

文章编号: 1002-2082(2006)03-0254-04

MathCAD 在椭圆偏振仪测定 薄膜光学常数中的应用

王学华¹, 薛亦渝², 曹 宏¹

(1. 武汉化工学院 材料科学与工程学院, 武汉 430073; 2. 武汉理工大学 材料科学与工程学院, 武汉 430070)

摘 要: 薄膜光学常数决定薄膜的光学性能。通过对椭圆偏振仪测试原理的分析, 得到求解薄膜光学常数超越方程的数值算法简化公式, 并利用 MathCAD 的“Solve Block”模块开发了基于 Windows 系统的椭圆偏振测量薄膜光学常数的计算程序, 该程序可用于单层有吸收薄膜或无吸收薄膜折射率和厚度的计算。实际应用结果表明, 该计算具有数值准确、精度高、运算速度快、适应性好, 对系统无特殊要求等优点, 可用于薄膜制备过程的在线检测。

关键词: 椭圆偏振仪; 薄膜光学常数; 薄膜折射率; 薄膜厚度; MathCAD

中图分类号: TP391.72; O484.5

文献标志码: A

MathCAD applied to testing of the optical constants for thin films with ellipsometer

WANG Xue-hua¹, XUE Yi-yu², CAO Hong¹

(1. School of Materials Science & Engineering of Wuhan Institute of Chemical Technology, Wuhan 430073, China; 2. School of Materials Science & Engineering of Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: The optical constants of thin film are decisive factors for its optical properties. A simplified numeric algorithm expression for solving transcendental equation of optical constants was obtained by analyzing the test principle of ellipsometer. A Microsoft Windows based calculating program for optical constants of thin films with “Solve Block” module of MathCAD by ellipsometer was developed. It can be used to calculate refractive index and thickness of thin films with little absorption or even no absorption as its feature. The results of practical operation indicate that this method has the advantages of better accuracy, high precision, high speed, and universal usage. It can be used in on-line test with ellipsometer during the process of film preparation.

Key words: ellipsometer test; thin-film optical constant; thin-film refractive index; thin-film thickness; MathCAD

引言

椭圆偏振法测量已在光学、半导体、生物、医学等方面得到较为广泛的应用。它是基于表面反射光的偏振态发生变化的原理, 偏振态的变化与用费涅

尔反射系数表征的反射面介电特性有关。因此, 可以通过测量物体表面(假设有薄膜存在)反射光的偏振参数(Ψ 和 Δ)来确定薄膜的光学常数。由于椭圆偏参数确立的方程是超越方程, 因此直接计算是不

收稿日期: 2005-05-25; 修回日期: 2005-09-11

基金项目: 湖北省教育厅优秀中青年计划项目(2003b00)

作者简介: 王学华(1976—), 男, 湖北襄樊人, 博士, 武汉化工学院材料科学与工程学院教师, 主要从事薄膜材料的研究。

E-mail: xuehua_wang027@yahoo.com.cn

可能的。早期椭圆偏振仪的数据处理靠查图表获得, 改进后的椭圆偏振仪由于计算量较大, 给测试带来诸多不便。为了更快、更准确地计算薄膜的折射率和厚度, 国内外学者做过一些研究, 如椭圆偏振测量的遗传算法^[1], 椭圆偏振仪数据处理的实时做图方法^[2], 椭圆偏振测量的直接计算方法^[3], 各向异性薄膜椭圆偏振测量^[4]等。这些方法在计算过程中一般都要使用优化算法编写极其复杂的计算机程序, 在超越方程中进行优化; 如果参数设置不当, 很有可能得不到薄膜的折射率和厚度值, 因此人为误差较大。

MathCAD 是由 MathSoft 公司推出的一种交互式数值计算系统^[5], 在输入 1 个数学公式、方程组、矩阵之后, 计算机能直接给出结果, 而无须考虑中间计算过程。本文将用 MathCAD 的“Solve Block”功能模块来简化椭圆偏振仪测试过程的计算。传统数值计算方法是, 通过反复迭代椭圆公式的超越方程来达到求解的目的, 计算过程非常麻烦。采用 MathCAD 的“Solve Block”功能模块则使椭圆仪测试数据的计算变得相当简单。

1 基本原理

当一束线偏振光入射到薄膜表面时, 入射光波中的电场强度 P 分量和电场强度 S 分量在 2 种媒质的交界面上的特性不同, 即 P 分量和 S 分量的反射率和反射相移各不相同, 于是在反射光的 P 分量和 S 分量之间产生了附加的振幅差和位相差(反射光变成椭圆偏振光)。在入射介质、基片光学常数和入射角已知的情况下, 椭圆偏振光的参数由薄膜的光学常数决定。椭圆偏振仪的工作原理如图 1 所示。

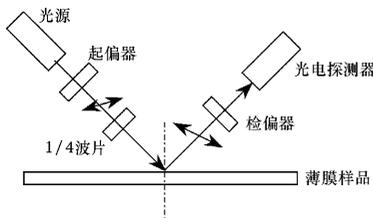


图 1 椭圆偏振仪光路示意图

Fig. 1 Schematic diagram of beam path of ellipsometer

当入射光线入射到薄膜表面时, 将发生如图 2 所示的反射和折射现象。图中 s 和 p 分别表示垂直于入射面的振动分量和入射面内的振动分量; d 表示薄膜的厚度。设 φ_1 表示光的入射角, φ_2 和 φ_3 分别为界面 1 和 2 上的折射角, n_1, n_2 和 n_3 分别为入射

介质、膜层和基片的折射率, 则薄膜的反射率可以由费涅尔反射系数表示成^[6]

$$R_p = \frac{r_{1p} + r_{2p} \exp(-i2\beta)}{1 + r_{1p} r_{2p} \exp(-i2\beta)} \quad (1)$$

$$R_s = \frac{r_{1s} + r_{2s} \exp(-i2\beta)}{1 + r_{1s} r_{2s} \exp(-i2\beta)} \quad (2)$$

$$\beta = 2\pi \frac{d}{\lambda} n_2 \cos \varphi_2 \quad (3)$$

其中, r_{1p} 和 r_{1s} 为界面 1 上 P 光和 S 光的反射系数; r_{2p} 和 r_{2s} 为界面 2 上 P 光和 S 光的反射系数, 有

$$r_{1p} = \frac{n_1 \cos \varphi_2 - n_2 \cos \varphi_1}{n_1 \cos \varphi_2 + n_2 \cos \varphi_1} \quad (4)$$

$$r_{1s} = \frac{n_1 \cos \varphi_1 - n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1 + n_2 \cos \varphi_2} \quad (5)$$

$$r_{2p} = \frac{n_2 \cos \varphi_3 - n_3 \cos \varphi_2}{n_2 \cos \varphi_3 + n_3 \cos \varphi_2} \quad (6)$$

$$r_{2s} = \frac{n_2 \cos \varphi_2 - n_3 \cos \varphi_3}{n_2 \cos \varphi_2 + n_3 \cos \varphi_3} \quad (7)$$

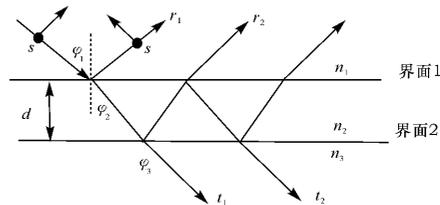


图 2 单层介质膜上光的反射和折射

Fig. 2 Reflection and refraction of light on single layer film

在椭圆偏振法测量中, 为了简便, 通常引入 2 个物理量 Ψ 和 Δ 来描述反射光偏振态的变化。它们与总反射系数的关系定义如下:

$$\tan \Psi \cdot e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s} \quad (8)$$

(8) 式即为椭偏方程, Ψ 和 Δ 分别为椭偏角。由 (1) ~ (8) 式可以看出, 参数 Ψ 和 Δ 是 $n_1, n_2, n_3, \varphi_1, \lambda$ 和 d 的函数。其中 $n_1, n_3, \varphi_1, \lambda$ 是已知量, 如果能从实验中测出 Ψ 和 Δ 的值, 那么就可以计算出薄膜的折射率 n_2 和厚度 d 。

2 MathCAD 编程的实现

“Solve Block”功能模块可用于求解方程组、多目标优化及线性规划等问题。在椭偏公式的求解中采用多目标优化方法, 计算步骤如下。

2.1 定义初始化参数

将 (4) ~ (7) 式简化为 n_2 的函数, 即

$$r_{1p}(n_2) := \frac{n_2 \cdot \cos(\varphi_1) - n_1 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2}}{n_2 \cdot \cos(\varphi_1) + n_1 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2}} \quad (9)$$

$$r_{1s}(n_2) := \frac{n_1 \cdot \cos(\varphi_1) - n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2}}{n_1 \cdot \cos(\varphi_1) + n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2}} \quad (10)$$

$$r_{2p}(n_2) := \frac{n_3 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2} - n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_3^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_3}}{n_3 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2} + n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_3^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_3}} \quad (11)$$

$$r_{2s}(n_2) := \frac{n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2} - (n_3) \cdot \frac{\sqrt{n_3^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_3}}{n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_2} + n_3 \cdot \frac{\sqrt{n_3^2 - \sin^2(\varphi_1)}}{n_3}} \quad (12)$$

将(9)~(12)式带入(1)和(2)式,定义“Solve Block”模块的初始计算公式为

$$\rho := \tan(\Psi) \cdot \exp(i \cdot \Delta) \quad (13)$$

其中, $i = \sqrt{-1}$;最大允差为 10^{-6} 。

2.2 调用 MathCAD 的 Solve Block 功能模块

Solve 功能模块的语法为

Given 约束条件;

本例中的约束条件为

约束1: $d < 1000$

约束1: $1.5 < n_2 < 3$

目标函数: $Minerr(var1, var2, \dots)$

本例中的目标函数为

$$\left(\begin{matrix} index \\ thickness \end{matrix} \right) := Minerr(n_2, d)$$

$$Re(\rho) = Re \left(\frac{r_{1p}(n_2) + r_{2p}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)}{1 + r_{1p}(n_2) \cdot r_{2p}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)} \cdot \frac{1 + r_{1s}(n_2) \cdot r_{2s}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)}{r_{1s}(n_2) + r_{2s}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)} \right)$$

$$Im(\rho) = Im \left(\frac{r_{1p}(n_2) + r_{2p}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)}{1 + r_{1p}(n_2) \cdot r_{2p}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)} \cdot \frac{1 + r_{1s}(n_2) \cdot r_{2s}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)}{r_{1s}(n_2) + r_{2s}(n_2) \cdot \exp\left(-4 \cdot \pi \cdot d \cdot n_2 \cdot \frac{\sqrt{n_2^2 - \sin^2(\varphi_1)^2}}{\lambda} \cdot i\right)} \right)$$

其中, $Re(\rho)$ 和 $Im(\rho)$ 分别表示 ρ 的实部和虚部; index 为薄膜折射率的计算值; thickness 为薄膜厚度的计算值。

2.3 输入相关的已知量并计算

在 MathCAD 的编辑框中依次输入测试条件和 Ψ, Δ 的值。MathCAD 将自动给出折射率(Refractive_index)、厚度(Thickness)和计算结果的误差 ERR。

3 应用

测试用介质薄膜样品是在 ZZS700-6/G 型真

空镀膜机上制备的,工艺条件见文献[7]。沉积后的薄膜在美国 GEARTNER L-119型椭圆偏振仪上进行折射率和厚度的测试,仪器检偏角 A 的随机读数误差为 $\pm 0.02^\circ$,起偏角 P 的误差为 $\pm 0.02^\circ$,工作波长为 546.1 nm 。MathCAD 的计算结果与其他优化算法的计算结果如表1所示。本算法的误差均在 5×10^{-8} 左右。

从表1可以看出,本文介绍的方法与直接算法和其他优化算法计算的结果非常相近,并且无需复杂的程序设计,具有计算速度快,精度高等优点,同时对试样无特殊条件限制,可直接用于实时在线检测,适合于科学研究和教学试验。

表1 几个薄膜样品的椭圆偏测量和数据处理结果

Table 1 Results from ellipsometric test and data processing of some thin-film samples

样品编号	入射角/(°)	$\Psi/(^{\circ})$	$\Delta/(^{\circ})$	折射率		膜厚/nm	
				其他算法	MathCAD	其他算法	MathCAD
1	60	-7.600	350.93	1.810	1.845	94.34	92.14
2	60	-9.325	357.70	1.950	1.905	82.83	82.45
3	60	-10.840	338.13	1.951	1.975	96.50	96.21
4	70	4.870	31.02	2.020	1.995	88.34	88.52
5	70	-5.110	219.89	2.020	2.013	89.24	89.52
6	70	10.160	14.60	1.818	1.811	106.65	106.52

4 结论

现代科学技术的许多部门对各种薄膜的研究和应用日益广泛,更加精确和迅速地测定薄膜的光学参数已变得更加迫切。本文利用 MathCAD 开发了基于 Windows 系统的椭圆偏振测量薄膜光学常数的计算方法,它具有程序设计简单、运算速度快、精度高、适应性好,对系统无特殊要求等优点,可用于薄膜的在线测试,进而可实现测试过程的自动化。

致谢:薄膜的椭圆偏振仪测试是在华中科技大学激光国家重点实验室夏文建博士的帮助下完成的,在此谨表示感谢。

参考文献:

[1] 彭子龙,李佐宜,胡煜,等.遗传算法在椭圆偏振测量

中的应用[J].光学技术,2000,26(3):277-280.

[2] 王洪涛.椭圆偏振法测量薄膜参数的数据处理[J].物理实验,2000,21(7):8-11,17.

[3] 吴永汉,窦菊英.椭圆法测膜厚的直接计算方法[J].物理实验,1997,18(1):11-13.

[4] BORTCHAGOVSKY E G. Ellipsometric method for investigation of the optical anisotropy of thin films: theory and calculations[J]. Thin Solid Films, 1997, (307):192-199.

[5] 宋征. Mathcad7.0入门及其工程应用[M].北京:人民邮电出版社,2000.

[6] 张孔时,丁慎训.物理实验教程:近代物理实验部分[M].北京:清华大学出版社,1997.

[7] 王学华,薛亦渝.温度条件对电子束蒸发制备 TiO₂薄膜的结构和性能的影响[J].应用光学,2004,25(2):55-57.

海军光电装备的未来发展方向

光电系统可以工作在所有的环境下,当装在无人机或无人舰船上时,光电传感器也能通过适当布置完成多传感器的数据融合,这将极大地提高目标位置测量精度。在不远的将来,无人舰船将装备先进的光电负载,工作在网络中心战(NCW)的框架下,灵活地适应指挥员的任务调遣。这些平台将工作在高威胁地区,识别目标并保持对通过高密度交通区运动目标的跟踪。海军通过改善他们与光电传感器、雷达和其它传感器的连通性,并考虑获取建制机载光电系统以进行闭环作战武器控制。如果能将多个传感器的数据进行融合,就可利用它们的多维特征很容易地探测难以发现的目标。

未来将借助三代热像仪加 FLIR/多功能激光器提高 ATD/AiTR(探测距离大于4 km)能力。三代热像仪加 FLIR/多功能激光器可以容易地安装在未来不带雷达的海上飞机和地面监视车辆上。这将是意大利防御电子公司 Galileo Avionica SpA 最终研制的 SASS IRST 系统,它可以容易地组合其它工作在可见和红外波段的灵巧传感器产生融合图像。

因为几家海军已开始采购 GPS 制导的能精确发射到100 km 以外的增程弹药,所以光电传感器也将广泛用于改进的地面攻击提示。舰载和机载光电传感器还将与宽带多光谱和超光谱成像技术相结合,这会有助于通过空间和时间分辨测量发射、反射或透射源的组成和分布来探测复杂背景内的多数或少数目标。这种超光谱系统是美国海军研究实验室(NRL)开发的微光光谱测量用便携式超光谱成像仪。它是一种工作在紫外/可见/近红外范围的模块化多传感器系统。美国海军研究实验室的人员声称:该系统可以作为一种功能强大的工具,用于地形表征、目标探测和羽烟跟踪任务以及海上的环保应用。

态势感知能力是光学/光电传感器日益用于海上环境的主要原因。未来,海上的平台中心或网络中心体系将把这些先进的传感器、大量的海军武器和其他子系统组合到用于水面作战的综合战斗子系统中。由于最近几年在光电及传感器阵列技术方面取得的长足进展,现代的热像仪可能是价格低廉、体积小巧的模块化轻型系统。协同工作的传感器可以产生远优于多个独立传感器累加的结果。(拓 锋 供稿)