). Расчетные параметры аппроксимирующих осцилляторов показаны в Таблице 28.

Аналитическое представление формулой (174), полученной из формулы Кардоны (157), успешно было применено для описания ДФ **четырьмя осцилляторами** нескольких материалов: c-Si, a-Si и Si_3N_4 и обладает преимуществом подавления поглощения в области прозрачности кремния по сравнению с результатами работы [253]. Всего подгоночных параметров в работе [253] было использовано 21. На Рис. 99 показаны диэлектрические функции аморфного, поликристаллического и монокристаллического кремния, а в Таблице 28 параметры осцилляторов, вычисленные по формуле (167), измерения выполнены в диапазоне энергий $\{1.3-4.59\text{eV}\}$ на эллипсометре UVISEL. В конце таблицы 30 приведена функция ошибки χ^2 , характеризующая точность аппроксимации.

Таблица 28. Параметры четырех осцилляторов (174), аналитически представляющих кристаллический, поликристаллический и аморфный кремний: c-Si, p-Si и a-Si в диапазоне энергий фотона 1.3-4.59 эВ.

	c-Si	p-Si	a-Si		c-Si	p-Si	a-Si
E_g	3.3800	3.3800	3.3800	$\beta 1$	-0.684	-0.799	0.599
E_g	3.6266	3.6266	3.6266	$\beta 2$	-0.439	-0.446	-0.903
E_g	4.2906	4.2906	4.2906	$\beta 3$	0.315	0.407	-0.559
E_g	5.3825	5.3825	5.3825	$\beta 4$	-1.620	-1.370	-2.000
C1	34.360	35.827	7.033	$\mu 1$	-1.002	-1.081	0.514
C2	219.998	219.998	325.447	$\mu 2$	-0.541	-0.544	-1.398
C3	118.104	148.224	140.848	$\mu 3$	-0.9504	-0.9504	-0.9504
C4	95.950	165.948	279.187	$\mu 4$	-0.9761	-0.9761	-0.9761
$\Gamma 1$	0.122	0.323	0.0001	$\epsilon \infty$	-0.228	-0.757	-1.932
$\Gamma 2$	0.392	0.444	0.972				
$\Gamma 3$	0.204	0.403	0.583				
$\Gamma 4$	2.668	1.040	1.383				
χ^2	0.055306	0.112349	0.458233				

В настоящее время разработаны более сложные модели аналитического представления ДФ, учитывающие особенности зонной структуры материала (количество валентных зон ν_1, ν_2, ν_3 и зон проводимости c_1, c_2), классификацию критических точек, вклады от переходов меду парами зон ($\nu_1 \rightarrow c_1; \nu_2 \rightarrow c_2; \nu_3 \rightarrow c_1; \nu_1 \rightarrow c_2$), 2D и 3D размерность критических точек. Эти феноменологические модели, такие как **PB** (для параболических зон) и **CPPB** (для критических точек параболических зон), рассматриваются уже не только с точки зрения подгонки формы ДФ, но и их первых трех производных [254] с учетом вклада Франца-Келдыша- Аспнеса (влияния электрического поля на край поглощения).

6.1.4. Сочетание метода параметризации ДФ и метода эквивалентной пленки

При интерпретации спектральных эллипсометрических измерений метод эквивалентной пленки применяется для вычисления ДФ дискретно на каждой длине волны по всему спектральному диапазону, например, для частично аморфизованного арсенида галлия предполагалось, что его ДФ можно представить смесью кристаллического и аморфного GaAs [250], для описания ДФ с- GaAs и а- GaAs использовался метод параметризации, как показано на Рис. 100.

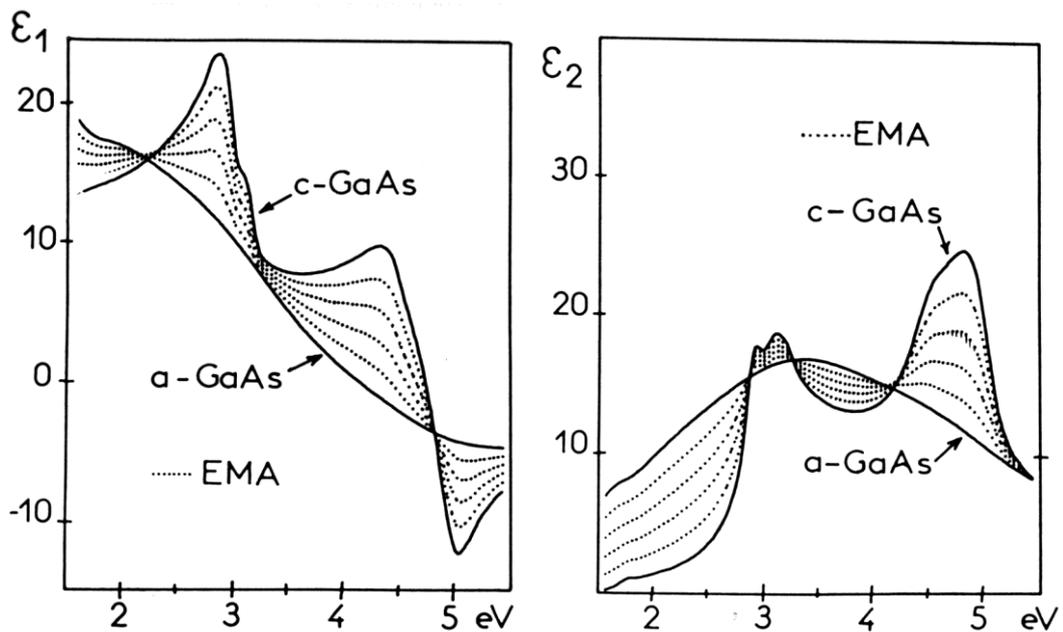


Рис. 100. Реальные и мнимые части ДФ, рассчитанные по модели Бруггемана эффективной пленки EMA (EMA- effective medium approximation) для различных смесей с- GaAs и а- GaAs, варьируя объемный коэффициент q от 0 до 1 [250].

Эксперимент показал, что частично аморфизованный арсенид галлия **не может** быть представлен физической смесью двух выше указанных компонент, поскольку облучение (имплантация) ионами As^+ приводит не только к нарушению структуры, но и к деформации ДФ, которая была рассчитана аналитической аппроксимацией по формуле (175). Таким образом, модель эквивалентной пленки в данном случае **не применима**.

§ 6.2. Метод спектральной эллипсометрии для измерений свойств неоднородной пленки оксида титана

Цель данного параграфа - обосновать выбор методов эллипсометрических измерений для изучения свойств пленки титана при кумулятивном отжиге, используя эллипсометрические спектры образцов, измеренных в диапазоне энергий 1.5-4.77 эВ.

Применение дисперсионных моделей аппроксимации диэлектрической функции в спектральных измерениях стало мощным инструментом изучения структуры конденсированных сред, как показано в § 6.1. В этом параграфе применение метода эквивалентной пленки в сочетании с методом параметризации ДФ продемонстрировано на примере изучения свойств термически окисленной пленки титана [259-260], где ожидалось получение пленки двуокиси титана – рутила.

6.2.1. Описание исследуемой структуры

Металлическая пленка титана была нанесена в вакууме $6.7 \cdot 10^{-4}$ Па из вольфрамовой лодочки на Si (100) подложку. Мониторинг толщины напыленного Ti осуществлялся *in situ* по изменению сопротивления кварцевого спутника. Затем Ti/Si -структуры ожигались на воздухе при температуре 750°C в Pt-контейнере для образования двуокиси титана. Длительность кумулятивного отжига на первом этапе составляла 7 часов, и после эллипсометрических измерений дополнительно еще 18 часов. На Рис. 101 схематично показан процесс получения Ti/Si –структур с использованием нескольких изотропных слоев с резкими границами раздела: переходного слоя на границе Si-Ti, образованного благодаря взаимной диффузии атомов/ионов кремния и титана; слоя, содержащего смесь двуокиси титана и TiO_x ; и верхнего слоя TiO_2 . Каждый из этих слоев описывается тремя параметрами, причем все $n_i = n_i(\lambda)$ и $k_i = k_i(\lambda)$.

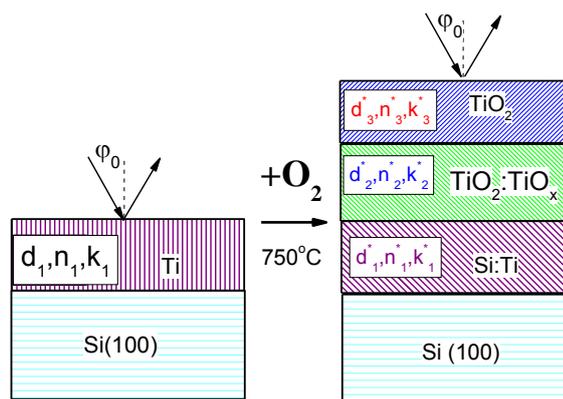


Рис. 101. Схема окисления пленки металлического титана.

6.2.2. Свойства окислов титана

Двуокись титана (TiO_2) – широкозонный оксид прозрачный в видимой области, обладающий большим показателем преломления, механической прочностью и химической стойкостью, используется в DRAM (dynamic-random-access-memory) памяти, в электролюминисцентных приборах, антиотражающих покрытиях, цветных фильтрах, лазерных зеркалах и др.

Двуокись титана кристаллизуется в трех возможных кристаллических фазах, и образует три полиморфные модификации: рутил (тетрагональная), анатаз (тетрагональная), и брукит (орторомбическая). Хорошо известно, что рутил наиболее стабильная фаза при любых температурах, тогда как анатаз и брукит метастабильны при $T < \sim 800^\circ\text{C}$. В дополнение к стехиометричным полиморфам, ряд нестехиометричных форм с общей формулой $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ могут сосуществовать в двуокиси, где $4 \leq n \leq 10$. Именно поэтому, электрические, магнитные и оптические свойства объемных кристаллов и пленок TiO_2 остаются предметом теоретического и практического интереса. Свойства окислов титана исследовались Рамановской спектроскопией, фотолюминесценцией, спектрофотометрией (оптическое поглощение), эффектом Холла и эллипсометрией. Рентгеновская дифракция Bragg-Brentano была успешно применена для идентификации TiO_2 . Как сообщалось в литературе [261-264], свойства TiO_2 , сильно зависят от условий синтеза таких, как реактивное триодное распыление, реактивное высокочастотное магнетронное распыление или реактивное распыление электронным пучком

из различных материалов мишени: Ti, TiO, Ti₂O₃, Ti₃O₅, Ti₄O₇. Более того, TiO₂ пленки имеют структурную сложность из-за а) гибкости связи Ti-O, позволяющую образовывать полиморфы с той же самой химией и/или с одинаковой энергией формирования и б) из-за дробной валентности компонент [263]. Как правило, авторы, исследующие свойства TiO₂, рассматривали пленки как гомогенные. На Рис. 102 приведены оптические свойства кристаллической, поликристаллической и аморфной двуокиси титана, полученные в разных условиях и с разными моделями интерпретации.

6.2.3. Обоснование выбора методов эллипсометрических измерений

Совершенно очевидно, что пленка, сформированная окислением на воздухе, не может быть изотропной и однородной по двум причинам: 1) из-за ограничений на диффузию кислорода вглубь металла, 2) из-за полиморфизма TiO₂. Кроме того, из спектральных эллипсометрических измерений следует, что ни одна из исследуемых пленок не может быть интерпретирована, как состоящая из одной какой-либо фазы TiO₂. Первая попытка моделирования любой из четырех фаз анизотропной двуокиси титана была неудачной. Это можно было предвидеть, поскольку в области сильного поглощения для энергий фотона больше, чем 3.8 эВ, где глубина проникновения света в вещество, равная $d = 1/\alpha = \lambda/4\pi k_e$, не превышает 10-20 нм (см. вставку к Рис. 103), и влиянием ниже лежащих слоев можно пренебречь.

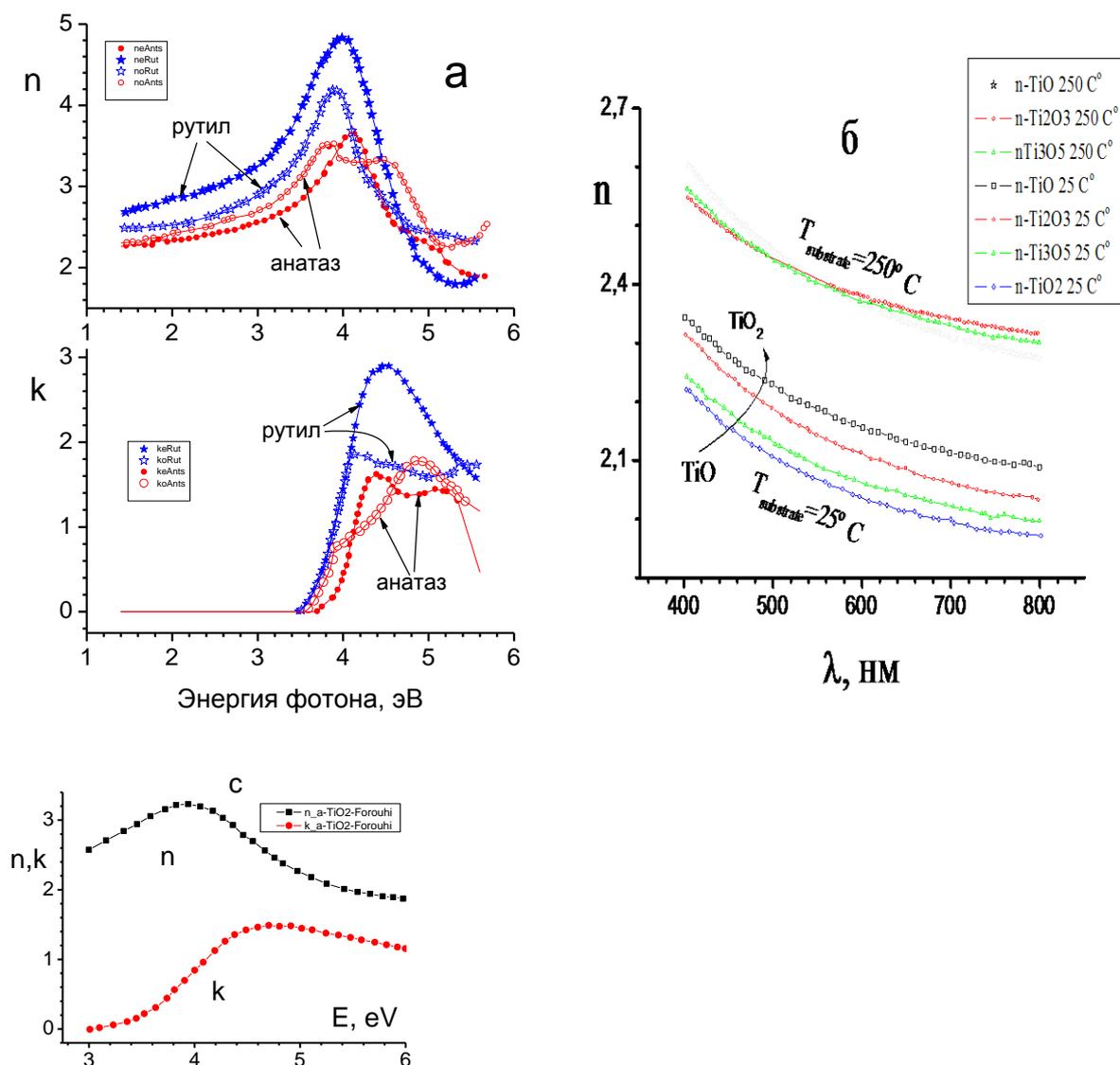


Рис. 102. а) Оптические свойства анизотропных кристаллических фаз двуокиси титана: рутила и анатаза [264];

с) Оптические свойства аморфной двуокиси титана [250].

б) показатель преломления **прозрачных** пленок диоксида титана, полученных реактивным распылением электронным пучком из различных стартовых материалов: TiO , Ti_2O_3 , TiO_2 , Ti_3O_5 [261].

Другими словами, измеряемые структуры можно рассматривать как полу-бесконечную подложку. К сожалению, спектральные зависимости диэлектрической функции образцов не совпадают ни с одной дисперсионной кривой $\varepsilon(\lambda)$ известных фаз TiO_2 , отображенных на Рис. 103. Следовательно,

необходимы более сложные математическая и физическая модели описания исследуемых структур.

Поэтому для описания образцов была выбрана

- многослойная модель, учитывающая неоднородность пленки по глубине (см. Рис. 101),
- диэлектрические функции неомогенных слоев, содержащих смеси двух компонент A и B , описывались эквивалентной пленкой по Бруггеману:

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{\varepsilon + 2\varepsilon_A} = f_B \frac{\varepsilon_B - \varepsilon_A}{\varepsilon_B + 2\varepsilon_A}; \quad (176)$$

- известные диэлектрические функции компонент (анизотропного рутила и анизотропного анатаза [264]), составляющих смеси, описывались методом параметризации, используя классическую модель, т.е. суммой осцилляторов по формуле (158) в исследуемом диапазоне энергий 1.5-4.77 эВ, метод параметризации ДФ был применен для модифицированных компонент, образующихся в пленке диоксида титана.

6.2.4. Экспериментальные эллипсометрические спектры $\varepsilon(\lambda)$

В этом эксперименте две серии TiO_2 пленок были рассмотрены: первую серию со временем отжига 7 часов при 750°C составляли образцы 1, 2, 3; вторая серия со временем кумулятивного отжига 7+18 часов при 750°C состояла из образцов 1оx, 2оx, 3оx. Спектральные зависимости ДФ всех образцов показаны на Рис. 104, из которого видно, что спектры 1, 2, 3 отличаются не только друг от друга, но и существенным образом от 1оx, 2оx, 3оx, соответственно.

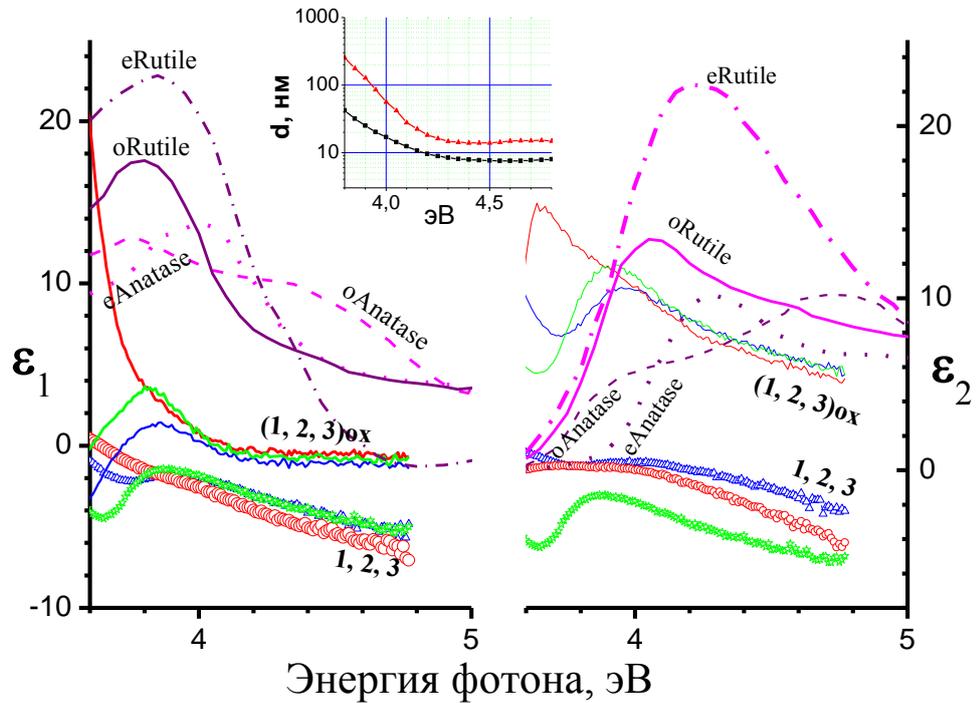


Рис. 103. Спектральная зависимость для энергий выше края поглощения Si-Ti образцов, экспонированных на воздухе при температуре 750 °С в течение 7 часов (1, 2, 3) и в течение 25 часов (1ox, 2ox, 3ox), в области сильного поглощения ($E > 3.6$ эВ). Для сравнения показаны действительные ϵ_1 и мнимые ϵ_2 части ДФ кристаллического рутила и кристаллического анатаза для обыкновенного ($E \perp c$) и необыкновенного ($E \parallel c$) лучей [264]. На вставке показана глубина проникновения света $d=1/\alpha$ для кристаллических фаз TiO_2 в этом же диапазоне.

В области прозрачности для $E < 3.8$ эВ интерференционный эффект присутствует во всех спектрах и позволяет грубо оценить толщину пленок.

Отличие спектров 1, 2, 3 друг от друга можно объяснить напылением металлической пленки Ti разной толщины при прочих равных условиях, например, пленка 1, составлена двумя напылениями Ti. Отличие же спектров 1, 2, 3 от спектров 1ox, 2ox, 3ox, соответственно, может быть связано как с изменением состава (образованием новых или дополнительных связей O-Ti-O), так и изменением толщины пленки за счет отжига.

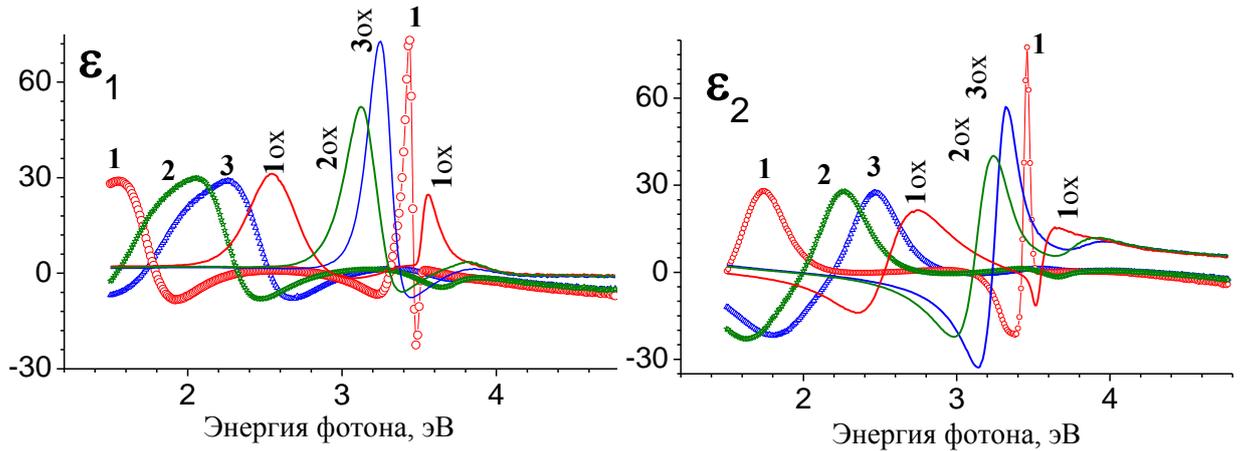


Рис. 104. Реальные ϵ_1 и мнимые ϵ_2 части псевдо-диэлектрической функции Si-Ti образцов, окисленных на воздухе при температуре 750°C в течение 7 часов (1, 2, 3) и 25 часов кумулятивного отжига (1ox, 2ox, 3ox).

Эллипсометрические спектры были измерены на SPME (Spectral Phase Modulated Ellipsometer) фирмы Jobin Yvon-Sofie ISA в диапазоне 1.5-4.77 эВ. Рамановские спектры для окисленных образцов и кристаллического рутила были записаны с энергией возбуждающего источника излучения 2.541 эВ.

Целью наших экспериментов было:

- найти адекватное описание сложных структур Si/ Ti/TiO_x/ TiO₂,
- сформулировать алгоритм решения ОЗЭ для исследуемой структуры в указанном диапазоне энергий,
- найти для всех слоев толщины и дисперсионные кривые $\epsilon(\lambda)$,
- объяснить изменение толщин пленок двуокиси титана от времени отжига,
- подтвердить результаты расчета эллипсометрических спектров независимыми методами (Рамановской спектроскопией).

6.2.5. Два метода измерений пространственно неоднородных полиморфных пленок: метод эквивалентной пленки и метод параметризации ДФ

Структура физической модели окисленной пленки показана на Рис. 101, для описания ДФ каждого слоя использовалась математическая модель

эквивалентной пленки или сочетание этой модели с методом параметризации.

- ❖ Во всех случаях был введен переходной слой, состоящий из смеси Ti/Si, который образуется, вероятнее всего, в результате взаимной диффузии атомов титана и кремния. Свойства переходного слоя для каждого образца немного отличаются из-за вариаций технологических условий.
- ❖ Неоднородный по глубине следующий слой представлен смесью одной из известных кристаллических фаз двуокиси титана и некоторой **модифицированной фазой рутила** или **анатаза**. Такое представление неоднородного слоя вполне оправдано полиморфизмом двуокиси титана. Диэлектрические функции **модифицированных фаз**, используя метод параметризации ДФ, были получены математическим преобразованием параметров классической осцилляторной дисперсионной модели, с высокой точностью описывающей кристаллические фазы TiO₂, (рутила или анатаза, соответственно) в том же самом диапазоне энергий:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0\omega} + \sum_{j=1}^2 \frac{f_j\omega_{0j}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\gamma_j\omega}.$$

В соответствии с классической дисперсионной моделью, ДФ слоя равна сумме высокочастотного значения ε_{∞} и нескольких осцилляторов, число которых определяется числом критических точек в спектре отражения или пропускания [265].

- ❖ Верхний слой кумулятивно окисленных образцов был практически кристаллической фазой, с индивидуальной толщиной и составом.
- ❖ При решении ОЗЭ в данном случае использовалась функция ошибок (функционал) χ^2 представленная следующей суммой:

$$\chi^2 = \frac{1}{2N} \sum_N \left(\frac{\varepsilon_1^{calc} - \varepsilon_1^{exp}}{\sigma_1} + \frac{\varepsilon_2^{calc} - \varepsilon_2^{exp}}{\sigma_2} \right)^2, \quad (177)$$

где индексы 1 и 2 относятся к действительной и мнимой части экспериментальной псевдо- диэлектрической функции, показанной на Рис. 104, а индексы *calc* и *exp* обозначают рассчитанные по модели и

экспериментальные значения псевдо-ДФ; σ_1 , и σ_2 –нормализующие (или весовые коэффициенты).

Результаты минимизации χ^2 (по формуле 177) приведены в Таблице 29. Это рассчитанные для каждого образца следующие параметры модели: а) число слоев модели, определяющих степень неоднородности по глубине; б) толщина каждого из слоев и общая толщина окисной пленки; в) состав каждого слоя и его $\varepsilon(\lambda)$; г) минимум функционала χ^2 , характеризующий точность решения ОЗЭ. Заметим, что нумерация слоев ведется от подложки. В этой же Таблице 29 приведены экспериментальные параметры: число напыленных слоев T_i , длительность и ступени кумулятивного отжига при 750°C.

Замечено, что пленки, окислявшиеся **более** длительное время, описывались **менее** сложной моделью. Этот феномен был обнаружен в результате моделирования и решения ОЗЭ.

К сожалению, для образца 1 не была найдена более адекватная модель и не получено меньшее значение функции ошибок. Попытка использовать более сложную модель с большим числом слоев не дала лучших результатов.

6.2.6. Результаты моделирования и обсуждение

Необходимо отметить следующие изменения образцов за счет дополнительного отжига в течение 18 часов: 1) существенное уменьшение общей толщины пленки; 2) увеличение переходного слоя на границе с кремнием почти в два раза во всех случаях; 3) образование кристаллической фазы (1ox) или их смесей (2ox, 3ox); 4) изменение состава пленки по глубине слоя; отличие состава верхнего слоя от любой из четырех известных фаз TiO_2 ; 5) улучшение качества решения ОЗЭ во всех случаях, т.е. уменьшение конечного значения функционала χ^2 примерно на порядок, что говорит в пользу адекватности примененной модели.

Таблица 29. Экспериментальные данные и параметры модели пленки TiO₂, полученной окислением на воздухе при температуре 750°C.

Экспериментальные данные			Параметры модели			
Номер образца	Число напылений слоев Ti	Время отжига, час	Номер слоя	Толщина пленки в Å	Состав слоя	χ^2
1	1+2	5+7		74.4 811.0 +455.1 +251.0 =1517.1	85.41%Ti+14.59%Si 75% Рутил-о +25%Анаказ-е Рутил-Модиф. Анаказ-Модиф.	41.15
1ox	1+2	5+7 +18		124.3 511.2 +210.3 =721.5	86.15%Ti+13.85%Si Рутил-е Рутил-Модиф.	0.895
2	1	7	4	61.2 625.6 +205.6 +237.7 =1068.9	76.84%Ti+23.16%Si Рутил-о Рутил-Модиф. Анаказ-Модиф.	13.14
2ox	1	7+18		160.2 250.6 +241.6 =492,2	98.13%Ti+1.87%Si 97.3% Рутил-е+2.7% Анаказ-о 99%Рутил-Модиф. +1% Анаказ-Модиф.	1.176
3	1	7		47.4 636.3 +133.6 +235.1 = 1005	96.18%Ti+3.82%Si 74.5% Рутил-о +25.5%Анаказ-е Рутил-Модиф. Анаказ-Модиф.	15.83
3ox	1	7+18		123.4 256.6 +212.8 = 469,4	98.13%Ti+1.87%Si 71.1% Рутил-е +28.9% Анаказ-о 99%Рутил-Модиф. +1% Анаказ-Модиф.	2.035

Принимая во внимание высокую температуру и большую длительность отжига, причину уменьшения толщины пленки можно объяснить образованием окислов с меньшей пористостью и большей упорядоченностью и, следовательно,

имеющих большую плотность и меньшую толщину. Более того, если не принимать факт уменьшения толщины, то ошибочный коэффициент затухания α [см^{-1}] может быть получен из спектров отражения или пропускания (из спектров трансмитанса или рефлектанса), как например, в работе [262].

Оптические свойства кристаллического рутила (для необыкновенного луча) и оптические свойства **модифицированного** рутила, который использовался при интерпретации спектров (1ox, 2ox, 3ox), кумулятивно окисленных 7+18 часов, показаны на Рис. 105.

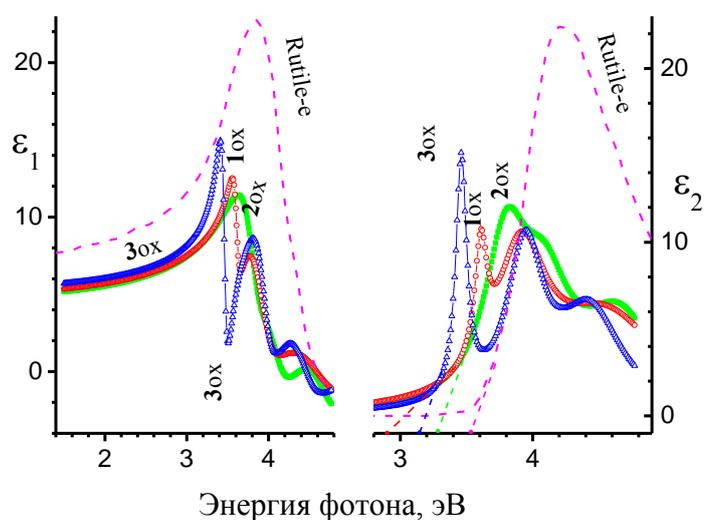


Рис. 105. Оптические свойства рутила и модифицированного рутила, использованного для решения ОЗЭ и подгонки спектров $\epsilon(E)$ образцов 1ox, 2ox, 3ox, согласно модели, показанной в Таблице 30.

Спектры диэлектрической функции **модифицированного** рутила для образцов 1ox, 2ox, 3ox характеризуются меньшей магнитудой поглощения и сдвигом в сторону меньших энергий не только края поглощения, но и обеих критических точек. Эти энергетические сдвиги являются неявными функциями режима кумулятивного отжига и они различны, т.к. процесс отжига был для каждого образца индивидуальным.

Экстраполяцией линейной части ϵ_2 можно получить значения энергий близких к E_g , которые для 1ox, 2ox, and 3ox образцов равны 2.89 эВ, 3.28 эВ, 3.14 эВ, соответственно, а для рутила-е эта величина равна 3.53 эВ. Сдвиги к более

низким энергиям по отношению к 3.53 эВ (для рутила-е) могут быть объяснены присутствием аморфной фазы, как предложено в работе [266], где степень аморфизации полупроводников связывалась с параметром, характеризующим уширение «хвоста» поглощения.

Таблица 30. Сдвиг края поглощения модифицированного рутила

образец	Рутил-е	1ох	2ох	3ох
E_g^* эВ	3.53	2.89	3.28	3.14

6.2.7. Подтверждение сложного фазового состава термически окисленных на воздухе пленок титана Рамановской спектроскопией

На Рис. 106 показаны Рамановские спектры комбинационного рассеяния кристаллического рутила (для сравнения) и образцов 2 и 2ох, которые были записаны, чтобы подтвердить наличие различных фаз TiO_2 в наших пленках. В Таблице 31 приведены Рамановские моды пленки анатаза [267] и кристаллического рутила и образцов 2 и 2ох. За исключением двух мод (104 и 609 см^{-1}), остальные моды отличаются от аналогичных мод кристаллического рутила примерно на 10 см^{-1} , и от моды анатаза (640 см^{-1}) – примерно на 30 см^{-1} .

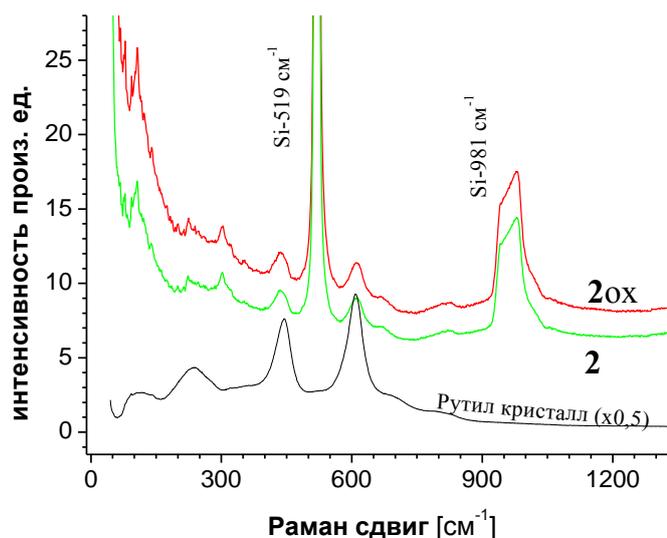


Рис. 106. Раман-спектры комбинационного рассеяния кристаллического рутила и образцов 2 и 2ох, экспонированных на воздухе при 750 C° в течение 7 и 25 часов, соответственно.

Эти факты не противоречат результатам эллипсометрического моделирования и расчета. С одной стороны, образцы 2 и 2ох довольно похожи на рутил, за исключением моды 670 см^{-1} , а с другой стороны, к сожалению, Раман-спектры не дают убедительной информации о различии в составе образцов, окисленных в течение 7 часов и 25 часов, хотя это различие ясно видно из эллипсометрических спектров, показанных на Рис. 104.

Таблица 31. Сравнение рамановских мод кристаллического рутила, аморфной пленки анатаза [267] и окисленных на воздухе образцов: 2 и 2ох.

образец	Рамановский сдвиг, см^{-1}						
	145	159	166	196	292	316	344
Анатаз (пленка[267])							
Рутил (кристалл)	145	159	166	196	292	316	344
образец 2 (7 часов окисления)	145	159	166	196	292	316	344
образец 2ох (7+18 часов окисления)	145	159	166	196	292	316	344

Пленки TiO_2 , полученные окислением на воздухе обладают профилем окисления, другими словами, состав пленки зависит от поперечной координаты z (от толщины слоя), а толщина слоя оксида, в свою очередь, зависит от условий напыления и окисления. Необходимо помнить, что пленки, полученные таким способом, могут быть неизотропными. Чтобы получить изотропные пленки TiO_2 необходимо выбрать другой способ или режим окисления.

Для описания ДФ каждого слоя использовалась математическая **модель эквивалентной пленки** или **сочетание этой модели с методом параметризации**.

Выводы к § 6.2. Принимая во внимание высокую температуру и большую длительность отжига, причину уменьшения толщины пленки можно объяснить образованием окислов с меньшей пористостью и большей упорядоченностью и,

следовательно, имеющих большую плотность и меньшую толщину. В заключение можно отметить, что метод эквивалентной пленки не является универсальным. Важное значение модель эквивалентной пленки имеет при интерпретации эллипсометрических спектров, позволяя находить состав довольно сложных пленок, как например, в [259-260].

§ 6.3. Комбинированный метод измерения свойств МЛЭ пленок GaAs с использованием областей прозрачности и поглощения

В этом параграфе разработан метод измерения толщины и спектральной зависимости комплексного показателя преломления верхних слоев сложных тонкопленочных структур на основе арсенида галлия, выращенных молекулярно – лучевой эпитаксией, с помощью спектральной эллипсометрии. Результаты этой работы позволяют надеяться на введение в будущем выходного контроля параметров таких структур.

Высокочастотные (гигагерцовые) транзисторы и интегральные схемы на основе полупроводников типа A_3B_5 широко используются в радиолокационных станциях и аппаратуре связи гражданского и военного применения. Малый вес и объем, высокая экономичность транзисторов и интегральных схем делает их особенно привлекательными для использования в устройствах индивидуальной мобильной и спутниковой связи, а также бортовых РЛС. В настоящее время наилучшие параметры имеют СВЧ-транзисторы, изготовленные на основе многослойных гетероструктур, синтезированных методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

Авторами работы [268] предложена технология получения гетероэпитаксиальных структур n^+ -GaAs/n-GaAs/GaAs для мощных СВЧ транзисторов типа MESFET и n^+ -GaAs/AlGaAs/n-GaAs/GaAs для мощных СВЧ транзисторов типа HFET (**Heterostructure Field-Effect Transistor.**) и получены MESFET (**metal semiconductor field effect transistor**) транзисторы с удельной

выходной мощностью $P_{yd} = 0.8$ Вт/мм и *HFET* транзисторы с $P_{yd} = 0.9$ Вт/мм на частоте 17.7 ГГц.

При отработке режимов выращивания отдельных слоев для контроля их параметров обычно используются следующие методики: низкотемпературная фотолюминесценция, холловские и C-V измерения. На Рис. 107 приведены оптические свойства слоев, образующих сверхрешетку (СР): арсенида галлия и арсенида алюминия. Оптические свойства этих слоев значительно отличаются в длинноволновой части спектра и практически не различимы в коротковолновой части спектра. Причем, слои чередуются таким образом, что фотоны с энергией $1.5 \div 3.2$ эВ из слоя AlAs с меньшим показателем преломления переходят в слой GaAs с большим показателем преломления и с более высоким коэффициентом поглощения. Очевидно что, для контроля рабочих структур требуются неразрушающие бесконтактные методики. В работе [269] сообщается об использовании метода спектральной эллипсометрии в области 1.5-4.75 эВ для измерения **толщин и оптических констант** слоев, образующих структуры, показанных на Рис.108.

6.3.1. Обоснование выбора метода измерения и цель работы

I. Влияние легирующей примеси на коэффициент затухания α для *n*-типа GaAs в диапазоне 1.3-1.6 эВ ранее было изучено в [270] из спектров отражения, используя соотношение Крамерса - Кронига и показано на Рис. 109. Энергия края собственного поглощения GaAs при комнатной температуре равна 1.425 эВ. Поскольку этот полупроводник прямозонный, то вблизи собственного края поглощения происходит резкий рост поглощения и при энергии фотонов $\hbar\omega \approx 1.6$ эВ коэффициент затухания $\alpha = 4\pi k/\lambda \approx 10^4$ см⁻¹, что соответствует коэффициенту поглощения $k \approx 0.1$. Согласно работе [270], уровень легирования в пределах $(5.9 \times 10^{17} \div 3 \times 10^{18})$ см⁻³ изменяет коэффициент поглощения α у GaAs *n*-типа для энергий фотонов 1.3-1.6 эВ, однако, даже в таком узком диапазоне приращение α может менять знак (Рис.109). Наши измерения на образцах, выращенных в

ИФП СО РАН, с разной степенью легирования кремнием и теллуром наблюдалась зависимость не только от концентрации легирующей примеси, но и от ее типа. Так при примерно равных концентрациях легирования теллур влияет больше, чем кремний на оптические константы арсенида галлия [292, 296], что видно из Рис. 110.

II Известно, что наибольшие изменения оптических свойств наблюдаются в области критических точек, т. е. при энергиях переходов из валентной зоны в зону проводимости. В области спектра 1-7 эВ таких переходов несколько, как видно из Таблицы 32, где приведены параметры зонной структуры арсенида галлия [271].

Таблица 32. Параметры зонной структуры арсенида галлия

aAs	E_g	E_{L1}	E_{L2}	$E_{\Gamma 2}$	E_{X1}	E_{X2}	E_{L3}	E_{L4}
эВ	1.430	2.99	3.23	4.52	5.12	5.55	6.6	6.9

Однако, современное представление диэлектрической функции GaAs суммой осцилляторов (166) в диапазоне 1.5-5.5 эВ приводит к следующим значениям энергий переходов [249], показанных в Таблице 33:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = (n^2 - k^2) + i2nk, \quad \varepsilon(E) = 1 + \sum_{i=1}^7 A_i \left(\frac{1}{E + E_i + i\Gamma_i} - \frac{1}{E - E_i + i\Gamma_i} \right). \quad (175)$$

Таблица 33

i-осциллятор	1	2	3	4	5	6	7
E_i (эВ)	2.9207	3.1267	3.5036	4.050	4.479	4.821	6.5595

В Таблицах 32 [271] и 33 [249] отмечены осцилляторы, энергии которых не попадают в диапазон наших измерений. Следовательно, наиболее интересным для наших исследований является диапазон энергий 3-3.5 эВ и вблизи 4.5 эВ, где следует ожидать изменений оптических свойств GaAs за счет легирующих примесей.

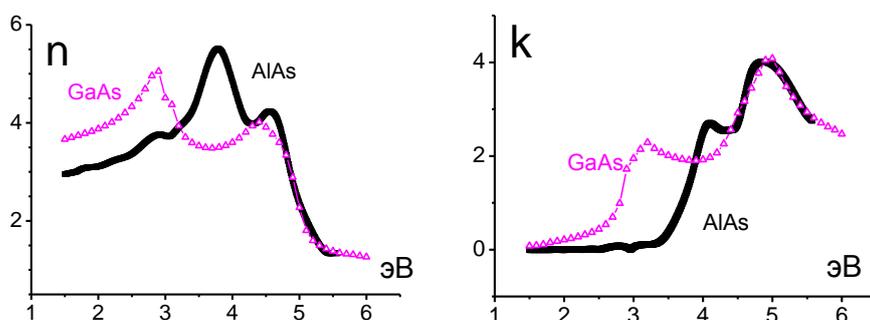


Рис. 107. Оптические свойства слоев арсенида галлия и арсенида алюминия, образующих сверхрешетку (СР) в исследуемой структуре.

<i>n</i>-GaAs : Si 0.3 мкм $C_{Si}: (3,0-3,5) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$	
<i>i</i>-GaAs 0.3 мкм	
СР 20 периодов 0.068 мкм	AlAs 5ML
	GaAs 7ML
	AlAs 5ML
	GaAs 7ML
<i>i</i>-GaAs 0.3 мкм	
АГЧП-10	

Рис.108. Параметры слоев изучаемых структур: толщины слоев в микрометрах, концентрация легирующей примеси (Si) в см^{-3} ; толщина слоев сверхрешетки (СР) в монослоях (ML). Подложка (АГЧП-10)- полу-изолирующий GaAs.

III. В области слабого поглощения от 1.5 до 2.6 эВ в измеряемом спектре следует ожидать интерференционного эффекта, учитывая при этом, что толщина GaAs, на которой отраженный свет, согласно закону Бугера-Ламберта затухает в 10 раз, изменяется от $\lambda \approx 2.57 \text{ мкм}$ до $\lambda \approx 0.16 \text{ мкм}$, соответственно.

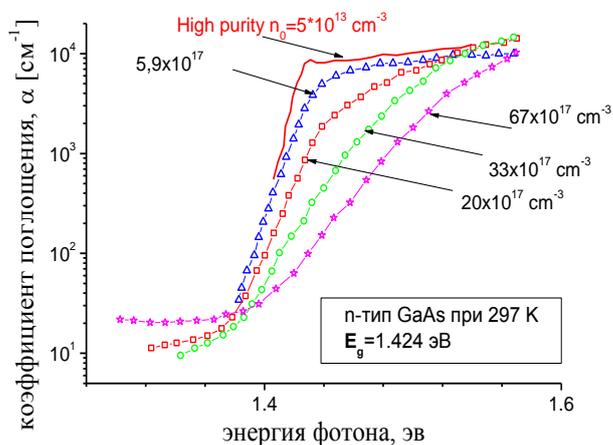


Рис. 109. Концентрационная ($5.9 \times 10^{17} - 3.3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$) зависимость (а) - коэффициента α для *n*-типа GaAs в диапазоне 1.3-1.6 эВ, полученная из спектров отражения, используя соотношение Крамерса - Кронига [270].

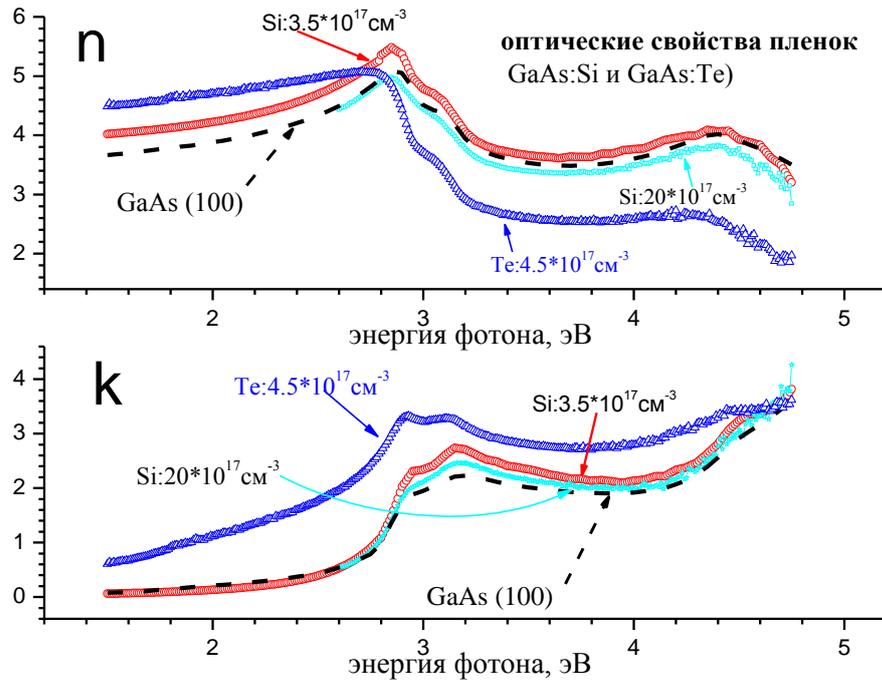


Рис. 110. Влияние легирующей примеси (Si и Te) на дисперсию оптических констант арсенида галлия [269, 292, 296].

Цель данного параграфа: для *n*-типа пленок GaAs, полученных молекулярно-лучевой эпитаксией (МЛЭ), разработать метод определения спектральной зависимости не только коэффициента поглощения, но и показателя преломления, т. е. дисперсию как действительной, так и мнимой частей комплексного показателя преломления $N = n - ik = \epsilon^{1/2}$, а следовательно, и комплексной диэлектрической функции $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = (n^2 - k^2) + i2nk$. Кроме того, вычислить толщины двух верхних слоев исследованных структур, и показать **воспроизводимость** технологического процесса.

6.3.2. Описание исследуемых структур

Структуры выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на установке Riber-32P. В качестве подложек использовались пластины полуизолирующего арсенида галлия диаметром 40 мм. Контроль скорости роста осуществлялся с точностью $\pm 1\%$ методом (RHEED) дифракции быстрых электронов на отражение по периоду осцилляций интенсивности зеркального рефлекса. Оптические измерения выполнены на спектральном эллипсометре

фирмы Jobin Yvon в диапазоне энергий 1.5-4.75 eV. Измеренные спектры эллипсометрических углов $\Psi(E)$ и $\Delta(E)$, которые связаны с относительным коэффициентом отражения $\rho(E)$, основным уравнением эллипсометрии: $tg\Psi e^{i\Delta} = R_p/R_s \equiv \rho$, были откорректированы с учетом образовавшегося окисла, используя соотношения (171) Друде, Арчера, Саксены [50], где R_p и R_s – коэффициенты Френеля для р- и s-поляризованного света, Ψ , Δ и $\bar{\Psi}$, $\bar{\Delta}$ – относятся к структуре с тонким ($d=\lambda$) окислом и без него, соответственно, C_Δ и C_Ψ – константы, зависящие от параметров системы:

$$\frac{tg\Psi}{tg\bar{\Psi}} e^{i(\Delta-\bar{\Delta})} = 1 - iC_\Delta d + C_\Psi d \Rightarrow \begin{cases} \frac{tg\Psi}{tg\bar{\Psi}} \cos(\Delta - \bar{\Delta}) = 1 + C_\Psi d \\ \frac{tg\Psi}{tg\bar{\Psi}} \sin(\Delta - \bar{\Delta}) = -C_\Delta d \\ tg\Psi - tg\bar{\Psi} = C_\Psi d tg\bar{\Psi} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \partial\Delta = (\Delta - \bar{\Delta}) = -C_\Delta d \\ \partial\Psi = (\Psi - \bar{\Psi}) = \frac{\sin 2\bar{\Psi} C_\Psi d}{2} \end{cases} \cdot (178)$$

Толщина тонкого окисла была определена из времени окисления, используя логарифмический закон роста окисла [109]: $d = d_0 \ln A(\tau + \tau_0)$, что соответствует образованию $\square 13\text{\AA}$ окисла для исследованных структур.

6.3.3. Метод измерения шести параметров структур в области прозрачности

В данном разделе не рассматриваются проблемы выбора функционала или функции ошибок, которым было уделено много внимания ранее. Суть решения обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ) в данном разделе сводилась к разбиению задачи на два этапа.

На первом этапе в области слабого поглощения GaAs задача состояла в определении **шести параметров одновременно** - толщин слоев d_1 и d_2 , отличающихся степенью легирования, и четырех параметров *одного* осциллятора, описывающего $\varepsilon_{trans}^{II}(E)$ верхнего слоя:

$$\varepsilon_{trans}^{II} = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0\omega}, \quad (179)$$

где ε_∞ и ε_s высокочастотная и статическая диэлектрические константы, соответственно; Γ_0 – фактор затухания; $\Gamma_0 > 0$; ω_T – энергия осциллятора в эВ, $\omega \in 1.5-2.6$ эВ; используя метод Марквардта-Левенберга (Levenberg - Marquardt) для минимизации функции ошибок χ^2 (180), определяемую разностью величин - измеренной и вычисленной, согласно предложенной модели (179):

$$\chi^2 = \frac{1}{2N} \left\{ \sum_i^N \operatorname{Re} \left[\frac{\varepsilon_{measur}(\omega_i) - \varepsilon_{calcul}(\omega_i)}{\alpha} \right]^2 + \sum_i^N \operatorname{Im} \left[\frac{\varepsilon_{measur}(\omega_i) - \varepsilon_{calcul}(\omega_i)}{\beta} \right]^2 \right\} \quad (180)$$

На втором этапе в области энергий больших, чем 2.6 эВ, где глубина проникновения света значительно меньше толщины пленки, определяется спектральная зависимость **диэлектрической функции только верхнего слоя**, согласно выражению (181), с учетом угла падения света φ_0 :

$$\varepsilon_{орач}'' = tg^2 \varphi_0 \left[1 - \frac{4\rho}{(1+\rho)^2} \sin^2 \varphi_0 \right] \quad (181)$$

6.3.4. Экспериментальные эллипсометрические спектры и результаты решения ОЗЭ

Как и ожидалось в пункте III, в спектрах измеренных эллипсометрических углов Ψ и Δ для одинаковых исследуемых структур 1, 2 и 3 наблюдаются осцилляции в области слабого поглощения от 1.5 до 2.6 эВ, амплитуда которых уменьшается по мере роста поглощения МЛЭ пленок арсенида галлия, как видно из Рис. 111. Несмотря на то, что все исследуемые структуры выращены в одной установке и в одном режиме, осцилляции отличаются и по амплитуде и по энергетическому положению экстремумов, что однозначно указывает на различие свойств только двух верхних слоев, так как вклад света, отраженного более глубокими слоями пренебрежимо мал.

На вставке к Рис. 111 видно, что амплитуда Ψ , характеризующая модуль относительного коэффициента отражения ρ , изменяется в пределах $10^\circ-17^\circ$, а фаза Δ комплексного ρ , или другими словами, разность фаз R_p и R_s коэффициентов $\delta_p - \delta_s = \Delta$ изменяется от 160° до 182° . В то же время положение первого максимума по Ψ равно 1.65, 1.7, 1.5 эВ для 1, 2 и 3 образцов,

соответственно; а первого минимума по Δ - 1.67, 1.75, 1.65 эВ, соответственно. Таким образом, и без расчетов ясно, что спектральная эллипсометрия, обладающая высокой фазовой чувствительностью, позволяет регистрировать различие в свойствах исследуемых структур.

Чтобы найти конкретные значения этих различий, необходимо решить ОЗЭ, вычисляя коэффициенты Френеля для всех слоев, показанных на Рис. 107 и, полагая, что известны толщины и спектральные зависимости диэлектрических функций всех слоев, кроме двух верхних.

На первом этапе решения ОЗЭ для описания неизвестной функции $\epsilon(E)$ была использована осцилляторная модель (179), в которую входят четыре неизвестных параметра. После минимизации функционала (180), результаты вычислений, а именно, толщины двух верхних слоев приведены в Таблице 34. На Рис. 112 в диапазоне энергий до 2.6 эВ приведены спектральные зависимости оптических констант - $n(E)$ и $k(E)$, которые показывают, что по сравнению с объемным полуизолирующим GaAs при энергии фотона 1.54 эВ действительная часть возрастает $\approx(5-9)$ %. Мнимая часть, т. е. поглощение, возрастает более чем на 15 %, оставаясь при этом равной $\approx 0,1$. Наблюдается заметный сдвиг края коэффициента поглощения в сторону меньших энергий. Отклонение суммарной толщины двух верхних рабочих слоев для данных образцов колеблется в пределах от -7% до + 4% от заданной и это надо учитывать при изготовлении транзисторов.

Таблица 34.

Номер образца	i GaAs толщина, мкм	n GaAs:Si толщина ,мкм	Суммарная толщина, мкм	$\pm\%$ от 0.6 мкм
1	0.2386	0.3187	0.5573	-7.1
2	0.2896	0.3364	0.6260	+4.3
3	0.3170	0.2656	0.5826	-2.9

Найденные из эллипсометрических спектров толщины двух верхних слоев для трех одинаковых МЛЭ структур, показанных на Рис. 107; отклонение суммарной толщины от заданной толщины составляет $+4\% \div -7\%$.

Чтобы показать преимущество МЛЭ технологии по отношению к МOCVD технологии в точности и однородности нанесения рабочих слоев, на Рис. 111а показаны спектры, измеренные на одной структуре в центре и на периферии шайбы. Количество осцилляций в области прозрачности GaN указывает на различие в суммарной толщине двух верхних слоев $\sim 20\%$.

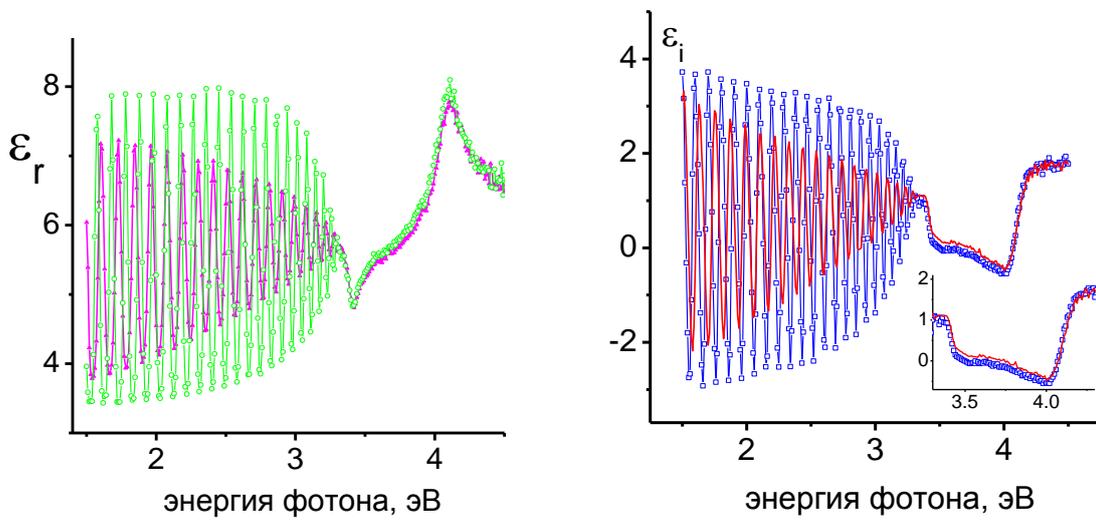


Рис. 111а. Эллипсометрические спектры действительной и мнимой частей ДФ гетероструктур, выращенных по технологии МOCVD, измеренные в двух точках на одной шайбе сапфира (в центре и на краю).

GaN	5 нм
Al _{0.28} GaN :Si	15 нм
Al _{0.28} GaN	5 нм
AlN	1 нм
GaN	2 мкм
Al ₂ O ₃	430 мкм

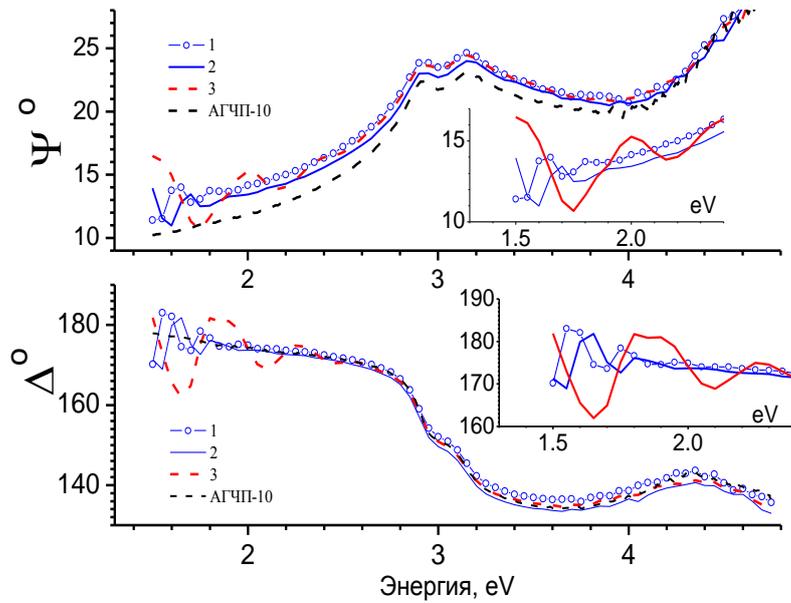


Рис. 111. Измеренные спектральные зависимости эллипсометрических углов Ψ и Δ для исследуемых структур 1 2 3 с коррекцией влияния окисла толщиной $\approx 13 \text{ \AA}$. На вставке показаны осцилляции Ψ и Δ в области слабого поглощения. Для сравнения приведен спектр полуизолирующего GaAs-АГЧП-10.

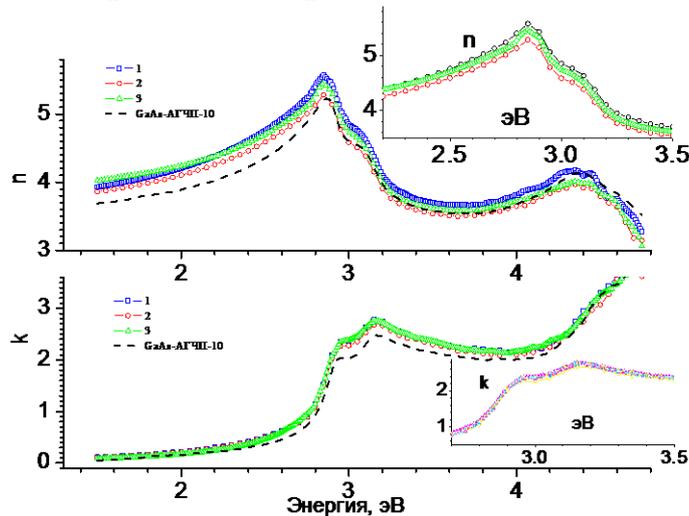


Рис. 112. Оптические свойства МЛЭ пленок GaAs *n*-типа с концентрацией кремния $(3-3,5) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, найденные из эллипсометрических спектров, для верхнего слоя структуры, показанной на Рис. 107.

Задача решалась в два этапа: в области слабого поглощения и в области сильного поглощения. ДФ верхнего слоя показана полностью во всем диапазоне энергий. Для сравнения приведен спектр объемного GaAs-АГЧП-10. На вставках в увеличенном масштабе показаны те же спектры в области критических точек.

На втором этапе решения ОЗЭ определен комплексный показатель преломления для энергий больших 2.6 эВ, вычисленный по формулам (181), который также отображен на Рис. 112. В окрестности первого осциллятора (Таблица 33) максимум n возрастает на (3-9) % а максимум поглощения k – на

(15-20) % по сравнению с арсенидом галлия –АГЧП-10. По-видимому, в запрещенной зоне образуются дополнительные уровни, ответственные за увеличение числа переходов из валентной зоны в зону проводимости. В области энергий больших 3.5 эВ создается впечатление, что кривые $n(E)$ пересекаются, в действительности этих пересечений нет, и это хорошо видно в трехмерном пространстве параметров ***n-ik-энергия*** на Рис. 113.

На Рис. 113 показано движение вектора комплексного показателя преломления как функции энергии фотона, причем при больших энергиях степень легирования играет заметно меньшую роль.

Выводы к § 6.3 В данном параграфе показана возможность определения спектральной зависимости комплексного показателя преломления $N(E)$ и толщин двух МЛЭ слоев арсенида галлия *n*-типа, отличающихся разной степенью легирования. Важно отметить, что в области слабого поглощения от 1.5 до 2.6 эВ можно и без расчетов оценить насколько отличаются или совпадают по свойствам рабочие слои, т.е. оценить **воспроизводимость** структур, что очень важно при изготовлении **транзисторов в гигагерцовом** диапазоне.

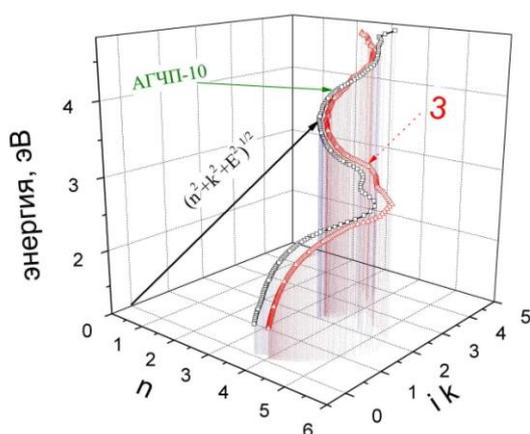


Рис. 113 Спектральные зависимости комплексного показателя преломления монокристаллического объемного арсенида галлия и верхнего слоя образца 3, в трехмерном пространстве: *энергия - n - ik*, две проекции которых показаны на Рис. 112.

§ 6.4. Корреляционные методы измерения оптических параметров МЛЭ пленок в зависимости от их морфологии, полярности и состава

Как правило, коэффициенты отражения R или пропускания T принимается во внимание некоторыми авторами, чтобы найти диэлектрическую постоянную в видимом диапазоне, ширину запрещенной зоны и состав в реальном режиме

времени для GaN, AlN и сплавов $Al_xGa_{1-x}N$. Поскольку сигналы R и T зависят от показателя преломления и коэффициента поглощения и, следовательно, зависят от состава слоя [272-275]. Эллипсометрия широко используется в настоящее время [276-278], и эта методика полезна для быстрой и неразрушающей характеристики как атомарно-чистых поверхностей, так и многослойных структур. Кроме того, спектральная эллипсометрия используется в диапазоне энергий зондирующего излучения: от ближнего инфракрасного излучения (0.75 эВ) до вакуумного ультрафиолета (с источником синхротронного излучения 20÷40 эВ). Для того, чтобы определить, например, температурную зависимость критических точек в спектрах AlN в вакуумном ультрафиолете [278].

Спектральная эллипсометрия - мощный инструмент исследования пленок, позволяющий определить не только толщину, но и дисперсию комплексного показателя преломления, энергетическое положение критических точек, а также ширину запрещенной зоны и ее зависимость от состава. Если же эта зависимость известна *a priori*, то тогда можно решить обратную задачу: по измеренным спектрам определить состав пленки.

6.4.1. Метод спектральной эллипсометрии для установления корреляции между оптическими свойствами пленок AlN, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией, и морфологией их поверхности

В этом параграфе разработан метод корреляции между количеством поверхностных 3D дефектов и особенностями в эллипсометрических спектрах и, следовательно, в оптических свойствах пленок AlN, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией в присутствии аммиака. Автор предлагает использовать этот факт для быстрой и неразрушающей проверки (разбраковки) качества пленки.

Основные критерии качества пленок AlN были выбраны следующие: а) величина сдвига фазового угла Δ в максимуме интерференции или б) величина кажущегося (эффективного) поглощения в области прозрачности AlN, вычисленного в соответствии с нашей моделью. Наши эксперименты были выполнены на спектральном эллипсометре (UVISEL фирмы Jobin Yvon) в диапазоне

энергий 1.5-4.75 эВ. Атомная силовая микроскопия (*AFM*), как независимый метод исследования, использовалась для определения **геометрических** размеров шероховатости поверхностного слоя (3D дефектов). Автором был предложен количественный параметр, связанный с поверхностной морфологией γ_s , и было изучено влияние поверхностных дефектов на фазу отраженного света. Новый параметр позволяет оценить качество поверхности из эллипсометрических спектров сразу, то есть без каких-либо вычислений. Кроме того, влияние поверхностных дефектов на коэффициент **кажущегося** поглощения пленки демонстрируется в случае, когда **шероховатость не учитывается** расчетной моделью. Этот подход мог быть полезен для того, чтобы сортировать идентичные пленки, выращенные в **стандартном** режиме роста.

6.4.1.1. Описание образцов

Серия образцов AlN была выращена методом МЛЭ в установке Riber CBE-32 с обычной эффузионной ячейкой Кнудсена для алюминия в потоке аммиака (NH_3) как источника активного азота. В эксперименте варьировался только режим начальной обработки подложки, все остальные параметры - температура подложки, вакуум в камере, парциальное давление аммиака - были неизменны [279-281]. В установке CBE-32 Riber использовалась отражательная дифракция быстрых электронов (RHEED система с напряжением 12 кВ) и видео регистрация дифракционной RHEED картины с анализом интенсивности дифракционных рефлексов. На поверхности Al_2O_3 (0001) как на подложке была выращена МЛЭ пленка (0001)AlN путем непрерывного нагревания сапфировой подложки от T_{\min} до T_{\max} ($T_{\max} - T_{\min} = 300^\circ\text{C}$) в течение 30 мин со скоростью нагревания $10^\circ/\text{мин}$ в потоке аммиака. После 5 минутной выдержки в потоке аммиака при T_{\max} температура снижалась до T_{\min} с той же скоростью. Дифракционная RHEED картина записывалась каждые 2 секунды. Наше математическое обеспечение позволяло извлечь эволюцию интенсивности рефлекса (тяжа) во времени, чтобы получить профиль интенсивности

исследуемой линии, которая характеризует степень кристалличности (упорядоченности) пленки AlN [281].

Напомним, что **основное уравнение эллипсометрии** связывает эллипсометрические углы Δ и Ψ с коэффициентами Френеля, которые зависят от энергии фотона E в эВ (или длины волны света λ в нм), следовательно, и сами углы становятся функциями длины волны света: $\rho(\lambda) \equiv \frac{R_p(\lambda)}{R_s(\lambda)} = \tan \Psi(\lambda) \exp[i\Delta(\lambda)]$. Причем,

именно фазовый угол Δ наиболее чувствителен к присутствию поверхностных дефектов или пленки. Как правило, при решении обратной задачи эллипсометрии, т. е. для нахождения неизвестных параметров исследуемой системы, используются численные методы минимизации некоторого функционала. **При этом выбор вида функционала и модели, описывающей исследуемую структуру, являются ключевыми факторами спектральной эллипсометрической характеристики.** С другой стороны, модель становится громоздкой, если необходимо учесть влияние переходных слоев на границах с воздухом и подложкой или их неомогенность, возникающую в процессе роста пленок.

На Рис.115 приведены спектры эллипсометрических углов для четырех образцов, детали поверхностной морфологии которых определены атомно-силовым микроскопом (SOLVER P47H in tapping mode), как показано на Рис. 114. Кроме того, изменение морфологии пленок контролировалось *in-situ* в процессе роста с помощью отражательной дифракции электронов высоких энергий (RHEED).

В исследуемом диапазоне энергий фотонов толщины (около 0.2 мкм) пленок AlN таковы, что позволяют записать несколько интерференционных экстремумов спектрах $\Delta(\lambda)$ и $\Psi(\lambda)$. Для того, чтобы связать значение $\delta\Delta_{\max}$ в интерференционном максимуме с поверхностными дефектами пленок, предложен коэффициент γ_s в качестве параметра поверхностной плотности

дефектов, равной отношению (в процентах) суммарной площади, занимаемой дефектами, к общей площади в поле зрения.

На Рис. 116 показана экспериментальная зависимость этих двух величин. Из графика можно записать уравнение и определить коэффициенты для данных образцов.

$$\gamma_s = \sum_i S_{defect}^i / S_{AIN}, \quad \delta\Delta_{max} = -34.15 + 0.77 \times \gamma_s. \quad (182)$$

Такое уравнение будет полезным для экспресс контроля и разбраковки образцов в режиме, когда технологические параметры мало меняются.

6.4.1.2. Методы параметризации спектральных измерений для пленок AlN

В этом разделе кажущиеся (псевдо-константы) оптические свойства (183а) и толщины пленок AlN были вычислены с использованием классической дисперсионной модели (183б), описывающей искомую диэлектрическую функцию. Поскольку известно, что ширина запрещенной зоны AlN равна 6.2 эВ, т.е. край поглощения лежит за пределами области измерений, то достаточно одного осциллятора в этой модели для описания $\varepsilon(\lambda)$ наших пленок.

$$\varepsilon_{псевдо} = \varepsilon_0 t g^2 \varphi_0 \left[1 - \frac{4\rho \sin^2 \varphi_0}{(1+\rho)^2} \right], \quad \rho = \frac{R_p}{R_s}, \quad \rho = f[\Delta(\lambda), \Psi(\lambda)]. \quad (183a)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma_0 \omega} \quad (183б)$$

Сначала, используя модель Лорентца, найдем параметры модели для достоверно известной пленки AlN, затем из спектров $\Delta(\lambda)$ и $\Psi(\lambda)$ найдем толщину наших пленок, полагая, что их состав соответствует AlN. С помощью нескольких последовательных итераций, минимизируя функционал (или функцию ошибки), получим спектральные зависимости $n(\lambda)$ и $k(\lambda)$, показанные на рисунке ниже, и уточненную толщину пленки.

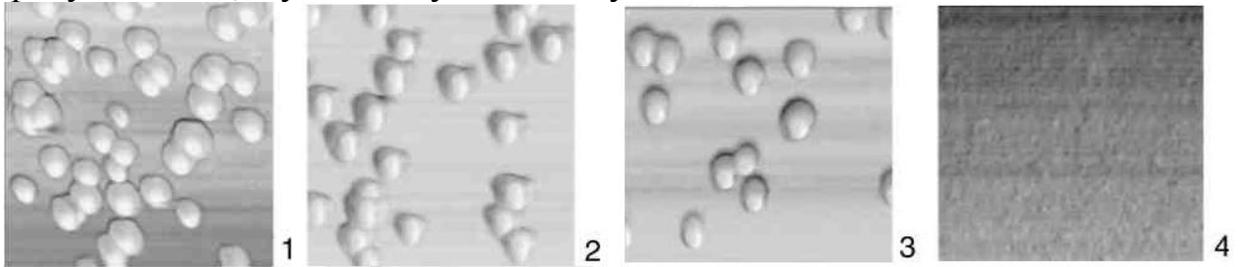


Рис. 114. AFM изображение поверхности четырех образцов AlN, выращенных при варьировании режимов начальной подготовки поверхности подложки. Высота дефектов, называемых “хилоками”, 30-40 нм, а их плотность уменьшается почти в 30 раз от первого до четвертого образца. Поле зрения 1×1 мкм².

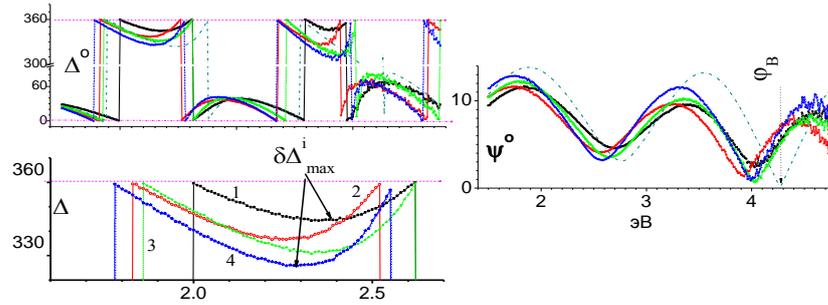


Рис. 115. Спектры эллипсометрических углов Ψ и Δ , измеренных на образцах 1-4, показанных на Рис.114. Для сравнения добавлен спектр AlN, рассчитанный с учетом показателя преломления из работы [244], где авторы полагали $k=0$.

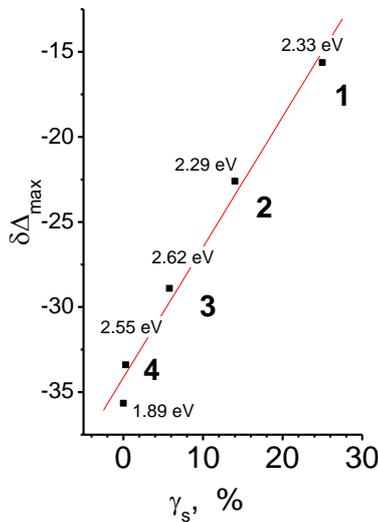


Рис. 116 Изменение угла Δ в интерференционном пике как функция параметра поверхностной морфологии γ_s . Около экспериментальных кривых показаны значения энергии фотонов, при которой $\delta\Delta_{\max}$ зарегистрированы.

$$\delta\Delta_{\max} = -34.15 + 0.77 \times \gamma_s$$

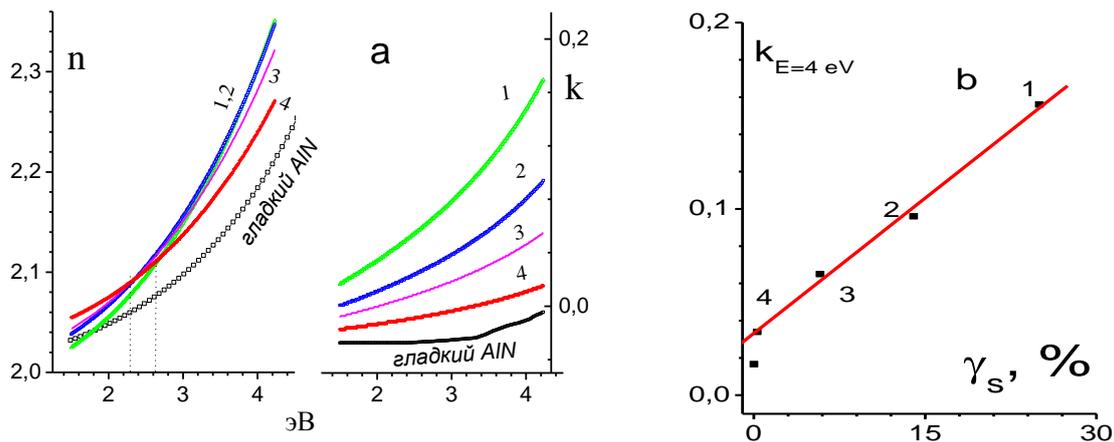


Рис. 117. а) Спектральные зависимости кажущегося показателя преломления n и кажущегося (ложного) показателя поглощения k для пленки AlN в видимой области спектра от 1.5 до 4.2 эВ;
 б) кажущийся (ложный) коэффициент поглощения k для пленки AlN как функция параметра поверхностной морфологии γ_s , выраженной в процентах.

Как видно из Рис.117 б, наличие дефектов на поверхности проявляется в возникновении кажущегося (ложного) поглощения, которое тем больше (оставаясь достаточно малым), чем больше плотность поверхностных дефектов. Из этого рисунка для данных образцов при энергии фотона 4 эВ можно записать уравнение прямой:

$$k_{E=4eV} = 0.02691 + 0.00517 \times \gamma_s, \quad (184)$$

Было обнаружено, что в области от 2.3 до 2.7 эВ поверхностные дефекты весьма слабо влияют на модуль относительного коэффициента ρ , равный $\text{tg}\Psi$, и, следовательно, на реальную часть вычисленного комплексного показателя преломления.

6.4.2. Зависимость края поглощения пленок $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ от состава

Зависимость края поглощения от состава пленки интересна тем, что, если она известна *a priori*, то из эллипсометрических спектров можно экспериментально определить ширину запрещенной зоны E_g , а затем состав исследуемой пленки. Так, например, в работе Wagner et al. [282], спектральная эллипсометрия была использована для характеристики гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с разным набором толщин слоев.

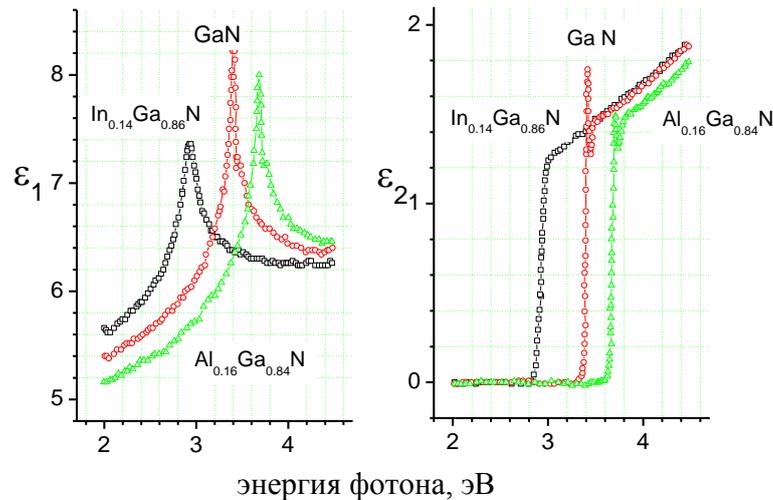


Рис. 118. Реальные ε_1 и мнимые части ε_2 параметрической диэлектрической функции, полученные из SE спектров гетероструктур GaN , $\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ и $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.87}\text{N}$, с помощью многослойной осцилляторной модели [284].

Из анализа SE спектров псеводиэлектрической функции этих структур, используя многослойную модель, диэлектрическая функция каждого из слоев которой описывалась параметрической осцилляторной моделью, были

получены спектры ДФ [284] для гетероструктур сложного состава: $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x \leq 0.16$) и GaN и $\text{In}_{0.13}\text{Ga}_{0.87}\text{N}$, показанных на Рис. 118.

Более того, была определена зависимость энергии ширины запрещенной зоны от мольной доли алюминия в каждом слое. Полученные из эллипсометрических спектров значения E_g были сравнены с данными, полученными на тех же самых материалах из спектров фотолюминесценции, и результатами других авторов, как показано на Рис. 121

Разброс значений E_g не позволяет пользоваться подобными зависимостями без проведения аналогичного анализа для получения калибровочной кривой, применимой для конкретных условий роста структур.

6.4.2.1. Экспрессный метод определения состава слоев гетероструктур

Цель данного раздела – разработать экспрессный метод определения состава слоев гетероструктур, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией, из эллипсометрических спектров.

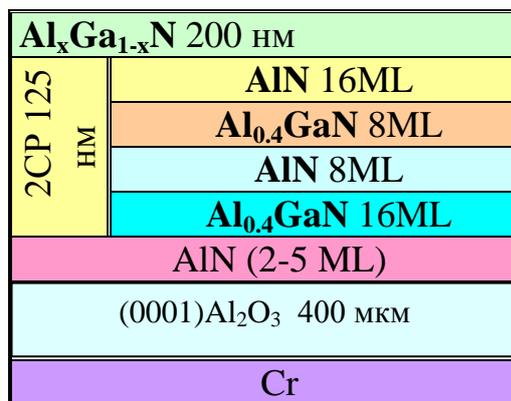


Рис. 119. Схема расположения слоев гетероструктур, выращенных в ИФП СО РАН на МЛЭ установке СВЕ-32 Riber.

На Рис. 119 схематично показана последовательность слоев, выращенных в установке СВЕ-32 Riber с видео мониторингом RHEED картины [279-281]; на сапфировую подложку (0001)Al₂O₃ молекулярно-лучевой эпитаксией был нанесен тонкий (2-5 монослоев) зародышевый слой (0001) AlN, затем выращены две сверхрешетки (СР) с общей толщиной 125 нм, состоящие из 20 периодов $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ /AlN, и верхний слой $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ переменного состава

($x=0.2\div 0.6$). Этот верхний слой и определяет сдвиг края поглощения в мнимой части псевдо диэлектрической функции ε_1 , как показано на Рис. 120. Исследованная здесь серия образцов отличалась не только составом верхнего слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, но отличалась и полярностью поверхности, которая была N или Ga-терминирована [283, 302].

Зависимость края поглощения $E_g^*(x)$ (величины близкой к ширине запрещенной зоны) от состава и полярности поверхности показана на Рис. 121. На этом же рисунке приведена аналогичная зависимость из статьи Wagner et al. [282] в малом диапазоне изменения состава ($x=0\div 0.15$), которая не противоречит нашим данным, хотя и не совпадает по величине. Несоответствие по величине объясняется тем, что в наших экспериментах край поглощения (E_g^*) определялся из SE спектров ДФ по максимальному наклону $\varepsilon_i(E)$ на краю поглощения.

Необходимо заметить, что точка $x=0.6$ на графике получена экстраполяцией нашей зависимости до энергии $E_g=6.0$ эВ, соответствующей AlN ($x=1$), поскольку диапазон измерений для UVISEL эллипсометра равен 1.5-4.8 эВ.

С другой стороны, полученная зависимость будет отражать реальную ситуацию и может служить как для контроля гетероструктур, выращенных в конкретной МЛЭ установке, так и для определения состава пленок.

6.4.2.2. Метод спектральной эллипсометрии для характеристики Ga/ или /N терминированной поверхности Al_xGa_N

Спектральная эллипсометрия позволяет идентифицировать поверхности пленок нитридов $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией, терминированных галлием Ga или азотом N, как, например, показано на Рис. 122 для образцов одного состава, но с разной полярностью поверхности. На Рис. 122 для ε_i изменен масштаб оси энергий фотона, чтобы яснее показать сдвиг края поглощения. Изменения видны не только в положении края поглощения и, что самое неожиданное, в величине ε_1 и ε_2 на энергиях выше ширины запрещенной зоны, т.е. в области сильного поглощения, где дисперсия

этих величин мала. Подобный эффект наблюдался в спектрах катодоллюминесценции в диапазоне энергий 1.5÷4 эВ на гетероструктурах GaN с разной полярностью поверхности в работах Lorenz P., Lebedev V., et al. [285-286] и в [287-289], где обнаружено изменение интенсивности как «желтой полосы», так и на энергиях оптических переходов (Рис. 123).

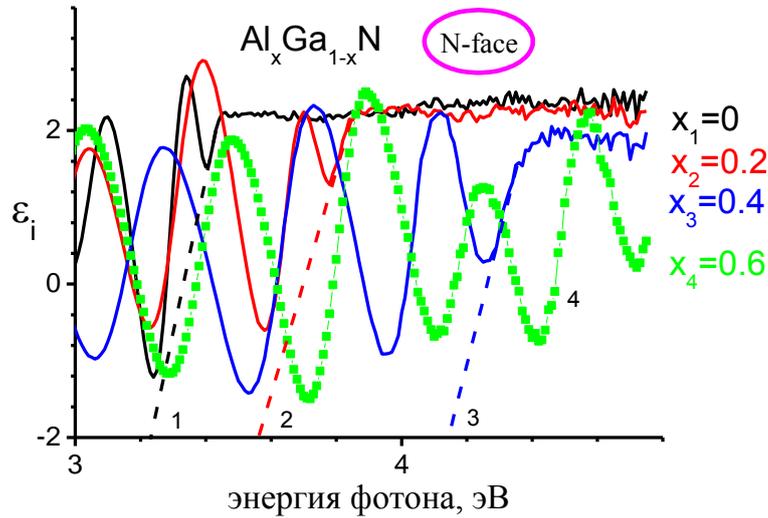


Рис. 120. Сдвиг края поглощения в мнимой части псевдодиэлектрической функции ϵ_1 от состава верхнего слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ гетероструктур, схема которых приведена на Рис. 119.

Наши эксперименты обнаружили зависимость сдвига края поглощения не только от состава, но и от полярности поверхности пленки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. На Рис. 122 показаны эллипсометрические спектры для пленок $\text{Al}_{0.2}\text{GaN}$, приготовленных таким образом, что их поверхность Ga (спектр 2) или N (спектр 1) терминированы. Зависимость сдвига края поглощения от состава ($x=0\div 0.6$) для одной и той же полярности поверхности видна из спектров $\epsilon_i(E)$ на Рис. 120.

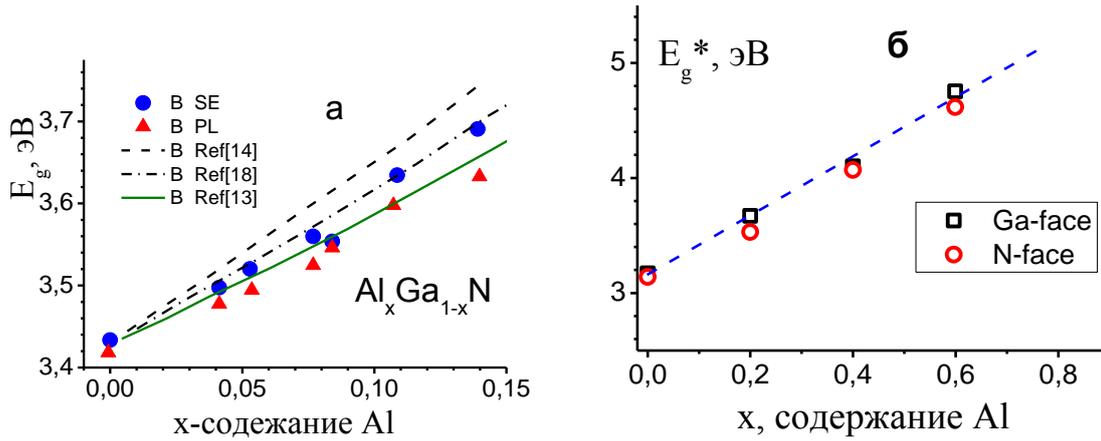


Рис. 121. а) Зависимости $E_g(x)$ ширины запрещенной зоны $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при комнатной температуре, полученные из эллипсометрических спектров (SE) и из положения пика фотолюминесценции (PL), как функции мольного содержания Al. Для сравнения даны значения $E_G(x)$ из работ {Ref. 13, 14, 18 из [282]}; состав $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ менялся в диапазоне $x=0\div 0.15$. б) Изменение энергии края $E_g^*(x)$ поглощения $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, определенное из SE спектров псевдо ДФ структур, выращенных в ИФП СО РАН; состав верхнего слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ гетероструктур менялся в диапазоне $x=0\div 0.6$.

Из спектров диэлектрической функции $\varepsilon(E)$ можно наблюдать за смещением края поглощения в мнимой части ε_i и за изменением величин действительной и мнимой частей диэлектрической функции в области энергий выше края поглощения. Обнаружено, что, во-первых, это изменение зависит от полярности и от состава пленки (от значения $x=0\div 0.6$), также как и край поглощения; а во-вторых, **знак изменения** действительной части ε_r по сравнению с мнимой **обратный**.

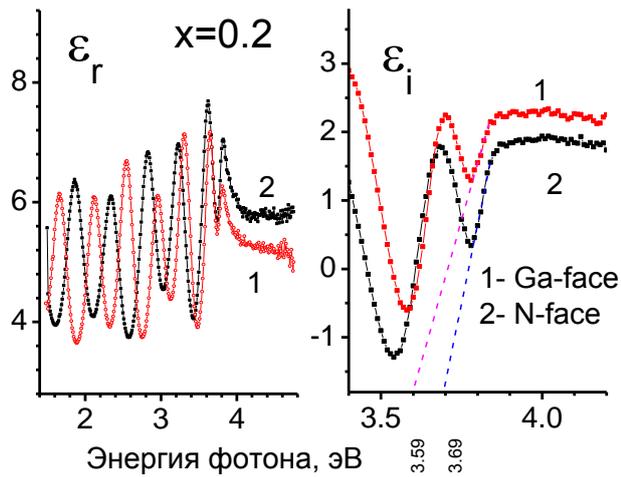


Рис. 122. Сравнение псевдо ДФ гетероструктур (ИФП СО РАН) с различной полярностью поверхности верхнего слоя для $x=0.2$.

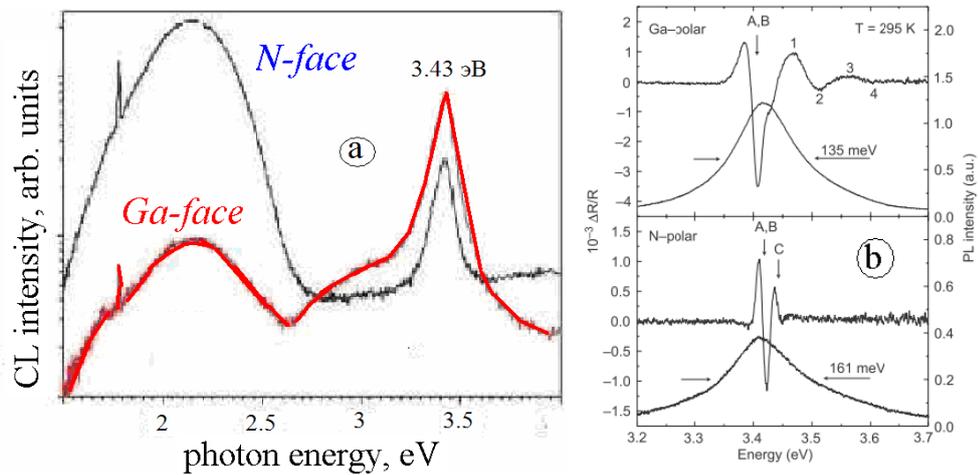


Рис. 123 а) Спектры катодолуминесценции (CL) пленки GaN, поверхность которых N или Ga-терминирована [285-288]; интенсивность CL сильно зависит от полярности поверхности; б) из спектров фотолуминесценции (PL) и фотоотражения (PR) авторы [289] обнаружили, что интегральная интенсивность эмиссионного пика Ga-polar слоя почти в три раза выше, чем N-polar слоя, а полуширина максимума PL (FWHM) уменьшается с 135 до 161 мэВ. Для Ga-polar слоя наблюдался PR резонанс с осцилляциями Франца-Келдыша (ФКО), связанный с сильным поверхностным электрическим полем (215 кВ/см); ФКО не наблюдались в N-polar слое, что указывает на то, что поверхностный барьер в этом слое значительно меньше.

Необходимо заметить, что максимальное изменение $\delta\epsilon_i$ обнаружено на нитриде галлия ($x=0$) и минимальное для нитрида алюминия. Для пленок одного и того же состава, но с различной полярностью поверхности такое необычное изменение спектров может быть объяснено двумя причинами: 1) наличием окисла Ga_2O_3 , который легко образуется на N-polar слое, как было показано в [290] и 2) шероховатостью поверхности GaN, показанной в работах [285, 291]. Подтверждением вышеприведенной интерпретации на Рис. 124а служит сообщение A.J. Ptak et al [290] о том, что концентрация кислорода и концентрация Холловских носителей на Ga-polar поверхности в ~ 10 раз меньше, чем in N-polar поверхности (Рис. 125).

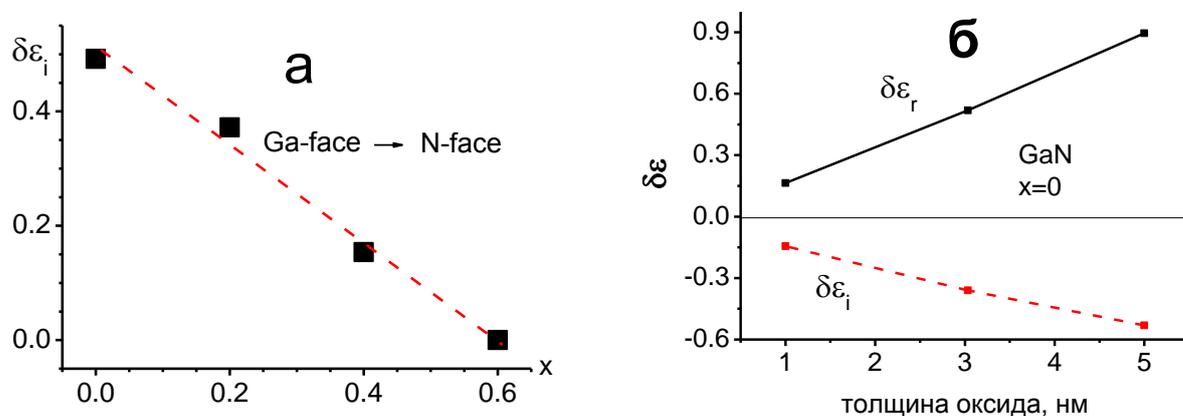


Рис. 124. а) Приращение мнимой части ДФ пленки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в области энергий за краем поглощения, т.е. больших, чем E_g^* , как функция состава пленки и полярности.

б) Интерпретация ~~приращения~~ $\delta\epsilon_i = \delta\epsilon_{i(\text{Ga-face})} - \delta\epsilon_{i(\text{N-face})}$ действительной $\delta\epsilon_r$ и мнимой частей $\delta\epsilon_i$ диэлектрической функции за счет образования окисла Ga_2O_3 на поверхности GaN (в области энергий $E=3.9\div 4.0$ эВ).

Если предположить, что толщина окисла на нитриде галлия ($x=0$) равна ~ 15 Å, а состав окисла точно соответствует Ga_2O_3 , тогда можно получить аналогичные изменения значений $\delta\epsilon_i$ и $\delta\epsilon_r$ за краем поглощения, т.е. при энергиях фотона, чем $\sim 3.9-4.0$ эВ. На Рис. 124б, где расчетные и экспериментальные значения хорошо согласуются между собой и по знаку и по величине.

Другой вариант интерпретации приращения действительной $\delta\epsilon_r$ и мнимой частей $\delta\epsilon_i$ диэлектрической функции может быть получен, если учесть наличие шероховатого слоя Ga-face поверхности, которую обнаружили P. Lorenz et al [285] и M.A. Mastro et al [291], как показано на Рис. 126 а,б. В соответствии с [285] различие оптических свойств GaN с N-face или Ga-face поверхностями может быть объяснено примерно ~ 20 кратным различием значений шероховатости: RMS (Ga-face) = 0.39 нм; RMS (N-face) = 6.7 нм. С другой стороны, в [291] обнаружена примерно двукратная разница тех же величин при отжиге в аммиаке. В любом случае для интерпретации приращения действительной $\delta\epsilon_r$ и мнимой частей $\delta\epsilon_i$ диэлектрической функции в структуру модели необходимо ввести еще один слой: а) пленку оксида или б) ЕМА (аппроксимация эффективной средой) слой для описания шероховатости. Следовательно, и в том и в другом случае при расчетах используется слой, физическая природа которого различна, его наличие приводит к аналогичным результатам.

Выводы к главе 6

○ В одноволной эллипсометрии для описания диэлектрической функции необходимо было знать только пару ее значений (действительную и мнимую части) на одной длине волны, а для спектральных измерений необходимо, как правило, более трех сот таких пар, поэтому ДФ задавалась табличным файлом. Условия синтеза пленки влияют на ее кристаллическую структуру и состав, что, следовательно, приводит существенным изменениям спектрального вида $\epsilon(\lambda)$. Практически невозможно создать библиотеку ДФ *известных и МЛЭ синтезируемых* материалов на все случаи жизни. Проблема была решена путем описания ДФ математически: в виде функции с ограниченным набором параметров (метод параметризации), что позволяет легко модифицировать спектральный вид $\epsilon(\lambda)$ в зависимости от условий синтеза. Аналитическое представление диэлектрического отклика не только удобно, но и полезно для определения состава эпитаксиальных слоев и

управления МЛЭ ростом в режиме реального времени, используя обратную связь. В настоящее время разработаны сложные модели аналитического представления ДФ, учитывающие особенности зонной структуры материала (количество валентных зон ν_1, ν_2, ν_3 и зон проводимости c_1, c_2), классификацию критических точек, вклады от переходов между парами зон ($\nu_1 \rightarrow c_1; \nu_2 \rightarrow c_2; \nu_3 \rightarrow c_1; \nu_1 \rightarrow c_2$), 2D и 3D размерность критических точек. Эти феноменологические модели, такие как **PB** (для параболических зон) и **CPPB** (для критических точек параболических зон), рассматриваются уже не только с точки зрения подгонки формы ДФ, но и их первых трех производных с учетом вклада Франца-Келдыша-Аспнеса (влияние электрического поля на край поглощения).

- Пленки TiO_2 , полученные окислением на воздухе, обладают профилем окисления, другими словами, состав пленки зависит от поперечной координаты z (от толщины слоя), а толщина слоя оксида, в свою очередь, зависит от условий напыления и окисления. Для описания ДФ каждого слоя использовалась математическая **модель эквивалентной пленки** или **сочетание этой модели с методом параметризации**. Из спектральных эллипсометрических спектров для пленок TiO_x , были отмечены следующие изменения образцов за счет дополнительного отжига в течение 18 часов:
 1. существенное уменьшение общей толщины пленки;
 2. увеличение переходного слоя на границе с кремнием почти в два раза во всех случаях;
 3. образование кристаллической фазы (1ox) или их смесей (2ox, 3ox);
 4. изменение состава пленки по глубине слоя;
 5. отличие состав верхнего слоя от любой из четырех известных фаз TiO_2 ;
 6. улучшение качества решения ОЗЭ во всех случаях, т.е. уменьшение конечного значения функционала χ^2 примерно на порядок.

Принимая во внимание высокую температуру и большую длительность отжига, причину уменьшения толщины пленки можно объяснить образованием окислов

с меньшей пористостью и большей упорядоченностью и, следовательно, имеющих большую плотность и меньшую толщину.

Модель эквивалентной пленки имеет важное значение при интерпретации эллипсометрических спектров, позволяя находить состав довольно сложных пленок TiO_x .

Необходимо помнить, что пленки, полученные таким способом, могут быть не изотропными.

- Показана возможность определения спектральной зависимости комплексного показателя преломления $N(E)$ и толщин двух МЛЭ слоев **арсенида галлия *n*-типа**, отличающихся разной степенью легирования. Обнаружено, что в области слабого поглощения от 1.5 до 2.6 эВ можно и без расчетов оценить насколько отличаются или совпадают по свойствам рабочие слои, т.е. оценить **воспроизводимость** структур, что очень важно при изготовлении **транзисторов в гигагерцовом** диапазоне. Для сравнения приведен Рис. 111а, который показывает однородность слоев гетероструктур, выращенных по технологии MOCVD. Видно, что МЛЭ технология обладает лучшей точностью.
- Для пленок, полученных МЛЭ, для количественной оценки качества поверхности AlN был предложен параметр поверхностной морфологии γ_s , и получены **два эмпирических** выражения, связывающих γ_s с измеряемыми поляризационными углами (Ψ и Δ) и с вычисленными оптическими псевдоконстантами. Эти выражения в дальнейшем могут служить основными критериями оценки наличия дефектов, используя спектральную эллипсометрию как экспрессную неразрушающую бесконтактную и очень надежную методику.
- Состав и полярность пленки тройного соединения $Al_xGa_{1-x}N$, выращенного молекулярно-лучевой эпитаксией, можно определить непосредственно из измеренных эллипсометрических спектров без вычислений и моделирования, используя калибровочные кривые $E_g^*(x)$ и $\delta\epsilon_i(x)$ или $\delta\epsilon_r(x)$.

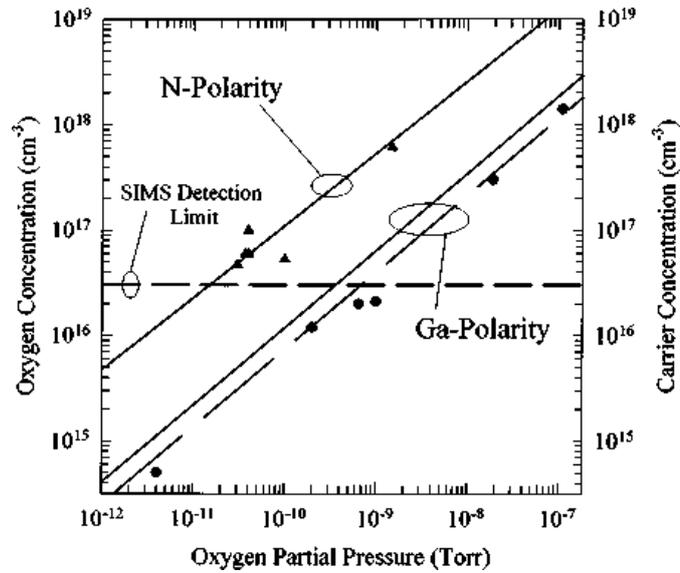


Рис. 125. Концентрация кислорода на поверхности и объемная концентрация носителей сильно зависят от полярности поверхности [290].

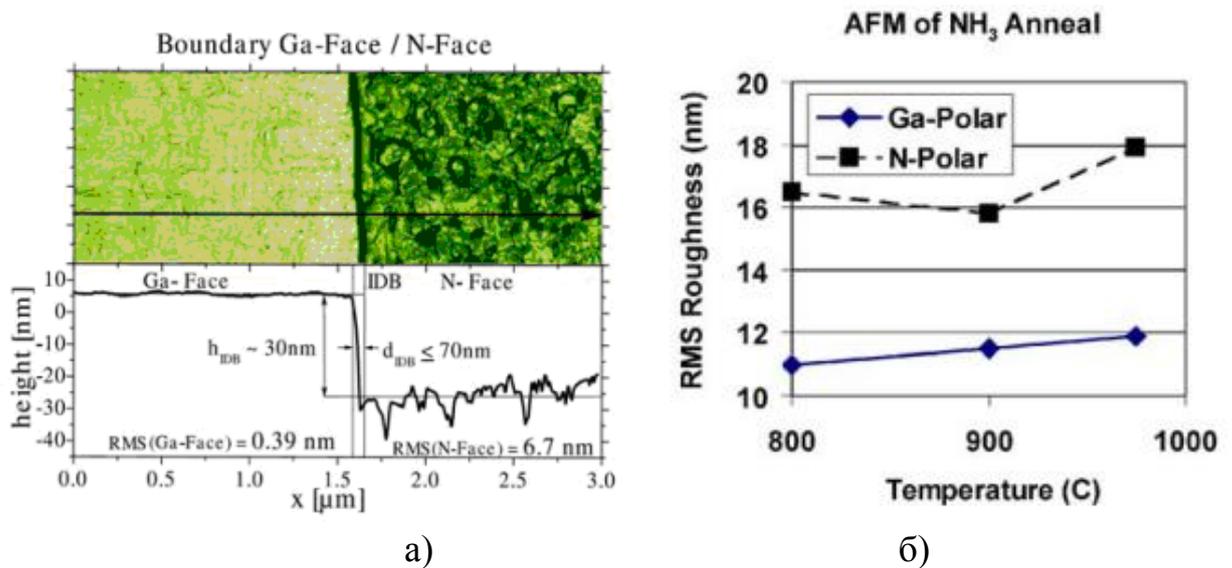


Рис. 126. Наличие и величина поверхностных дефектов (шероховатости) сильно зависит от полярности поверхности, как показано в работах а) [285] и б) [291].

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

На основе полученных результатов были сделаны следующие **общие выводы**:

I. Развита метод эллипсометрии наноразмерных пленок диэлектриков, полупроводников и металлов, основанный на разработке новых принципов измерений, позволяющих существенно увеличить точность и чувствительность метода, суть которых состоит в следующем.

I.1. Разработан универсальный метод эллипсометрических измерений (параметров поглощающих и прозрачных пленок), основанный на аналитическом решении основного уравнения эллипсометрии в форме 3D спирали в $(n-ik-d)$ пространстве параметров пленки. Разработан способ проверки адекватности исследуемой системы и выбранной модели расчета.

I.2. Исследованы фундаментальные ограничения на точность измерения параметров отражающей системы эллипсометрическим методом. Разработан метод повышения точности и чувствительности измерений параметров пленки, использующий статистическую обработку результатов. Показано влияние выбора формы функционала и процедур вычисления (величины шага итерации и критерия момента останова) на точность, независимость, однозначность и устойчивость решения при восстановлении параметров исследуемой системы.

I.3. Разработан метод математического планирования эксперимента на базе матрицы Гесса, которая опосредованно зависит от углов падения φ_0 и числа измерений. Предложена численная характеристика дефекта M_0 одного измерения и его обусловленности, т.е. степени влияния каждого из параметров на точность. Показано, что оценки нескольких параметров имеют разную степень достоверности (разную степень отклонения от точных значений).

I.4. Разработан метод определения однозначности решений в заданной области искомых параметров при фиксированной и известной нормализованной толщине пленки (d/λ) . Предсказано, что число решений определяется числом нулей и полюсов мероморфной функции, полученной из основного уравнения эллипсометрии. Метод полезен на начальных этапах решения конкретных обратных задач эллипсометрии.

II. Разработаны методы эллипсометрии для измерения кинетических параметров окисления наноразмерных структур

II.1. Разработан комбинированный метод взаимодействия поляризованного света с поверхностью пространственно неоднородных наноразмерных структур, сочетающий несколько эллипсометрических методов: метод многоугловой эллипсометрии; метод сшивки двух задач по общему параметру; метод модуляционной эллипсометрии; метод динамических измерений и метод спектральной эллипсометрии. Измерены зависимости роста толщины окисла от

времени окисления $d(\tau)$, зависимость состава неомогенной многофазной пленки окисла по глубине окисла и зависимость комплексного показателя преломления оксидной пленки от толщины окисла d и от температуры окисления $n(d, T^\circ\text{C})$ и $k(d, T^\circ\text{C})$. Выявлен из эллипсометрических измерений механизм образования многофазной пленки окисла переходного металла для разных температур окисления. Обнаружено, что характеристикой содержания двуокиси ванадия в пленке являются крутизна изменения $\delta\Delta/\delta T^\circ\text{C}$ или ширина температурного интервала $\delta T^\circ\text{C}$ скачка эллипсометрического угла Δ при фазовом переходе I рода.

II.2. Разработан метод вспомогательных номограмм, который в сочетании с методом Друде, для металла позволил из кинетических эллипсометрических измерений впервые обнаружить эффекты, а) перестройки поверхности, сопровождающейся «поляризационным шумом», при росте куприта на поверхности меди; б) смены закона роста окисла (параболического на кубический) после перестройки поверхности. Измерены толщины и состав субнаноразмерных (0÷4 нм) пленок куприта.

II.3. Разработан новый метод «номограмм приращений» для повышения точности измерений: оптических констант, законов роста и состава наноразмерных окислов полупроводников [A_3B_5 (GaAs) A_2B_6 (CdTe)]. Исследовано ограничение на точность измерений оптических констант при наличии окислов на поверхности, влияющих на работу прибора. ОЖЭС и РФЭС подтвердили результаты моделирования и расчетов эллипсометрических данных.

II.4. Разработан новый метод спектральной эллипсометрии для измерения параметров пространственно неоднородных полиморфных пленок на базе многослойной модели, в которой оптические свойства каждого слоя описываются сочетанием двух методов: метода эквивалентной пленки (на основе принципа аддитивности) и метода дисперсионной аппроксимации диэлектрической функции (на основе зонной теории твердого тела). Определены для неоднородного по толщине и многофазного High-k диэлектрика TiO_2 (окисла титана) из эллипсометрических спектров а) зависимость состава по глубине окисла (дисперсии диэлектрической функции $\varepsilon(\lambda)$) и б) уменьшение общей толщины окисла при образовании кристаллических фаз.

III. Установлены корреляционные зависимости поляризационных свойств наноразмерных пленок от их состава, гомогенности и морфологии.

III.1. Разработан метод математической обработки экспериментальных измерений поляризованного света, отраженного от шероховатых поверхностей со случайным распределением дефектов. Вычислено влияние каждого из параметров нерегулярного искусственного рельефа на поляризационные характеристики отраженного от нее света. Метод хорошо объясняет и

предсказывает наблюдаемое в эксперименте аномальное поведение эллипсометрических углов $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$ -наличие экстремумов.

III.2. Разработан метод математического моделирования процесса отражения поляризованного света от шероховатой поверхности с учетом поправки Лорентца. Выявлен «концентрационный резонанс» т.е. возникновение поглощения, на порядок превышающего поглощение исходных материалов смеси, из теоретического анализа математической модели шероховатых поверхностей. Определены условия резонанса (показатель преломления $n < 1$ и $k > n$, что возможно для таких металлов, как золото, серебро и медь).

III.3. Разработан метод восстановления неизвестных параметров из эллипсометрических спектров, суть которого состоит в решении двух подзадач: 1) в области слабого и 2) в области сильного поглощения. Определена зависимость дисперсии оптических констант от уровня и типа легирующей примеси слоя GaAs в гетероструктуре.

III.4. Разработан неразрушающий бесконтактный высокочувствительный метод контроля количества дефектов или состава тройных соединений. Найдены из эллипсометрических спектров корреляционные зависимости поляризационных свойств пленок, выращенных молекулярно лучевой эпитаксией: а) от количества поверхностных наноразмерных 3D дефектов и б) края фундаментального поглощения и полярности поверхности пленок тройных соединений $Al_xGa_{1-x}N$ от состава.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Работа выполнена автором в ИФП СО РАН в течение 1979-2013 гг.

Личный вклад автора является основным и заключается: в разработке новых методов эллипсометрических измерений; в исследовании фундаментальных ограничений на точность измерений эллипсометрическим методом; в повышении точности метода; в разработке методов математической обработки экспериментальных результатов и в моделировании процессов отражения поляризованного света от отражающих систем; в постановке задач исследования наноразмерных пленок, в проведении экспериментов по моделированию неоднородной поверхности и в дополнении новыми дисперсионными моделями диэлектрических функций существующего программного обеспечения спектрального эллипсометра UVISEL (Jobin Yvon).

Содержание диссертации отражено в следующих публикациях:

Основные публикации в журналах из списка ВАК:

1. Ланская Т. Г., Любинская Р. И., Свиташева С. Н., Свиташев К. К. Эллипсометрическое исследование термически окисленного ванадия. –// ЖТФ, 1981, **51**, № 9, с. 1920-1926.
2. Ржанов А. В., Свиташева С. Н., Свиташев К. К., Соколов В. К., Ашкерев Ю. В., Осадчев Л. А., Цеснек Л. С. Эллипсометрический метод определения качества обработки поверхности. –// Доклады АН СССР. 1982, т. **267**, № 2, с. 373.
3. Свиташева С.Н., Свиташев К.К., Семенов Е.В., Васильев А.Г. Изменение эллипсометрических параметров в зависимости от механической обработки поверхности.- //Поверхность. Физика, химия, механика, 1983, №12, с.64.
4. Ржанов А. В., Свиташева С. Н., Свиташев К. К. Графический метод интерпретации результатов эллипсометрических измерений на шероховатых поверхностях.-// Доклады Академии Наук СССР,- 1983, **273**, N5, с. 1123-1126.
5. Свиташева С.Н., Любинская Р.И., Свиташев К.К. Исследование процесса формирования пленки естественного окисла на поверхности меди методом эллипсометрии.- //Поверхность. Физика, химия, механика, № 11, 1986, с. 80-85.
6. Брагинский Л. С., Гишинский И. А., Свиташева С.Н. Отражение света шероховатой поверхностью: интерпретация эллипсометрических измерений.- //Доклады Академии Наук СССР, -1987, **293**, №5, с. 1097-1102.
7. Галицын Ю. Г., Петренко И. П., Свиташева С. Н. Исследование кинетики образования и состава окисла на сколотой поверхности GaAs (110).- //Поверхность. Физика, химия, механика, № 11, 1987, с. 51-58.
8. Свиташева С. Н. Точное решение обратной задачи эллипсометрии для поглощающих пленок, –//Доклады Академии Наук СССР, 1991, **318**, № 5, с. 1154-1158.

9. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Часть I, - //Автометрия, 1992, №4, с. 76-81.
10. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Часть II; - /Автометрия, 1992, №4, с. 81-86.
11. Воскобойников Ю. Е., Лантюхова Е. В., Свиташева С. Н. Однозначность, устойчивость и независимость решения обратной задачи эллипсометрии; - //Автометрия, 1994, №4, с. 91-97.
12. Воскобойников Ю. Е., Петухова Е. В. Свиташева С. Н. Эффективный алгоритм решения обратной задачи эллипсометрии при исследовании тонких пленок. - //Автометрия, 1996, №4, с. 110-119.
13. Свиташева С. Н. Особенности решения обратной задачи эллипсометрии для сильно поглощающих пленок.- //Автометрия, 1996, №4, с. 119-126.
14. Gritsenko V. A., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashcheva S. N., and Wong H. Enriching of the Si₃N₄ -thermal oxide interface by excess Silicon in ONO structures. -//Microelectronic Engineering, 1997, **36**, 123.
15. Gritsenko V. A., Morokov Yu.N., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashcheva S. N., and Wong H., Kwok R., Chan R. Characterization of the Silicon Nitride - Thermal Oxide Interface in ONO Structures by ELS Spectroscopy and Ellipsometry.-// Proceedings of the International Conference on Microelectronics, 1997, 1, pp.111-114.
16. Polovinkin V. G., Svitashcheva S. N. The analysis of general ambiguities of the inverse ellipsometric problem. -//Thin Solid Films, 1998, **313-314** , P.128-131
17. Svitashcheva S. N., Kruchinin V. N. Spectral dependence of the complex refractive index shift across the semiconductor-metal transition in thermally- oxidized Vanadium. -//Thin Solid Films, 1998, **313-314**, 319-322.
18. Gritsenko V. A., Petrenko I. P., Svitashcheva S. N., and Wong H. Excess Silicon at Si₃N₄-SiO₂ Interface. -//Appl. Phys. Lett, 1998, **72**, №4, p.462-464.

19. Gritsenko V. A., Morokov Yu. N., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashcheva S. N., Kwok R., Chan R., Wong H. Characterization of the Silicon Nitride - Thermal Oxide Interface in ONO Structures by ELS Spectroscopy and Ellipsometry. - //Microelectronics and Reliability, 1998, **38**. P.745-751.
20. Половинкин В. Г., Свиташева С. Н. Определение числа решений обратной задачи эллипсометрии в заданной области параметров. - //Автометрия, 1999, №4, с. 94-103.
21. Gritsenko V. A., Svitashcheva S. N., Petrenko I. P., Wong Hei, Xu J. B., and Wilson I. H. Study of excess silicon at Si₃N₄ / Thermal SiO₂ Interface using EELS and Ellipsometric Measurements, -// Journal of Electrochemical Society, 1999, **146** (2) 780-785.
22. Badmaeva I.A., Repinskij S.M., Sveshnikova L.L., Khapov Y.I., Kruchinin V.N., Svitashcheva S.N., Tereshchenko O.E., Yanovskij Y.A. Photolysis of Langmuir-Blodgett films containing lead, silver, and copper behenates.-// Journal of Physical Chemistry **A(75)** 2001, pp. 828-833.
23. Sharafutdinov, R., Khme, S., Semenova, O., Svitashcheva, S., Bilyalov, R., Poortmans, J. A new high-rate deposition method for thin film crystalline Si solar cells.-// Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2002, pp. 1178-1181.
24. Nastaushev Yu. V., Prinz V. Ya., Svitashcheva S.N. A technique for fabrication Au/Ti micro- and nanotubes.-//Nanotechnology, 2005, **16**, p. 908-912.
25. Naumova O. V., Nastaushev Y.V., Svitashcheva S. N., Sokolov L. V., Werner Peter, Zakharov N. D., Gavrilova T. A., Dultsev F. N., Aseev A. L. Properties of Silicon Nanowhiskers Grown by Molecular-Beam Epitaxy. -AIP Conference Proceeding, 2007, **893**, p. 793-740.
26. Свиташева С. Н. Определение оптических констант МЛЭ пленок GaAs n-типа в спектральном диапазоне 1.5-4.75 эВ.-// Автометрия, 2007, **43**, № 6, стр. 108-115,.

27. Mansurov V.G., Nikitin A.Yu., Galitsyn Yu.G., Svtasheva S. N., Zhuravlev K.S., Osvath Z., Dobos L., Horvath Z.E., Pecz B. AlN growth on sapphire substrate by ammonia MBE.-//Journal of Crystal Growth , 2007, **300** , P.145–150.
28. Naumova O. V., Nastaushev Yu. V., Svtasheva S. N., Sokolov L. V., Zakharov N. D., Werner P., Gavrilova T. A., Dultsev F. N. and Aseev A. L. MBE-grown Si whisker structures: morphological, optical and electrical properties. - //Nanotechnology -2008, **19**, 225708, P. 1-5.
29. Svtasheva S. N., Gritsenko V. A., Kolesov B. A. Optical properties of TiO₂ films made by air oxidation of Ti.-// Phys. Status Solidi (c) 2008, **5**, №5, p. 1101–1104; /DOI 10.1002/pssc.200777731.
30. Svtasheva S. N., Mansurov V. G., Zhuravlev K. S., Nikitin A. Yu., Sheglov D. V., and Pecz B. Correlation between optical properties of MBE films of AlN and morphology of their surface.- //Phys. Status Solidi (a) -2008, **205**, № 4, P.941–944.
31. Svtasheva S.N. Optical Constants of MBE n-type GaAs Films doped by Si or Te. -// JEMAA, Vol.2, No. 6, 2010, p.357-361 DOI: 10.4236/jemaa.2010.26046.
32. Svtasheva S.N. Random Phase Mask as Model of rough surface. Part I Theory- //Thin Solid Films v. **519** 2011, p.2718-2721; DOI information: 10.1016/j.tsf.2010.11.070. Svtasheva S.N. Random Phase Mask as Model of rough surface. Part II Experiment-// Thin Solid Films v. **519** 2011, p.2722-2724; DOI information: 10.1016/j.tsf.2010.11.067.
34. Dultsev F.N., Svtasheva S.N., Nastaushev Yu.V., Aseev A.L. Ellipsometric investigation of the mechanism of the formation of titanium oxynitride nanolayers.-//Thin Solid Films, **519**, 2011, p.6344-6348; Doi: 10.1016/j.tsf.2011.04.034.
35. Свиташева С.Н., Поздняков Г.А., Щеглов Д.В., Настаушев Ю.В. Оптические свойства и морфология алмазоподобных углеродных пленок, полученных в сверхзвуковом потоке плазмы.-// Автометрия 2011, т.**47**, №5 стр.59-66.

36. Свиташева С.Н., Журавлев К.С. Зависимости оптических характеристик пленок $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ от состава и полярности поверхности-//Автометрия 2011, т.47, №5 стр.82-87.
37. Svitashева S. N. Optimization of maximum VO_2 content in polymorphous oxides of vanadium-// 2nd International Conference on OEEM 2012, China, Shanghai, p. 127.
38. Svitashева S. N., Pozdnyakov G. A. Monitoring of technological conditions for preparing DLC films in Supersonic flow of a hydrocarbonic plasma-// 2nd International Conference on OEEM 2012, China, Shanghai, p. 95.
39. Свиташева С. Н., Поздняков Г. А., Настаушев Ю.В. Свойства алмазоподобных пленок, выращенных в сверхзвуковом потоке углеводородной плазмы.-// Proceedings of The First International Conference “Development of nanotechnologies”, p. 124-126, 2012.
40. Svitashева S. N., Gilinsky A. M. Influence of doping level on shift of the absorption edge of gallium nitride films (Burstein-Moss effect).-// Appl. Surf. Sci., (2013), Vol. 281, p.109-112; <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.02.094>.
41. Svitashева S. N. Experimental Study of Polarization Properties of Rough Surface.-// Electrical and Electronic Engineering, Vol. 2, No. 6, p. ,2012.
42. Svitashева S. N. Optimization of maximum VO_2 content in polymorphous oxides of vanadium.-// Key Engineering Materials, Vol. 538, p. 113-116, 2013.
43. Svitashева S.N., Pozdnyakov G. A. Monitoring of technological conditions for preparing DLC films in supersonic flow of a hydrocarbonic plasma. // Key Engineering Materials, Vol. 538, p. 281-284, 2013.

Апробация работы. Материалы диссертации в виде 36 докладов обсуждались на 6 Российских и 17 Международных научных конференциях: 2^{ая} Всесоюзная конференция “Эллипсометрия - метод исследования физико-химических процессов на поверхности твердых тел”, (Новосибирск, 1981), 3 доклада; Тезисы докладов Всесоюзной конференции «Физика окисных пленок», 1982, Петрозаводск, с. 17; 3^{ья} Всесоюзная конференция “Эллипсометрия: теория, методы, приложения”, (Новосибирск, 9-11 июля 1985), 2 доклада; 4^{ая} Всесоюзная конференция “Эллипсометрия: теория,

методы, приложения”, (Новосибирск, 18-21 июля 1989), 2 доклада; 10-я Байкальская школа-семинар «Методы оптимизации и их приложения», (Иркутск, 14-19 августа 1995), 1 доклад; The 2nd International Conference on Spectroscopic Ellipsometry- ICSE-2, (Charleston, SC, USA, 12-15 May 1997), 2 Abstracts: P2.15 and P4.12; Proceedings of the 21st International Conference on Microelectronics, Yugoslavia, 15-17 September, Vol. 1, p.111-114, 1997; Infos’97- Insulation Films on Semiconductors, June 11-14, Stenungsund, Sweden, P131997; The 29th IEEE Photovoltaic Specialists Conference.-(20-24 May 2002, New Orleans, USA), Proceedings, p. 1178-1181; Кремний-2002, (Новосибирск, 9-12 июля 2002 г.) ”Совещание по росту кристаллов, пленок и дефектам структуры кремния” с. 154; The 6th International Conference on Nitride Semiconductors, (28.08-2.09.2005, Bremen, Germany), Abstract Th-P-072; The 14th International Symposium on Nanostructures Physics and Technology, (26-30.06.2006, St. Petersburg, Russia), Abstract, p. 82-83; The 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, (24-28 July, 2006, Vienna, Austria) Abstract FrM2j.31; Symposium on Growth of III-Nitrides, (Linkoping, Sweden, 2006) Abstract; The 4th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry- ICSE-4, (Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007), 3 Abstracts: p. 28, p.81, p. 290; MRS spring meeting 2008, (San Francisco CA, USA), Abstract H4.42; The 5th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry- ICSE-5, (Albany NY USA, 23-28 May, 2010) 5 Abstracts; The 18th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology” (St. Petersburg, Russia, June 21-26, 2010), 1 Abstract; SCORPH-2010 VIII Иссык-Кульская международная конференция по инновационным материалам 1 Abstract; 7th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN10), oral presentation, 11-14 July 2010, Ouranopolis Halkidiki, Greece, p.58; 2 Posters on 2nd International Conference on OEEM 2012, China, Shanghai, p. 95 and p. 127;. oral presentation on E-MRS 2012 FALL MEETING, September 17-21, Poland, Program K-XI 3; oral presentation on The First International Conference “Development of nanotechnologies” Barnaul, 2012, Proceedings p. 124-126.

В заключение автор считает своим долгом выразить искреннюю благодарность научному консультанту доктору физико-математических наук, академику РАН, профессору А. В. Чаплику и доктору физико-математических наук, члену-корреспонденту РАН, профессору А. В. Двуреченскому за ценные и полезные консультации и замечания при оформлении работы.

Автор выражает искреннюю и глубокую признательность академику РАН А.В. Ржанову и члену-корреспонденту РАН К.К. Свиташеву за поддержку в проведении работы в целом, обсуждение полученных результатов и ценные замечания при оформлении публикаций.

Персональную благодарность автор выражает всем соавторам за плодотворное сотрудничество, прежде всего, академику РАН А.Л. Асееву и своим соавторам, в том числе, д.ф.-м.н., академику РАЕН Ю.Е. Воскобойникову, д.ф.-м.н. В.А. Гриценко, д.ф.-м.н. В.Я. Принцу, д.ф.-м.н. К.С. Журавлеву, д.х.н. Ю. Г Галицыну, к.ф.-м.н. Л.В. Соколову, к.ф.-м.н. В.Г. Мансурову, к.ф.-м.н. В.Г. Половинкину, к.х.н. В.Н. Кручинину, к.ф.-м.н. Ю.В. Настаушеву, к.ф.-м.н. Д.В. Щеглову, к.ф.-м.н. Л.С. Брагинскому, И.С. Солдатенкову и программистам ЭВМ Р.И. Любинской и И.И. Воробьевой. Автор признателен д.ф.-м.н., профессору О.П. Пчелякову за внимание и ценные рекомендации при подготовке к защите. Безусловно, автор благодарен всем сотрудникам, без квалифицированной и добросовестной помощи которых, не могла быть выполнена эта работа.

Список литературы

1. Эллипсометрия. Библиографический указатель отечественной и иностранной литературы за 1950-1976 г.г., (879 ссылок), Новосибирск, ИФП СО РАН СССР, 1977.
2. Эллипсометрия. Аннотированный библиографический указатель отечественной и иностранной литературы за 1975-1979 г.г., (648 ссылок), Новосибирск, ИФП СО РАН СССР, 1985.
3. Эллипсометрия. Аннотированный библиографический указатель отечественной и иностранной литературы за 1980-1984 г.г., Часть 1, (461 ссылка): Часть 2, (839 ссылок), Новосибирск, ИФП СО РАН СССР, 1985.
4. Эллипсометрия. Аннотированный библиографический указатель отечественной и иностранной литературы за 1985-1989 г.г., (746 ссылок), Новосибирск, ИФП СО РАН СССР, 1989.
5. Ellipsometry in the Measurement of Surface and Thin Films. –The 1st Symposium Proceedings, Washington, 1963, ed. by Passaglia E., Stromberg R.R., and Kruger J.; National Bureau of Standards, Misc. Publ., vol. **256**, (U.S. Govn't. Printing Office, Washington, 1964).
6. Recent Developments in Ellipsometry.- The 2nd Symposium Proceedings, Nebraska, 1968, ed. by Bashara N.M., Buckman A.B., Hall A.C.; Surf. Sci., 1969, vol. **16**, 452 p.p.
7. Ellipsometry. – Proceedings of the third International conference on ellipsometry, Nebraska, 1975, ed. by Bashara N.M., Azzam R.M.A.; Surf. Sci., vol. **56**, 1976.
8. Proceedings of the fourth International conference on ellipsometry, Berkley, USA, 1979, ed. by Muller R.H., Azzam R.M.A., and Aspnes D.E.; Surf. Sci., vol. **96**, 1980.
9. Proceedings of the 1st International conference on Spectroscopic ellipsometry, Paris, 1993, ed. by Boccara A.C., Pickering C., Rivory J.; Thin Solid Films, v. **233-234**, 1993.

10. Proceedings of the Second International conference on Spectroscopic ellipsometry, Charleston, USA, 1997, ed. by Collins R.W., Aspnes D.E., Irene E.A.; Thin Solid Films, v. **313 -314**, 1998.
11. Proceedings of the Third International conference on Spectroscopic ellipsometry, Vienne, Austria, 2003; Thin Solid Films v. **455-456**, 2004.
12. Proceedings of the 4th International conference on Spectroscopic ellipsometry (ICSE4), Stockholm, Sweden, 2007, ed by Hans Arwin, Uwe Beck, and Mathias Schubert; Physica Status Solidi (a) **205**, No.4, 709-948, (2008) and Physica Status Solidi (c) **5**, No. 5, 1003-1442, (2008).
13. “Современные проблемы эллипсометрии”, - труды 1^{ой} Всесоюзной конференции по эллипсометрии. /под ред. Ржанова А.В. – Новосибирск, «Наука», 1980, с. 192.
14. “Эллипсометрия - метод исследования физико-химических процессов на поверхности твердых тел”,- труды 2^{ой} Всесоюзной конференции по эллипсометрии. /под ред. Ржанова А.В. – Новосибирск, «Наука», 1983, с. 180.
15. “Эллипсометрия: теория, методы, приложения”, -труды 3^{ей} Всесоюзной конференции по эллипсометрии /под ред. Ржанова А.В. и Ильиной Л.А. – Новосибирск, «Наука», 1987, с. 192; и “Эллипсометрия в науке и технике”, - труды 3^{ей} Всесоюзной конференции по эллипсометрии /под ред. Свиташева К.К. и Мардежова А.С. –Новосибирск, ИФП, АН СССР, 1987, с. 205.
16. “Эллипсометрия в науке и технике”, вып. 2 -труды 4^{ой} Всесоюзной конференции по эллипсометрии /под ред. Свиташева К.К. и Мардежова А.С. –Новосибирск, ИФП, АН СССР, 1990, с. 189.
17. Ржанов А. В., Свиташев К.К., Семенов А.И., Семенов Л.В., Соколов В.К. Основы эллипсометрии.- под ред. Ржанова А.В., Новосибирск, "Наука", 1979, с.419.
18. Azzam R.M.A., Bashara N.M. Ellipsometry and Polarized light.- North-Holland, 1977, p. 529.

19. Горшков М.М. Эллипсометрия. – Москва, «Советское Радио», 1974, с. 200.
20. Aspnes D.E. Spectroscopic Ellipsometry of Solids. –chapter 15 in the book “Optical properties of Solids and new Developments”, ed. by Seraphin B.O.; North-Holland, 1976, p. 800-846.
21. Shurcliff W.A. Polarized Light. –Harvard University, Cambridge, Massachusetts, 1962 г.; имеется перевод: Шерклифф У. Поляризованный свет. –«Мир», 1965.
22. Резвый Р.Р. Эллипсометрия в микроэлектронике. -Москва, «Радио и связь», 1983, с. 120.
23. Конев В.А., Кулешов Е.М., Пунько Н. Радиоволновая эллипсометрия., под ред. Ковалева И.С. –Минск, «Наука и техника», 1985., с.104.
24. Rzhанov A.V., Svitashев K.K. Ellipsometric techniques to study surfaces and thin films. –// Advances in Electronics and Electron Physics, 1979, v. **49**, p. 1-84.
25. Compain E., Drevillon B., Huc J., Parey J.Y., Bouree J.E. Complete Mueller matrix measurement with a single high frequency modulation.- // Thin Solid Films, **313-314**, 1998, p. 47-52.
26. Azzam R.M.A., El-Saba A.M., Abushagur M.A.G. Spectrophotopolarimeter based on multiple reflections in a coated dielectric slab. - // Thin Solid Films, **313-314**, 1998, p. 53-57.
27. Yamamoto M., Furudate M. Ellipsometry in the extreme ultraviolet multilayer polarizers. -/ Thin Solid Films, **313-314**, 1998, p. 751-755.
28. Foldina M., De Martino A., Garcia-Caurel E., Ossikovski R., Bertin F., Hazart J., Postava K. and Drévillon. Monitoring critical dimensions of bidimensional gratings by spectroscopic ellipsometry and Mueller polarimetry.-// phys. stat. sol. (a) **205**, 806-809 (2008).
29. Ossikovski R., Garcia Caurel E., and De Martino A. Product decompositions of experimentally determined non depolarizing Mueller matrices -// phys. stat. sol. (c) **5**, No. 5, 1059-1063 (2008).

30. Ladstein J., Stabo-Eeg F., Garcia Caurel E., and Kildemo M. Fast near-infra-red spectroscopic Mueller matrix ellipsometer based on ferroelectric liquid crystal retarders -// *phys. stat. sol. (c)* **5**, No. 5, 1097-1100 (2008).
31. Ben Hatit S., Foldina M., De Martino A., and Drévilion. Angle-resolved Mueller polarimeter using a microscope objective. // *phys. stat. sol. (a)* **205**, 743-747 (2008).
32. Fukarek W., Kaschny J. R. Cavities in helium implanted and annealed silicon characterized by spectroscopic ellipsometry // *Journal of Applied Physics*, v.**86**, number 8, p. 4160-4165, 1999.
33. Archer R. J., Gobeli G. W. Measurement of oxygen adsorption on Silicon by ellipsometry.- // *J. Phys. Chem. Solids*, **26**, 1965, p. 343.
34. Беринг П.Х. Теория и методы расчета оптических свойств тонких пленок.- §2 в книге: «Физика тонких пленок», М., «Мир», 1967, с. 91-151.
35. Розенберг Г.В. Оптика тонкослойных покрытий. Физматгиз, 1958, с. 570.
36. Gerrard A. and Burch J.M. Introduction to Matrix methods in optics. Dover Publications, 1994, p. 355.
37. Scandone F., Ballerini L. Theorie de transmission et de la reflexion dans les system de couches minces multiples. // *Nuovo Cimento*, 1946, v. **3**, p.81.
38. Abeles F. Recherches sur la propagation des ondes electromagnetiques sinusoidal dans les milieueux stratifies. // *Ann Phys.*, 1950, v. **5**, p. 596.
39. Abeles F. Optical properties of thin absorbing films. // *J. Opt. Soc. Am.*, 1957, v. **47**, No. 6, p. 473.
40. Jones R.C. A new calculus for the treatment of optical system. 1. Description and discussion of the calculus.-// *J. Opt. Soc., Am.*, 1941, v. **31**, No. 7, p. 488. 2. Proof of the three general equivalence theorems.- // *J. Opt. Soc., Am.*, 1941, v. **31**, No. 7, p. 493. 3. The sohneke theory of optical activity.-// *J. Opt. Soc., Am.*, 1941, v. **31**, No. 7, p. 500.
41. Hauge P. S. Mueller matrix ellipsometry with imperfect compensators. -// *J. Opt. Soc. Am.* **68**, 1519-1528 (1978).

42. Priebe J. R. Operational Form of the Mueller Matrices. -// J. Opt. Soc. Am., **59**, issue 2, pp. 176-780 (1969).
43. Archer O., Drevillion B. A reflectance anisotropy spectrometry for real-time measurements. -// Rev. Sci. Instrum., **63**, No. 11, 1992, p. 5332-5339.
44. McCrackin F. L., Colson J. P. Computational techniques for the use of the exact Drude equations in reflection problems. -in ref. [5], p. 61.
45. Winterbottom A. B. Optical studies of metal surface. – The Royal Norwegian Scientific Society Report, 1955, No. 1, published by Bruns F., Trondheim, Norway.
46. Azzam R.M.A., Zaghloul A.-R. M., and Bashara N.M. Ellipsometric function of a film-substrate system: applications to the design of reflection type optical devices and ellipsometry. -// J. Opt. Soc. Am., 1975, **65**, No. 3, p. 252-260.
47. Azzam R.M.A., Zaghloul A.-R. M., and Bashara N.M. Design of film-substrate single reflection linear partial polarizers. // -J. Opt. Soc. Am., 1975, **65**, No. 12, p. 1472-1474.
48. Свиташева С. Н. Точное решение обратной задачи эллипсометрии для поглощающих пленок, -// Доклады Академии Наук СССР, т. **318**, № 5, 1991, с. 1154-1158.
49. Archer R. J. Determination of the properties of films on Silicon by the method of ellipsometry. -// J. Opt. Soc. Am., 1962, **52**, No. 9, p. 970.
50. Saxena A. N. Changes in the phase and amplitude of polarized light reflected from a film-covered surface and their relations with thickness.-// J. Opt. Soc. Am., 1965, **12**, No. 2, p. 226.
51. Дагман Э.Е. Об одном подходе к решению обратной задачи эллипсометрии. -// Поверхность. Физика, химия, механика, 1984, № 7, с. 30-35.
52. Свиташева С. Н. -Особенности решения обратной задачи эллипсометрии для сильно поглощающих пленок.-// Автометрия, N4, 1996, с. 119-126;

53. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. -Точность восстановления параметров и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Часть I, -// Автометрия, N4, 1992, с. 76-81;
54. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров и обусловленность обратной задачи эллипсометрии.- Часть II; //Автометрия, N4, 1992, с. 81-86.
55. Воскобойников Ю. Е., Лантюхова Е. В., Свиташева С. Н. Однозначность, устойчивость и независимость решения обратной задачи эллипсометрии; -// Автометрия, N4, 1994, с. 91-97.
56. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н., Петухова Е. В. Вариационные подходы к решению обратных задач эллипсометрии. // Международная 10-я школа-семинар “Методы оптимизации и их приложения”, Иркутск, 1995, с. 250-252.
57. Ржанов А. В., Свиташева С. Н., Свиташев К. К. Графический метод интерпретации результатов эллипсометрических измерений на шероховатых поверхностях.-// Доклады Академии Наук СССР,- 1983, т. **273**, N5, с. 1123-1126.
58. Garnett J.C.M. Colors in metal glasses, in metallic films, and in metallic solutions. -// Phil. Trans. Roy. Soc., A, 1906, v.**205**, p.237.
59. Bruggeman D.A.G. Von Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen.-// Annalen der Physik., 1935, 5 Folge, Band 24, s.636.
60. Archer R.J. Optical measurements of film growth on Si and Ge surface in room air. -// J. of Electrochem. Soc., **104**, 619, 1957.
61. Zaininger K.H., Revecz A. G. Ellipsometry- a valuable tool in surface research. – “RCA review”, 1964, p. 85.
62. Zaininger K.H., Revecz A. G. Ellipsometric investigations of oxide on GaAs.-// J. de Physique, **25**, 1964, p. 208.
63. Свиташева С.Н., Любинская Р. И. Эффективная среда как модель шероховатой поверхности. -// Материалы III Всесоюзной конференции по

- эллипсометрии в книге: " Эллипсометрия: теория, методы, приложения ", Новосибирск, Наука, 1987, с. 18-24.
64. Девятова С. Ф., Свиташева С. Н., Ерко́в В. Г., Свиташев К. К. Влияние высокотемпературных отжигов на оптические свойства поликристаллического кремния.-// Тезисы докладов конференций. Материалы, серия 6, вып. 1 (208), Москва, ЦНИИ Электроника, 1984, с. 22-24.
65. Свиташева С. Н., Девятова С. Ф., Ерко́в В. Г., Любинская Р. И. Оптические константы и кинетика осаждения из газовой фазы пленок поликристаллического кремния; -// Труды III Всесоюзной конференции «Эллипсометрия: теория, методы, приложения», в книге: " Эллипсометрия в науке и технике"- ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1987, с. 92-97.
66. Аульченко Н. А., Гриценко В. А., Меерсон Е.Е., Назаров Н. И., Романов Н. А., Свиташева С. Н., Фомин Б. И. Контактные явления в МНОП-структурах. -// Препринт N16 -87; Институт Физики Полупроводников, Новосибирск, 1987, с. 45.
67. Бурыкин И.Г., Воробьева Л.П., Грушецкий В.В., Дагман Э.Е., Любинская Р.И., Сапрыкина Г.А., Свиташев К.К., Семенов А.И., Семенов Л.В. Алгоритмы и программы для численного решения некоторых задач эллипсометрии -// Новосибирск, "Наука", 1980 с.192.
68. Azzam R. M. A. Analytical determination of the complex dielectric function of an absorbing medium from two angles of incidence of minimum parallel reflectance . -// J. Opt. Soc. Am., **6**, No 8, 1989, p. 1213.
69. Zhang R., Luo J., Chen M. A method for multiple angle of incidence ellipsometric analysis in determination of double-layer thin film parameters.-// Acta Opt. Sin., **9**, No 1, 1989, p. 75.
70. Дагман Э. Е. Полное решение обратной задачи эллипсометрии для однослойной системы при вариации толщины и угла падения света. -// Оптика и спектроскопия, **65**, № 5, 1988, с. 1150-1155.

71. Ward L. The accuracies of photometric, polarimetric and ellipsometric methods for the optical constants of thin films.-// Opt. and Laser Technol., **17**, N5, 1985, p. 263.
72. Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization -//Comp. J., **7**, 1965, p. 308.
73. Банди Б. Методы оптимизации. -// М.: Радио и связь, 1988.
74. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М., Наука, 1973.
75. Воскобойников Ю. Е., Преображенский Н. Г., Седельников А. И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. -// Новосибирск: Наука, 1984.
76. Воскобойников Ю. Е. Выбор размерности функциональных приближений экспериментальных данных. -// Автометрия, 1985, № 4, с. 26-32.
77. Тихонов А. П., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач.-// М.: Наука, 1983.
78. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений.-// М: Мир, 1980.
79. Бронников А. В., Воскобойников Ю. Е. Комбинированные алгоритмы нелинейной фильтрации зашумленных сигналов и изображений -// Автометрия.- 1990.-№1, с. 21-26.
80. Бард Е. Нелинейное оценивание параметров.-/ М.: Статистика, 1979.
81. Фихтенгольц Г. М. Курс дифференциального и интегрального исчисления, Т.1.-// М., Наука, 1966.
82. Воскобойников Ю. Е., Петухова Е. В. Свиташева С. Н. Эффективный алгоритм решения обратной задачи эллипсометрии при исследовании тонких пленок; //-Автометрия, N4, 1996, с. 110-119.
83. Voskoboinikov Yu. E., Vtyurin K. A., and Litasov V. A. A descriptive algorithm for restoring input signal of optical system.-// Avtometriya, 2005, N 3, v. **41**, p. 3-9; Voskoboinikov Yu. E. Accuracy characteristics and synthesis of recurrent signal restoration algorithms.-// Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2001. No. 2. P. 49-58.

84. Базара М., Шетти К. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. // М: Мир, 1982.
85. Воскобойников Ю. Е. Эффективный алгоритм решения плохо обусловленных систем уравнений при интерпретации экспериментальных данных -// Автометрия, 1988, № 5, с. 104-109.
86. Van der Sluis. Stability of solution of linear algebraic systems // Numerische. Math., 1970. **14**. p. 246.
87. Воскобойников Ю. Е. Оценивание оптимального параметра регуляризующих алгоритмов восстановления изображений -// Автометрия, 1995, № 3, с. 68-77.
88. Воскобойников Ю. Е. Решение обратных измерительных задач с заданными точностными характеристиками -// Автометрия. 1988. № 2. с. 71.
89. Половинкин В. Г., Свиташева С. Н. Определение числа решений обратной задачи эллипсометрии в заданной области параметров.- // Автометрия, 1999, с. 94-103;
90. Kamiya I., Aspnes D. E., Tanaka H., Florez L. T., Harbison J. P., Bhat A. Surface science at atmospheric pressure: reconstructions on (001) GaAs in organometallic chemical vapor deposition -// Phys. Rev. Lett., 1992, **68**, No 5, p. 627-630.
91. Martensson J., Arwin H. Interpretation of spectroscopic ellipsometry data on protein layers on gold including substrate-layer interaction -// Langmuir. 1995. **11**, N3. P. 963.
92. Polovinkin V. G., Svitashева S. N. The analysis of general ambiguities of the inverse ellipsometric problem //Thin Solid Films. 1998. **313-314**. P. 128.
93. Urban III F. K. Ellipsometry algorithm for absorbing films // Appl. Opt. 1993. **32**, N 13. P. 2339.
94. Urban III F. K., Comfort J. C. Numerical ellipsometry: enhancement of new algorithm for real-time, in situ film growth monitoring //Thin Solid Films. 1994. **253**. P. 262.

95. Comfort J. C., Urban III F.K. Numerical techniques useful in the practice of ellipsometry // *Thin Solid Films*. 1995, **270**, P. 78.
96. Barton D., Comfort J. C., Urban III F. K. Numerical ellipsometry: Real-time solution using mapping onto the complex index plane // *J. Vac. Sci. Technol.* 1996, **A 14** (3), P. 786.
97. Lekner J. Inversion of reflection ellipsometric data -// *Appl. Opt.* 1994. **33**, N 22. P. 5159.
98. Svitashcheva S. N., Kruchinin V. N. Spectral dependence of the complex refractive index shift across the semiconductor-metal transition in thermally- oxidized Vanadium. -// ICSE-2, Charleston, SC, USA, 12-15 May 1997, P2.15.
99. Svitashcheva S. N., Kruchinin V. N. Spectral dependence of the complex refractive index shift across the semiconductor-metal transition in thermally- oxidized Vanadium.- // *Thin solid films*, **313-314** (1998) 319-322.
100. Шишаков П. А., Андреева В. В., Андрущенко И. К. Строение и механизм образования окисных пленок на металлах. -// М.: Изд-во АН СССР, 1959.
101. Гурьянов А. А., Теруков Е. И. Оптические свойства окисленного на воздухе ванадия.- // *ЖТФ*, 1980, т. 50, № 4, с. 892-895.
102. Frantsuzov A. A., Makrushin N. I. Temperature dependence of oxidation rate in clean Ge (111) - // *Surf. Sci.*, 1973, V. **40**, P. 320-342.
103. Lefebvre P. R., Zhao C., Irene E. A. An in situ and ex situ ellipsometry comparison of interfaces of Si and GaAs resulting from thermal and plasma oxidation. -// *Thin solid films*, **313-314** (1998) 454-458.
104. Habraken F. H. P. M., Gijzeman O. L. G., Bootsma G. A. Ellipsometry of clean surfaces, submonolayers and monolayer film. -// *Surf. Sci.*, 1980, V. **96**, P. 482-507.
105. Ланская Т. Г., Любинская Р. И., Свиташева С. Н., Свиташев К. К. Эллипсометрическое исследование термически окисленного ванадия. -// *ЖТФ*. - 1981.- Т. **51**, № 9,- с. 1920-1926.

106. Свиташева С. П. Свойства пленок термически окисленного ванадия. -// Тез. докл. Всесоюзной конференции «Физика окисных пленок», 1982, Петрозаводск, с. 17.
107. Свиташева С. Н., Рудая Н. С. Исследование кинетики образования тонких окисных пленок методом эллипсометрии; в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", - материалы III Всесоюзной конференции : "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, Наука, 1987, с. 167-171.
108. Свиташева С.Н., Любинская Р.И., Свиташев К.К. Исследование процесса формирования пленки естественного окисла на поверхности меди методом эллипсометрии; -// Поверхность. Физика, химия, механика, № 11, 1986, с. 80-85.
109. Галицын Ю. Г., Петренко И. П., Свиташева С. Н. Исследование кинетики образования и состава окисла на сколотой поверхности GaAs (110);- // Поверхность. Физика, химия, механика, № 11, 1987, с. 51-58.
110. Аникеева Н. А., Курдина Т. И., Свиташева С. Н. Свойства естественного окисла теллурида кадмия и его влияние на точность определения оптических параметров; в книге: " Эллипсометрия в науке и технике» вып.2, -материалы IV всесоюзной конференции «Эллипсометрия: теория, методы, приложения», Новосибирск, 1990, с. 60-67.
111. Gritsenko V. A., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashева S. N., and Wong H. Enriching of the Si₃N₄ -thermal oxide interface by excess Silicon in ONO structures- // Infos'97-Insulation Films on Semiconductors, June 11-14, 1997, Stenungsund, Sweden, P13.
112. Gritsenko V. A., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashева S. N., and Wong H. Enriching of the Si₃N₄ -thermal oxide interface by excess Silicon in ONO structures -// Microelectronic Engineering, **36** (1997) 123-124.
113. Gritsenko V. A., Morokov Yu. N., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashева S. N., Wong H., Kwok R., and Chan R. Characterization of the Silicon Nitride -

- Thermal Oxide Interface in ONO Structures by ELS, XPS, Ellipsometry, and Numerical Simulation. -// Proceedings of the 21st International Conference on Microelectronics, Yugoslavia, 15-17 September, Vol. **1**, p.111-114, 1997.
- 114.Gritsenko V. A., Petrenko I. P., Svitashva S. N., and Wong H. Excess Silicon at Si₃N₄-SiO₂ Interface. -// Appl. Phys. Lett, V.**72**, N4, p.462-464, 1998.
- 115.Gritsenko V. A., Morokov Yu. N., Novikov Yu. N., Petrenko I. P., Svitashva S. N., Kwok R., Chan R., Wong H. Characterization of the Silicon Nitride - Thermal Oxide Interface in ONO Structures by ELS Spectroscopy and Ellipsometry. -// Microelectronics and Reliability, V. **38**. P.745-751, 1998.
- 116.Gritsenko V. A., Svitashva S. N., Petrenko I. P., Wong Hei, Xu J. B., and Wilson I. H. Study of excess silicon at Si₃N₄ / Thermal SiO₂ Interface using EELS and Ellipsometric Measurements, -// Journal of Electrochemical Society, **146** (2) 780-785, 1999.
- 117.Landgren G, Ludeke R., Morar J. F., Jugnet Y., Himpsel F. J. Oxidation of GaAs(110): New Results and Models -// Phys. Rev. B**30**, p. 4839, 1984.
- 118.Хауффе К. Реакция в твердых телах и на их поверхности. Часть II, М., ИЛ, 1963.
- 119.Гримли Т. Химия твердого тела /Под ред. Гарнера. М., ИЛ, 1961, с. 446.
- 120.Баранский Л. И., Клочков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника. Справочник. Киев: Наук. думка, 1973.
- 121.Страковская С. Е., Кораблев В. В., Станчиц С. А. Температурные зависимости оптических постоянных GaAs (111)В.-// Оптика и спектроскопия, 1983, Т. **55**. Вып. 1. с. 90-93.
- 122.Podlesnik D. V., Gilgen H. H., Osgood R. M. Jr. Deep ultraviolet induced wet etching of GaAs. // Appl. Phys. Lett, 1984. V. **45**(5). P. 563.
- 123.Umeno M., Joshimoto M., Shimizu H., Amemiya Y. Ellipsometric and infrared spectroscopic studies of oxide film on GaAs surface. // Surf. Sci., 1979, V. 86, P. 314-321.

124. Su C. Y., Lindau J., Chye P. W., Skeath P. R., Spicer W. E. Photoemission studies of the interaction of oxygen with GaAs (100).- // Phys. Rev. B, 1982, V. **25**, № 6, P. 4045-4068.
125. Schwartz G. P., Schwartz B., Griffiths J. E., Sugano T. Interfacial reactions in plasma grown native oxide - GaAs structures- // J. Electrochem. Soc., 1989, V. **127**, N 10, P. 2209-2273.
126. Watanabe K., Hashiva M., Hirohata Y. Oxide layers on GaAs prepared by thermal, anodic and plasma oxidation: indepth profiles and annealing effects. // Thin Sol. films, 1979, V. **56**, N 4, P. 64-73.
127. Sugano T. Oxide film growth on GaAs and silicon substrates by anodization in oxygen plasma and its application to devices and intergated circuit fabricalion. // Thin Sol. films, 1980, V. **72**, № 1, P. 9-17.
128. Стриха В. И. Теоретические основы работы контакта металл - полупроводник. Киев: Наукова думка, 1974.
129. Koshkarov P.K., Kazior T. E., Lagowski J., Gatos H.C. Interface states and internal photoemission in p-type GaAs metal-oxide-semiconductor surfaces. -// J. Appl. Phys. 1983, V. **54**, № 2, P. 963-970.
130. Барре П. Кинетика гетерогенных процессов.- // М., Мир, 1976.
131. Bartels F., Monch W. Chemisorption of oxygen of cleaved GaAs (110) surfaces: photon stimulation and chemisorption states.- // Surf. Sci., 1985, V. **143**, P. 315-341.
132. Petro W. G., Hiho J., Eglas S. et al. Effect of low-intensity laser radiation during oxidation of the GaAs (110).- // J. Vac. Sci. Techn., 1982, V. **21**, B. 2, P. 405-408.
133. Yokoyama S., Hirose M., Osaka Y. et al. Internal photoemission in anodic oxide/GaAs interface. -// Appl. Phys. Lett., 1981, V. **38**, N 2, P. 97-99.
134. Eden R. C., Moll J. L., Spicer W. E. Experimental evidence for optical population of the x minima in GaAs.- // Phys. Rev. Lett., 1967, V. **18**, N 15, p. 597-599.

135. Bertrand P. A. The photochemical oxidation of GaAs. -// J. Electrochem. Soc., 1985, V. **132**. № 4. P. 973-976.
136. Massies J., Contour J. P. Substrate chemical etching prior to molecular-beam epitaxy: An x-ray photoelectron spectroscopy study of GaAs {001} surfaces etched by the H₂SO₄-H₂O₂-H₂O solution. -// J. Appl. Phys. 1985. V. **58**. № 2, p. 806-810.
137. Моррисон С. Химическая физика поверхности твердого тела. // М. Мир, 1980. с. 488.
138. Свиташева С.Н., Любинская Р.И., Аникеева Н.В., Земцова М.Ф., Торгашова С.Ю.. Моделирование неоднородности поверхности с помощью калиброванных частиц и поляризационные характеристики такой поверхности. - Препринт №24, Новосибирск, ИФП, СО АН СССР, 1988, с. 1-56.
139. Vina L., Umbach C., Cardona M., Vodopyanov L. Ellipsometry studies of electronic interband transitions in cadmium mercury telluride (Cd_xHg_{1-x}Te)- // Physical Review B. V. **29**, N12, 1984, p.6752-6760.
140. Ponpon J.P. On the Properties of Real Cadmium Telluride Surfaces -// J. Applied Physics, A **27**, 1982, p.11-17.
141. Davis L.E., Macdonald N.C., Palmberg P.W., Riach G.E., Weber R.S. Physical electronics, -// Eden Prairie, Minnesota, 1976.
142. U. Solzbach and H.J. Richter. Sputter cleaning and dry oxidation of CdTe, HgTe, and Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te surfaces.-// Surface Science, v. **97**, 1980, p.191-205.
143. Кубашевский О., Гопкинс. Б. Окисление металлов и сплавов. М. Металлургия, 1965.
144. Эванс Ю. Р. Коррозия и окисление металлов. М.: Машиностроение. 1962, с. 856.
145. Lapujoulade J., Le Gruier Y., Lefort M., Lejay Y. A helium beam scattering study of the adsorption of oxygen on copper (110).-// Surf. Sci., 1982. v. **118**. p. 103.

146. Spitzer A., Lüth H. The adsorption of oxygen on copper surfaces: II. Cu(111). // *Surf. Sci.*, 1982. v. **11**, p. 121.
147. Hanekamp L. J., Lisowski W., Bootsma G. A. Spectroscopic ellipsometric investigation of clean and oxygen covered copper single surfaces.- // *Surf. Sci.*, 1982. v. **118**, p. 1-18.
148. Yamashita M., Omura K., Hirayama D. Passivation behavior of copper anodes and its illumination effects in alkaline solutions.- // *Surf. Sci.*, 1980, v. **96**, p. 448.
149. Реми Г. Курс неорганической химии. М.: Мир. 1974, т. **2**. с. 872.
150. Шкляев А. А., Бакланов М. Р. Эллипсометрические характеристики чистых поверхностей Si(320) при фазовых переходах. -// *Поверхность*, 1982, № 1. с. 96.
151. Алгазин Ю. Б., Блюмкина Ю. А., Свитащев К. К., Яблонцева Т. М. Эллипсометрическое исследование термодесорбции тонких пленок двуокиси кремния и адсорбированных слоев с поверхности монокристаллического кремния. -// *Журн. техн. физики*. 1979, т. **49**, с. 2349.
152. Ржанов А. В., Свитащева С. Н., Свитащев К. К., Соколов В. К., Ашкерев Ю. В., Осадчев Л. А., Цеснек Л. С. Эллипсометрический метод определения качества обработки поверхности.- // *Докл. АН СССР*. 1982, т. **267**, № 2, с. 373.
153. Meyer F., De Kluzenaar E. E., Bootsma G. A. Ellipsometry and the clean surface of silicon and germanium.- // *Surf. Sci.*, 1971. v. **27**, N1 p. 88-106.
154. Engel H. J., Hauffe K., Ilchner B. Über die Kinetik der Oxydation von Nickel bei 400°C. -// *Electrochem. Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*- 1954.- B. 58.- S. 478 - 482.
155. Drobny V. F., Pulfrey L. Properties of reactively-sputtered copper oxide thin films. -// *Thin Sol. Films*, 1979. v. **61**, N 1. p. 89-98.
156. Bärwinkel I C, Schmidt H. J. Numerical analysis of normal reflectance data as applied to the study of oxide films on copper.- // *Thin Sol. Films*, 1979, v. **59**, № 3, p. 373.

157. Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А. Фазовый переход металл-полупроводник и его применение.- // «Наука», Л., (1979).
158. Колонг Р.- Нестехиометрия. «Мир», М., (1974).
159. У. Пирсон. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. «Мир», М., (1977).
160. Чудновский Ф.А.- Фазовый переход металл-полупроводник и его применение.-// ЖТФ, **45**, №8, 1561-1583, (1975).
161. Биленко Д.И., Белобровая О.Я., Жаркова Э.А., Рябова Л.А., Сурбинов И.А., Хасина Е.И. – Исследование свойств двуокиси ванадия в миллиметровом диапазоне длин волн при фазовом переходе металл-полупроводник.-// ФТТ, **18**, вып. 7, с. 1982-1985, 1976.
162. Биленко Д.И., Жаркова Э.А., Хасина Е.И., Борисов С. П., Стальмахов А. В.- Влияние одноосного давления на фазовый переход металл-полупроводник в плечах двуокиси ванадия.-// Микроэлектроника, **8**, вып. 1, с. 74-76, 1979.
163. Ланская Т.Г., Меркулов И.А., Чудновский Ф.А. Гистерезисные явления при фазовом переходе металл-полупроводник в окислах ванадия.- // ФТТ, **20**, вып. 2, с. 336-342, 1978.
164. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов. «Мир», М., (1975).
165. Береснева Л.А., Васильева Л.Л., Девятова С.Ф., Панькин В. Г., Свиташев К. К., Шварц Н. Л. Поведение оптических констант и электрические свойства тонких пленок VO_2 вблизи фазового перехода.-// Письма ЖТФ, **3**, вып. 9, с. 420-424 (1977).
166. Дагман Э.Е., Панькин В.Г., Свиташев К.К., Семенов Л. В., Семенов А. И. Определение параметров поглощающих пленок с помощью метода эллипсометрии.-// Опт. и спектр., **46**, 559 (1979).
167. Береснева Л.А., Васин О.И., Девятова С.Ф., Шварц Н.Л. Оптические постоянные и электрические свойства пленок окислов ванадия.-// Сб.

- «Физика тонкопленочных систем» под ред. А.В. Ржанова, ИФП СО АН СССР, Новосибирск, с. 20-25. (1978).
168. Verleur H.W., Barker A.S., Berglund C.N. Optical properties of VO₂ between 0.25 and 5 eV. -// Phys. Rev., **172**, No. 3, p. 788-798, (1968).
169. Борисов Б.С., Корецкая С.Т., Мокеров В.Г., Раков А.В., Соловьев С.Г. Электрические и оптические свойства VO₂ при фазовом переходе полупроводник-полуметалл.-// ФТТ, **12**, №8, с. 2209-2216, (1970).
170. Balberg I., Trokman S.-High-contrast optical storage in VO₂ film -// J. Appl. Phys., **46**, No. 5, p. 2111 (1975).
- 171.. Гурьянов А.А., Теруков Е.И. Оптические свойства окисленного на воздухе ванадия.-// ЖТФ, **50**, 4, 892-895,1980.
172. Дорожко Е.В., Савицкий В.Г. Оптическое поглощение пленок VO₂ и V₂O₃ и возможность перехода полупроводник-полуметалл в соединениях переходных металлов.-// ФТТ, **19**, №4, с. 1150-1151, (1977).
173. Мокеров В.Г., Бегишев А.Р., Игнатъев А.С. -Локализация 3d электронов в твердых растворах VO₂+Ar.- // ФТТ, **23**, №4, с. 983-989, 1981.
174. Minomura S., Nagasaki H. The effect of Pressure on the metal-to-insulator transition in V₂O₄ and V₂O₃-//. Phys. Soc. Japan, **19**, p. 131-132, (1964).
175. Clayton J.C., De Smet D.J.-The optical anisotropy of the anodic oxide of vanadium.-//. Electrochem. Soc., **123**, №2, p.1886, (1976).
176. Clayton J.C., De Smet D.J. A study of the anodic oxide of vanadium under anodic and cathodic conditions.-// Electrochem. Soc., **123**, №12, p. 174, (1976).
177. Одынец Л.Л. Физика окисных пленок. ПГУ, Петрозаводск (1979).
178. Чугунова М.Е., Ждан А.Г., Елинсон В.М. Пиролитические пленки VO₂ ; фазовый переход и электропроводность.-// Микроэлектроника, **5**, вып. 6, с. 558, 1976.
179. Jacobsen R.T., Kerker M. Optical properties of Vanadium pentoxide.-// J. Opt. Soc. Am., **57**, No. 6, p. 751, (1967).

180. Мокеров В.Г., Макаров В.Л., Тулвинский В.Б., Бегишев А.Р. Оптические свойства пятиоксида ванадия в интервале энергий от 2 до 14 эВ. // Опт. и спектр., **40**, вып. 1, с. 104-110, 1976.
181. Losurdo M., Berreca D., Bruno G., Tondello E. – Spectroscopic ellipsometry investigation of V₂O₅ nanocrystalline thin films. // Thin Solid Films, **384**, p. 58-64, 2001.
182. Losurdo M., Berreca D., Bruno G., Tondello E. - Dielectric function of V₂O₅ nanocrystalline films by spectroscopic ellipsometry: Characterization of microstructure // Appl. Phys. Lett., v. **77**, No. 8, 2000.
183. Yatsuda Y., Habetani S., Uchida K. et al. Hi-MNOS Technology for a 64 kbyte Byte-Erasable S-V only EEPROM. IEEE // Journal of Solid State Circuits, 1985 v. **SC-2**, №1, p.144-151.
184. Suzuki E., Hiraishi H., Ishi K. and Hayashi Y.A. A low-Voltage Alterable with metal-oxide-nitride-oxide Semiconductor (MONOS) Structure // IEEE Trans. On Electron Dev., 1983, v. **ED-30**, №2, p.122-128.
185. Brown W.D., Jones R.V., Nasby R.O. The MONOS memory translator: Application in a Radiation-Hard Nonvolatile RAM. // Solid State Electronics, 1985, v. **28**, №9, p.877-884.
186. Бахвалов Н.Ф. Численные методы. Москва, Наука, 1976, т.1.
187. Enomoto T., Ando R., Morita H., Nakayama H., -Thermal oxidation rate of a Si₃N₄ film and its masking effect against oxidation of silicon. // Japan J. Appl. Phys., 1978, **17**, №6, p.1049-1058.
188. Franz J., Langheinrich W.-Thermal oxidation of silicon nitride. // Solid State Electronics, 1971, v. **14**, p.499.
189. Колобов Н.А., Смирнова В.М., Финарев М.С.- Применение пленок нитрида кремния в технологии ПЗС. // Электронная промышленность, 1982, №7, с.39-42.
190. Bolotin V.P., Britov I.A., Gritsenko V.A., Kovtunencko S.A., Olshanetskii B.Z., Popov V.P., Romashenko Yu. N., Serjapin V.G., Tiis S.A. Composition and

- structure of enriched by Silicon Silicon nitride. –/ Sov. Phys. Dokl., 1990, v. **310**, No. 1, p. 114-117.
191. Di Maria D.J., Arnett P.C. Hole Injection Into silicon nitride: Interface barrier energies by Internal photoemission. –// Appl. Phys. Lett., 1975, v.26, №2, p.711-713.
192. Gritsenko V. A. Structure and Electronic Properties of Amorphous Dielectrics in Silicon MIS Structures, p. 280, Science, Novosibirsk, Russia (1993).
193. Habraken F. H. P. M., Ullersama E. H. C., Arnoldbik W. M., and Kuiper A. E. T., in Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop: Fundamental Aspects of (Ultrathin Dielectrics in Si-Based Devices toward an Atomic Scale Understanding, pp. 411-424. Kluwer Academic Pub., Boston, MA (1997).
194. Chramova L. V., Chusova T. P., Gritsenko V. A., Feofanov G. N., and Smirnova T. P. Chemical compositional changing and absorption edge red shift in annealing silicon nitride.–// Nonorgan. Mater. (Sov.). **23**, 73 (1987).
195. Gritsenko V. A., in “Silicon Nitride in Electronics”, pp. 138-187, Elsevier, New York (1988).
196. Белоусов И.И., Гриценко В.А., Ефимов В.М. Электронная структура и проводимость слоев SiO_2 , полученных при 100°C . –// ПОВЕРХНОСТЬ. Физика, химия, механика. **10**, № 1, 1992, с. 62-66.
197. Басс Ф.Г., Фукс И.М. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности. –// М., “Наука”, 1972.
198. Хусу А.П., Витенберг Ю.Р., Пальмов В.А. Шероховатость поверхностей.–// М., “Наука”, 1975.
199. Егорова Г.А., Лонский Э.С., Потапов Е.В., Раков А.В. Эллипсометрия диффрактированного света. –// Микроэлектроника, 1980, 9, вып.4, с.319.
200. Elson J.M., Bennett J.M. Relation between the angular dependence of scattering and the statistical properties of optical surfaces.–// J.Opt.Soc.Am., 1979, v.69, N1, p. 31.

201. Azzam R.M.A. and Bashara N.M. Polarization characteristics of scattered radiation from a diffraction grating by ellipsometry with application to surface roughness.-// Phys. Rev. B, 1972, v.5, N12, p.4721.
202. Раутиан С.Г. К теории эшелетта. - Оптика и спектроскопия, 1959, т.7, вып.4, с.564.
203. Vorburger T.V., Ludema K.C. Ellipsometry of rough surfaces.-// Applied Optics, 1980, **19**, N4, p.581.
204. Фейнберг Е.Л. Распространение радиоволн вдоль реальной поверхности.// В сб.: Исследование по распространению радиоволн.- Под ред. Введенского Б.А., Изд-во АН СССР, 1948, вып.2.
205. Сивухин Д.В. К теории эллиптической поляризации при отражении света от изотропных сред.-// ЖЭТФ, 1956, т.30, №2, с.374.
206. Aspnes D.E., Theeten G.B., Hottier F. Investigation of effective-medium models of microscopic surface roughness by spectroscopic ellipsometry.-// Phys.Rev.B., 1979, v.20, N8, p.3292.
207. Aspnes D.E., Kinsbron E. and Bacon D.D. Optical properties of Au: Sample effects.-// Phys. Rev. B., 1980, v. 21, p. 3290.
208. Hanekamp L.G., Lisowski W., Bootsma G.A. Spectroscopic ellipsometric investigation on clean and oxygen covered copper single crystal surfaces.-// Surface science, 1982, v.118, p.1.
209. Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. - М., "Мир", 1981.
210. Займан Дж. Электроны и фононы.- М., "Мир", 1962.
211. Свиташева С.Н., Свиташев К.К., Семенов Е.В., Васильев А.Г. Изменение эллипсометрических параметров в зависимости от механической обработки поверхности.-// Поверхность. Физика, химия, механика, 1983, №12, с.64.
212. Чураева М. Н., Зорин З. М., Персианцев В. И. Эллипсометрическое исследование оптически полированной поверхности меди. -// Поверхность. Физика, химия, механика, 1985.- № 2, С. 132-138.

- 213.Соколов А.В. Оптические свойства металлов.-// М., Физматгиз, 1961.
- 214.Волькенштейн М.В. Молекулярная оптика.-// М., Гостехиздат, 1951.
- 215.Johnson P. B., and Christy R. W. Optical Constants of the Noble Metals.-// Physical Review B, V.6, No.12, p. 4370-4379, 1972.
- 216.Кириллова М. М., Номерованная Л. В., Носков М. М. Оптические свойства монокристалла молибдена.-// Ж. эксперим. и теор. физ., 1971, т. 60, № 6, с. 2252.
- 217.Алгазин Ю.Б., Блюмкина Ю.А., Гребнев Н.И., Свиташев К.К., Семенов Л.В., Яблонцева Т.М. Оптические постоянные атомарно-чистой поверхности германия и кремния и их температурные зависимости. -// Оптика и спектроскопия, 1978, т.45, №2, с.330.
- 218..Сивухин Д.В. Общий курс физики. Оптика.- М., "Наука",1980.
- 219.Алгазин Ю.Б., Блюмкина Ю.А., Гребнев Н.И., Свиташев К.К., Семенов Л.В., Яблонцева Т.М. Оптические постоянные атомарно-чистой поверхности германия и кремния и их температурные зависимости. -// Оптика и спектроскопия, 1978, **45**, №2, с. 330.
- 220.Соколов Л.В., Ламин М.А., Марков В.А., Машанов В.И., Пчеляков О.П., Стенин С.И. Осцилляции оптических характеристик поверхности роста пленок Ge при эпитаксии из молекулярного пучка.-// Письма в ЖЭТФ.1986, т.44, вып.6, с. 278-280.
- 221.Uri Ban J. Polarization and interference in optics. Refraction from metal gratings. Surface smoothness.-// Optics. 1983, v.63, N3, 191.
- 222.Takeda J. Hologram memory with high quality and high information storage density.-// Japan. Jour. of Applied Physics, 1972, v.11, N5, p.656.
- 223.Takeda J., Osjida Y., Miyamura Y. Random phase shifters for Fourier transformed holograms.-// Applied Optics, 1972, v.11, N4, p.818.
- 224.Burckhardt C.V. Use of random phase mask for the recording of Fourier transform holograms of data masks.-// Applied Optics, 1970, v.9, N3, p.695.

225. Haken R.A., Backer J.M., Beynon J.D. An investigation into the dependence of the chemically-etched edge profiles of silicon dioxide films on etchant concentration and temperature.-// Thin Solid Film, 1973, v.18, 3t, p.53.
226. Brandes R.G. Wall profiles produced during photoresist masked isotropic etching.-// J. Electrochem., Soc., 1973, v.120, N1, p. 140.
227. Свиташева С.Н., Любинская Р.И., Свиташев К.К. Отражение света от ячейки фазовой маски с цилиндрическими боковыми гранями. - Препринт №18, Новосибирск, ИФП, СО АН СССР, 1987, с. 30.
228. Свиташева С.Н., Любинская Р.И. Модели шероховатой поверхности и поляризационные характеристики отраженного от нее света.- Препринт 11, 1987, ИФП СО АН СССР, с.48.
229. Свиташева С.Н., Солдатенков И.С. Экспериментальные зависимости Ψ и Δ от угла падения света на поверхность случайной фазовой маски. Препринт-12, ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1987, с. 48.
230. Свиташева С. Н. Отражение светового луча с трапециидальным рельефом.- в книге: "Эллипсометрия в науке и технике ", ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1987, с. 7-13.
231. Борн М., Вольф Э. Основы оптики.- М., "Наука", 1970.
232. Егорова Г.А., Капаев В.В., Потапов Е.В. Эллипсометрические аномалии дифракционных порядков на решетках. - в книге: " Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, "Наука", 1987, с. 111-117.
233. Егорова Г.А., Лонский Э.С., Потапов Е.В. Определение линейных размеров элементов микросхем методом дифракционной эллипсометрии.- в книге: " Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, "Наука", 1987, с. 117-120.
234. Лонский Э.С., Лонская Е.Э. Метод дифракционной эллипсометрии для определения линейных размеров элементов микросхем. - в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, "Наука", 1987, с. 120-123.

235. Федорин В.Н. Метод эллипсометрического анализа периодических структур.- Труды 3^{ей} Всесоюзной конференции по эллипсометрии в книге: "Эллипсометрия: теория, методы, приложения", Новосибирск, "Наука", 1987, с. 123-126.
236. Smith V., Riel H., Senz S., Karg S., Riess W., and Gosele U. Realization of a Silicon Nanowire Vertical Surround-Gate Field-Effect Transistor. -// *Small*, 2, 85-88 (2006).
237. Zakharov N., Werner P., Sokolov L. and Gosele U. Growth of Si Whiskers by MBE: Mechanism and peculiarities.-// *Physics E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2007, V.37, N.1-2, pp.148-152.
238. Smith D.R., Schultz S., Markos P., and Soukoulis C.M. Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission. -// *Phys. Rev. B* 65, 195104 (2002); and *Metamaterials Publications.htm*.
239. Naumova O. V., Nastaushev Yu. V., Svistasheva S. N., Sokolov L. V., Zakharov N. D., Werner P., Gavrilova T. A., Dultsev F. N. and Aseev A. L. MBE-grown Si whisker structures: morphological, optical and electrical properties. -// *Nanotechnology* -2008-Vol. **19**, 225708, P. 1-5; doi:10.1088/0957-4484/19/22/225708; Online at stak.iop.org/Nano/19/225708.
240. Nastaushev Yu. V., Svistasheva S. N., Sokolov L. V., Werner P., .., Zakharov N. D., Gavrilova T. A., Naumova O. V., and Aseev A. L. Tall Silicon nanopillars characterization by SEM,-// IV and SE techniques.-Proceedings of 14th International Symposium on Nanostructures Physics and Technology, 2006, St. Peterburg, Russia, p. 82-83.
241. Naumova O. V., Nastaushev Y.V., Svistasheva S. N., Sokolov L. V., Werner Peter, Zakharov N. D., Gavrilova T. A., Dultsev F. N., Aseev A. L. Properties of Silicon Nanowhiskers Grown by Molecular-Beam Epitaxy. -// American Institute Physics CP893, Physics of Semiconductors, 28th International Conference edited

- by W. Jantsch and F. Schäffler; 2007- Vol. **893**, AIP Conference Proceedings 2007, **893**(1): 739-740.
- 242.Svitasheva S.N., Sokolov L.V., Zakharov N.D. and Werner P. Si-whiskers fabricated by MBE and their optical properties. -// 2007, Proc. ICSE-4 (Stockholm), p. 290.
- 243.Nastaushev Yu. V., Prinz V. Ya., Svitasheva S.N. A technique for fabrication Au/Ti micro- and nanotubes.-// Nanotechnology, **16**, 2005, p. 908-912.
- 244.Ambacher O., Arzberger M., Brunner D., Angerer H., Freudenberg F., Esser N., Wethkamp T., Wilmers K., Richter W., and Stutzmann M. AlGa_N-Based Bragg Reflectors. -// MRS Internet J. Nitride Semi-cond. Res. Vol.2, article 22 (1997)/
- 245.Lu H., Schaff W.J., Eastman L.F., Wu J., Walukiewicz W., Camilla V., Ambacher O. Growth of a-plane InN on r-plane sapphire with a GaN buffer by molecular-beam epitaxy. -// Appl. Phys. Lett., **83**, 2003, p. 1136.
- 246.Kawashima N., Yoshikawa H., Adachi S., Fuke S., Ohtsuka K. Optical properties of hexagonal GaN. -// J. Appl. Phys., **82**, 7, 1997, p. 3528-3535.
- 247.Cardona M. Modulation Spectroscopy, Academic Press, New York, 1969.
- 248.Tauc J., Grigorovici R., Vancu A. Optical properties and electron structure of amorphous Germanium.-// phys. stat. sol., **15**, 1966, p. 627-637.
- 249.Erman M., Theeten J.B., Chambon P., Kelso S.M., Aspnes D.E. Optical properties and analysis of GaAs single crystal partly amorphized by ion implantation. -// J. Appl. Phys., **56**, No. 10, 1984, p. 2664-2671.
- 250.Forouhi A.R., Bloomer I. Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics.-// Phys. Rev. **B 34**, No. 10, 1986, p. 7018-7026.
- 251.Forouhi A.R., Bloomer I. Optical properties of crystalline semiconductors and dielectrics.-// Phys. Rev. **B 38**, No. 3, 1988, p. 1865-1874.
- 252.Jellison G.E. Jr, Modine F.A. Parametrization of the optical functions of amorphous materials in the interband region. -// Appl. Phys. Lett., **69**, No. 3, 1996, p. 371-373.

253. Kim C.C., Garland J.W., Abad H., Raccah P.M. Modeling the optical dielectric function of semiconductors: Extension of the critical-point parabolic-band approximation. -// Phys. Rev. **B 45**, No. 20, 1992, p. 11749-11767.
254. Leng J., Opsal J., Chu H., Senko M., Aspnes D.E. Analytic representations of the dielectric functions of materials for device and structural modeling. -// Thin Solid Films **313-314**, 1998, p. 132-136.
255. Коновалов О.В., Самойленко И.И., Фейгин Л.А., Щедрин Б.М., Янусов Л.Г. Статистическое обоснование параметризации модели в рефлектометрии. – КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, **44**, №2, с. 356-360, 1999.
256. Aspnes D.E., Quinn W.E., Tamargo M.C., Pudensi M. A. A., Schwarz S. A., Brasil M. J. S. P., Nahoty R. E., and Gregory S. Growth of $Al_xGa_{1-x}As$ parabolic quantum wells by real-time feedback control of composition. -// Appl. Phys. Lett., **60**, No.10, 1992, p. 1244-1248.
257. Nussenzveig H.M. Causality and Dispersion Relations. –Academic Press, New York, 1972.
258. Djuris'ic' A.B., Li E.H. Modeling the optical constants of hexagonal GaN, InN, and AlN. -// J. Appl. Phys., **85**, No. 5, 1999, p. 2848-2853.
259. Svitashева S. N., Gritsenko V. A., Kolesov B. A. Optical properties of TiO_2 films made by air oxidation of Ti. -// phys. stat. sol. (c), **5**, No. 5, p. 1101–1104, (2008); / DOI 10.1002/pssc.200777731.
260. Svitashева S. N., Gritsenko V. A., Kolesov B. A. Optical properties of TiO_2 films made by air oxidation of Ti. -// Proceedings of ICSE-4, Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007, p.81.
261. Svitashева S. N., Mansurov V. G., Zhuravlev K. S., Nikitin A. Yu., Sheglov D. V., and Pecz B. Correlation between optical properties of MBE films of AlN and morphology of their surface.-// Proceedings of ICSE-4, Stockholm, Sweden, June 11-15, 2007, p.28.

262. Selhofer H., Ritter E., and Linsbod R. Properties of Titanium dioxide films prepared by reactive electron beam evaporation from various starting materials. - // Appl. Opt. **41**, No. 4, p. 756-762, (2002).
263. DeLoach J.D., Scarel G., Aita C. R. Correlation between titania film structure and near ultraviolet optical absorption -J. -// Appl. Phys. **85**, No.4, p. 2377-2384, 1999.
264. Tang H., Prasad K., Sanjinès R., Schmid P. E., and Lèvy F. Electrical and optical properties of TiO₂ anatase thin films. -// J. Appl. Phys. **75**, No.4, p. 2042-2047, 1994.
265. Jellison G. E., Jr., Boatner L. A., Budai J. D., Jeong B. S., and Norton D. P. Spectral ellipsometry of thin film and bulk anatase (TiO₂)-// J. Appl. Phys. **93**, No. 12, p. 9537-9541, 2003.
266. Loudon R. The quantum Theory of Light. Clarendon Press, Oxford, 1973.
267. O'Leary S.K., Johnson S. R, Lim P. K. - The relationship between the distribution of electronic states and the optical absorption spectrum of an amorphous semiconductor: An empirical analysis. -// J. Appl. Phys. **82**, p. 3334-3340 (1997); doi:10.1063/1.365643.
268. Toshiaki Ohsaka, Fujio Izumi, Yoshinori Fujiki. Raman spectrum of anatase, TiO₂-// J. Raman Spectrosc., **7**, p. 321-324, 1978; DOI: 10.1002/jrs.1250070606.
269. Бакаров А.К., Журавлев К. С., Торопов А.И., Шамирзаев Т.С., Мякишев Ю. Б., Раков Ю.Н. Мощные полевые СВЧ транзисторы на основе эпитаксиальных структур AlGaAs/GaAs.// Микроэлектроника, **31**, № 3, с. 163-169, 2002.
270. Свиташева С. Н. Определение оптических констант МЛЭ пленок GaAs n-типа в спектральном диапазоне 1.5-4.75 эВ.-// Автометрия, т. **43**, № 6, стр. 108-115, 2007.
271. Casey H. C. Jr., Sell D. D., and Wecht R. W. Concentration dependence of the absorption coefficient for n- and p-type GaAs between 1.3 and 1.6 eV.-// Journal of Applied Physics, Vol. **46**, No 1, p. 250-257, 1975.

272. Гавриленко В. И., Грехов А. М., Корбутяк Д. В., Литовченко В. Г. Оптические свойства полупроводников. Справочник, Киев, Наукова думка, стр. 85-86, 1987.
273. Niebelschütz F., Cimalla V., Tonisch K., Haupt Ch., Brückner K., Stephan R., Hein M., Ambacher O. - AlGa_xN/GaN – based MEMS with two-dimensional electron gas for novel sensor applications.- // *phys. stat. sol. (c)* **5**, No. 6, (2008) p. 1914–1916.
274. Brunner D., Angerer H., Bustarret E., Freudenberg F., Höpler R., Dimitrov R., Ambacher O., Stutzmann M. Optical constants of epitaxial AlGa_xN films and their temperature dependence. -// *J. Appl. Phys.* **82** (10) p. 5090-5096, (1997).
275. Hardtdegen H., Kaluza N., Cho Y.S., Stein R., Strittmatter A., Reißmann L., Bimberg D. and Zettler J.-T. New method for the in situ determination of Al_xGa_{1-x}N composition in MOVPE by real time optical reference. -in Abstracts-book of 6th ICNS, Bremen, Germany, 2005, Mo-P-073.
276. Yu G., Ishikawa H., Umeno M., Egawa T., Watanabe J., Jimbo T., Soga T. Optical properties of Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructure on sapphire by spectroscopic ellipsometry. -// *J. Appl. Phys. Lett.* **72** (18) p. 2202 (1998).
277. Tisch U., Katz O., Meyler B., Finkman E., and Salzman J. The Dependence of the Refractive Index of AlGa_xN on Temperature and Composition at Elevated Temperatures. -// *J. Appl. Phys.* **89**, 2676 (2001).
278. Antoine-Vincent N., Natali F., Mihailovic M., Vasson A., Leymarie J., Disseix P., Byrne D., Semond F., Massies J. Determination of the refractive indices of AlN, GaN, and Al_xGa_{1-x}N grown on (111)Si substrates. -// *J. Appl. Phys.* **93** (9) p. 5222 (2003).
279. Wethkamp T. and Wilmers K., Cobet C., Esser N., and Richter W., Ambacher O. and Stutzmann M., Cardona M. Dielectric function of hexagonal AlN films determined by spectroscopic ellipsometry in the vacuum-UV spectral range. -// *Phys. Rev. B* **59**, p. 1845, 1999.
280. Svitashева S. N., Mansurov V. G., Zhuravlev K. S., Nikitin A. Yu., Sheglov D. V., and Pecz B. Correlation between optical properties of MBE films of AlN and

- morphology of their surface.-// phys. stat. sol. (a) -2008-Vol. **205**, No. 4, P.941–944.
- 281.Mansurov V.G., Nikitin A.Yu., Galitsyn Yu.G., Svitashева S. N., Zhuravlev K.S., Osvath Z., Dobos L., Horvath Z.E., Pecz B. AlN growth on sapphire substrate by ammonia MBE.-// Journal of Crystal Growth Vol. 300 , P.145–150, (2007).
- 282.Mansurov V.G., Galitsyn Yu. G., Nikitin A. Yu., Kolosovsky E. A., Zhuravlev K. S., Osvath Z., Dobos L., Horvath Z. E., Pecz B -Continuous order-disorder phase transition (2x2)→(1x1) on the (0001)AlN surface.-// phys. stat. sol. (c) **4**, No. 7, 2498– 2501 (2007) / DOI 10.1002/pssc.200674867.
- 283.Wagner J., Ramakrishnan A., Obloh H., Kunzer M., Kohler K., Johs B. Spectroscopic Ellipsometry Analysis of InGaN/GaN AlGaIn/GaN Heterostructure Using a Parametric Function Model. -// MRS'99 Full Meeting Symposium W: GaN and Related Alloys; J. Wagner, A. Ramakrishnan, D. Behr, M. Maier, N. Herres, M. Kunzer, H. Obloh, and K.-H. Bachem, -// MRS Internet. J. Nitride Semicond. Res. **4S1**, G2.8 (1999).
- 284.Свиташева С.Н., Журавлев К.С. - Зависимость края оптического поглощения пленок $Al_xGa_{1-x}N$ от состава и полярности поверхности. -// VIII Иссък-Кульская международная конференция по инновационным материалам SCORPh-2010, 5 -8 Августа 2010.
- 285.Laws G. M., Larkins E. C., Harrison I., Molloy C. and D. Somerford. Improved refractive index formulas for the $Al_xGa_{1-x}N$ and $In_yGa_{1-y}N$ alloys. -// Appl. Phys., **89**, No. 2, 2001, p. 1108-1115.
- 286.Lorenz P., Lebedev V., Niebelschutz F., Hauguth S., Ambacher O., Schaefer J. A., and Krischok S. - Characterization of GaN-based lateral polarity heterostructures. -// phys. stat. sol. (c) **5**, No. 6, 1965–1967 (2008) / DOI 10.1002/pssc.200778550.
- 287.Lorenz P., Lebedev V., Niebelschutz F., Hauguth S., Ambacher O., Schaefer J. A., and Krischok S. – Spatially resolved photoluminescence of inversion domain

- boundaries in GaN-based lateral polarity heterostructures.-// Appl. Phys. Lett. **79**, 7, 952-954, 2001.
- 288.Schuck P.J., Mason M. D. , Grober R. D. , Ambacher O. , Lima A. P. , [Miskys C.](#) , Dimitrov R. , [Stutzmann M.](#) Comparison of N-face and Ga-face AlGaIn/GaN-based high electron mobility transistors grown by plasma-induced molecular beam epitaxy. -// JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS PART 1-REGULAR PAPERS SHORT NOTES & 38 9A 4962-4968 (1999).
- 289.Dimitrov R., Mitchell A. , Wittmer L. , Ambacher O. , [Stutzmann M.](#) , Hilsenbeck J., [Rieger W.](#) - Characterization of GaN-based lateral polarity heterostructures. -// phys. stat. sol. (c) **5**, No. 6, p. 1965-1967, 2008.
- 290.Kudrawiec R., Korbutowicz R., Paszkiewicz R., Syperek M., and Misiewicz J.- Photoreflectance and photoluminescence of thick GaN layers grown by HVPE,-// Proceedings of 4th International Conference on Solid State Crystals, Opto-Electronics Review **12**, 4 (2004), 435–439.
- 291.Ptak A.J., Holbert L.J., Ting L., Swartz C.H., Moldovan M., Giles N.C., Myers T.H., Van Lierde P., Tian C., Hockett R.A., Mitha S., Wickenden A.E., Koleske D.D., and Henry R.L.- Controlled oxygen doping of GaN using plasma assisted molecular-beam epitaxy.-// Applied Physics Letters, **79** (2001) 2740-2742.
- 292.Mastro M.A., Kryliouk O.M., Andersen T.J., Davydov A., Shapiro A.- Influence of polarity on GaN thermal stability.-//Journal of Crystal Growth 274 (2005) 38-46.
- 293.Svitasheva S.N.- Optical Constants for MBE n-type GaAs Films doped by Si or Te. -// JEMAA Vol. **2** No. 6, p. , 2010.
- 294.Svitasheva S.N. - Random Phase Mask as Model of rough surface. Part I Theory.- // The 5th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry, University at Albany, Albany, NY USA, 23-28 May 2010, abstract №228.
- 295.Svitasheva S.N. - Random Phase Mask as Model of rough surface. Part II Experiment.-// The 5th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry, University at Albany, Albany, NY USA, 23-28 May 2010, abstract №232.

- 296.Svitasheva S.N., Sokolov L.V., Zakharov N.D., Werner P. - Spectroscopic ellipsometric method for characterization of metamaterials. -// The 5th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry, University at Albany, Albany, NY USA, 23-28 May 2010, abstract №197.
- 297.Svitasheva S.N. - Impact of the doping elements on dispersion of GaAs optical constants. -// The 5th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry, University at Albany, Albany, NY USA, 23-28 May 2010, abstract №199.
- 298.Svitasheva S.N., Dultsev F.N., Aseev A.L. - Spectroscopic ellipsometry for characterization of MBE grown Si-whisker structures. -// 18th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology" St Petersburg, Russia, June 21-26, 2010, abstract.
- 299.Svitasheva S.N., Sokolov L.V., Nastaushev Yu.V., Dultsev F.N. - Impact of Ti metallization and nitrogen plasma treatment on optical properties of Si-whiskers structures grown by MBE technique.-// 7th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN10) 11-14 July 2010, Ouranoupolis Halkidiki, Greece.
- 300.Dultsev F.N., Svitasheva S.N., Nastaushev Yu.V., Aseev A.L. Ellipsometric investigation of the mechanism of the formation of titanium oxynitride nanolayers.-// Thin Solid Films, **519**, 2011, p.6344-6348; Doi: 10.1016/j.tsf.2011.04.034. Svitasheva S.N. Random Phase Mask as Model of rough surface. Part I Theory-//Thin Solid Films v. **519** 2011, p.2718-2721; DOI information: 10.1016/j.tsf.2010.11.070. Svitasheva S.N. Random Phase Mask as Model of rough surface. Part II Experiment-// Thin Solid Films v. **519** 2011, p.2722-2724; DOI information: 10.1016/j.tsf.2010.11.067.
- 302.Свиташева С.Н., Журавлев К.С. Зависимости оптических характеристик пленок $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ от состава и полярности поверхности. - //Автометрия 2011, т.47 №5 стр. 82-87.

- 303.Свиташева С.Н., Поздняков Г.А., Щеглов Д.В., Настаушев Ю.В. Оптические свойства и морфология алмазоподобных углеродных пленок, полученных в сверхзвуковом потоке плазмы -// Автометрия 2011, т.47 №5 стр. 59.
- 304.Свиташева С.Н., Поздняков Г.А., Настаушев Ю.В. Свойства алмазоподобных пленок, выращенных в сверхзвуковом потоке углеводородной плазмы -// Тезисы докладов первой международной конференции «Развитие нанотехнологий: задачи международных и региональных научно-образовательных и научно-производственных центров», стр. 124-126.
- 305.Svitasheva S.N. Optimization of maximum VO₂ content in polymorphous oxides of vanadium-// 2nd International Conference on Optical Electronic and Electrical Materials, abstract, p. 127.
- 306.Svitasheva S. N., Gilinsky A. M. Influence of doping level on shift of the absorption edge of gallium nitride films (Burstein-Moss effect).-// Appl. Surf. Sci., vol.281, p. 109-112, (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.02.094>.
- 307.Svitasheva S. N. Experimental Study of Polarization Properties of Rough Surface.-// Electrical and Electronic Engineering, Vol. 2, No. 6, p. ,2012.
- 308.Svitasheva S. N. Optimization of maximum VO₂ content in polymorphous oxides of vanadium.-// Key Engineering Materials, Vol. 538, p. 113-116, 2013.
- 309.Svitasheva S.N., Pozdnyakov G. A. Monitoring of technological conditions for preparing DLC films in supersonic flow of a hydrocarbonic plasma. // Key Engineering Materials, Vol. 538, p. 281-284, 2013.
310. Svitasheva S.N. Optical properties of Si nano-whisker structures grown by MBE technique: impact of Ti metallization and nitrogen plasma treatment.-// Известия АлтГУ, 1/1, стр. 189-194, 2013.