

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТЕЙ ИЗМЕРЕНИЯ ТОЛЩИН МНОГОСЛОЙНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ МЕТОДОМ СПЕКТРАЛЬНОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

В.Г. Цепулин
В.Л. Толстогузов
Р.О. Степанов
В.Е. Карасик

v.tsepulín@bмstú.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Представлен подход, позволяющий провести оценку случайной погрешности измерения толщин многослойных пленочных покрытий методом спектральной рефлектометрии. При разработке оценочных выражений использована линеаризованная регрессионная модель. Проведенные измерения образца эталонного покрытия показали, что расхождение оценок случайной погрешности, полученных с помощью предложенного подхода, с экспериментальными значениями составляют не более 30 % для толщин, измеренных с субнанометровой точностью

Ключевые слова

Многослойные пленочные структуры, рефлектометрия, профилометрия, тонкие пленки, погрешность измерения толщин

Поступила в редакцию 28.11.2016

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 14-08-01103 А

Введение. Оценка погрешностей является неотъемлемой частью процесса измерения толщин пленочных покрытий. В общем случае для получения оценочных значений полученных погрешностей необходимо составить математическую модель, учитывающую погрешности, вносимые в измерение всеми составляющими компонентами измерительной системы. Построение этой модели является сложной задачей и не всегда оказывается возможным. Представленный в настоящей работе подход позволяет оценить случайные погрешности измерения толщин по спектральным измерениям коэффициента отражения без использования такой модели. Полученная оценка проведена на основе значения функции невязки, рассчитанного в процессе определения толщин слоев пленочной структуры.

Математическая модель для оценки погрешностей толщин. Метод спектральной рефлектометрии [1, 2] предполагает проведение нескольких измерений коэффициента отражения пленочного покрытия на различных длинах волн. Проведенные измерения и теоретическая зависимость коэффициента отражения от длины волны, которая может быть описана с помощью выражений, приведенных в работе [3] (см. (1.6.39), (1.6.41), (1.6.49)–(1.6.50)), позволяют определить толщины слоев пленочной структуры. Для этого применяют нели-

нейную регрессию, полагая, что измерения коэффициента отражения распределены согласно нормальному закону с дисперсией σ_i для длины волны λ_i . В этом случае функцию невязки в зависимости от вектора толщин пленочного покрытия $\mathbf{d} = \{d_1, \dots, d_K\}$ можно записать в виде

$$\eta(\mathbf{d}) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} [R_i(\lambda_i, \mathbf{d}) - R_m(\lambda_i)]^2, \quad (1)$$

где R_i — коэффициент отражения пленочного покрытия на длине волны λ_i , вычисленный с использованием математической модели для толщин \mathbf{d} ; R_m — коэффициент отражения, полученный путем измерений.

Толщины пленки находят путем поиска минимума функции невязки (1). Точка $\hat{\mathbf{d}}$, в которой она достигает минимума, является решением задачи. Найденные в результате описанных вычислений значения отличаются от действительных значений толщин, поскольку измерения коэффициента отражения R_m выполнены с некоторыми ошибками. Поэтому кроме нахождения значений толщины также необходимо знать погрешности их измерения.

В работах [4, 5], затрагивающих вопрос оценки погрешностей измерения, использовано линейное приближение, поэтому оценка, полученная с помощью приведенных выражений, будет грубой. Более точное оценочное значение погрешности измерения может быть определено с использованием оценки среднеквадратического отклонения параметров, найденных в результате регрессионного анализа. Для получения такой оценки в случае нелинейной регрессии функцию математической модели приближают линейной. Тогда матрица ковариаций найденных параметров может быть вычислена следующим образом [6]:

$$\text{cov } \mathbf{d} = \sigma^2 (\mathbf{P}^T \mathbf{P})^{-1},$$

где \mathbf{P} — матрица производных функции R_i размером $N \times K$; $P_{i,j} = \frac{\partial R_i(\lambda_i, \mathbf{d})}{\partial d_j}$.

Следовательно, дисперсия найденного параметра d_j равна $\sigma_{d_j}^2 = \text{cov}(\hat{\mathbf{d}})_{j,j}$.

Получаем, что при неизвестных среднеквадратических отклонениях измерений среднеквадратические отклонения найденных с помощью метода наименьших квадратов параметров в первом приближении можно вычислить с помощью выражения

$$\sigma_{d_j} = \hat{\sigma}_0 \sqrt{(\mathbf{P}^T \mathbf{P})_{j,j}^{-1}}, \quad (2)$$

где $\hat{\sigma}_0$ — оценочное среднеквадратическое значение ошибки, которое для N измерений и K неизвестных, при условии, что среднеквадратические отклонения измерений равны, может быть вычислено по формуле

$$\hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\eta(\hat{\mathbf{d}})}{N - K}}. \quad (3)$$

Выражения (1)–(3) позволяют оценить среднеквадратическое отклонение найденных толщин слоев. Для этого необходимо вычислить значения частных производных, входящих в выражение (2), теоретические зависимости которых могут быть вычислены с использованием матричных выражений для расчета коэффициента отражения пленки.

Для нахождения матрицы **P** необходимо рассчитать значения частных производных коэффициента отражения по толщинам пленочного покрытия для каждой длины волны $\partial R / \partial d_k$. Используя выражение (1.6.51), приведенное в работе [3], запишем

$$\frac{\partial R}{\partial d_k} = \frac{\partial r}{\partial d_k} \bar{r} + \frac{\partial \bar{r}}{\partial d_k} r, \tag{4}$$

где чертой обозначены комплексно сопряженные величины.

Производная амплитудного коэффициента отражения для ТЕ моды может быть записана следующим образом:

$$\frac{\partial r}{\partial d_k} = 2 \frac{p_1 \left(\frac{\partial M_{11}}{\partial d_k} + \frac{\partial M_{12}}{\partial d_k} p_L \right) (M_{21} + M_{22} p_L) - p_1 \left(\frac{\partial M_{21}}{\partial d_k} + \frac{\partial M_{22}}{\partial d_k} p_L \right) (M_{11} + M_{12} p_L)}{[(M_{11} + M_{12} p_L) p_1 + M_{21} + M_{22} p_L]^2},$$

где M_{11} , M_{12} , M_{21} , M_{22} — элементы матрицы **M**, которая для покрытия, содержащего L слоев, может быть рассчитана по выражению

$$\mathbf{M} = \prod_{k=1}^L \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} n_k d_k\right) & -\frac{i}{p_k} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} n_k d_k\right) \\ -i p_k \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} n_k d_k\right) & \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} n_k d_k\right) \end{pmatrix}.$$

Для немагнитной среды $p_k = n_k \cos \theta_k$. Выражения для ТМ моды могут быть получены путем замены коэффициентов p_k коэффициентами $q_k = \frac{\cos \theta_k}{n_k}$.

Покажем, что производные коэффициентов матрицы **M** так же, как и значения коэффициентов можно определить матричным методом. Запишем выражение для частной производной характеристической матрицы

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial d_k} = \frac{\partial \left(\prod_{i=1}^L \mathbf{M}_i \right)}{\partial d_k}.$$

Из всех матриц, входящих в произведение, только матрица \mathbf{M}_k зависит от толщины этого слоя d_k . Поэтому данное выражение можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial d_k} = \left(\prod_{i=1}^{k-1} \mathbf{M}_i \right) \frac{\partial \mathbf{M}_k}{\partial d_k} \left(\prod_{i=k+1}^L \mathbf{M}_i \right) = \mathbf{M}'. \tag{5}$$

С одной стороны, используя выражение для характеристической матрицы k -го слоя [3], получаем

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}' &= \left(\prod_{i=1}^{k-1} \mathbf{M}_i \right) \begin{pmatrix} -\frac{\partial \beta_k}{\partial d_k} \sin \beta_k & -\frac{i}{p} \frac{\partial \beta_k}{\partial d_k} \cos \beta_k \\ -ip \frac{\partial \beta_k}{\partial d_k} \cos \beta_k & -\frac{\partial \beta_k}{\partial d_k} \sin \beta_k \end{pmatrix} \left(\prod_{i=k+1}^L \mathbf{M}_i \right) = \\
 &= \left(\prod_{i=1}^{k-1} \mathbf{M}_i \right) \begin{pmatrix} -\frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k \sin \beta_k & -\frac{i}{p} \frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k \cos \beta_k \\ -ip \frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k \cos \beta_k & -\frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k \sin \beta_k \end{pmatrix} \left(\prod_{i=k+1}^L \mathbf{M}_i \right),
 \end{aligned}$$

где $\beta = \frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k$; θ_k — угол между направлением распространения излучения в k -м слое пленочного покрытия и нормалью к поверхности раздела сред.

С другой стороны, имеем

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial d_k} = \begin{pmatrix} \frac{\partial M_{11}}{\partial d_k} & \frac{\partial M_{12}}{\partial d_k} \\ \frac{\partial M_{21}}{\partial d_k} & \frac{\partial M_{22}}{\partial d_k} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Сопоставляя выражения (5) и (6), получаем, что производные коэффициентов матрицы \mathbf{M} могут быть найдены как соответствующие коэффициенты матрицы \mathbf{M}' . С использованием этих коэффициентов и выражения (4) могут быть вычислены значения частных производных в точке решения, найденного по формуле (1) при решении задачи оптимизации. В свою очередь, эти значения позволяют оценить среднеквадратическое отклонение неизвестных параметров.

Экспериментальная проверка полученной модели для оценки погрешности.

Для проверки полученных выражений была проведена серия измерений эталонного образца пленочного покрытия с помощью аппаратуры и методов, описанных в работе [7]. Схема экспериментальной установки, которая использована для проведения эксперимента, представлена на рис. 1. Спектральные изображения образца пленочного покрытия SiO₂ толщиной 312,8 нм на кремниевой подложке, были зарегистрированы при различном времени экспонирования с помощью матричного приемника излучения. С уменьшением времени экспонирования матрица регистрирует меньший сигнал, и, поскольку ее шум носит преимущественно аддитивный характер, среднеквадратическое отклонение измеренного коэффициента отражения становится больше.

Результаты проведенных измерений для минимального и максимального значений времени экспонирования приведены на рис. 2. Эксперимент проводили с использованием длин волн равномерно выбранных из диапазона 500...640 нм. Для каждого спектрального изображения была проведена обработка центральной

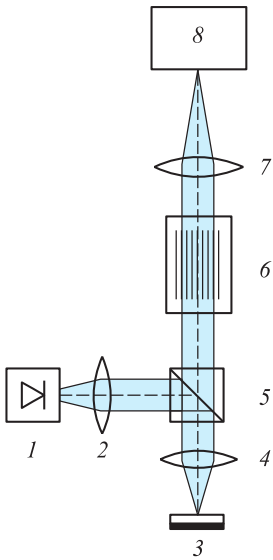


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 — широкополосный источник излучения; 2 — коллимирующая линза; 3 — исследуемая пленочная структура; 4 — объектив; 5 — светоделительный кубик; 6 — акустооптический фильтр; 7 — фокусирующий объектив; 8 — матричный приемник излучения

зоны 100×100 пикселей и найдено распределение толщин. Выбор центральной зоны изображения обусловлен тем, что угол падения излучения на образец изменяется в зависимости от расстояния от точки образца до оптической оси. Для центра изображения этим изменением можно пренебречь и считать падение нормальным.

Время экспонирования для каждого спектрального изображения в зависимости от интенсивности источника излучения, чувствительности приемника и пропускания компонентов оптической системы автоматически выбиралось так, чтобы регистрируемое изображение полностью занимало динамический диапазон. При регистрации серии спектральных изображений время экспонирования для каждой длины волны изменялось от оптимального до некоторого минимального. Далее отношение времени экспонирования к оптимальному времени будем называть коэффициентом времени экспонирования K_e .

Для каждой длины волны и двух значений коэффициента времени экспонирования (максимального и минимального) на рис. 2 представлена плотность распределения вероятности коэффициентов отражения, полученных в результате обработки спектральных изображений. Плотность вероятности отложена по оси x для каждой длины волны и пропорциональна ширине закрашенной области.

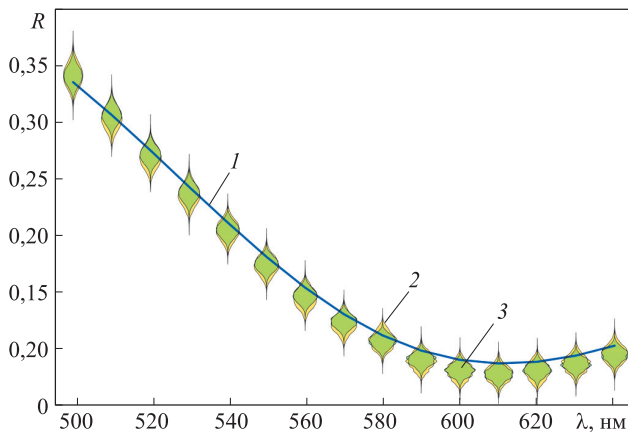


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения эталонного образца (1) и его плотности вероятности от длины волны для значений коэффициента времени экспонирования $K_e = 0,2$ (2) и 1 (3)

В соответствии с представленными экспериментальными данными можно сделать следующие выводы.

1. Среднеквадратическое отклонение коэффициента отражения увеличивается с уменьшением времени экспонирования и снижается с уменьшением коэффициента отражения.

2. Математическое ожидание регистрируемого коэффициента отражения смещено относительно теоретической зависимости и незначительно изменяется в зависимости от времени экспонирования. Это можно объяснить тем, что используемый метод калибровки измерительной установки не учитывает нелинейные отклонения чувствительности приемника излучения [7].

Для больших значений коэффициентов отражения плотность распределения вероятности коэффициента отражения имеет вид нормального, в то время как для малых значений заметны отклонения от нормального распределения, вызванные влиянием шума квантования.

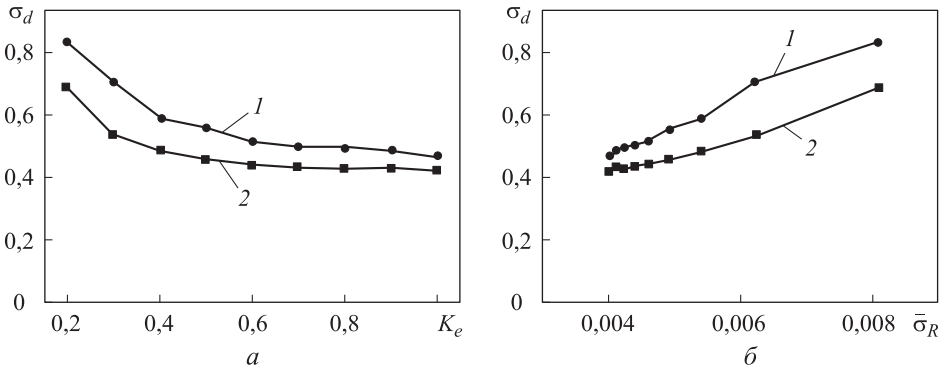


Рис. 3. Зависимости среднего значения среднеквадратического отклонения случайной погрешности определения толщины пленки (1) и его теоретическая оценка (2), полученная с помощью линеаризованной модели регрессии с использованием формул, приведенных выше, от коэффициента экспонирования (a) и от среднего среднеквадратического отклонения коэффициента отражения ($\bar{\sigma}_R$)

Зависимости среднего значения среднеквадратического отклонения случайной погрешности определения толщины пленки и его теоретическая оценка, полученная с помощью линеаризованной модели регрессии с использованием формул, приведенных выше, от коэффициента экспонирования и от среднего среднеквадратического отклонения коэффициента отражения приведены на рис. 3. Чтобы показать характер зависимости среднеквадратического отклонения погрешности измерения толщины от среднеквадратического отклонения шума измеряемого коэффициента отражения было введено среднее среднеквадратическое отклонение коэффициента отражения $\bar{\sigma}_R = \sum_{j=1}^N \sigma_R(\lambda_j)$.

Полученные зависимости иллюстрируют, что линеаризованная модель позволяет с достаточно высокой точностью оценить случайную погрешность из-

мерения толщины. Оценочное значение погрешности незначительно превышает полученное в результате эксперимента, что объясняется использованием линейного приближения регрессионной модели. На точность оценки также может влиять отклонение плотности распределения вероятности коэффициента отражения от нормального закона и отличие среднеквадратического отклонения коэффициента отражения для различных длин волн. Отметим, что полученные оценки погрешностей не учитывают систематические погрешности измерения и их оценку необходимо проводить отдельно, используя выражение (1).

Выводы. На результирующую погрешность измерения толщин пленочных структур может влиять множество факторов, таких как шумы приемника и источника излучения, неточности учета их спектральных характеристик, аберрации оптической системы. Комплексное влияние этих факторов на погрешность измерения толщин может быть оценено с использованием значений функции невязки, полученных в процессе решения обратной задачи.

Проведенные исследования показывают, что линеаризованная регрессионная модель может быть использована, чтобы с достаточно высокой точностью оценить случайные погрешности измерения толщин. Отклонение оценочного значения среднеквадратического отклонения от его экспериментального значения для исследуемого эталонного образца составило доли нанометров и не более 30 % значения погрешности.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для выбора таких параметров измерения толщин, при которых будет достигнута минимальная погрешность их измерения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Leng J.M., Sidorowich J.J., Yoon Y.D., Opsal J.* Simultaneous measurement of six layers in a silicon on insulator film stack using spectrophotometry and beam profile reflectometry // *Journal of Applied Physics*. 1997. Vol. 81. No. 8. P. 3570–3578. DOI: 10.1063/1.364994
URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.364994>
2. *Kim D., Kim S., Kong H.J., Lee Yu.* Measurement of the thickness profile of a transparent thin film deposited upon a pattern structure with an acousto-optic tunable filter // *Optics Letters*. 2002. Vol. 27. No. 21. P. 1893–1895. DOI: 10.1364/OL.27.001893
URL: <https://www.osapublishing.org/ol/abstract.cfm?uri=ol-27-21-1893&origin=search>
3. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с.
4. *Ylilammi M., Rantaaho T.* Optical determination of the film thicknesses in multilayer thin film structures // *Thin Solid Films*. 1993. Vol. 232. No. 1. P. 56–62.
DOI: 10.1016/0040-6090(93)90762-E
URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/004060909390762E>
5. *Konstantinov I., Babeva T., Kitova S.* Analysis of errors in thin-film optical parameters derived from spectrophotometric measurements at normal light incidence // *Applied Optics*. 1998. Vol. 37. No. 19. P. 4260–4267. DOI: 10.1364/AO.37.004260
URL: <https://www.osapublishing.org/ao/abstract.cfm?uri=ao-37-19-4260>

6. *Bates D.M., Watts D.G. Nonlinear regression analysis and its applications. John Wiley & Sons, Inc., 1988. 370 p.*

7. *Измерение распределения толщин многослойных пленочных структур методами спектральной рефлектометрии / В.Г. Цепулин, В.Л. Толстогузов, В.Е. Карасик, А.В. Перчик, А.П. Арефьев // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2016. № 3. С. 3–12. DOI: 10.18698/0236-3933-2016-3-3-12*

Цепулин Владимир Германович — младший научный сотрудник НОЦ «Фотоника и ИК-техника» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Толстогузов Виктор Леонидович — младший научный сотрудник НОЦ «Фотоника и ИК-техника» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Степанов Родион Олегович — канд. техн. наук, заместитель директора НИИ «Радиоэлектроники и лазерной техники» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Карасик Валерий Ефимович — д-р техн. наук, профессор кафедры «Лазерные и оптико-электронные системы» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Пробьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Цепулин В.Г., Толстогузов В.Л., Степанов Р.О., Карасик В.Е. Оценка погрешностей измерения толщин многослойных пленочных покрытий методом спектральной рефлектометрии // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2017. № 3. С. 4–12. DOI: 10.18698/0236-3933-2017-3-4-12

ERROR ESTIMATION OF MEASURING MULTILAYER FILM COATING THICKNESS BY SPECTRAL REFLECTOMETRY METHOD

V.G. Tsepulin

v.tsepulin@bmstu.ru

V.L. Tolstoguzov

R.O. Stepanov

V.E. Karasik

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

This work focuses on an approach to error estimation of measuring multilayer film coating thickness by spectral reflectometry method. The approach is based on the linearized regression model. The measurements of the test coating sample showed that disagreement of random error estimates, obtained by the proposed approach with the experimental values is not more than 30 % for the thickness measured with an accuracy of subnanometer

Keywords

Multilayer film structures, reflectometry, profilometry, thin films, thickness measurement errors

REFERENCES

- [1] Leng J.M., Sidorowich J.J., Yoon Y.D., Opsal J. Simultaneous measurement of six layers in a silicon on insulator film stack using spectrophotometry and beam profile reflectometry. *Journal of Applied Physics*, 1997, vol. 81, no. 8, pp. 3570–3578. DOI: 10.1063/1.364994 Available at: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.364994>
- [2] Kim D., Kim S., Kong H.J., Lee Yu. Measurement of the thickness profile of a transparent thin film deposited upon a pattern structure with an acousto-optic tunable filter. *Optics Letters*, 2002, vol. 27, no. 21, pp. 1893–1895. DOI: 10.1364/OL.27.001893 Available at: <https://www.osapublishing.org/ol/abstract.cfm?uri=ol-27-21-1893&origin=search>
- [3] Born M., Wolf E. Principles of optics. Pergamon Press, 1959.
- [4] Ylilammi M., Rantaaho T. Optical determination of the film thicknesses in multilayer thin film structures. *Thin Solid Films*, 1993, vol. 232, no. 1, pp. 56–62. DOI: 10.1016/0040-6090(93)90762-E Available at: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/004060909390762E>
- [5] Konstantinov I., Babeva T., Kitova S. Analysis of errors in thin-film optical parameters derived from spectrophotometric measurements at normal light incidence. *Applied Optics*, 1998, vol. 37, no. 19, pp. 4260–4267. DOI: 10.1364/AO.37.004260 Available at: <https://www.osapublishing.org/ao/abstract.cfm?uri=ao-37-19-4260>
- [6] Bates D.M., Watts D.G. Nonlinear regression analysis and its applications. John Wiley & Sons, Inc., 1988. 370 p.
- [7] Tsepulin V.G., Tolstoguzov V.L., Karasik V.E., Perchik A.V., Arefev A.P. Thickness distribution measurement of multilayer film structures by spectral reflectometry methods. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Priborostr.* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Instrum. Eng.], 2016, no. 3, pp. 3–12 (in Russ.). DOI: 10.18698/0236-3933-2016-3-3-12

Tsepulin V.G. — Junior Research Scientist of Scientific Educational Center Photonics and IR-Technology, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Tolstoguzov V.L. — Junior Research Scientist of Scientific Educational Center Photonics and IR-Technology, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Stepanov R.O. — Cand. Sc. (Eng.), Deputy Director of Scientific Research Institute of Radioelectronics and Laser Technology, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Karasik V.E. — Dr. Sc. (Eng.), Professor of Laser and Optoelectronic Systems Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Tsepulin V.G., Tolstoguzov V.L., Stepanov R.O., Karasik V.E. Error Estimation of Measuring Multilayer Film Coating Thickness by Spectral Reflectometry Method. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Priborostr.* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Instrum. Eng.], 2017, no. 3, pp. 4–12. DOI: 10.18698/0236-3933-2017-3-4-12