

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

На правах рукопису

ЗАБАШТА ЛЮБОВ АНАТОЛІЇВНА

**ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СТРУКТУР  
НАПІВПРОВІДНИК - ПОВЕРХНЕВА ФАЗА МЕТОДОМ  
БАГАТОКУТОВОЇ ЕЛІПСОМЕТРІЇ**

Спеціальність 01.04.07 - фізика твердого тіла

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття вченого ступеня  
кандидата фізико - математичних наук



Суми - 1996

39

AB 36, 75

Дисертація є рукопис.

Роботу виконано на кафедрі фізики Сумського державного університету

ЛННБ України ім.В.Стефаника



00760860 (R)

Науковий керівник:

доктор фізико - математичних наук,  
професор **Дмитрук М.Л.**

Офіційні опоненти:

доктор фізико - математичних наук,  
професор **Поперенко Л.В.** (Київський державний національний університет ім.Т.Г.Шевченка)

доктор фізико - математичних наук,  
професор **Олемський О.І.** (Сумський державний університет)

Провідна організація

Інститут фізики Національної академії наук України  
(м.Київ)

Захист дисертації відбудеться "27" листопада 1997 р. о 15 год. на засіданні спеціалізованої ради К 22.01.01 при Сумському державному університеті за адресою: 244007, м.Суми, вул.Римського-Корсакова, 2, ауд. 216 корп. ЕТ.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Сумського державного університету.

Автореферат розіслано "29" січня 1997 р.

Вчений секретар спеціалізованої ради, кандидат фізико-математичних наук

А.С.Опанасюк

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність проблеми.** Дослідження фізичних (зокрема, оптичних) і фізико - хімічних явищ на поверхні і межах поділу твердих тіл, тобто в умовах їх істотного просторового обмеження, являє собою безсумнівний науковий інтерес, оскільки діелектричні, структурні, електронні та інші властивості поверхневої фази (межі поділу) не є в загальному випадку такими ж, як в об'ємі. З іншого боку, інтерес до проблем дослідження явищ, що відбуваються на межі поділу напівпровідник - поверхнева фаза пов'язаний з розширенням області прикладних застосувань поверхневих явищ у напівпровідниках в численних системах мікро- та оптоелектроніки.

Велику цікавість викликає дослідження властивостей межі поділу діелектрик - напівпровідник (ДН), в зв'язку з тим, що нанесення діелектрика на поверхню напівпровідника використовується при створенні МДН - приладів (польових транзисторів, варикапів), пасивації поверхні напівпровідника та ізоляції активних елементів інтегральних схем. Практично найбільш вивчена межа поділу кремнію з термічно вироценим шаром окислу кремнію Si-SiO<sub>2</sub>. Оскільки, нарівні з кремнієм і германієм, напівпровідники типу A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> (особливо GaAs, GaP, InP та інші) нині є найважливішими напівпровідниковими матеріалами, актуальним питанням є дослідження властивостей їх поверхневих фаз. Окрім того, практично важливою задачею прикладних наук є дослідження кінетики зміни поверхневих властивостей складних напівпровідникових сполук у процесі окислення для отримання структур зі стабільними в часі характеристиками.

Особливий інтерес викликає вивчення оптичних властивостей несучільних (острівцевих) металевих плівок і зміна властивостей поверхні напівпровідника введенням домішок різних металів способом так званого поверхневого легування з розчинів. За аналогією з об'ємним легуванням можна очікувати активного впливу поверхневого легування на структурні, електричні, фотоелектричні та оптичні властивості поверхні. Окрім того, місцезнаходження домішки металу на

поверхні напівпровідника допускає більше різноманіття у відношенні її зв'язків координації, валентності порівняно з об'ємом. Оптичні неруйнівні методи дослідження острівцевих металевих плівок дозволяють кількісно описати їх реальну структуру, а також електродинамічні властивості самих острівців (кластерів) в залежності від їх розмірів. Окрім того, ці дослідження дозволяють оцінити статистичну однорідність острівцевих плівок і напівпровідникових підкладок. Ці дані можуть суттєво доповнити результати прямих електронно - мікроскопічних спостережень. Задачі дослідження поверхневих властивостей розглянутих вище систем потребують розробки нових і вдосконалення існуючих експериментальних методик аналізу приповерхневої області.

Еліпсометрія є одним із неруйнівних методів вивчення властивостей поверхні, контролю плівок і перехідних шарів, а також визначення їх фізичних характеристик. При цьому еліпсометрія, в порівнянні з іншими методами, має високу чутливість до присутності поверхневих субмоношарових покриттів, перехідних і порушених шарів на межах поділу середовищ. Однак коректна інтерпретація результатів еліпсометричних вимірювань у подібних системах значно ускладнена через неоднозначність отримуваних розв'язків зворотної задачі еліпсометрії. Ця неоднозначність обумовлена, в першу чергу, можливими кореляціями між досліджуваними оптичними параметрами, а також наявністю похибок в експериментальних даних. Тому при відновленні досліджуваних оптичних параметрів, окрім створення теоретичних моделей, адекватних досліджуваній системі, особливу актуальність набуває використання чисельних алгоритмів, що враховують можливу наявність кореляції між відшукованими параметрами, та стійких до похибки в експериментальних даних.

**Мета роботи.** 1. Дослідити можливість використання методу регуляризації за Тихоновим для розв'язання оберненої задачі еліпсометрії. Розробити методику математичної обробки еліпсометричних даних в методі багатокуткових вимірювань на основі коректної постановки оберненої задачі еліпсометрії. Дослідити можливості розробленої методики при вивченні властивостей межі поділу напівпровідник-поверхнева фаза.

2. Вивчити особливості оптичних властивостей межі поділу діелектрик - напівпровідник (InP - окисна плівка; InP - діелектричне покриття; GaAs - власна окисна плівка; GaAs - анодний окисел; поверхня GaAs після зняття анодного окислу).

3. Дослідити методом еліпсометрії оптичні властивості та кінетику процесів окислення поверхні полікристалічних плівок CdTe при різних температурах відпалу. 4. Провести еліпсометричне дослідження впливу острівцевої металічної плівки Au на оптичні властивості напівпровідника GaAs. Вивчити особливості структурно - морфологічних перетворень на поверхні напівпровідника, легованій металами з розчину. Дослідити розмірну залежність динамічної поляризованості металевих мікрочасток (кластерів). (Відмітимо, що закономірності осадження золота, а також електрофізичні властивості легованої поверхні арсеніду галлію вивчались раніше іншими методами; експериментальні дані про їх оптичні властивості, отримані методом еліпсометрії, були відсутні.)

Вибір об'єктів дослідження в значній мірі обумовлений можливістю їх широкого практичного використання для створення приладів мікро-, оптоелектроніки.

**Наукова новизна** роботи полягає в наступному:

1. Вперше запропоновано коректну постановку оберненої задачі еліпсометрії в методі багатокутових вимірювань на основі принципу регуляризації А.Н.Тихонова. Розроблено стійкий чисельний алгоритм розв'язування оберненої задачі еліпсометрії.
2. Проведено теоретичне дослідження можливостей розробленої методики на прикладі відновлення оптичних параметрів системи напівпровідник - діелектрична плівка. Показано стійкість алгоритму до вибору початкового наближення і величини похибки в експериментальних даних. Досліджено проблеми однозначності задачі відновлення оптичних параметрів з багатокутових вимірювань при умові можливої кореляції між ними.
3. Проведено еліпсометричне дослідження поверхонь InP двох типів: 1) так званої реальної, тобто окисленої поверхні, з тонким шаром власних окислів; 2) поверхні, вкритої товстим шаром ( $\gg 100$  нм) двоокису кремнію. Показано

можливість одночасного відновлення сильно корельованих оптичних параметрів для поверхні I-го типу.

4. Вперше проведено дослідження кінетики процесів окислення поверхні полікристалічних плівок телуриду кадмію. За даними еліпсометричних досліджень проведено розрахунок відносного об'єму пор в рамках наближення ефективного середовища. Виявлено монотонне зниження коефіцієнту заломлення окисної плівки при підвищенні температури відпалу на всіх стадіях процесу окислення. Виявлено дифузійне обмеження процесу росту окисної плівки.
5. Вперше проведено еліпсометричне дослідження впливу острівцевої металічної структури Au на оптичні властивості напівпровідника GaAs. Досліджено вплив мікрорельєфу підкладки на еліпсометричні параметри. Проведена статистична оцінка параметрів мікрорельєфу поверхні напівпровідника GaAs. Проведено оцінку параметрів мікросорсткостей на основі наближення ефективного середовища. Запропоновано апроксимацію мікросорсткої поверхні GaAs однорідними шарами різного хімічного складу. Обговорюється модель ефективних діелектричних констант для легованої золотом (металізованої) поверхні GaAs. Проведено порівняння даних еліпсометрії з результатами мікроскопічного аналізу з морфології і структури легованої поверхні. Запропоновано структурну модель металізованої поверхні GaAs, що враховує специфіку осадження домішки і розподілу її по поверхні напівпровідника. Вперше методом багатокутової еліпсометрії визначена розмірна залежність динамічної поляризованості металевих мікрочасток (кластерів) Au на поверхні GaAs.

**Практична значимість** роботи полягає в тому, що:

1. Розроблено алгоритм розв'язування оберненої задачі еліпсометрії, що дозволяє відновлювати оптичні параметри неоднорідних відбиваючих систем при різному рівні похибки в експериментальних даних, а також при умові можливої кореляції між досліджуваними параметрами.

2. Отримані експериментальні дані еліпсометричного дослідження межі поділу діелектрик - напівпровідник на прикладі системи InP - власний окисел; InP - пасивуюче чужорідне покриття; GaAs - власний окисел; GaAs - анодний окисел; CdTe - окисна плівка розвивають і уточнюють уявлення про властивості поверхней матеріалів, перспективних для використання в науці і промисловості як базових шарів ряду напівпровідникових приладів.

3. Проведені дослідження дозволили встановити дифузійний характер процесу росту окисної плівки на поверхні полікристалічного CdTe. Виявлене монотонне зниження коефіцієнта заломлення окисної плівки на всіх стадіях процесу окислення при підвищенні температури відпалу дозволило зробити висновки щодо зміни складу окислу на поверхні телуриду кадмію.

4. На основі проведених еліпсометричних вимірювань отримана важлива інформація щодо формування суцільного контакту метал - напівпровідник на стадії острівцевого металічного покриття. Це дозволяє вдосконалювати електрохімічний спосіб отримання поверхнево - бар'єрних структур з високим параметром неідеальності їх вольтамперних характеристик.

**Особистий внесок** дисертанта полягає в постановці та вирішенні оберненої задачі еліпсометрії, а також в постановці та проведенні чисельних та експериментальних досліджень, обробці та обговоренні їх результатів, написанні робіт [1-13]. Основні результати та висновки дисертаційної роботи належать автору.

### **Основні положення та результати, які виносяться на захист :**

1.Методика математичної обробки еліпсометричних даних в методі багатокуткових вимірювань на основі коректної постановки оберненої задачі еліпсометрії, теоретичні та експериментальні дослідження можливостей розробленої методики при відновленні оптичних параметрів планарних структур.

2. Результати експериментального дослідження оптичних властивостей межі поділу напівпровідник - діелектричне покриття для систем: InP - власна окисна плівка; InP - діелектричне покриття; GaAs - природна окисна плівка; GaAs - анодний окисел; поверхня GaAs після хімічного травлювання анодного окислу.

3. Встановлений механізм росту окисної плівки на поверхні полікристалічного теллуриду кадмію (дифузійне обмеження і товщинна неоднорідність). Виявлена зміна складу стабільного окислу на поверхні теллуриду кадмію при зміні температури відпалу.

4. Отримана методом багатокутової еліпсометрії оцінка параметрів мікрорельєфу порушеного в процесі легування поверхневого шару GaAs на основі статистичних підходів і в рамках наближення ефективного середовища.

5. Структурна і оптична моделі легованої золотом поверхні напівпровідника GaAs, що враховують як особливості електрохімічного процесу росту острівців Au, так і розподіл їх по поверхні напівпровідника.

6. Встановлена методом багатокутової еліпсометрії розмірна залежність динамічної поляризованості острівців (кластерів) Au золота на поверхні GaAs.

### **АПРОБАЦІЯ РОБОТИ І ПУБЛІКАЦІЇ**

Основні результати дисертації доповідались на конференціях і семінарах:

- III Російсько-Українсько-Німецький аналітичний симпозиум "Аргус-94" (Климентово, 1994р.);
- Науково - технічна конференція "Техніка і фізика електронних систем і пристроїв" (Суми, 1995р.);
- Міжнародна наукова конференція, присвячена 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя "Фізика в Україні" (Львів, 1995р.);
- Міжнародна наукова конференція по оптичним методам діагностики матеріалів і пристроїв для опто-, мікро- і квантової електроніки "OPTDIM'95" (Київ, 1995р.);
- XII Українська школа-семінар з міжнародною участю "Спектроскопія молекул і кристалів" (Ніжин, 1995р.);

- Науково - технічна конференція викладачів, співробітників і студентів СумДУ (Суми, 1996р.);
- Міжгалузевий науково-практичний семінар з участю зарубіжних спеціалістів "Вакуумна металізація" (Харків, 1996р.);
- II Міжнародна конференція "MPSL'96" (Суми, 1996р.);
- Міжнародна конференція з поляриметрії і еліпсометрії "P/E-metry" (Казимирц Дольні, Польща, 1996 р.);
- Міжнародний семінар з прогресивних технологій багатокомпонентних плівок і структур та їх застосування в фотоніці (Ужгород, 1996р.);
- IX Міжнародна школа-семінар по фізиці конденсованого стану "Майбутнє науки і технології тонких плівок" (Софія, Болгарія, 1996 р.)

Результати досліджень надруковані в 13 статтях та тезах доповідей, перелік яких наведено в списку публікацій в авторефераті.

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається із вступу, чотирьох глав, висновків, списку цитованої літератури, що містить 125 назв, та додатку. Робота викладена на 158 сторінках тексту, включаючи 38 малюнків і 15 таблиць.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність теми дисертації і сформульована ціль роботи. Приведені основні положення, які виносяться на захист, вказані практична значимість і наукова новизна отриманих результатів.

У першій главі "Використання методу багатокутової еліпсометрії при дослідженні складних оптичних систем" проведено порівняльний аналіз характеристик найбільш поширених методів дослідження структури і складу приповерхневої області твердих тіл. Висвітлені можливості оптичних методів аналізу поверхні, зокрема, методу еліпсометрії. Розглянуті проблеми, пов'язані з інтерпретацією даних еліпсометричних досліджень. Обговорюється некоректний характер задачі одночасного відновлення багатьох оптичних параметрів неоднорідних відбиваючих світло систем. Обґрунтовуються принципи використання методу регуляризації А.Н. Тихонова для рішення оберненої задачі еліпсометрії.

Розглянути можливості опису властивостей неоднорідних приповерхневих шарів в рамках наближення теорії ефективного середовища. Наводяться рівняння для різних мікроструктурних моделей двохфазної ефективної плівки, отриманих з розв'язку рівняння Клаузіуса-Моссоті. Обговорюється можливість отримання додаткової інформації щодо мікроскопічної геометрії і складу фаз ефективної плівки шляхом встановлення абсолютних меж на можливі значення ефективної діелектричної функції. Вміщено огляд робіт по використанню методу багатокуткових вимірювань в еліпсометрії при дослідженні складних оптичних систем.

**Друга глава** "Стійкий чисельний метод розв'язання оберненої задачі еліпсометрії в методі багатокуткових вимірювань" присвячена опису розробленого в даній роботі стійкого чисельного методу розв'язування оберненої задачі еліпсометрії в методі багатокуткових вимірювань.

При проведенні аналізу результатів еліпсометричних вимірювань на неоднорідних системах в дисертації використовується багат шарова модель: неоднорідний шар апроксимується набором  $N$  однорідних шарів товщиною  $d_j$ . В такій моделі припускається, що середовище, шари і підкладка однорідні і оптично ізотропні, а на межі поділу показник заломлення змінюється стрибкоподібно.

В цьому розділі дається коректна постановка оберненої задачі еліпсометрії, яка ґрунтується на заміні вихідної некоректної задачі мінімізації функціоналу

$$R(\mathbf{B}) = \|S(\mathbf{B})\|^2 = \sum_{i=1}^M [\{\Psi_i(\mathbf{B}, \varphi_i) - \Psi_i'\}^2 + \{\Delta_i(\mathbf{B}, \varphi_i) - \Delta_i'\}^2]$$

близькою до неї, але стійкою задачею мінімізації так званого згладжуючого функціоналу А.Н.Тихонова

$$T(\mathbf{B}) = \|S(\mathbf{B})\|^2 + \alpha(\mathbf{B} - \mathbf{B}_0)^2, \alpha = \alpha(\delta)$$

при умовах

$$b_{j \min} \leq b_j \leq b_{j \max}, \quad j=1, \dots, k$$

Таблиця 1 - Результат розв'язування оберненої задачі при пошуку двох невідомих параметрів\*

$ K_{jj}' $	$n_{fi}$	$n_{ff}$	$n_{si}$	$n_{sf}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.328 (0.299)	1.225	1.475 (1.475)	3.7	3.85 (3.85)	2915 (4270)	0.0547 (0.0547)
$ K_{jj}' $	$n_{fi}$	$n_{ff}$	$k_{si}$	$k_{sf}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.977 (0.975)	1.2	1.4755 (1.474)	0.02	0.02 (0.02)	398 (390)	0.0547 (0.0547)
$ K_{jj}' $	$n_{fi}$	$n_{ff}$	$k_{fi}$	$k_{ff}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.244 (0.249)	1.15	1.475 (1.475)	0.01	0.01 (0.01)	738 (738)	0.0547 (0.0547)
$ K_{jj}' $	$n_{fi}$	$n_{ff}$	$t_{fi}$	$t_{ff}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.999 (0.999)	1.175	1.475 (1.321)	4	4 (4.9)	544 (544)	0.0547 (0.0547)
$ K_{jj}' $	$n_{si}$	$n_{sf}$	$k_{si}$	$k_{sf}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.107 (0.08)	4.25	3.85 (3.85)	0.02	0.02 (0.02)	18000 (13000)	0.0547 (0.0547)
$ K_{jj}' $	$n_{si}$	$n_{sf}$	$k_{fi}$	$k_{ff}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.996 (0.999)	3.88	3.85 (3.872)	0.01	0.01 (0.09)	91.7 (91.4)	0.0547 (0.0547)
$ K_{jj}' $	$n_{si}$	$n_{sf}$	$t_{fi}$	$t_{ff}$	$R(\mathbf{B}_i)$	$R(\mathbf{B}_f)$
0.298 (0.265)	3.75	3.85 (3.85)	4	4 (4)	1050 (1200)	0.0547 (0.0547)

\*Початкові наближення (i), рішення (f), коефіцієнт парної кореляції  $K_{ij}'$ . Величини решти параметрів фіксовані і дорівнюють своїм точним значенням. В лапках наведені дані, отримані з використанням алгоритму нелінійного МНК.

де параметр регуляризації  $\alpha = \alpha(\delta) \geq 0$  обирається таким, щоб виконувалась умова  $R(\mathbf{B}) \leq \delta^2$ . Тут  $\Psi_i$  і  $\Delta_i'$  - вимірні в експерименті еліпсометричні кути,  $\mathbf{B}=(b_1, b_2, \dots, b_k)$  - параметричний вектор, що характеризує досліджувану структуру,  $\mathbf{B}_0$ - фіксований вектор в просторі розв'язків;  $\Psi_i(\mathbf{B}, \varphi_i)$

$i \Delta_i(\mathbf{B}, \varphi_i)$  - еліпсометричні кути, розраховані для даного вектора  $\mathbf{B}$  і фіксованої довжини хвилі  $\lambda$  при  $i$ -ому куті падіння  $\varphi_i$ ,  $M$  - число вимірювань.

Описано розроблений в даній роботі алгоритм розв'язування оберненої задачі еліпсометрії в методі багатокуткових вимірювань, стійкий щодо вибору як початкового наближення, так і до похибки в експериментальних даних. Наводяться результати чисельних експериментів для системи напівпровідник - окисна плівка, які демонструють стійкість алгоритму до вибору початкового наближення і величини похибки в експериментальних даних. Проведено порівняльний аналіз результатів розв'язування оберненої задачі еліпсометрії регуляризуючим алгоритмом, алгоритмом на основі комплексного метода Бокса і алгоритмом з використанням нелінійного МНК (методу найменших квадратів). Розглянуті питання кореляції між параметрами і однозначність задачі відновлення оптичних параметрів. Як видно з таблиці 1, де наведені для порівняння результати розв'язку оберненої задачі регуляризуючим алгоритмом і алгоритмом з використанням нелінійного МНК, використання регуляризуючого алгоритму забезпечує отримання значно точніших результатів, ніж застосування нелінійного МНК при тих же початкових наближеннях. Точний результат вдається отримати навіть при пошуку значень для пар  $n_r - k_s$ ,  $n_r - d_f$ ,  $n_s - k_f$ , де параметр парної кореляції близький до одиниці.

В третій главі "Експериментальне дослідження діелектричних покриттів на поверхні напівпровідникових з'єднань  $A^{III}B^V$  і  $A^{II}B^{VI}$ " описана методика експериментального визначення поляризаційних кутів при реалізації нульового оптичного методу, подається схема еліпсометричної установки.

Представлені результати експериментального дослідження поверхонь  $\text{InP}$  двох типів: 1) так звана реальна, тобто окислена поверхня, з тонким шаром власних окислів; 2) поверхня, покрита товстим шаром ( $\gg 100$  нм) двоокису кремнію, що отримана способом електронно-променевого розпилення при невеликому ( $+200^\circ\text{C}$ ) підігріві підкладки. Розрахунок коефіцієнтів парної кореляції чутливості до параметрів для обох

типів поверхонь InP показав, що для поверхні I-го типу всі оптичні параметри є сильно скорельованими. Показана можливість одночасного відновлення сильно корелюючих оптичних параметрів для поверхні I-го типу за результатами розв'язку оберненої задачі регуляризованим алгоритмом.

За результатами дослідження анодно-окисленої поверхні монокристалів GaAs зроблено висновок, що анодне окислення, яке знімає порушений приповерхневий шар, призводить до зменшення показника поглинання і до підвищення показника заломлення, що пов'язане із зменшенням впливу шорсткостей поверхні на оптичні константи і підвищенням щільності приповерхневих шарів.

Подані результати еліпсометричного дослідження процесів окислення поверхні полікристалічних плівок CdTe. Виявлено монотонне зниження коефіцієнту заломлення окисної плівки при підвищенні температури відпалу на всіх стадіях процесу окислення, що пояснюється зміною складу окислу, який утворюється на поверхні CdTe. При низьких температурах відпалу на поверхні CdTe переважає окисел  $\text{CdTeO}_3$ , в той час, як при високих температурах утворюється окисел  $\text{TeO}_2$ . Встановлено дифузійне обмеження процесу росту окисної плівки. Розраховані значення оптичних констант напівпровідникової підкладки, окисної плівки і товщини окисного шару при різних температурах відпалу (таблиця 2).

Таблиця 2 - Результати експериментального визначення оптичних параметрів поверхні зразків CdTe при різних температурах відпалу

$T_{\text{ox}}, ^\circ\text{C}$	$n_s, \text{CdTe}$	$k_s, \text{CdTe}$	$n_{f\text{ox}}, t=200 \text{ год}$	$D_{\text{ox}}, \text{нм}, t=200\text{год}$
20	2.76	0.56	2.37	4.2
260	2.53	0.83	2.15	6.4
340	2.64	0.55	2.11	23.2
420	2.57	0.75	2.03	38.8

Проведено розрахунок відносного об'єму пор в рамках наближення ефективного середовища.

В **четвертій главі** "Еліпсометричне дослідження впливу острівцевої металічної структури на оптичні властивості напівпровідника" наведені результати дослідження методом еліпсометрії впливу острівцевої металічної структури на оптичні властивості напівпровідника. Описана технологія вирощування металічних острівцевих плівок на поверхні напівпровідника і методика експерименту. Приводяться експериментальні результати дослідження основних еліпсометричних параметрів для легованої поверхні GaAs (рис.1). Встановлено, що поверхневе легування золотом суттєво змінює оптичні властивості поверхні напівпровідника GaAs. Максимальні зміни параметрів  $\delta\Delta = \Delta - \underline{\Delta}$  і  $\delta\Psi = \Psi - \underline{\Psi}$  ( $\underline{\Delta}$  і  $\underline{\Psi}$  відповідають окисленій нелегованій реальній поверхні) для кута падіння пучка світла  $\varphi = 75^\circ$  і при концентраціях домішки в розчині ( $C = 8 \div 16 \cdot 10^{-5}$  г·іон/л) досягають  $|\delta\Delta| = 55^\circ$  і  $|\delta\Psi| = 19^\circ$ . Кутові залежності  $\delta\Delta(\varphi)$  і  $\delta\Psi(\varphi)$  немонотонні і змінюють знак при  $\varphi = 75^\circ$  (рис.1).

Проведений аналіз експериментальних даних в рамках моделей напівпровідник - діелектрична плівка і напівпровідник - однорідна металева плівка, показав, що досліджувану поверхневу структуру не можна описувати в рамках вказаних простих моделей. Це пояснюється оптичною неоднорідністю утворюваних поверхневих покриттів. Методом електронної мікроскопії встановлено, що металеві покриття мають чітко виявлену острівцеву структуру; поверхнева густина, радіус і висота острівців сильно змінюються із зміною умов легування. Максимально легована поверхня GaAs виявляється неоднорідною з сильно розвинутим рельєфом. Відзначається також, що особливості процесу поверхневого легування приводять до створення мікрорельєфу не тільки металевої плівки, але й власне поверхні арсеніду галію. Для виділення вкладу мікрорельєфу підкладки на оптичні властивості острівцевої структури вивчались властивості поверхні арсеніду галію після вилучення металічного покриття хімічним розчиненням його в розчині персульфату амонію.

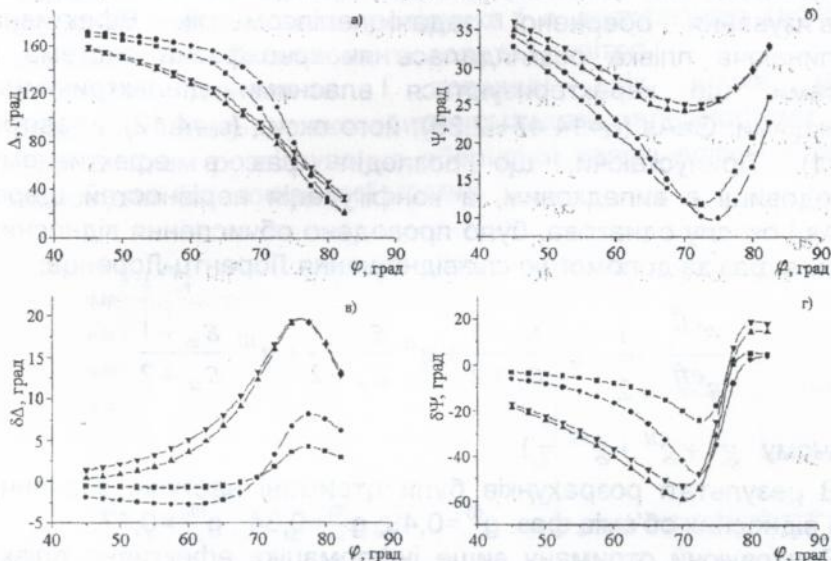


Рисунок 1— Залежність від куту падіння  $\varphi$ : а) еліпсометричного параметра  $\Delta$ ; б) еліпсометричного параметра  $\Psi$ ; в) зміни параметра  $\delta\Delta$ ; г) зміни параметра  $\delta\Psi$ . Концентрація  $C$  легуючої домішки: —■—  $1 \cdot 10^{-5}$  г/іон/л; —●—  $4 \cdot 10^{-5}$  г/іон/л; —▲—  $8 \cdot 10^{-5}$  г/іон/л; —▼—  $16 \cdot 10^{-5}$  г/іон/л

Проведена статистична оцінка параметрів мікрорельєфу поверхні напівпровідника GaAs вказує на наявність слабого рельєфу. Для оцінки параметрів мікрорельєфу був проведений аналіз еліпсометричних даних для обробленої в розчині персульфату амонію легованої поверхні ( $C=1 \cdot 10^{-5}$  г/іон/л) GaAs на основі наближення ефективного середовища, оскільки згідно з даними електронно-мікроскопічних вимірювань, мікрорельєф поверхні, що створюється в процесі її легування металічними домішками, є гладким в розумінні:  $l \ll \lambda$  (тут  $l$  — середньостатистична висота шорсткостей,  $\lambda$  — довжина хвилі світла) і нахил шорсткостей  $\text{tg } \beta \leq 1$ . Ці нерівності задовільняють вимогам застосовності теорії еквівалентного середовища для опису впливу шорсткостей на результати еліпсометричних вимірювань. Шорсткий поверхневий шар описувався ефективною поглинаючою плівкою з плосопаралельними межами. Оптичні властивості плівки характеризувались ефективною діелектричною функцією  $\epsilon^{\text{eff}}$ ,

визначеною за еліпсометричними вимірюваннями шляхом розв'язування оберненої задачі еліпсометрії. Ефективна поглинаюча плівка розглядалась як трьохфазна система з фазами, що характеризуються власними діелектричними функціями: GaAs ( $\epsilon_I = 14.47 + i2.35$ ); його оксид ( $\epsilon_{II} = 4.12$ ); і повітря ( $\epsilon_{III} = 1$ ). Припускаючи, що розподіл фаз в ефективному середовищі є випадковим, а конфігурація нерівностей шарів GaAs і окислу однакова, було проведено обчислення відносних об'ємів фаз за допомогою співвідношення Лорентц-Лоренца:

$$\frac{\epsilon^{eff} - 1}{\epsilon^{eff} + 2} = g^I \frac{\epsilon_I - 1}{\epsilon_I + 2} + g^{II} \frac{\epsilon_{II} - 1}{\epsilon_{II} + 2} + g^{III} \frac{\epsilon_{III} - 1}{\epsilon_{III} + 2}$$

причому  $g^I + g^{II} + g^{III} = 1$

В результаті розрахунків були отримані наступні значення для відносних об'ємів фаз:  $g^{(I)} = 0,49$ ;  $g^{(II)} = 0,34$ ;  $g^{(III)} = 0,17$ .

Враховуючи отриману вище інформацію, ефективна плівка розглядалась в рамках багат шарової моделі, що апроксимує неоднорідний шорсткий шар набором однорідних поглинаючих шарів різного хімічного складу. Кількість шарів і початкові наближення для шуканих значень оптичних параметрів вибирались з аналізу даної моделі на основі наближення ефективного середовища. Оптичні константи і товщини шарів визначались шляхом розв'язування відповідної оберненої задачі (рисунки 2).

Отримані дані дозволяють побудувати оптичну модель легованої золотом поверхні GaAs з врахуванням мікрорельєфу підкладки. З цією метою досліджувана легована поверхнева структура розглядалась в рамках моделі: напівпровідник - шорсткий шар - поглинаюча ефективна плівка. У відповідності з отриманими для поверхні із стравленим металічним покриттям даними, шорсткий шар є трьохшаровою поглинаючою плівкою, в якій компоненти повітря заміщуються компонентами золота. Для зразка з концентрацією легуєної домішки в розчині  $C = 1 \cdot 10^{-5}$  г-іон/л відносний об'єм компоненти золота фіксувався, а для решти зразків розраховані для цієї моделі значення оптичних констант і товщин шарів вибирались як початкове наближення.

Ефективна плівка описує острівцеву золоту плівку, створену на шорсткій поверхні напівпровідника і є двофазною системою, яка містить у собі компоненти золота і повітря.

Оптичні константи і товщини всіх шарів моделі розраховувались за експериментальними залежностями  $\Delta(\varphi)$  і  $\Psi(\varphi)$  шляхом розв'язування оберненої задачі еліпсометрії для відповідної багат шарової моделі.

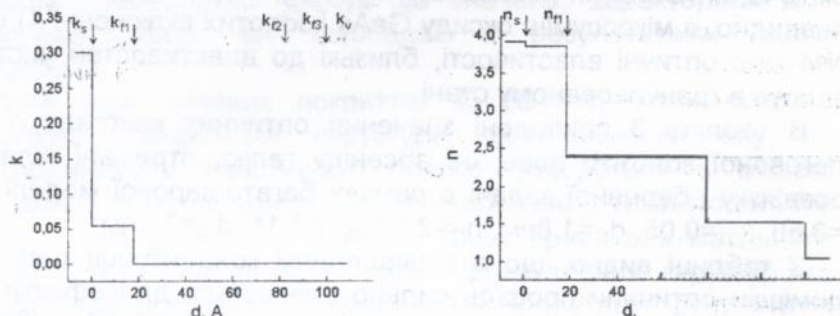


Рисунок 2 - Профіль: а) коефіцієнта поглинання  $k$ , б) коефіцієнта заломлення  $n$  обробленої в розчині персульфату амонію легованої золотом поверхні GaAs ( $C=1 \cdot 10^{-5}$  г.іон/л)

Для оцінки адекватності вибраної моделі ефективної плівки досліджуваній поверхневій структурі розраховувались абсолютні границі на допустимі значення  $\varepsilon'_{\text{eff}}$  і  $\varepsilon''_{\text{eff}}$ . Розраховані відносні об'єми фази золота для різних концентрацій легуючої домішки в розчині подані в таблиці 3.

Таблиця 3 - Результати розв'язування оберненої задачі еліпсометрії для легованої золотом поверхні GaAs в рамках багат шарової моделі

$C \cdot 10^{-5}$ г.іон/л	$n_{f3}$	$k_{f3}$	$d_{f3}$ , нм	$n_{f4}$	$k_{f4}$	$d_{f4}$ , нм	g(Au)
1	2.49	0.27	3.0	1.41	0.22	4.6	0.21
4	2.49	0.27	3.0	1.18	0.39	12.5	0.11
8	2.52	0.27	3.0	0.75	1.35	18.1	0.44
16	2.68	0.27	3.0	0.75	1.62	17.6	0.68

Відносні об'ємні величини покриття поверхні GaAs золотом  $\epsilon_{Au}$  добре узгоджуються з даними електронно-мікроскопічних вимірювань відносного покриття поверхні золотом. Ефективні шари в даній багатошаровій структурі мають досить чітку електродинамічну інтерпретацію, а саме: 1) шар №1 є GaAs із слабо зміненими внаслідок поверхневого легування оптичними параметрами; 2) шар №2 - це оксид арсеніду галію (майже непоглинаючий на довжині хвилі 632.8 нм), який вміщує включення GaAs чи його компоненти; 3) поглинаючий шар №3, очевидно, є мікросуміш оксиду GaAs і золотих включень; 4) шар №4 має оптичні властивості, близькі до властивостей чистого золота в гранульованому стані.

В таблиці 3 приведені значення оптичних констант  $n$  і  $k$  легованої золотом поверхні арсеніду галію, отримані шляхом розв'язку оберненої задачі в рамках багатошарової моделі ( $n_{f1}=3.56$ ,  $k_{f1}=0.05$ ,  $d_{f1}=1.8$ нм,  $n_{f2}=2.74$ ,  $k_{f2}=0.11$ ,  $d_{f2}=7.1$ нм).

З таблиці видно, що з підвищенням концентрації легуючої домішки оптичний профіль сильно змінюється для ефективної поглинаючої плівки ( $n_{f4}$ ,  $k_{f4}$ ), в той час, як оптичні константи решти шарів змінюють свої значення досить слабо. Це підтверджує адекватність запропонованих багатошарових моделей легованої золотом і шорсткої поверхонь GaAs.

Зроблено висновок, що еліпсометричні дослідження дозволяють побудувати структурну модель легованої металом поверхні напівпровідника, що враховує як особливості процесу легування, так і розподіл домішки по поверхні напівпровідника, а також мікрорельєф поверхні.

Використовуючи отриману за даними електронної мікроскопії величину відносного об'єму золота, розраховувалась діелектрична функція металічних острівців шляхом вирішення оберненої оптимізаційної задачі. Показано, що  $\epsilon'_{Au}$  і  $\epsilon''_{Au}$  острівців з підвищенням товщини плівки наближаються до значень  $\epsilon'$  і  $\epsilon''$ , характерних для масивного золота. При переході від діелектричної проникності, застосування якої до наночастинок ( $d \leq 10$ нм) проблематичне, до їх питомої діелектричної поляризованості  $\alpha'$ :

$$\alpha' = \frac{\alpha}{d^3} = \frac{\varepsilon - \varepsilon^{eff}}{\varepsilon + 2\varepsilon^{eff}}$$

де  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ , були зроблені наступні висновки. При малих покриттях  $Q$ , коли острівцева плівка характеризується простою морфологією: ізольовані острівці, розміщені в діелектричній матриці, уявна частина поляризованості росте із зменшенням острівців і монотонно прямує до значень, характерних для металічних сфер, що співпадає з результатами інших досліджень.

Проте, при значних покриттях  $Q$  ( $Q > 0,5$ ), коли острівці утворюють ланцюжкові структури фрактального типу, їх електродинамічні властивості погано описуються в моделі ізольованих золотих сфер. Тому розраховані в такій моделі  $\text{Re } \alpha'$  і  $\text{Im } \alpha''$  не досягають значень, характерних для масивного золота. Оптичні властивості таких фрактальних структур на поверхні твердого тіла і, зокрема, інтерпретація результатів еліпсометричних досліджень, потребують додаткових досліджень, що передбачається зробити в подальших роботах.

В додатку наведено опис пакету програм, що реалізують регуляризований алгоритм вирішення оберненої задачі в методі багатокуткової еліпсометрії.

Основні результати і висновки дисертації формулюються таким чином:

1. Розвинута методика математичної обробки експериментальних даних в методі багатокуткової еліпсометрії на основі коректної постановки оберненої задачі з використанням методу регуляризації за А.Н.Тихоновим. Проведені теоретичні та експериментальні дослідження показали, що запропонований в дисертації чисельний алгоритм стійкий до вибору початкового наближення, похибки в експериментальних даних, а також наявності кореляції між оптичними параметрами.
2. За результатами експериментального дослідження визначені оптичні константи монокристалічного  $\text{InP}$  ( $n=3.76$ ,  $k=0.26$ ), оптичні константи і товщина власної окисної плівки  $\text{InP}$  ( $n=1.84$ ,  $k=0$ ,  $d=3\text{nm}$ ), оптичні константи і товщина шару

$\text{SiO}_2$  ( $n=1.452$ ,  $k=0.01$ ,  $d=99\text{nm}$ ). Продемонстрована можливість одночасного відновлення кількох сильно корелюючих параметрів з використанням розробленого в дисертації регуляризуючого алгоритму.

3. За результатами досліджень монокристалів і епітаксialьних п-п структур GaAs, підданих анодному окисненню, отримані значення оптичних параметрів поверхні GaAs ( $n=3.82$ ,  $k=0.29$ ), оптичні константи і товщина власної окисної плівки ( $n=2.04$ ,  $k=0$ ,  $d=2.70$  нм), анодного окислу ( $n=1.84$ ,  $k=0$ ,  $d=59.3$  нм), поверхні GaAs після зняття анодного окислу ( $n=3.97$ ,  $k=0.27$ ). Визначені товщини реального ( $d=5.3$  нм) і анодного окислів ( $d=59.3$  нм). Встановлено, що анодне окислення приводить до зменшення  $k$  і до підвищення  $n$ . Це пов'язано із зменшенням ролі шорсткостей.
4. Досліджена кінетика процесів окислення поверхні полікристалічних плівок телуриду кадмію. Виявлено монотонне зниження коефіцієнта заломлення окисної плівки при підвищенні температури відпалу на всіх стадіях процесу окислення, що пояснюється зміною складу стабільного окислу на поверхні CdTe. Встановлено дифузійне обмеження процесу росту окисної плівки. Визначені значення оптичних констант полікристалічного CdTe ( $n=2.6$ ,  $k=0.6$ ), оптичних констант і товщини окисної плівки при різних температурах відпалу.
5. Методом електронної мікроскопії встановлено, що розподіл розмірів острівців на легуваній поверхні GaAs в залежності від їх концентрації підпорядковується нормальному закону. Виявлено, що із збільшенням експозиції  $t$ , функція ймовірності перестає бути унімодальною. Останнє відбиває наявність різних активних центрів з різними типами зарядового обміну між підкладкою і острівцем золота.
6. Проведена на основі статистичних підходів оцінка впливу мікрорельєфу підкладки на еліпсометричні параметри вказує на пологий, плавний характер шорсткостей.
7. Зроблена оцінка параметрів мікروشорсткостей порушеного в процесі легування поверхневого шару GaAs на основі наближення ефективного середовища в рамках різних

мікроструктурних моделей з фазами різного складу. Шороховатий поверхневий шар розглядався в рамках багат шарової моделі. Шляхом вирішення відповідної оберненої задачі визначені оптичні константи і товщини шарів.

8. Проведено аналіз еліпсометричних даних легованої золотом поверхні GaAs на основі наближення ефективного середовища з врахуванням шорсткостей напівпровідникової підкладки. Побудована оптична та структурна моделі легованої золотом поверхні GaAs з врахуванням мікрорельєфу підкладки. Розраховані відносні об'єми фази золота для різних концентрацій домішки в розчині. Проведено аналіз розмірної залежності динамічної поляризованості золотих острівців.

#### **Основні результати дисертації надруковані в таких роботах:**

- 1.Забашта Л.А. Использование комплексного метода при восстановлении оптических параметров неоднородных систем в эллипсометрии // Вестник Сумского государственного университета. -1994. -№2. -С. 17 - 19.
- 2.Zabashtha L.A., Zabashtha O.I. Solution of inverse problem in ellipsometry// Proc.SPIE. -Optical diagnostics of materials and devices for opto- mikro-, and quantum electronics; Sergey V.Svechnikov, Mikhail Ya.Valakh, Editors. -Kiev,1995. - №2648. - P.152 - 155.
- 3.Забашта Л.А., Забашта О.И., Сторижко В.Е., Овчаренко А.П. Устойчивый метод решения обратной задачи эллипсометрии// Поверхность. -1996.-№ 6. С. 26 - 32.
- 4.Забашта Л.А., Забашта О.И., Овчаренко А.П. Устойчивый численный метод решения обратной задачи эллипсометрии // Научно - техническая конференция "Техника и физика электронных систем и устройств": Сумы, 1995. - С.382.
- 5 Забашта Л.А., Забашта О.И., Игнатенко В.П., Перекрестов В.И. Интерактивная графическая система "ELLA" для решения обратной задачи эллипсометрии // Научно - техническая

конференція "Техніка і фізика електронних систем і устроїв": Суми; 1995. - С.395.

6. Забашта Л.А., Ігнатенко В.М. Дослідження оптичних властивостей багаточастотних структур методом еліпсометрії // Міжнародна наукова конференція, присвячена 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя "Фізика в Україні": Львів, 1995. -С.177.

7. Дмитрук Н.Л., Забашта Л.А., Ігнатенко В.М., Кшнякіна С.І. Определение оптических свойств соединений типа  $A^mB^v$  методом многоугловой эллипсометрии // XII Українська школа-семінар з міжнародною участю "Спектроскопія молекул та кристалів": Ніжин, 1995. -С.66.

8. Забашта Л.А., Ігнатенко В.М., Опанасюк А.С., Харченко В.І. Исследование процессов окисления поверхности пленок CdTe методом эллипсометрии //Труды Украинского вакуумного общества : Харьков, 1996. -Т.2. - С.222 - 225.

9 Dmitruk N.L., Zabashta L.A. Ellipsometry studies of the effect of the metal island structure on the optical properties of the semiconductor surface // International conference "Polarimetry and ellipsometry": Kazimierz Dolny, Poland, 1996. - P.41.

10.Zabashta L.A., Zabashta O.I. Practical aspects of multiple-angle ellipsometry of semiconductor structures // International conference "Polarimetry and ellipsometry": Kazimierz Dolny, Poland, 1996. - P.103.

11. Dmitruk N.L., Zabashta L.A. Effect of discontinuous gold films on the optical properties of GaAs surface// Second International Conference MPSL'96: Sumy, 1996.- P.49.

12. Dmitruk N.L., Ignatenko V.M., Kshnjakina S.I., Zabashta L.A., Application of multi - angle ellipsometry for discontinuous metallic films

on semiconductor surface// International workshop on advanced technologies of multicomponent solid films and structures and their application in photonics: Uzhgorod, 1996.-P.20.

13.Забашта Л.А., Забашта О.І. Восстановление оптических параметров в методе многоугловой эллипсометрии // Вестник Сумского государственного университета. -1996. -№5. -С. 34 - 39.

## АННОТАЦИЯ

**Забашта Л.А. Исследование оптических свойств структур полупроводник - поверхностная фаза методом многоугловой эллипсометрии**

Диссертация (рукопись) на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика твердого тела. Сумский государственный университет, Сумы, 1996.

К защите представлена разработанная методика математической обработки экспериментальных данных в методе многоугловой эллипсометрии на основе корректной постановки обратной задачи эллипсометрии, теоретические и экспериментальные исследования возможностей разработанной методики, изложенные в 13 научных публикациях. Проведено эллипсометрическое исследование влияния островковой металлической структуры на оптические свойства полупроводника. Исследовано влияние микрорельефа поверхности на эллипсометрические параметры. Изучена размерная зависимость динамической поляризуемости островков (кластеров) золота на поверхности полупроводника.

**Ключові слова:** багаточарові структури, тонкі плівки, зворотня задача еліпсометрії, оптичні властивості, ефективно середовище, динамічна поляризованість.

## ABSTRACT

*Lubov A.Zabashta. Multiple - Angle Ellipsometry Studies of the Optical Properties of the Semiconductor - Surface Phase Structures.*

The dissertation (manuscript) for the obtaining of the scientific degree of the candidate of science in the mathematics and physics corresponding to the speciality 01.04.07 - solid state physics, Sumy State University, Sumy, 1996.

The thesis presents a technique developed for processing experimental data obtained by multiple - angle ellipsometry using the correct formulation of the inverse ellipsometry problem as well as theoretical and experimental studies of the potentialities of the technique described in 13 publications. Ellipsometry studies were performed of the effect of the metal island structure on the semiconductor optic properties. The effect of the surface microrelief on the ellipsometry parameters was examined. The dimensional dependence of the dynamic polarization of gold islands (clusters) was studied on the semiconductor surface.

440352

Ав 36.759

Забашта Любов Ан

**ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СТРУКТУР  
НАПІВПРОВІДНИК - ПОВЕРХНЕВА ФАЗА МЕТОДОМ  
БАГАТОКУТОВОЇ ЕЛІПСОМЕТРІЇ**

Відповідальний за випуск – Денисов Станіслав Іванович

Підп. до друку 21.01.97. Формат 60x74/16  
Тираж 100 прим.      Замовл. №

Обл.-вид.арк. 11  
Безкоштовно

СумДУ, 244007, м.Суми, вул. Римського-Корсакова, 2

«Різоцентр» СумДУ, 244007, м.Суми,  
вул.Римського-Корсакова, 2