

Caracterización estructural mediante elipsometría espectral de multicapas basadas en SiO₂

M. GARRIGA Y M. I. ALONSO

Institut de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC, 08193 Bellaterra

Se han caracterizado capas de óxidos subestequiométricos de silicio (SiO_x) y estructuras gruesas de guías de onda mediante elipsometría espectral. Para ello ha sido necesario desarrollar un método de ajuste que permita analizar en detalle espectros complicados de elipsometría, como los obtenidos en estructuras multicapa gruesas (~10 μm) típicas de dispositivos modernos de óptica integrada. La elipsometría es la técnica más adecuada para la caracterización detallada de esas estructuras, pero la extracción mediante ajuste de los parámetros deseados es a menudo impracticable con los métodos usuales. Nuestro método se basa en parametrizar las constantes ópticas desconocidas con funciones spline. El método es aplicable tanto a materiales con una variación suave de las constantes ópticas como a materiales que presenten estructuras agudas debidas a transiciones electrónicas en el rango de energía analizado.

Palabras clave: elipsometría, simulación numérica, propiedades ópticas, capas gruesas, subóxidos de silicio.

Structural characterisation of SiO₂ based multilayers using spectroscopic ellipsometry

We have characterised PECVD-grown non-stoichiometric silicon oxides (SiO_x) and thick waveguide structures based on these materials with spectroscopic ellipsometry. We have developed a fit method that allows detailed analysis of complicated ellipsometric spectra, such as those of thick (~10 μm) multilayer structures found in modern integrated optics devices. Ellipsometry should be the natural choice for thorough nondestructive characterisation of those heterostructures, but extraction of the required parameters is often impracticable by common approaches. Our fit procedure is based in spline parametrisations of the unknown optical functions and is applicable to materials either with a smooth optical response or displaying sharp electronic transitions in the analysed energy range.

Keywords: Ellipsometry, numerical simulation, optical properties, thick layers, silicon suboxides.

1. INTRODUCCIÓN

Las diversas tecnologías relacionadas con la microelectrónica tratan de forma habitual con heteroestructuras complejas de multicapas semiconductoras y aislantes. Por ejemplo, en la fabricación de dispositivos ópticos integrados, las estructuras típicas constan de varias capas y alcanzan un espesor total alrededor de 10 μm. En la fase de desarrollo de dichos dispositivos, las estructuras completas suelen caracterizarse mediante técnicas de análisis destructivas. El proceso de crecimiento de la multicapa se optimiza caracterizando capas individuales depositadas sobre obleas auxiliares o de control. Como técnica no invasiva se usa con frecuencia la reflectometría óptica que tan sólo permite una comprobación global de la calidad de la estructura depositada. Es por tanto muy deseable disponer de una técnica de análisis no destructiva que permita una caracterización detallada de la estructura depositada, determinando espesor, composición e índices de refracción de las distintas capas.

La elipsometría espectral es a priori la técnica no destructiva que mejores prestaciones reúne para extraer las características mencionadas en estructuras multicapa. El espectro del parámetro elipsométrico Δ contiene información sobre el cambio en la fase de la luz en cada una de las interfaces de la mul-

ticapa. Ello debería facilitar la deducción de todos los detalles de la estructura. Sin embargo, el análisis de espectros de elipsometría de estructuras multicapa gruesas (<10 μm), llega a ser prácticamente imposible, sobre todo si una o varias de las capas depositadas son de materiales compuestos o con índices de refracción desconocidos.

En este artículo describimos brevemente en qué consiste la elipsometría espectroscópica y cuales son los métodos habituales de análisis de espectros elipsométricos de estructuras multicapa. En particular, vemos qué problemas plantea el análisis de espectros complicados y proponemos un método para solucionarlos.

2. CONCEPTOS BÁSICOS DE ELIPSOMETRÍA

La elipsometría es una técnica óptica de caracterización que permite deducir las propiedades ópticas de un material –simple o compuesto– a partir del cambio de polarización que sufre la luz al interactuar con la muestra. Aunque puede usarse en modo de transmisión, la elipsometría espectral es especialmente útil en modo de reflexión, ya que así permite estudiar con gran precisión materiales muy diversos como son metales, semiconductores y estructuras complejas con multicapas de

materiales transparentes o con poca absorción. El montaje experimental de un elipsómetro se muestra en la Figura 1. La muestra está sujeta en el eje de un goniómetro con el que se fija el ángulo entre el brazo de iluminación y el brazo de análisis. El primero consiste en una fuente de luz y componentes ópticos adecuados para obtener un haz colimado con una polarización pura ajustable y conocida. En el brazo de análisis se disponen los componentes ópticos necesarios para medir el estado de polarización de la luz reflejada o transmitida por la muestra. La polarización se determina analizando la señal obtenida en un fotodetector situado detrás de los componentes ópticos del brazo de análisis.

Aunque el esquema básico de un elipsómetro es siempre el mismo, existe una gran variedad de instrumentos cuyos componentes ópticos y su distribución se escogen para optimizar al máximo la precisión y exactitud de la información que se quiere obtener de las medidas. Tradicionalmente, los elipsómetros constaban de dos polarizadores lineales, usados como polarizador y analizador respectivamente y un compensador (lámina $\lambda/4$). La medida consistía en variar la posición relativa de esos componentes hasta obtener idealmente un cero, en la práctica un mínimo absoluto en la intensidad detectada. Hoy en día, se usan técnicas de modulación mecánicas o electroópticas que combinadas con la adquisición de datos por ordenador permiten medidas más rápidas y precisas. Así, por ejemplo, usando moduladores electroópticos es posible realizar medidas dinámicas, in situ, a velocidades de 10-50 kHz. En los instrumentos con modulación mecánica, uno de los polarizadores gira a unas 2000 vueltas por minuto. Con un detector multicanal adecuado es posible obtener un espectro en décimas de segundo. En cuanto al rango espectral existen elipsómetros comerciales que cubren desde el infrarrojo medio hasta el UV lejano. Hay también prototipos funcionando en el infrarrojo lejano y en el ultravioleta de vacío.

Entre las distintas técnicas de caracterización óptica la medida de la reflectancia es la más próxima a la elipsometría. En comparación la elipsometría espectral ofrece varias ventajas. Al determinar estados de polarización de la luz no precisa de medidas absolutas de intensidad, obviando la necesidad de disponer de fuentes de luz intensas y de espectro monótono. Además, al ser el estado de polarización una magnitud vectorial, con elipsometría se obtienen simultáneamente dos parámetros de la muestra. Ello permite, por ejemplo, obtener parte real e imaginaria del índice de refracción de una muestra masiva sin tener que recurrir a un laborioso análisis de los espectros mediante transformaciones de Kramers-Kronig. El hecho de determinar el cambio de la fase del estado de polarización hace que las medidas de elipsometría sean muy sensibles a la estructura de la zona superficial de la muestra. Esto que en algunos casos puede ser perjudicial, se convierte en una gran ventaja cuando, con el uso de modelos adecuados, podemos realizar un análisis estructural de multicapas de materiales transparentes o ligeramente absorbentes.

Para describir el estado de polarización χ de un haz de luz monocromático perfectamente polarizado basta con especificar el cociente de amplitudes y la fase relativa de las dos componentes del campo eléctrico en un sistema de ejes perpendicular a la dirección de propagación del haz. En elipsometría se escogen como ejes las direcciones paralela (p) y perpendicular (s) al plano de incidencia, definido por los haces incidente y reflejado. Por ejemplo, en el caso de usar un polarizador lineal para fijar el estado de polarización incidente tenemos $\chi_i = \tan P$, donde P es el ángulo que forma el eje de transmisión del polarizador con el plano de incidencia.

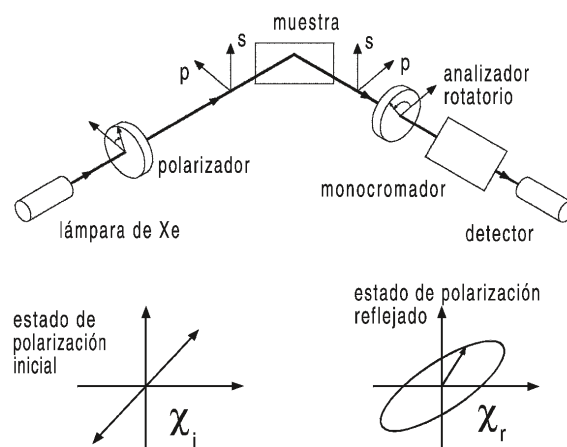


Figura 1. Esquema de un elipsómetro espectral de analizador rotatorio en modo de reflexión.

Las medidas de elipsometría determinan la evolución espectral del cociente entre los estados de polarización reflejado χ_r e incidente χ_i denominado también cociente complejo de reflectancia ρ :

$$\rho = \frac{\chi_i}{\chi_r} = \tan \Psi e^{i\Delta} \quad (1)$$

Los parámetros elipsométricos Ψ y Δ están directamente relacionados con las posiciones de los polarizadores y el compensador en los elipsómetros tradicionales. La relación entre los parámetros medidos y las propiedades ópticas de la muestra depende de la disposición experimental (ángulo de incidencia φ , orientación de la muestra si ésta es anisótropa, etc...) y del modelo usado para describir la estructura y los materiales que componen la muestra. El ejemplo más sencillo se obtiene al considerar la muestra como un material homogéneo e isotrópico con una superficie perfectamente plana. En ese caso, llamado modelo de dos fases, usando las fórmulas de Fresnel para la refracción de luz polarizada en una superficie entre dos medios semiinfinitos [1]

$$r_p = \frac{\varepsilon \cos \varphi - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}}{\varepsilon \cos \varphi + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}}, \quad r_s = \frac{\cos \varphi - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}}, \quad \rho = \frac{r_p}{r_s} \quad (2)$$

obtenemos una relación directa entre ρ y la función dieléctrica ε del material:

$$\varepsilon = \left(\frac{1-\rho}{1+\rho} \right)^2 \tan^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^2 \varphi. \quad (3)$$

El modelo de dos fases es el único caso en que es posible obtener de forma analítica las propiedades ópticas de la muestra a partir del cociente complejo de reflectancia. Tanto en el caso de materiales anisótropos como en el de estructuras multicapa la relación entre las propiedades ópticas y estructurales de la muestra es lo bastante complicada como para tener que resolverse mediante métodos numéricos.

El análisis de los espectros de elipsometría se hace mediante un modelo de multicapas planoparalelas esquematizado en la Fig. 2. El campo eléctrico en cada una de las capas es la suma de dos ondas planas viajando hacia y desde el substrato. Las fórmulas de Fresnel nos relacionan los campos eléctricos a ambos

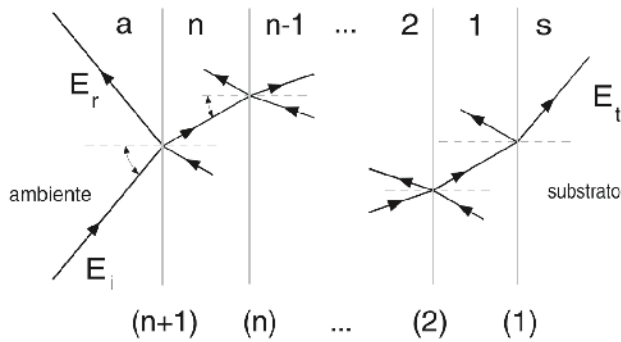


Figura 2. Modelo multicapa para la reflexión de la luz en una heteroestructura.

TABLA 1: MODELOS ANALÍTICOS PARA LA FUNCIÓN DIELECTRICA. LOS DETALLES DE CADA MODELO SE DAN EN LA REF. [2], EXCEPTO PARA EL MODELO CON FUNCIONES SPLINE DESARROLLADO EN ESTE TRABAJO.

modelo	función dieléctrica
Sellmeier	$n^2(\lambda) = 1 + \sum_{i=1}^q \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - B_i}$
Cauchy	$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad k(\lambda) = \frac{D}{\lambda} + \frac{E}{\lambda^3}$
Osciladores armónicos	$\epsilon(E) = \sum_{k=1}^n A_k \left(\frac{1}{E - E_k + i\Gamma_k} - \frac{1}{E + E_k + i\Gamma_k} \right)$
Forouhi y Bloomer	$k_c(E) = \left[\sum_{i=1}^q \frac{A_i}{E^2 - B_i E + C_i} \right] (E - E_g)$ $n_c(E) = n_c(\infty) + \sum_{i=1}^q \frac{B'_i E + C'_i}{E^2 - B_i E + C_i}$
Funciones spline	<p>nodos : $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, N$</p> $n(\lambda) = \sum_{l=0}^3 A_{li} (\lambda - \lambda_i)^l, \quad \lambda_i \leq \lambda < \lambda_{i+1}$ $k(\lambda) = \sum_{l=0}^3 B_{li} (\lambda - \lambda_i)^l,$

lados de cada interfaz. De una a otra interfaz la relación entre los campos eléctricos viene dada por la propagación de una onda plana en un medio con la constante dieléctrica del material en cuestión. Mediante un proceso iterativo se obtiene una relación entre el campo eléctrico en el ambiente y en el sustrato:

$$\vec{E}_a = M \cdot \vec{E}_s, \quad M = I_{a,n} L_n I_{n,n-1} \dots I_{2,1} L_1 I_{1,s}. \quad (4)$$

La matriz de reflectancia M se construye como el producto de las matrices de interfaz I_{jk} y propagación L_j

$$I_{jk} = \frac{1}{t_{jk}} \begin{pmatrix} 1 & r_{jk} \\ r_{jk} & 1 \end{pmatrix}, \quad L_j = \begin{pmatrix} e^{-i\theta_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta_j} \end{pmatrix}, \quad \theta_j = \frac{2\pi d_j}{\lambda} \sqrt{\epsilon_j - \epsilon_a \sin^2 \varphi} \quad (5)$$

En la ecuación 5, r_{jk} y t_{jk} son respectivamente los coeficientes de Fresnel de reflexión y transmisión en la interfaz jk . A partir de las matrices de reflectividad para las polarizaciones paralela p y perpendicular s al plano de incidencia, se obtiene el cociente complejo de reflectancia

$$\rho = \frac{\chi_i}{\chi_r} = \frac{M_{21}^p M_{11}^s}{M_{11}^p M_{21}^s}. \quad (6)$$

Para analizar los espectros experimentales se usan métodos numéricos iterativos con los que se ajusta el espectro de r calculado con el modelo multicapa con el medido experimentalmente. Los parámetros del modelo son, además del número de capas que forman la estructura, los espesores y las funciones dieléctricas de cada una de ellas.

3. EXPERIMENTAL

El método presentado fue desarrollado para poder analizar las estructuras que forman la guía de ondas en dispositivos sensores optoquímicos. En concreto, se han analizado estructuras antiresonantes ARROW basadas en óxidos de silicio substequiométricos, depositados mediante PECVD (CVD asistido por plasma). Las capas de $a\text{-SiO}_x, x < 2$ se depositaron en un reactor PECVD con electrodos plano paralelos acoplados capacitivamente y con flujo de gas radial (modelo PLASMALAB 80+). La presión de la cámara, la potencia de RF y la temperatura del sustrato durante la deposición fueron 200 mTorr, 30 W y 300 C respectivamente. Como precursores se usó una mezcla de silano y óxido nitroso. El cociente de flujos $R = \text{N}_2\text{O}/\text{SiH}_4$ se varió entre 2 y 59 mientras el caudal total se mantenía constante a 150, 300 y 750 sccm. Como sustratos se usaron obleas de Si (100) tipo p (14-20 Ωcm) de 2 pulgadas de diámetro y 290 μm de espesor.

En una estructura multicapa de guía de ondas una pequeña variación del índice de refracción de una de las capas puede provocar un aumento en las pérdidas por atenuación. El parámetro principal que controla el índice de refracción de la capa de SiO_x depositada por PECVD es el cociente de flujos entre protóxido nitroso y silano. Por ello, en una primera etapa, nos hemos concentrado en determinar la dependencia con R del índice de refracción del subóxido. Así, antes de analizar estructuras de guía de onda completa hemos probado la bondad del método desarrollado en capas simples de SiO_x sobre silicio de alrededor de 1 μm de espesor.

Los espectros se midieron con un elipsómetro espectral de polarizador rotatorio, modelo ES4G de SOPRA. El rango espectral disponible es de 1.4 a 5.1 eV y el ángulo de incidencia j puede variarse de forma continua. La mayoría de los espectros fueron realizados a $\varphi = 70^\circ$, con un paso de energía de entre 2 y 20 meV. La resolución del espectrómetro es mejor que o igual a 1 meV.

4. MÉTODO DE ANÁLISIS

Los espectros obtenidos se han interpretado con el modelo de multicapas descrito anteriormente. Entre los parámetros del modelo uno de los más delicados en su definición es la función

dieléctrica de cada una de las capas. En el caso de materiales conocidos, su función dieléctrica puede obtenerse de las bases de datos disponibles. Las funciones dieléctricas desconocidas suelen parametrizarse con funciones analíticas de la energía (ver Tabla 1). El modelo que se usa depende de las características del material en cuestión [2]. Así, para materiales dieléctricos o con poca absorción, cuyas funciones dieléctricas cambian suavemente con la energía, se usan los modelos de Sellmeier y Cauchy. En cambio, para semiconductores con variaciones abruptas en su función dieléctrica debidas a las transiciones electrónicas interbandas, se usan modelos semiempíricos basados en cálculos de la estructura electrónica. Dentro del modelo de multicapas también es posible representar superficies o interfaces rugosas o materiales compuestos. Ello se consigue añadiendo una capa adicional cuya función dieléctrica se obtiene con el modelo de medio efectivo [3], siendo el modelo de Bruggeman el más usado.

Una vez definido el modelo concreto de multicapa a usar, es decir el número de capas y de qué tipo de material es cada capa, el proceso de análisis consiste en: calcular la matriz de reflectancia (Ec. 4 y 5); obtener el coeficiente complejo de reflectancia (Ec. 6); comparar con las medidas experimentales; modificar adecuadamente los parámetros del modelo y reiterar el proceso hasta conseguir un acuerdo suficiente entre el modelo y los datos experimentales. Para ello se usan algoritmos no lineales de minimización en mínimos cuadrados [4]. Con este método es posible analizar sistemas multicapa con un máximo de cuatro a cinco capas y un espesor total de poco más de $1 \mu\text{m}$, claramente insuficientes para los sistemas que hemos estudiado.

Los espectros de elipsometría de multicapas gruesas ($\leq 10 \mu\text{m}$) contienen un gran número de oscilaciones debidas a la interferencia de la luz reflejada en las distintas interfaces. El periodo de esas oscilaciones es, a grandes rasgos, inversamente proporcional al camino óptico global nd donde n es el índice de refracción promedio y d es el espesor total. Al comparar la simulación del modelo multicapa con el espectro experimental, pequeñas variaciones en el índice de refracción se compensan con las variaciones correspondientes en los espesores. Dicho de otro modo, el problema de minimización tiene muchos mínimos locales que además están muy cerca unos de otros. Así el problema numérico de minimizar las diferencias entre el experimento y el modelo se vuelve inestable y de convergencia muy lenta, a no ser que los valores iniciales de los parámetros que se dan al algoritmo de minimización sean muy cercanos a los resultados finales. Para evitar esas limitaciones hemos desarrollado un método en el que se corrigen las deficiencias mejorando sustancialmente los métodos tradicionales básicamente en tres aspectos: una evaluación cuidadosa de la matriz de reflectancia para evitar inestabilidades numéricas, el uso de funciones simples y directas para describir los índices de refracción desconocidos y el uso de rutinas de minimización muy versátiles e interactivas.

Para que el análisis de los espectros complicados sea un proceso práctico y flexible es necesario que la rutina de minimización permita ver de manera gráfica e interactiva la bondad del ajuste y que sea muy versátil en el tratamiento de los parámetros. Para ello tomamos el paquete MINUIT [5], modificándolo para obtener gráficas de los valores experimentales y del modelo en cada uno de los pasos intermedios del ajuste. MINUIT permite, de manera cómoda, fijar y dejar variar a voluntad uno o mas parámetros, limitarlos a un rango determinado, y barrer un intervalo dado para encontrar el mejor valor. Todas estas cualidades hacen de MINUIT un paquete muy útil para analizar los espectros de elipsometría de estructuras multicapa gruesas con espesores de hasta $10 \mu\text{m}$.

Otro problema que hubo que resolver es la estabilidad numérica del cálculo de la matriz de reflectancia. La matriz de propagación en el material j (L_j) contiene exponentiales del producto $d_j \sqrt{\epsilon_j}$. Si la capa es muy gruesa y ligeramente absorbente, se obtienen exponentes grandes que al ser introducidos en el cálculo de la matriz global pueden provocar problemas de inestabilidad numérica. Este problema se resuelve normalizando adecuadamente las matrices de reflectividad intermedias.

El tercer aspecto mejorado fue el modelo usado para describir la función dieléctrica de los materiales desconocidos. Los modelos empíricos habituales (Tabla 1) aplicados al análisis de estructuras gruesas ($>0.5 \mu\text{m}$) presentan varios inconvenientes. La relación entre los parámetros del modelo y la función dieléctrica es indirecta. Además, los parámetros están correlacionados entre sí, de forma que al variar uno de los parámetros cambia el valor de la función dieléctrica en todo el espectro. Para que el proceso de minimización sea rápido y efectivo se necesita una descripción paramétrica de la función dieléctrica que pueda acomodar una gran variedad de funciones dieléctricas, ya sean de variación suave con la energía o con estructuras, y que además los parámetros estén directamente relacionados con los índices de refracción y de absorción que representan. Las funciones que reúnen esos requisitos son las splines cúbicas [6].

Para modelizar las funciones dieléctricas desconocidas hemos usado funciones spline cúbicas con condiciones de nodo en los extremos. Las posiciones de los nodos se fijan en ciertas energías seleccionables. Los parámetros ajustables del modelo son los valores del índice de refracción n y de la absorción k a esas energías. El uso de funciones spline nos da un modelo potente, simple y flexible para describir una gran variedad de funciones dieléctricas que van desde la función monótonamente creciente de los dieléctricos a las funciones llenas de estructuras de los semiconductores, siempre y cuando en cada estructura se escoja un número suficiente de nodos y sus energías se distribuyan adecuadamente. En su desarrollo actual el modelo permite el uso de diez nodos, que corresponde a 20 parámetros ajustables. Aunque los otros modelos empíricos usan menos parámetros, el modelo de splines tiene dos ventajas claras: los parámetros del modelo dan directamente las funciones ópticas del material por lo que es muy fácil escoger valores iniciales y decidir si el ajuste evoluciona hacia resultados razonables. Además, la influencia de un parámetro determinado en la calidad del ajuste se reduce a la región del espectro colindante con el nodo correspondiente. Dicho de otra forma, esos 20 parámetros están altamente descorrelacionados, lo que favorece una convergencia paso a paso hacia el resultado final.

5. RESULTADOS

5.1. Capas de SiO_x

En la Figura 3 se han representado distintas funciones ópticas determinadas en capas de SiO_x de aproximadamente $1 \mu\text{m}$ de espesor depositadas sobre Si. Para analizar el espectro de una sola capa sobre un sustrato conocido pueden utilizarse métodos tradicionales. Sin embargo, la ventaja de nuestro método consiste en que el modelo utilizado es el mismo para todas las capas, independientemente de la composición x . Es evidente que, una vez obtenidas las funciones ópticas, pueden ser ajustadas posteriormente usando fórmulas analíticas con significado físico. En este caso, la respuesta óptica de los distintos óxidos de la Figura 3 se encuentra entre la de SiO_2 y SiO [7], donde tanto n como k aumentan cuando x disminuye.

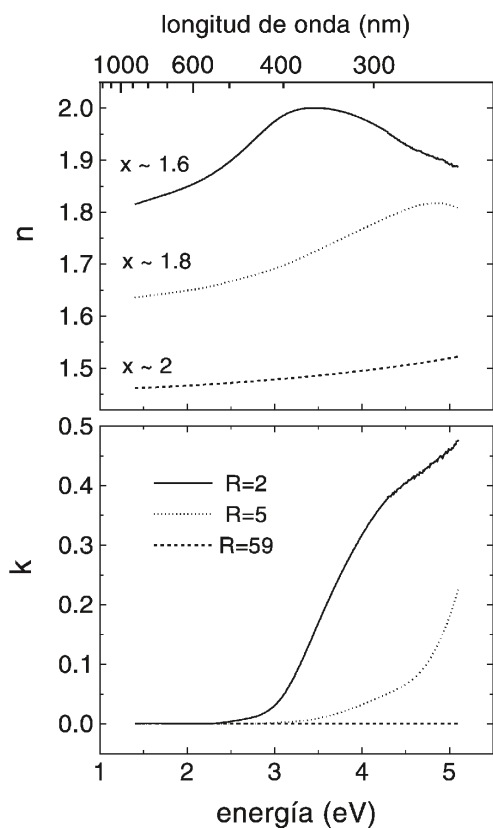


Figura 3. Índice de refracción n y coeficiente de extinción k en función de la energía para tres composiciones distintas de SiO_x depositado por PECVD.

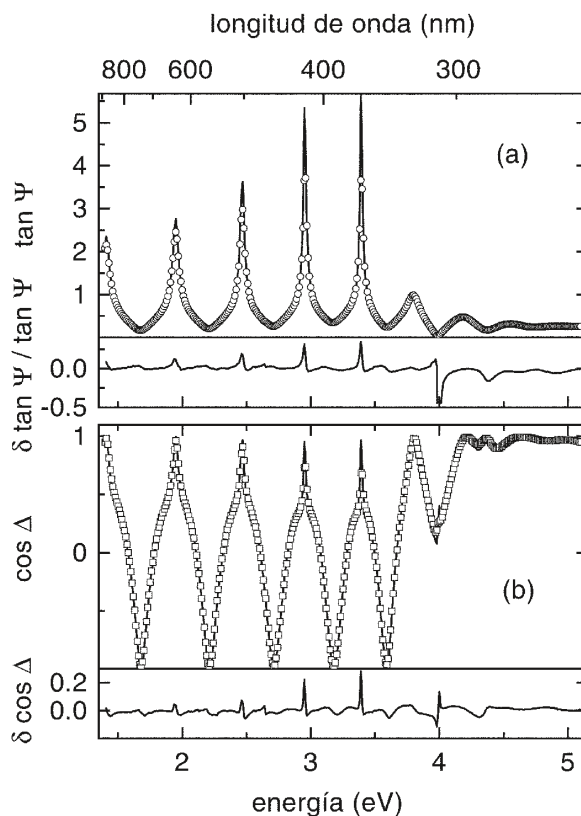


Figura 4. Espectro de elipsometría correspondiente a una capa depositada con $R = 5$. Los símbolos son puntos experimentales medidos cada 10 meV y $\varphi = 70^\circ$, mientras que las líneas son el mejor ajuste. Los errores de medida son siempre menores que el tamaño de los símbolos. (a) Parte superior: Espectro de $\tan \Psi$. Parte inferior: Diferencia normalizada entre experimento y ajuste. (b) Parte superior: Espectro de $\cos \Delta$. Parte inferior: Diferencia entre experimento y ajuste.

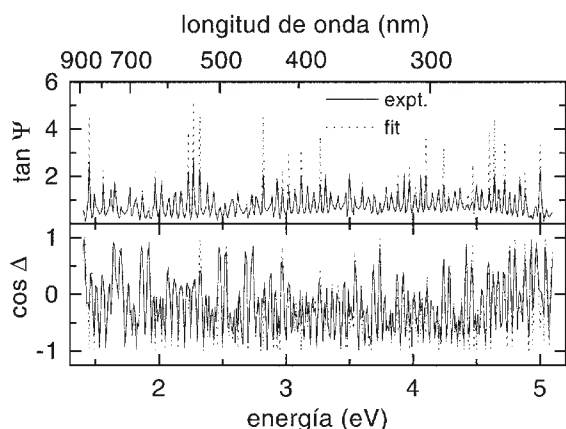


Figura 5. Espectros generales $\tan \Psi$ y $\cos \Delta$. de la muestra multicapa investigada y sus mejores ajustes. El paso de medida es 10 meV y $\varphi = 70^\circ$. La estructura de $\sim 10 \mu\text{m}$ de espesor consiste en cinco capas: SiO_x/Si₃N₄/SiO_x/Si₃N₄/SiO₂/Si sustrato. Sus espesores (en μm) obtenidos del ajuste son: 2.883/0.321/4.647/0.320/2.024.

Los espectros de los parámetros elipsométricos de la capa depositada con una relación de flujos $R = 5$ se reproduce en la Figura 4, donde también puede verse la calidad de los ajustes realizados. En este caso el espesor de la capa obtenido del ajuste es $0.822 \mu\text{m}$ y n y k se dan en la Figura 3.

De la Figura 4 se desprende que el modelo presenta diferencias máximas con el experimento en las energías donde $\tan \Psi$ presenta picos pronunciados y a su vez $\cos \Delta$ presenta bien un pico o un punto cuspidal. Dichas diferencias disminuyen un poco si medimos los espectros con paso menor que 10 meV, pero no desaparecen. Ello es debido a que los valores medidos en estos puntos son los más sensibles a la estructura de la muestra [8], incluyendo sus imperfecciones, aunque también tienen errores de medida mayores. Esto se tiene en cuenta ya que los errores medidos se incluyen en la función que se minimiza.

5.2. Estructura de guía

En el caso de las multicapas completas para guía de ondas, no ha sido posible determinar las estructuras por métodos tradicionales. En cambio, el método que presentamos sí que lo permite. Como ejemplo presentamos resultados obtenidos para la siguiente estructura de guía usada en sensores químicos [9]. La muestra contiene cinco capas de tres materiales distintos:

$\text{SiO}_x(d_1)/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_x(d_2)/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$, depositados sobre $\text{Si}(100)$. La Figura 5 muestra espectros generales de $\tan\Psi$ y $\cos\Delta$ medidos a 70 grados de incidencia con paso 10 meV. Las funciones dieléctricas de SiO_2 térmico y Si_3N_4 depositado por LPCVD se determinaron separadamente en muestras auxiliares. El índice de refracción complejo de las dos capas de SiO_x es parametrizado usando una función spline. El mejor ajuste obtenido también está representado en la Figura 5. En este caso, el índice de refracción obtenido para el SiO_x nos indica que x está muy cerca de 2. El valor de $n = 1.460$ a 1.96 eV coincide con el obtenido en una oblea de control medida a esta energía (láser de He-Ne). El valor $k = 0$ obtenido en todo el rango de energías medido también es consistente.

De forma similar a lo expuesto en la Sección 5.1, las mayores discrepancias entre modelo y experimento tienen lugar en los puntos donde $\tan\Psi$ presenta picos. Parte de la diferencia puede atribuirse al paso relativamente grande usado en las medidas y, de hecho, ésta disminuye al reducir el paso hasta 2 meV. Con pasos todavía menores los espectros ya no se modifican. Puesto que la resolución espectral es ~ 1 meV, las diferencias que persisten entre modelo y experimento provienen principalmente de pequeños gradientes de espesor presentes en las capas de SiO_x .

Las características del proceso de minimización se ven claramente a partir del comportamiento de la función de error χ^2 . Usando los espectros medidos con paso 2 meV, representamos χ^2 para valores de los parámetros cercanos al mejor ajuste, como se puede ver en la Figura 6. Está claro que hay numerosos mínimos locales en el problema. Puesto que dichos mínimos son muy estrechos, los parámetros en cada mínimo están muy bien determinados. Esta también es una forma de ver porqué pequeñas imperfecciones de la muestra, tales como gradientes de espesor, tienen gran influencia sobre los espectros, en especial en los valores en los máximos de $\tan\Psi$ y puntos correspondientes de $\cos\Delta$. En el ejemplo que nos ocupa, el mejor ajuste viene dado por los parámetros del mínimo absoluto A. Cerca de éste hay dos mínimos denotados por B y C. Refinando los ajustes en los entornos B y C llegamos a los mínimos locales B' y C'. El índice de refracción del subóxido a 1.96 eV y el espesor de la capa enterrada de SiO_x se especifican en la gráfica, mientras los espesores obtenidos para las capas de nitruro y SiO_2 sólo varían a partir del cuarto decimal. Los métodos tradicionales de ajuste no son capaces de distinguir entre mínimos tan próximos. En este ejemplo nos encontramos con que el mínimo B' es casi tan bajo como A. Pero incluso si consideramos que los espesores e índices reales son un promedio de ambos valores (A y B'), el resultado y su incertidumbre es excelente en términos de caracterización de la muestra.

6. CONCLUSIONES

En resumen, hemos demostrado la viabilidad de la elipsometría espectral como técnica de caracterización no invasiva de muestras multicapa muy gruesas (hasta 10 μm). Usando métodos de ajuste adecuados, es posible extraer los parámetros estructurales con gran precisión. En este trabajo se han analizado multicapas de óxidos con funciones dieléctricas suaves, pero dadas las características de las funciones spline, el método desarrollado es aplicable también a heteroestructuras con semiconductores que presentan transiciones electrónicas interbanda. Hemos extendido la aplicabilidad de la elipsometría espectral solventando los problemas existentes en los métodos de análisis actuales.

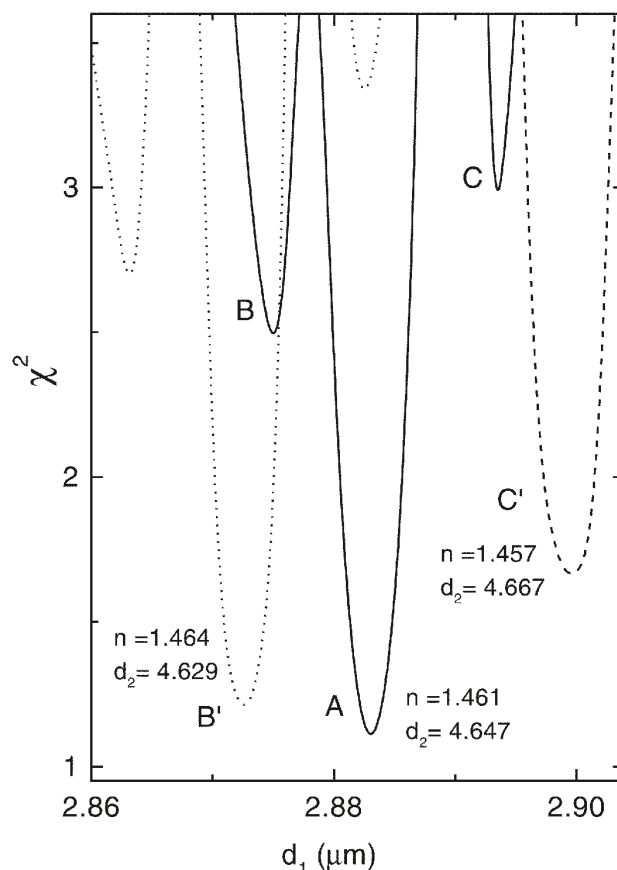


Figura 6. Representación de distintos mínimos locales según los parámetros del ajuste (ver texto). Línea continua: Variación de la función de error alrededor del mínimo absoluto A. La dependencia de χ^2 en función de d_1 alrededor de los dos mínimos locales más próximos B' y C' viene dada respectivamente por las líneas punteada y a trazos.

AGRADECIMIENTOS

Las muestras analizadas en este trabajo fueron depositadas por C. Domínguez y A. Llobera. El trabajo se ha hecho dentro del proyecto TIC97-0594 financiado por la CICYT.

BIBLIOGRAFÍA

1. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light*, (North-Holland, Amsterdam). 1977
2. A. R. Forouhi and F. Bloomer, *Handbook of Optical Constants of Solids*, Vol. II, Chapt. 7, E. D. Palik Ed. (Academic Press, New York,) pp. 151-175. 1991
3. D. E. Aspnes, J. B. Theeten, and Hottier F., *Phys. Rev. B*, **20** 3292-3302. (1979)
4. P. R. Bevington. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill, New York, 1969.
5. F. James, *Minuit-function minimization and error analysis*, CERN Program Library long writeup D506, 1994.
6. C. de Boor, *A practical guide to splines*, Vol. 27 of *Applied mathematical Sciences*. (Springer-Verlag, New York, 1978).
7. H. R. Philipp, *Handbook of Optical Constants of Solids*, Vol. I, E. D. Palik Ed. (Academic Press, New York,) pp. 749-769. 1985
8. J. B. Theeten and D. E. Aspnes, *Thin Solid Films*, **60** 183-192 (1979).
9. I. Garcés, F. Villuendas, J. Subías, J. Alonso, M. Del Valle, C. Domínguez, and E. Bartolomé, *Optics Letters*, **23** 225-227 (1998).

Recibido: 19.10.99

Aceptado: 10.03.00