

Програмно-апаратний комплекс досліджень оптичних властивостей тонких плівок

М.Г. Демиденко, С.І. Проценко*, К.В. Тищенко, О.В. Федченко

Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

(Одержано 12.04.2012; у відредагованій формі – 23.05.2012; опубліковано online 04.06.2012)

Використовуючи оптичні елементи компанії Thorlabs та систему графічного програмування LabVIEW 2010, розроблено автоматизований програмно-апаратний комплекс для дослідження оптичних властивостей багатошарових плівкових систем. Запропоновано сумісний генетичний алгоритм для обробки експериментальних даних нуля еліпсометрії та рентгенівської рефлектометрії. Показано, що запропонований підхід дозволяє дуже точно інтерпретувати фазові перетворення, дифузійні процеси та розмиття інтерфейсів в багатошарових плівкових системах при використанні різних розрахункових теоретичних моделей.

Ключові слова: нуль-еліпсометрія, рентгенівська рефлектометрія, оптичні коефіцієнти, співвідношення Френеля, генетичні алгоритми.

PACS numbers: 07.60.Fs, 06.05.cm

1. ВСТУП

При дослідженні електрофізичних і магнітнорезистивних властивостей тонких плівок та спін-вентальних систем важливо знати особливості дифузійних процесів, можливість збереження індивідуальності окремих шарів плівкової системи і про твердофазні реакції, які протікають в таких системах у процесі конденсації або наступної термообробки.

При дослідженні ступеню індивідуальності окремих шарів та дифузійних процесів в багатошарових плівкових системах, часто, користуються методом рентгенівської рефлектометрії. Але при вивченні спін-вентальних систем на основі мультишарів Co/Cu виникає ряд складнощів, пов'язаних з тим, що густина шарів Co та Cu та оптичні константи речовин в рентгенівському діапазоні дуже близькі і тому експериментальним шляхом їх дуже складно розрізнити. У зв'язку з цим головною метою роботи було організація повного замкнутого циклу дослідження багатошарових плівкових систем, використовуючи комбінацію стандартного малокутового рентгенівського дифрактометра та запропонованого нами нуля-еліпсометра [1, 2].

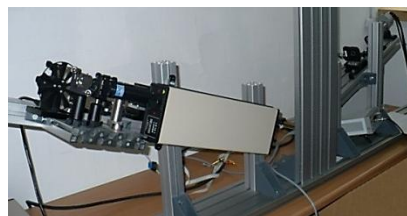
Використовуючи метод нуля-еліпсометрії при дослідженні нанорозмірних спін-вентальних систем на основі багатошарових плівок Co/Cu можна отримати точні значення (на відміну від метода рентгенівської рефлектометрії) оптичних параметрів коефіцієнтів заломлення n та k , оскільки вони мають різну абсолютну величину. Тому комбінація методів малокутової рентгенівської дифракції та нуля-еліпсометрії дає можливість більш точно вивчити особливості дифузійних процесів та процесів фазоутворення в багатошарових нанорозмірних Co/Cu плівках, як складових спін-вентальних систем.

Для реалізації вищезазначеного замкнутого циклу досліджень нами був використаний серійний малокутовий рентгенівський дифрактометр Bruker D8 Discover і розроблений програмно-апаратний комплекс для дослідження та аналізу оптичних властивостей багатошарових плівок методом нуля-еліпсометрії.

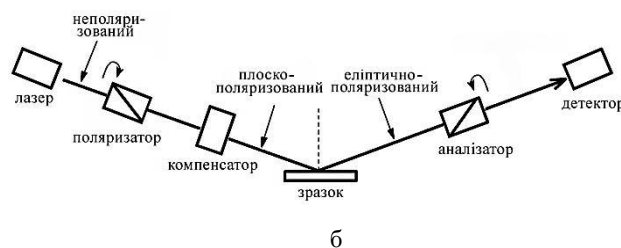
2. ПРОГРАМНО-АПАРАТНИЙ КОМПЛЕКС АВТОМАТИЗОВАНОГО НУЛЬ-ЕЛІПСОМЕТРА

При виготовленні нуля-еліпсометра нами були використані оптичні елементи компанії Thorlabs (аналізатор, поляризатор, компенсатор) з можливістю програмного регулювання за допомогою крокових двигунів, лазер з довжиною хвилі $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ та плечі з незмінним кутом 70° падіння та відбивання від зразка лазерного променя.

На рис. 1 наведено зовнішній вигляд і оптична схема розробленого нуля-еліпсометра.



а



б

Рис. 1 – Зовнішній вигляд нуля-еліпсометра (а) та його оптична схема (б)

При розробці програмно-апаратного комплексу нуля-еліпсометра ми використали класичну схему, яка базується на автоматичному обертанні поляризатора та аналізатора [3] та включає в собі модульоване джерело світла з колініруючою оптикою, поляризатор, компенсатор, аналізатор, фокусуючу оптику та детектор (фотоелектронний перемножувач),

* serhiy.protsenko@gmail.com

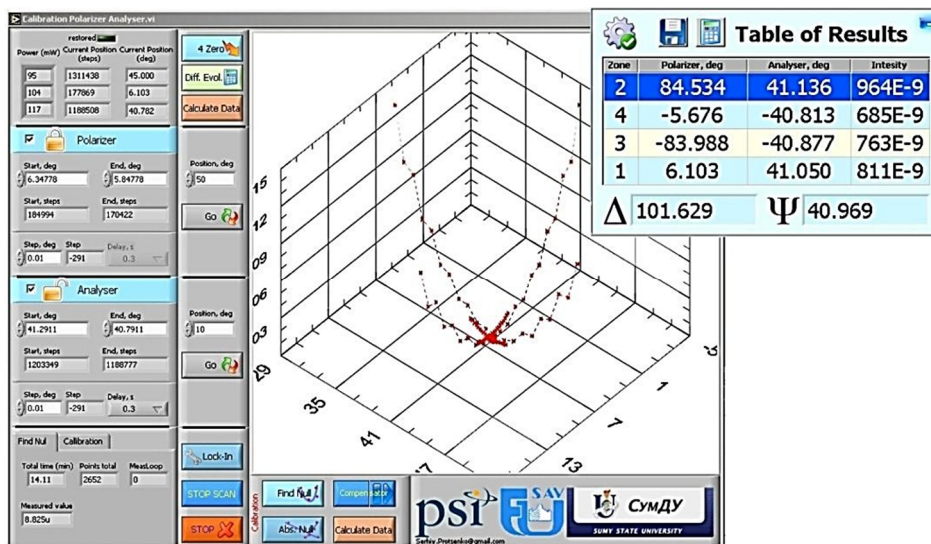


Рис. 2. – Зовнішній вигляд розробленого програмного забезпечення для керування нуль-еліпсометром у режимі пошуку значень Δ та ψ в чотирьох зонах

сигнал з якого поступає на Lock-in amplifier, де, після обробки, подається через інтерфейс GPIB до керуючого програмного забезпечення на ПК.

На рис. 2 показано зовнішній вигляд програмного забезпечення в режимі пошуку експериментальних значень Δ та ψ (еліпсометричні кути) за чотирма зонами.

У такому режимі роботи нуль-еліпсометра компенсатор фіксується на рівні $1/4$ довжини хвилі $\delta = 90^\circ$ з відхиленням $\pm 45^\circ$. Завдяки ітераційній циклічній зміні кута регулювання поляризатора (при фіксованому значенні кута компенсатора) і аналізатора та при ітераційній зміні кута регулювання аналізатора (при фіксованому значенні кута компенсатора та поляризатора) вдається досягти пар значень кутів поляризатора та аналізатора, при яких лінійно поляризоване світло може бути повністю погашене. В результаті значення кутів поляризатора та аналізатора, при яких спостерігається практично нульовий сигнал на детекторі, дорівнюють еліпсометричним кутам Δ та ψ . Для підвищення точності отриманих результатів значення Δ та ψ усереднювалися шляхом проведення пошуку нуля, в так званих чотирьох зонах, при зміні кутів поляризатора і аналізатора від 0 до 90° (при двох значеннях кута компенсатора $\pm 45^\circ$) та зміні кутів поляризатора і аналізатора від 0 до 90° (при двох значеннях кута компенсатора $\pm 45^\circ$).

Програмне забезпечення для керування всіма підсистемами нуль-еліпсометра було реалізоване за допомогою системи програмування LabVIEW 2010, оскільки використання саме такого програмного, а не апаратного підходу дозволяє гнучко змінювати моделі роботи приладу та застосовувати різні схеми керування в залежності від типу досліджуваних зразків.

На рис. 3 наведені порівняльні експериментальні результати значень параметрів Δ і ψ для системи SiO_2/Si отриманих на розробленому нами нуль-еліпсометрі та на серійному приладі Технічного університету в м. Братиславі (Словаччина). Як видно з рисунку, співпадання можна вважати припустимим, а незначні розходження можуть бути пояснені нерів-

номірністю окисла по поверхні підкладки та різними умовами вимірювання.

Оскільки між еліпсометричними кутами Δ і ψ та оптичними коефіцієнтами відбиття (n) і заломлення (k) не існує простого аналітичного співвідношення, то для знаходження величин n і k , а також товщини окремих шарів (d_i) у багатошарових плівкових систем необхідно розв'язувати обернену задачу еліпсометрії.

Хоча необхідно зазначити, що при визначенні абсолютних величин d_i , n і k кількість можливих розв'язків суттєво зростає з збільшенням кількості шарів плівкової структури. Для пошуку саме фізичних значень оптичних коефіцієнтів відбиття (n) і заломлення (k) та товщини окремих шарів (d_i) нами використовувався метод генетичних алгоритмів (ГА) [4, 5].

3. РОЗРАХУНКОВІ МОДЕЛІ ДЛЯ АНАЛІЗУ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ РЕФЛЕКТОМЕТРІЇ ТА ЕЛЛІПСОМЕТРІЇ ПЛІВКОВИХ СИСТЕМ З ВИКОРИСТАННЯМ ГЕНЕТИЧНОГО АЛГОРИТМУ

Основною метою даної частини роботи було розробити програмне забезпечення для визначення оптичних показників, шорсткості меж поділу та товщини для кожного шару багатошарової системи. Дана задача розв'язувалася за допомогою сумісного генетичного алгоритму, який поєднав аналіз експериментальних даних нуль-еліпсометрії та рентгенівської рефлектометрії. Для розрахунку були використані різні моделі: Паратта, Гібауда, профілів, інтердифузії, реплікацій та модель, що враховує наявність проміжного шару [6, 7, 8, 9]. Їх використання дозволяє наблизитися до реальних параметрів системи для збільшення точності аналізу експериментальних результатів. При розв'язку оберненої задачі еліпсометрії та рентгенівської рефлектометрії необхідно одночасно знаходити велику кількість невідомих за декількома експериментальними значеннями, тому доцільне використання генетичних алгоритмів. У порівнянні зі звичайними оптимізаційними методами вони мають наступні особливості: паралельний пошук, випадкові мутації та

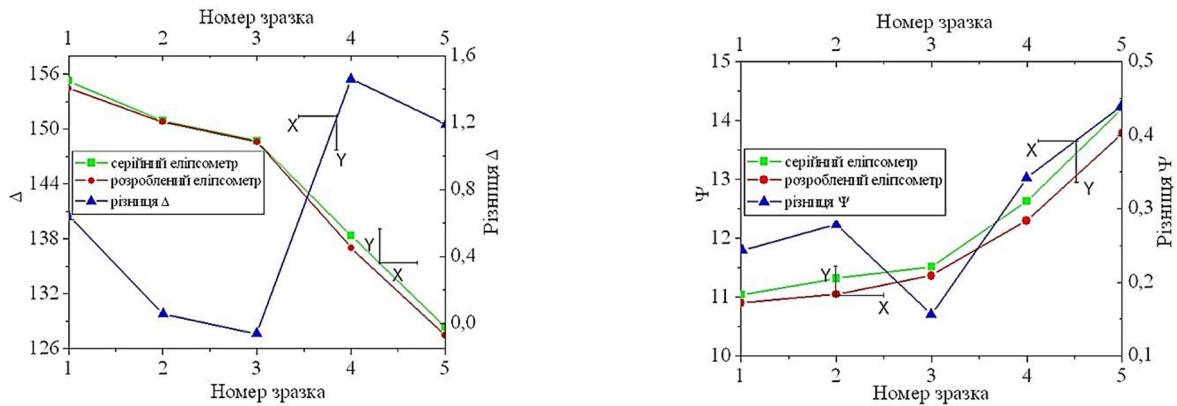


Рис. 3. – Порівняння експериментальних параметрів Δ та ψ для системи SiO₂/Si, отриманих на виготовленому нуль-еліпсометрі в порівнянні з серійним приладом

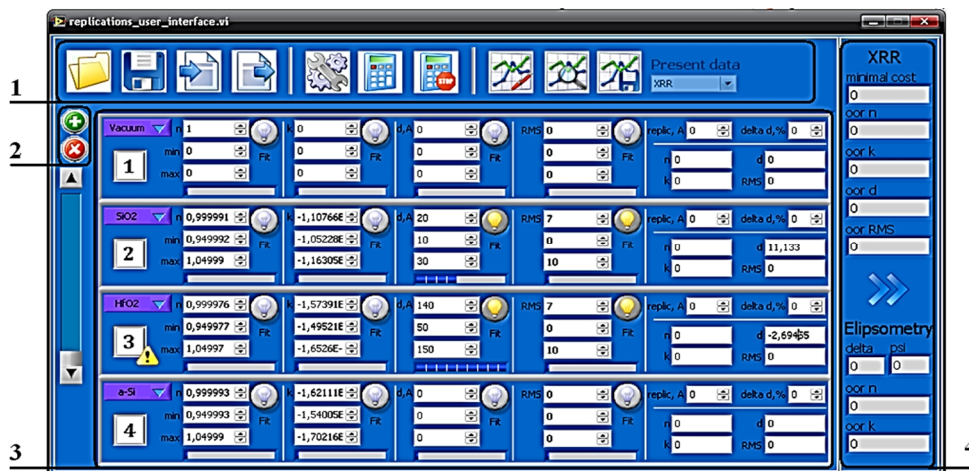


Рис. 4 – Зовнішній вигляд лицеві панелі розробленого програмного забезпечення: 1 – група кнопок, що використовуються для операцій з файлами, налаштування, старту та зупинки розрахунку, роботи з графіками; 2 – кнопки, що використовуються для додавання чи видалення шарів у розрахунковому стеку; 3 – масив кластерів, що слугує для задавання розрахункового стеку; 4 – область, що вказує поточні значення похибки розрахунку для рефлектометрії, еліпсометрії та дані ψ та Δ

рекомбінації вже знайдених рішень. ГА добре підходять як простий евристичний метод оптимізації багатовимірних, погано визначених функцій.

Програмне забезпечення розроблялося в графічному середовищі програмування компанії National Instruments LabVIEW 2010. Воно має перевагу при створенні паралельного програмного забезпечення з великою кількістю одночасно працюючих потоків, оскільки являє собою двовимірну мову програмування з підтримкою нативного паралелізму.

Зовнішній вигляд лицеві панелі розробленого програмного забезпечення наведений на рис. 4.

При роботі з додатком існує можливість задати матеріал шару, його оптичні параметри n та k , товщину шару (d), межі пошуку $n_{\min} - n_{\max}$, $k_{\min} - k_{\max}$ і $d_{\min} - d_{\max}$ та необхідність пошуку. Додатково за допомогою панелі настройки параметрів розрахунку користувач може зазначити наступні параметри: кут падіння, довжину хвилі, розмір популяції, стратегію генетичного алгоритму (є можливість вибору із 10 різних стратегій), *crossover*, *weighting* та вибрати формулу розрахунку функції похибки.

Розроблене програмне забезпечення має декілька інтерфейсів, що з'являються в залежності від того, яку модель вибрав користувач. Для розв'язку оберненої

задачі еліпсометрії та розрахунку теоретичної рефлектометрії основною являється модель Паратта [6], в якій залежність між оптичними постійними шару та параметрами еліптично-поляризованого світла встановлюється на основі співвідношень Френеля:

$$r_j = \frac{k_{zj} - k_{zi}}{k_{zj} + k_{zi}} \exp \left[-2(k_{zj} \cdot k_{zi})^{1/2} \sigma_j \right], \quad (1)$$

де r_j – коефіцієнт Френеля для відбиття від поверхні між шарами i та j ; k – перпендикулярна компонента хвильового вектору в шарі j чи i ; σ – RMS, величина що враховує шорсткість поверхні.

$$k_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j \cos \theta_j, \quad (2)$$

де λ – довжина хвилі; n_j – це комплексний індекс віддзеркалення; θ_j – кут падіння хвилі на площину (визначається для всіх шарів системи за законами оптики) [7].

Комплексний коефіцієнт відбиття $n = n + ik$ (де n – це коефіцієнт відбиття та k – коефіцієнт затухання хвилі) визначається для двох сусідніх шарів: n_i та n_j . Амплітуди електричних полів, що пройшли та були відбиті визначаються зі співвідношень Френеля для s -поляризації та p -поляризації:

$$r_{ij}^S = \frac{n_i \cos \theta_i - n_j \cos \theta_j}{n_i \cos \theta_i + n_j \cos \theta_j} \cdot \exp \left[-2 \left(\frac{4\pi^2}{\lambda^2} n_i n_j \cos \theta_j \cos \theta_i \right)^{1/2} \sigma_j \right], \quad (3)$$

$$r_{ij}^P = \frac{n_i \cos \theta_j - n_j \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_j + n_j \cos \theta_i} \cdot \exp \left[-2 \left(\frac{4\pi^2}{\lambda^2} n_i n_j \cos \theta_i \cos \theta_j \right)^{1/2} \sigma_j \right], \quad (4)$$

де n – комплексний коефіцієнт відбиття; $\theta_{j,i}$ – кут падіння хвилі на j -ий чи i -ий шар; σ_j – RMS j -ого шару.

На основі співвідношень (3-4), визначаються загальні коефіцієнти відбиття, з урахуванням комплексної складової коефіцієнта розсіювання хвилі у товщині d_j шару – φ_j :

$$r_p = \frac{r_{ij}^p + r_{p+1} \cdot \varphi^2}{1 + r_{p+1} \cdot r_{ij}^p \cdot \varphi^2}, \quad (5)$$

$$r_s = \frac{r_{ij}^s + r_{s+1} \cdot \varphi^2}{1 + r_{s+1} \cdot r_{ij}^s \cdot \varphi^2}, \quad (6)$$

де $\varphi_j = \exp(ik_j d_j)$.

За відомими значеннями r_p та r_s визначаються азимут та різниця фаз ψ та Δ :

$$\Psi = \text{Re} \left(\frac{r_p}{r_s} \right) \cdot \frac{180}{\pi}, \quad (7)$$

$$\Delta = \text{Im} \left(\frac{r_p}{r_s} \right) \cdot \frac{180}{\pi}, \quad (8)$$

При розрахунку теоретичної рефлектометрії, на основі моделі Паратта, після загального коефіцієнту відбиття для p поляризації визначається коефіцієнт рефлектометрії R (відбивна здатність): $R = |r_p|^2$.

Оскільки, реальні поверхні мають не ідеальну морфологію (шорсткість), то виникла необхідність використовувати додаткову модель у програмному забезпеченні, яка дозволяє враховувати геометрію цих нерівностей на поверхні шарів. У залежності від типу морфології розрахунки ведуться за різними формулами. Недоліком цієї моделі є те, що вона описує нерівності поверхні з певним наближенням.

У реальних багат шарових системах мають місце не тільки нерівності, а й їх реплікації від шару до шару, тому в розробленому програмному забезпеченні передбачена також модель реплікацій. Вона дозволяє уточнити результати моделі Паратта за допомогою коефіцієнтів RMS та відбиття нерівностей першого шару у наступні.

За допомогою рентгенівської рефлектометрії чи нуль-еліпсометрії та коефіцієнтів Френеля можливо розрахувати товщини та оптичні показники дифузної межі, тобто проміжних шарів, що виникають через дифузію між шарами з різних матеріалів. У розробленому програмному забезпеченні такі розрахунки проводяться використовуючи «graded» модель. Проміжний шар характеризується трьома параметрами: товщина дифузної межі w_g кількість шарів, що входять до неї N_g , фактор розподілення X_g , що визначає де знаходиться проміжний шар відносно початкової межі поділу (до дифузії) (див. рис. 5):

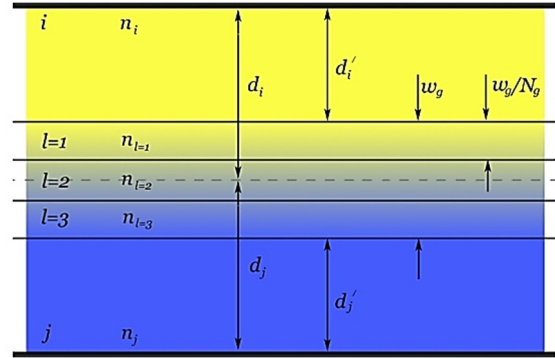


Рис. 5 – Модель багат шарової системи з проміжними шарами, що виникли внаслідок дифузії

Товщина кожного з N_g шарів еквівалентна w_g/N_g , а оптичні показники кожного l -го шару ($l = 1, 2, \dots, N_g$) розраховуються за наступними співвідношеннями:

$$n_l = \frac{(N_g + 1 - l)n_i + l n_j}{(N_g + 1)}, \quad (9)$$

$$k_l = \frac{(N_g + 1 - l)k_i + l k_j}{(N_g + 1)}, \quad (10)$$

Результуюча товщина шарів чистого матеріалу d_i' та d_j' після врахування наявності дифузної області, визначається так:

$$d_i' = d_i - w_g(1 - X_g), \quad (11)$$

$$d_j' = d_j - w_g X_g. \quad (12)$$

Дана модель дозволяє визначити основні параметри дифузної області [9].

4. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розраховані та побудовані за допомогою розробленого програмного забезпечення графіки рефлектометрії порівнювалися з експериментальними та теоретичними, що були отримані з GenX (це універсальна програма, яка використовується для знаходження даних X-Ray та нейтронної рефлектометрії) [10].

На рис. 6 наведено порівняння експериментального графіка, та теоретичного, що був побудований за допомогою розробленого ПЗ для багат шарової системи $\text{HfO}_2(14 \text{ нм})/\text{SiO}_2(2 \text{ нм})/\text{a-Si}$.

На рис. 7 приведені результати роботи GenX: червона лінія – експериментальна рефлектометрія, синя лінія – теоретичні розрахунки GenX для системи $(\text{Fe}(1,1 \text{ нм})/\text{Pt}(1,6 \text{ нм}))_2/\text{Pt}(4,5 \text{ нм})/\text{Fe}(1,1 \text{ нм})/\text{MgO}$ за допомогою моделі Паратта.

На рис. 8 наведено порівняння теоретичних розрахунків GenX (зелений графік) та розробленого програмного забезпечення (червоний графік) для тієї же системи.

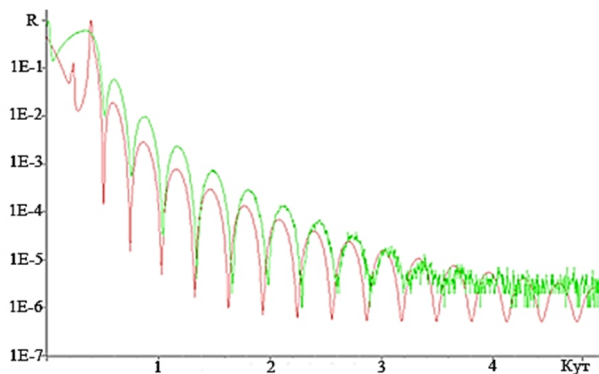


Рис. 6 – Порівняння експериментальної (зелена лінія) та розрахункова залежність (червона лінія), яка отримана за допомогою розробленого ПЗ для системи: $\text{HfO}_2(14 \text{ nm})/\text{SiO}_2(2 \text{ nm})/\text{a-Si}$

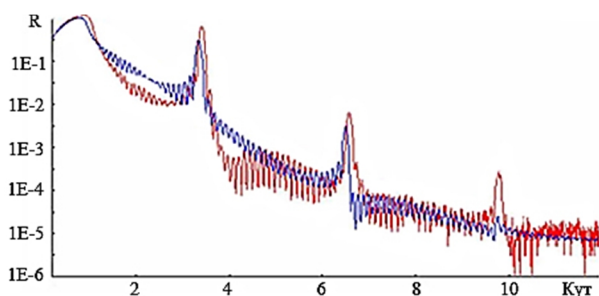


Рис. 7 – Порівняння експериментальної та теоретичної рефлектометрії (яка отримана в результаті роботи GenX) для системи $(\text{Fe}(1,1 \text{ nm})/\text{Pt}(1,6 \text{ nm}))_{24}\text{Pt}(4,5 \text{ nm})/\text{Fe}(1,1 \text{ nm})/\text{MgO}$. Для розрахунку використовувалась модель Паратта

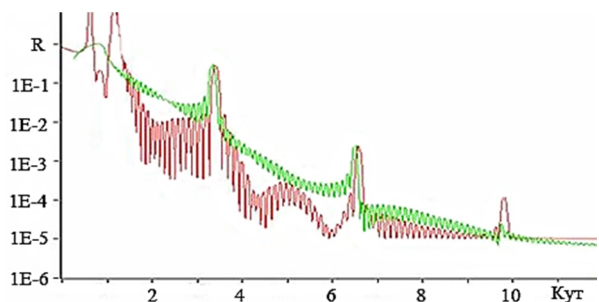


Рис. 8 – Порівняння теоретичних розрахунків GenX (зелений графік) та розробленого програмного забезпечення (червоний графік) для тієї ж системи

З цих графіків видно, що для моделі Паратта розроблене ПЗ дещо краще розраховує рефлектометрію, ніж GenX.

Для розрахунку використовувалася модель профілів (експоненційний профіль).

На рис. 9 представлені розрахунки розробленого ПЗ для моделі з проміжними шарами (graded model). Видно, як змінюється рентгенівська рефлектометрія при наявності дифузійних процесів.

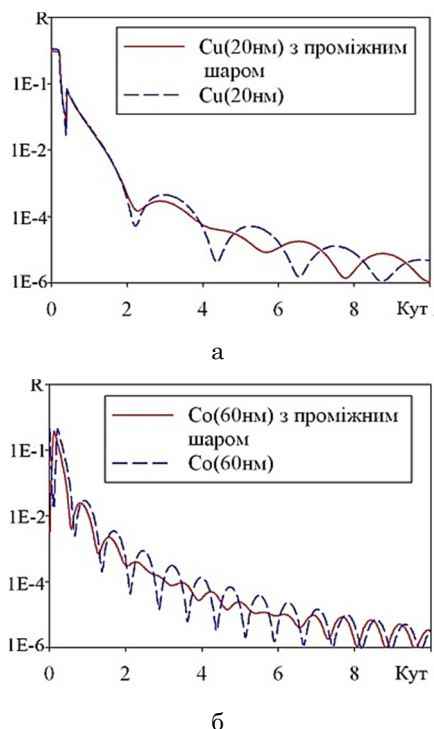


Рис. 9 – Розрахунок рентгенівської рефлектометрії (graded model) для плівок $\text{Cu}(20 \text{ nm})$ (а) та $\text{Co}(60 \text{ nm})$ (б).

5. ВИСНОВКИ

Таким чином, різні розрахункові моделі у розробленому програмному забезпеченні дозволяють максимально наблизити багатшарову систему до реальної, завдяки урахуванню нерівностей меж поділу, реплікації, інтердифузії, наявності проміжних шарів. Використання одночасної обробки експериментальних даних рентгенівської рефлектометрії та нуль-еліпсометрії дозволяє значно зменшити похибки визначення товщини та оптичних показників шарів. У якості методу розрахунку використовувався генетичний алгоритм, оскільки він добре працює з великою кількістю невідомих, не потрапляє до локального мінімуму та знаходить фізичні розв'язки.

Software and Hardware System for the Investigation of the Thin Film Optical Properties

M.G. Demydenko, S.I. Protsenko, K.V. Tyschenko, O.V. Fedchenko

Sumy State University, 2, Rimsky Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

Using Torhlab's optical elements and graphic software development system LabVIEW 2010 the software and hardware automation system for the investigation of the optical properties of multilayer film systems was built. The joint genetic algorithm was suggested to process experimental data of Null-ellipsometry and X-ray reflectometry. It was shown that the proposed technique lets one simulate phase transitions, diffusion processes and interface blurring in multilayer film systems very accurate for different computational theoretic models.

Keywords: Null-ellipsometry, X-Ray reflectivity, Optical coefficients, Fresnel equations, Genetic algorithm.

Программно-аппаратный комплекс исследований оптических свойств тонких пленок

М.Г. Демиденко, С.И. Проценко, К.В. Тищенко, Е.В. Федченко

Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

Используя оптические элементы компании Torlabs и систему графического программирования LabVIEW 2010, разработано автоматизированный программно-аппаратный комплекс для исследования оптических свойств многослойных пленочных систем. Предложен совместный генетический алгоритм для обработки экспериментальных данных нуль-эллипсометрии и рентгеновской рефлектометрии. Показано, что предложенный подход позволяет очень точно интерпретировать фазовые превращения, диффузионные процессы и размытие интерфейсов в многослойных пленочных системах при использовании различных расчетных теоретических моделей.

Ключевые слова: Нуль-эллипсометрия, рентгеновская рефлектометрия, оптические коэффициенты, соотношения Френеля, генетические алгоритмы.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. M. Bjorck, G. Andersson, *A short manual for GenX*, <http://genx.prog.googlepages.com/manuals>.
2. P.T. Patsalas, S. Logothetidis, P.C. Kelires, *Diam. Relat. Mater.* **14**, 1241 (2005).
3. H.G. Tompkins, E.A. Irene, *Handbook of ellipsometry* (Springer: 2005).
4. М.Г. Демиденко, С.И. Проценко, О.Б. Проценко, О.В. Федченко, *Вісник СумДУ. Серія: Фізика, математика, механіка* **1**, 33 (2008).
5. M. Demydenko, S. Protsenko, P. Siffalovic, *Thin Solid Films* **520**, 5722 (2012).
6. L. Parratt, *Phys. Rev.* **95**, 359 (1954).
7. D.L. Windt, *Comput. Phys.* **12**, 360 (1998).
8. I. Pape, T.P.A. Hase, B.K. Tanner, M. Wormington. *Physica B* **253**, 278 (1998).
9. A. Gibaud, S. Hazra, *Current Science* **78**, 1467 (2000).
10. M. Bjorck, G. Andersson. *J. Appl. Cryst.* **40**, 1174 (2007).