

文章编号: 1002-2082(2009)01-0084-05

# 椭圆偏光谱测量中椭圆参数的灵敏度分析

黄水花<sup>1</sup>, 周全<sup>2</sup>, 谭吉春<sup>1</sup>

(1. 国防科技大学 理学院, 湖南 长沙 410073;  
2. 国防科技大学 光电科学与工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:** 在对椭圆偏振测量的基本原理进行了简单介绍和推导后, 讨论了椭圆偏振测量中椭圆参数关于薄膜参数的灵敏度以及入射角对椭圆参数的影响, 并进行了具体的仿真分析, 得到如下结论: 椭圆参数Delta对薄膜光学常数和薄膜厚度变化的灵敏度明显高于椭圆参数Psi。在椭圆数据处理中, 椭圆参数Delta的测量精度直接影响薄膜光学常数和薄膜厚度的拟合精度。为了提高椭圆参数Delta的测量精度, 可以选择入射角在膺布儒斯特角附近。所得结论对高精度椭圆测量具有指导意义。

**关键词:** 光学薄膜; 椭圆测量术; 光学常数; 灵敏度分析

中图分类号: O484.4; O433.1

文献标志码: A

## Sensitivity analysis of ellipsometric parameters in ellipsometric spectral measurement

HUANG Shui-hua<sup>1</sup>, ZHOU Quan<sup>2</sup>, TAN Ji-chun<sup>1</sup>

(1. Science College, National University of Defense and Technology, Changsha 410073, China; 2. College of Photoelectron Science and Engineering, National University of Defense and Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** Based on a brief introduction of the basic principle of ellipsometry and some derivations, the sensitivity of ellipsometric parameters with respect to film parameters and the influence of incident angle on the ellipsometric parameters were discussed, and its simulation analysis was made. It shows that the sensitivity of ellipsometric parameter Delta to the film optical constants and film thickness is apparently higher than another ellipsometric parameter Psi, and the measurement accuracy of ellipsometric parameter Delta directly affects the fitting accuracy of film optical constants and film thickness in the ellipsometric data processing. A method is provided to improve the measurement accuracy of Delta by choosing the incident angle close to the Pseudo-Brewster angle.

**Key words:** optical film; ellipsometry; optical constant; sensitivity analysis

## 引言

薄膜光学参数的测量方法有干涉测量法、X射线法、光谱扫描法和椭圆偏振测量术等<sup>[1]</sup>, 其中椭圆偏振测量术不但能测定薄膜厚度和光学常数, 还可以测量解算出多层薄膜系统中各层的厚度和光学常数, 且测量的膜厚范围广, 具有非扰动性、非破

坏性及相当高的灵敏度和精确度等诸多优点, 是现代薄膜测量中应用最广泛的方法之一。

## 1 椭圆偏振测量的基本原理

椭圆偏振测量术是研究两媒质间界面或薄膜中发生的现象及其特性的一种光学方法, 其原理是利

用偏振光束在界面或薄膜上反射或透射时出现的偏振变换<sup>[2]</sup>,通过计算来获得薄膜的光学常数及膜层厚度。

偏振光从镀有单层膜基片上的反射是椭圆测量中比较重要的一种情况。如图1所示,假设平行平面界面、厚度为 $d$ 的薄膜夹在半无限大环境媒质和基片之间。环境媒质、薄膜和基片都是均匀各向同性的。光束从复折射率为 $N_1$ 的环境媒质中入射,入射角为 $\varphi_1$ ;薄膜复折射率为 $N_2$ ,厚度为 $d$ ,折射角为 $\varphi_2$ ;基底的复折射率为 $N_3$ ;入射光束中包含p分量和s分量。光束从环境媒质入射到薄膜中时,由于界面1和界面2对光束的多次反射和折射,在界面1上的总反射光波是经多次反射光波干涉叠加的结果。

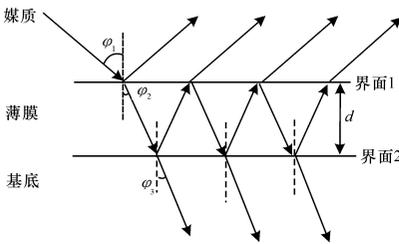


图1 光在单层膜上的反射和折射

Fig. 1 Reflection and refraction of light on single layer

为了研究倾斜入射光波经薄膜反射后的振幅和相位的变化,其总复振幅反射系数表示为

$$R_p = |R_p| \exp(i\Delta_p) \quad (1)$$

$$R_s = |R_s| \exp(i\Delta_s) \quad (2)$$

式中:  $|R_p|$ 和 $|R_s|$ 分别表示p偏振光和s偏振光经薄膜系统反射时的振幅衰减;  $\Delta_p$ 和 $\Delta_s$ 分别表示p偏振光和s偏振光经薄膜系统反射时的相移。

由于p偏振光和s偏振光的界面菲涅耳反射系数不同,因此这2种偏振情况的薄膜系统总的反射系数也是不同的。这正是椭圆测量术测量薄膜系统的依据,即通过测量入射光和反射光的偏振改变来计算薄膜系统的某些参数。定义椭圆参数与总反射系数之间的关系为

$$\tan \Psi \exp(i\Delta) = \rho = \frac{R_p}{R_s} = \frac{|R_p|}{|R_s|} \exp[i(\Delta_p - \Delta_s)] \quad (3)$$

由(3)式可知椭圆参数具有明确的物理意义,它们直接反映出经过薄膜系统反射前后光的偏振态的变化,在测量时能够直接得到椭圆参数的测量计算值。一般规定椭圆参数的范围为:  $0 < \Psi < \pi/2$ ,

$0 < \Delta < 2\pi$ 。

一般来说,在椭圆测量中,入射波长、入射角和基底的复折射率均为已知,实验环境的空气折射率也近似为1。则可以将(3)式表示为 $\rho = \rho(N_2, d)$ ,即 $\Psi = \Psi(N_2, d)$ ,  $\Delta = \Delta(N_2, d)$ 。因此,通过椭圆方程计算可以求出薄膜的厚度 $d$ 以及薄膜的复折射率 $N_2$ 。

## 2 椭圆偏光测量中椭圆参数的灵敏度分析

椭圆测量术是一种高灵敏度的测量技术,为了获得高精度测量结果,除了要求仪器自身具有稳定的测量精度并能对所测的椭圆数据进行有效处理的优化方法外,还可以通过在测量中选择椭圆测量比较灵敏的区域进行测量来提高测量数据的精度。为了更直观地对椭圆测量中各个参数的灵敏度进行分析<sup>[3]</sup>,进行如下的仿真模拟。

### 2.1 椭圆参数随薄膜厚度变化的灵敏度分析

假设在某个环境-薄膜-基底薄膜系统中,环境媒介的折射率为1.0,入射角为 $70^\circ$ ,薄膜具有Cauchy色散方程关系:

$$n_1(\lambda) = 2.0671 + \frac{0.015308}{\lambda^2} + \frac{0.0020183}{\lambda^4}$$

波长单位为 $\mu\text{m}$ ,吸收系数 $k=0$ ,基底具有Cauchy色散方程关系:

$$n_2(\lambda) = 1.4473 + \frac{0.0038487}{\lambda^2} - \frac{2.1663 \times 10^{-5}}{\lambda^4}$$

波长单位为 $\mu\text{m}$ 。为了能在一定光谱范围内讨论膜厚对椭圆参数的影响,将光谱范围设为(500 nm, 900 nm)。假设薄膜的厚度在50 nm~100 nm范围内变化,对椭圆参数的变化进行仿真模拟计算,如图2所示。

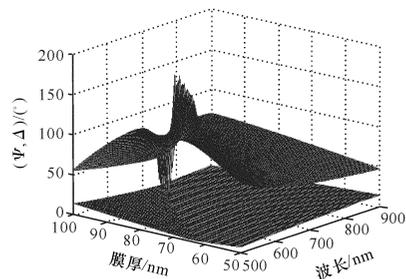


图2 椭圆参数 $\Psi$ 和 $\Delta$ 随膜厚变化曲面图

Fig. 2 Variation of ellipsometric parameters  $\Psi$  and  $\Delta$  with layer thickness

在图2中,将椭圆参数 $\Psi$ 和 $\Delta$ 随膜厚变化曲面图画于同一个坐标系中,下曲面表示椭圆参数 $\Psi$ 由膜厚变化引起的变化曲面,上曲面表示椭圆参数 $\Delta$ 由膜厚变化引起的变化曲面。从图中可以看出,在整个光谱范围内,椭圆参数 $\Psi$ 由膜厚变化引起的变化曲面是比较平坦的,而相应椭圆参数 $\Delta$ 的变化曲面则是很崎岖不平的,也就是说椭圆参数 $\Delta$ 对薄膜厚度的微小变化显然要敏感于椭圆参数 $\Psi$ 对薄膜厚度的微小变化。这表明,在椭圆数据处理中计算薄膜厚度时,椭圆参数 $\Delta$ 的精确度比椭圆参数 $\Psi$ 的精确度更为重要。

上述讨论中,没有考虑薄膜吸收的影响,下面就进行更深一步的讨论。假设在某个环境-薄膜-基底薄膜系统中,环境媒质的折射率为1.0,入射角为 $69^\circ$ ,入射波长为632.8 nm,基底的折射率为1.457,薄膜的复折射率为 $N = n - ik$ ,其中 $n = 2.000$ ,分析椭圆参数在膜厚为(10 nm, 5 000 nm)范围内的分布情况。

由图3可见,当薄膜完全不考虑吸收时,椭圆参数值随着薄膜厚度的增加呈现出周期性分布;由图4可见,当引入吸收时,随着膜厚增加,椭圆参数值周期性变化范围越来越小,在膜厚很大时变化趋近为零。

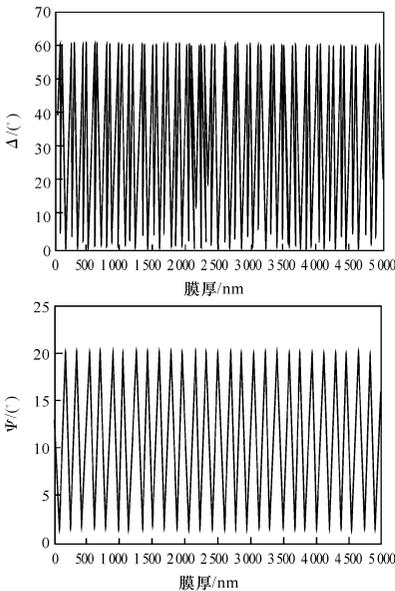


图3  $k=0$ 时椭圆参数值随膜厚增加的分布图

Fig. 3 Distribution variation of ellipsometric parameters with layer thickness while extinction coefficient  $k = 0$

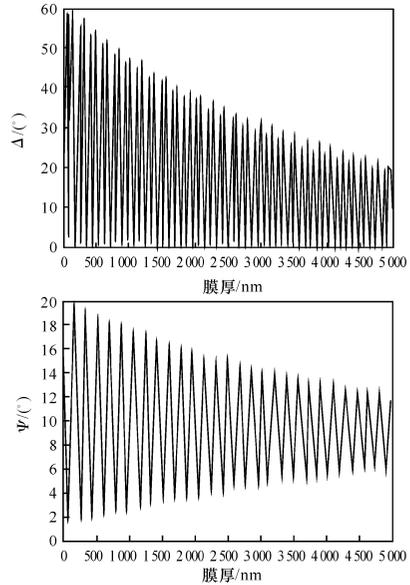


图4  $k=0.01$ 时椭圆参数值随膜厚增加的分布图

Fig. 4 Distribution variation of ellipsometric parameters with layer thickness while extinction coefficient  $k=0.01$

以上分析表明:在不考虑吸收时,椭圆参数值随膜厚的增加呈周期性变化,即椭圆参数关于膜厚的灵敏度不受膜厚增加影响,故测量中对膜厚的要求没有限制,均能得到较好的测量精度;在引入吸收时,椭圆参数值周期性变化的范围越来越小,最终趋于一直线,即椭圆参数关于膜厚的灵敏度随膜厚增加而减小,因此当测量的薄膜厚度很大时,测量的椭圆参数值误差增大,得不到准确的测量结果。

在实际测量中,薄膜不可能完全无吸收,因此在椭圆测量中,建议选择膜厚在1 000 nm以内的薄膜系统,更厚的薄膜系统可以考虑使用其他测量手段进行测量。

### 2.2 椭圆参数随光学常数变化的灵敏度分析

假设在某个环境-薄膜-基底薄膜系统中,环境媒质的折射率为1.0,入射角为 $70^\circ$ ,膜厚 $d = 75.0$  nm,基底具有Cauchy色散方程关系:

$$n_2(\lambda) = 1.4473 + \frac{0.0038487}{\lambda^2} - \frac{2.1663 \times 10^{-5}}{\lambda^4}$$

式中波长单位为 $\mu\text{m}$ 。在光谱(500 nm, 900 nm)内进行模拟分析。当不考虑薄膜吸收情况时,取薄膜的光学常数变化范围为(1.5, 3.0),对椭圆参数的

变化进行模拟分析。

当引入吸收时,仅讨论吸收系数对椭圆参数的影响,薄膜的折射率色散关系满足 Cauchy 色散方程:

$$n_1(\lambda) = 2.0671 + \frac{0.015308}{\lambda^2} + \frac{0.0020183}{\lambda^4}$$

式中波长单位为  $\mu\text{m}$ , 设消光系数的变化范围为 (0, 0.01), 对椭圆参数的变化进行模拟分析。如图 5 和图 6 所示。

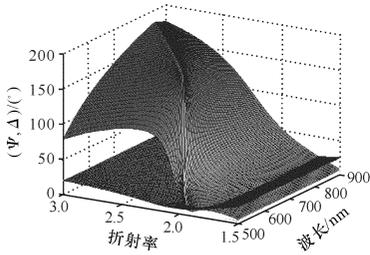


图 5 椭圆参数  $\Psi$  和  $\Delta$  随折射率变化的曲面图

Fig. 5 Variation of ellipsometric parameters  $\Psi$  and  $\Delta$  with refractive index

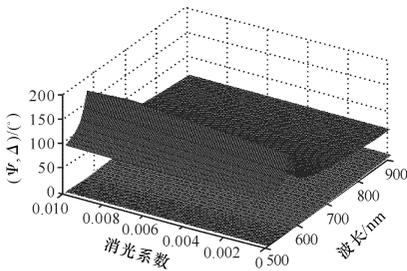


图 6 椭圆参数  $\Psi$  和  $\Delta$  随消光系数变化的曲面图

Fig. 6 Variation of ellipsometric parameters  $\Psi$  and  $\Delta$  with extinction coefficient

由图 5 和图 6 可见,在整个光谱范围内,椭圆参数  $\Psi$  由薄膜光学常数(或消光系数)变化引起的变化曲面是比较平坦的,而相应椭圆参数  $\Delta$  的变化曲面则是很崎岖不平的,也就是说椭圆参数  $\Delta$  比椭圆参数  $\Psi$  更敏感于薄膜光学常数(或消光系数)的微小变化。

以上表明,在椭圆数据处理中计算薄膜光学常数时,椭圆参数  $\Delta$  的精确度比椭圆参数  $\Psi$  的精确度更为重要。

### 2.3 椭圆参数随入射角变化的灵敏度分析

在实际的椭圆光谱测量中,常常采用光度法原理进行测量<sup>[4]</sup>。根据光度法原理,当起偏器方位角为  $P$  时,可通过归一化傅里叶系数  $\alpha$  和  $\beta$  来计算出

椭圆参数  $(\Psi, \Delta)$ , 计算方程为

$$\begin{cases} \tan \Psi = \sqrt{\frac{1+\alpha}{1-\alpha}} |\tan P| \\ \cos \Delta = \frac{\beta}{\sqrt{1-\alpha^2}} \cdot \frac{\tan P}{|\tan P|} \end{cases} \quad (4)$$

对(4)式等号两边同时取微分计算,得到:

$$\begin{aligned} \delta \Psi &= \frac{\delta(\tan \Psi)}{1 + \tan^2 \Psi} \\ \delta \Delta &= \frac{\delta(\cos \Delta)}{-\sqrt{1 - \cos^2 \Delta}} \end{aligned} \quad (5)$$

式中:

$$\begin{aligned} \delta(\tan \Psi) &= \frac{\tan \Psi}{1 - \alpha^2} \delta \alpha \\ \delta(\cos \Delta) &= \sqrt{\left(\frac{\alpha}{1 - \alpha^2} \cos \Delta \delta \alpha\right)^2 + \left(\frac{\delta \beta}{1 - \alpha^2}\right)^2} \end{aligned}$$

由(5)式分析可得:当椭圆参数  $\Delta$  在  $0^\circ$  或  $180^\circ$  附近时,  $\delta \Delta$  为一个较大值,也就表示在光度法中通过归一化的傅里叶系数  $\alpha$  和  $\beta$  计算出的椭圆参数  $\Delta$  会出现较大误差值。因此,在椭圆测量中要尽量避免椭圆参数  $\Delta$  在  $0^\circ$  或  $180^\circ$  附近的测量值。

为了模拟入射角对椭圆参数的影响,仍然采用上面的环境-薄膜-基底薄膜系统。假设光谱范围为 (500 nm ~ 900 nm), 入射角从  $0^\circ$  变化到  $90^\circ$ , 模拟椭圆参数随入射角变化情况,其他参数均为模拟系统参数值。

由图 7 可以看出,选择入射角在  $70^\circ$  附近,椭圆参数  $\Delta$  的值能有效地避开  $0^\circ$  或  $180^\circ$  附近的情况,使得椭圆参数  $\Delta$  的测量精度得到提高。

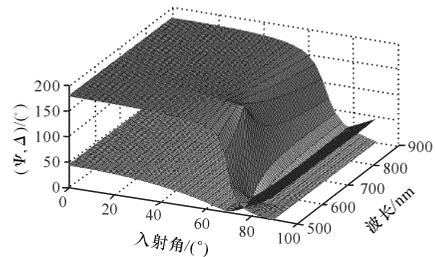


图 7 椭圆参数  $\Psi$  和  $\Delta$  随入射角变化的曲面图

Fig. 7 Variation of ellipsometric parameters  $\Psi$  and  $\Delta$  with incident angle

另外,从光学原理可知,当一束光遇到 2 种折射率不同的介质界面时,会存在一个入射角,使得光波中的 p 分量反射率为零,称该角度为布儒斯特角,在该角度处反射光的相位会发生突变,使得测量反射光与入射光相位差的椭圆参数  $\Delta$  产生一个

突变,例如在空气环境介质中,测量某折射率为1.5的基底,当入射角为 $56.322^\circ$ 时(即布儒斯特角入射<sup>[5]</sup>),椭圆参数 $\Delta$ 的值从 $180^\circ$ 突变到 $0^\circ$ 。同样,在单层薄膜系统中,当光束以某个入射角入射时,整个系统对入射光中的p分量反射率最小,称此入射角为布儒斯特角。在布儒斯特角附近,椭圆参数 $\Delta$ 也会发生较快的变化。在图7所示的数据模拟中,当入射角在 $70^\circ$ 附近时,椭圆参数 $\Delta$ 从 $180^\circ$ 很快变化到 $0^\circ$ ,说明该薄膜系统的布儒斯特角在 $70^\circ$ 左右。

根据上面的分析,为了得到较高精度的椭圆测量参数,选择入射角的一个基本原则就是尽量选择薄膜系统的布儒斯特角作为入射角;在变入射角测量中,也要尽量选择在布儒斯特角附近的多个角度作为入射角。

### 3 结论

本文对椭圆测量中的椭圆参数灵敏度区域进行了详细的讨论,分析了薄膜厚度、薄膜光学常数以及入射角对椭圆参数的灵敏度影响,并作了仿真分析。由仿真分析可知在椭圆参数中,椭圆参数 $\Delta$ 对薄膜厚度、薄膜光学常数变化的灵敏度明显高于椭圆参数 $\Psi$ 。在椭圆数据处理中,椭圆参数 $\Delta$ 的测量精度直接影响着薄膜光学常数、薄膜厚度的拟合精度。为了提高椭圆参数 $\Delta$ 的测量精度,可以选择入射角在布儒斯特角附近。

参考文献:

[1] VEDAM K. Spectroscopic ellipsometry: a historical

overview[J]. Thin Solid Films, 1998(313-314):1-9.

[2] 阿查姆 R M A, 巴夏拉 N M. 椭圆偏振测量术和偏振光[M]. 梁民基, 译. 北京: 科学出版社, 1986.

AZZAM R M A, BASHARA N M. Ellipsometry and polarized light[M]. Translated by LIANG Min-ji. Beijing: Science Press, 1986. (in Chinese)

[3] 廖清君. 单波长消光椭圆仪的数据处理研究[D]. 成都: 四川大学, 2002.

LIAO Qing-jun. Study of data processing for single-wave null ellipsometry [D]. Chengdu: Sichuan University, 2002. (in Chinese)

[4] 周全. 某些常用光学材料(薄膜)的椭圆测量[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2007.

ZHOU Quan. Ellipsometric measurement of some usual optical material (film) [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2007. (in Chinese)

[5] 波恩 M, 沃耳夫 E. 光学原理(上)[M]. 杨葭孙, 译. 北京: 科学出版社, 1978.

BORN M, WOLF E. Principles of optics [M]. Translated by YANG Jia-sun. Beijing: Science Press, 1978. (in Chinese)

[6] 周全, 黄云. 模拟退火算法与遗传算法在光谱椭圆数据处理中的应用比较[J]. 应用光学, 2008, 29(3): 385-389.

ZHOU Quan, HUANG Yun. Application and comparison of simulated annealing algorithm and genetic algorithm in spectral ellipsometry data processing[J]. Journal of Applied Optics, 2008, 29(3):385-389. (in Chinese)