

О.І. ЗАВАЛІСТІЙ, О.В. МАКАРЕНКО, В.А. ОДАРИЧ, А.Л. ЯМПОЛЬСЬКИЙ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,

фізичний факультет, кафедра оптики

(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601)

УДК 539

СТРУКТУРА ОКИСНОЇ ПЛІВКИ НА ПОВЕРХНІ ПОРУВАТОГО КРЕМНІЮ

Тривале перебування поруватого кремнію на повітрі приводить до зміни структури його приповерхневого шару, для опису якого стандартна одношарова модель вже не є достатньо точною. Методом багатокутової еліпсометрії досліджено структуру поверхневого шару поруватого кремнію. Запропоновано комбінований підхід до аналізу даних кутової еліпсометрії, який полягає в застосуванні моделі багатощарового середовища і матричного методу розрахунку поширення оптичного випромінювання у ньому для одержання теоретичних кутових залежностей $\tan \psi$ та $\cos \Delta$. При цьому вид функції шуканого оптичного профілю за глибиною є додатковою умовою, яка накладається на багатощарову модель. Еволюційними чисельними методами проведено пошук глобального мінімуму функції середньоквадратичного відхилення MSE (Mean Squared Error) між теоретичними та експериментальними залежностями і одержано параметри оптичного профілю. Проаналізована модель, згідно з якою глибинний неокислений шар поруватого кремнію є однорідним, а зовнішній окислений шар має лінійний профіль показника заломлення. Показано, що лінійна та двоступінчата моделі окисленої плівки дають найкраще узгодження з експериментальними еліпсометричними функціями. Адекватність теоретичної моделі підтверджено також шляхом визначення координат колірності зразка.

Ключові слова: співвідношення Френеля, поруватий кремній, метод диференційної еволюції, колірний простір Lab, координати колірності; функції змішування кольорів, стандартний освітлювач D65.

1. Вступ

Поруватий кремній одержують шляхом електрохімічного травлення монокристалічного кремнію в спеціально підбраному електроліті на основі водного розчину плавикової кислоти. В результаті електрохімічних реакцій, що перебігають у товщі кремнію, поблизу його поверхні утворюється область із розгалуженою системою пор, орієнтованих переважно вздовж напрямку струму і найчастіше перпендикулярно поверхні зразка. Товщина цієї області в залежності від технологічних умов виготовлення становить кілька мікрометрів [1–3]. Після виключення струму зразок виносять на повітря і в утвореному шарі поруватого кремнію відбувається затухання хімічних реакцій, супроводжуване взаємодією з атмосферним киснем і парами води. Внаслідок цього на поверхні по-

руватого кремнію через кілька місяців зберігання на повітрі утворюється тонка плівка товщиною до двох сотень нанометрів, яка може містити залишки пор (кремнієвий каркас), частково чи повністю забитих продуктами реакцій, здебільшого оксидів кремнію різного складу. Існують спектроеліпсометричні дані, які свідчать, що ця плівка не є однорідною по товщині [4], а можливо, є двохкомпонентною [5]. Спектроеліпсометричні виміри [1–3] свідчать про складну, кількашарову будову поруватого кремнію, але незрозуміло, якого об'єкту ці дані стосуються – приповерхневого шару чи наростлої плівки. Предметом даної роботи є дослідження будови цієї плівки і визначення її оптичних характеристик із застосуванням загальної моделі, що враховує неоднорідність об'єкта дослідження по глибині. Вивчення поруватого кремнію актуальне в зв'язку з його застосуванням для створення сенсорів, поляризаційних елементів та в медико-біологічній сфері [6].

© О.І. ЗАВАЛІСТІЙ, О.В. МАКАРЕНКО,
В.А. ОДАРИЧ, А.Л. ЯМПОЛЬСЬКИЙ, 2020

ISSN 0372-400X. Укр. фіз. журн. 2020. Т. 65, № 1

2. Експериментальна частина

Досліджували зразок поруватого кремнію у вигляді пластини товщиною близько 1 мм, одержаної електрохімічним травленням монокристалічного кремнію *p*-типу протягом 3 хвилин при густині струму 10 мА/см² в електроліті HF + ацетон у співвідношенні об'ємних долей 2:1. Протягом кількох років після виготовлення зразок зберігався в лабораторії при кімнатній температурі, контактуючи з навколишнім повітрям. На зразку візуально спостерігається яскрава інтерференційна картина у вигляді кількох різноколірних смуг (рис. 1), яка свідчить про існування на поверхні власне поруватого кремнію тонкої плівки з геометрично плоскими межами.

За допомогою автоматизованої гоніополяриметричної установки [7] методом обертового аналізатора виконано кутові еліпсометричні вимірювання, з яких знаходили еліпсометричні параметри відбитого світла: Δ – різницю фаз між *p*- і *s*-компонентами електричного вектора світлової хвилі і ψ – арктангенс відношення коефіцієнтів відбивання в *p*- і *s*-площинах зразка. Довжина хвилі джерела випромінювання становила $\lambda = 625$ нм при спектральній напівширині $\Delta\lambda = 10$ нм, кути падіння змінювалися в діапазоні $\theta = 40^\circ \dots 80^\circ$ з кроком у $2,5^\circ$, а точка зондування показана на рис. 1.

3. Одержані еліпсометричні дані та їх обговорення

Метою аналізу еліпсометричних даних було розв'язання оберненої задачі еліпсометрії, тобто знаходження характеристик відбивної системи за вимірними значеннями еліпсометричних параметрів.

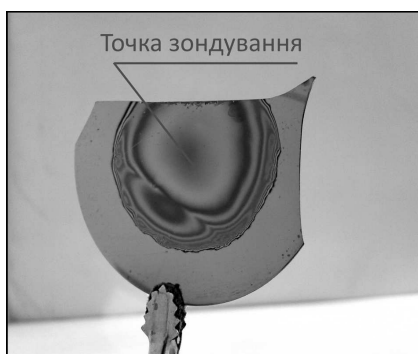


Рис. 1. Зразок поруватого кремнію

трів. Цю задачу виконувала автоматизована програма, в основі якої лежить еліпсометрична функція, записана для великої кількості шарів. Досліджуваний об'єкт представлено сукупністю тонких плоскопаралельних шарів на підкладці, кожен із яких характеризується комплексним показником заломлення $N_j = n_j - ik_j$ та має однакову товщину d . До такої моделі застосовано матричний метод розрахунку проходження світла (відбивання й пропускання), що базується на електромагнітній теорії випромінювання [8], котрий для ряду задач успішно продовжує застосовуватись [9]. Однією з його переваг є врахування інтерференційних явищ в багатошаровій системі.

Розраховують відбиті від такої системи хвилі $E_{0-}^{(r)}$ для випадків *p*- та *s*-поляризації, користуючись співвідношеннями Френеля для коефіцієнтів відбивання між шарами. Маючи вирази для цих хвиль, легко одержати еліпсометричні параметри $\tan \psi$ і $\cos \Delta$:

$$\tan \psi = \left| \frac{(E_{0-}^{(r)})_p}{(E_{0-}^{(r)})_s} \right|$$

– відношення амплітуд компонент відбитої хвилі,

$$\cos \Delta = \cos \left(\pi - \left| \arg \left[\frac{(E_{0-}^{(r)})_p}{(E_{0-}^{(r)})_s} \right] \right| \right)$$

– косинус зсуву фаз між ними.

Таким чином, одержуємо теоретично розраховані залежності $\tan \psi$ та $\cos \Delta$ від кута падіння θ , які порівнюються з експериментально вимірними. Критерієм якості збігу відповідних залежностей є функція середнього квадратичного відхилення між ними (Mean Squared Error) MSE:

$$\text{MSE} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\left(\cos(\Delta_j)^{\text{theor}} - \cos(\Delta_j)^{\text{exp}} \right)^2 + \left(\tan(\psi_j)^{\text{theor}} - \tan(\psi_j)^{\text{exp}} \right)^2 \right],$$

де M – кількість експериментальних точок (кутів падіння). Варіюючи параметри шарів моделі так, щоб MSE набувало якомога менших значень, можна визначити оптичні характеристики зразка. З цією метою авторами була створена програма у

Таблиця 1. Товщини d , показники заломлення n першого та другого шарів і характеристики колірності x , y , ΔE_{ab}^* , одержані в рамках однорідної моделі a двох шарів

№ розв'язку	d_1 , нм	n_1	d_2 , нм	n_2	MSE, $\times 10^{-3}$	x	y	ΔE_{ab}^*
1	46,3	1,507	2157,0	3,531	4,84	0,266	0,298	6,0
2	148,1	1,496	1994,8	3,495	4,85	0,267	,299	5,6
3	149,1	1,489	1913,8	3,475	4,88	0,268	0,300	5,2
4	144,7	1,517	2319,3	3,561	4,89	0,265	0,297	6,2
5	144,1	1,521	2400,4	3,574	4,93	0,264	0,297	6,4
6	143,4	1,525	2481,6	3,587	4,98	0,264	0,296	6,5
7	142,8	1,529	2562,6	3,599	5,03	0,264	0,296	6,7
8	142,3	1,533	2643,8	3,610	5,10	0,263	0,296	6,8
9	152,8	1,467	1670,9	3,403	5,12	0,270	0,302	4,8
10	139,9	1,548	3049,3	3,657	5,50	0,262	0,294	7,3

середовищі LabVIEW, яка мінімізує MSE як функцію багатьох змінних. Крім найпростіших теоретичних моделей, таких як модель напівнескінченного середовища, одно- та двошарова моделі, можна застосувати й більш складні оптичні профілі. Для цього у програмі кількість шарів моделі береться рівною 500. Природно, що з такою величезною кількістю параметрів задача не може бути коректно розв'язана, тому показники заломлення усіх шарів пов'язуються між собою заданою функціональною залежністю (наприклад, лінійною), яка описує певний тип оптичного профілю.

На першому етапі для опису досліджуваного зразка було застосовано однорідну двошарову модель. Вважали, що на поверхні кремнію знаходиться однорідний шар поруватого кремнію, а зверху – ще один однорідний окислений шар (рис. 2, *a*). Границі зміни показника заломлення окисленого верхнього шару при моделюванні приймали $n_1 = 1,0 \dots 2,0$, товщини – $d_1 = 1 \dots 400$ нм. Для поруватого кремнію (середній шар) границі відповідно були $n_2 = 1,6 \dots 3,9$, $d_2 = 1 \dots 4$ мкм. Показник заломлення підкладки вважали рівним $n_3 = 3,897$, що відповідає монокристалічному кремнію, і не варіювали. Показниками поглинання ($\kappa_3 = 0,03$ для монокристалічного кремнію) нехтували, наближено приймаючи їх рівними нулю.

Враховуючи складний рельєф цільової функції MSE, яка може мати багато локальних мінімумів, для пошуку глобального мінімуму було застосовано метод диференційної еволюції [10], перевагами якого є простота реалізації і невелика кількість ке-

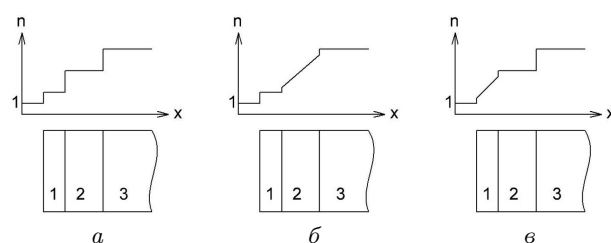


Рис. 2. Двошарові моделі оптичного профілю зразка: *a* – з однорідними шарами, *б*, *в* – з лінійною зміною показника заломлення

руючих параметрів. Стартову точку для алгоритму обирали випадковим чином у заданих межах, а процедуру мінімізації MSE повторювали багато разів. У результаті одержали 20 наборів близьких між собою розв'язків (товщини d_j та показники заломлення n_j шарів). Їх відсортували за значенням функції MSE і вибрали 10 найкращих, а решту відкинули (див. табл. 1).

При дослідженні структури тонких шарів спектральна еліпсометрія, як правило, є більш інформативною, ніж кутова. Хоча таких вимірювань у даній роботі й не проводили, але натомість скористалися наступним прийомом. Досліджуваний зразок має яскраво виражену інтерференційну картину на поверхні (див. рис. 1), а отже, для додаткової оцінки адекватності застосованих теоретичних моделей і одержаних результатів можуть бути залучені методи колориметрії. Для кожного розв'язку шляхом варіювання довжини хвилі λ , що входить до теоретичної моделі, розраховували спектр відбивання світла при нормальному падінні $R(\lambda)$. Ти-

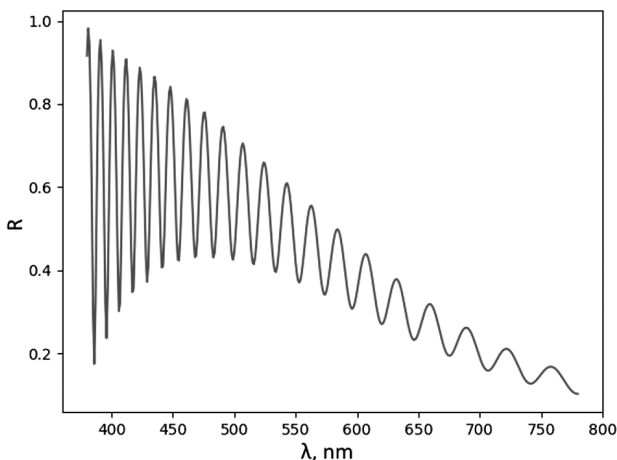


Рис. 3. Спектр відбивання $R(\lambda)$ поруватого кремнію, розрахований для розв'язку №1 однорідної теоретичної моделі (а)

Таблиця 2. Товщина d_2 та межі зміни показника заломлення n_{21}, n_{22} проміжного шару поруватого кремнію, одержані в наближенні лінійного профілю b показника заломлення

№ розв'язку	d_2 , нм	n_{21}	n_{22}	MSE, $\times 10$
1	2427,9	3,535	3,536	5,09
2	2727,0	3,505	3,506	6,45
3	2466,6	3,483	3,484	5,79
4	2048,7	3,558	3,558	4,98
5	2221,2	3,572	3,572	4,92
6	2482,3	3,586	3,586	4,98
7	2206,0	3,596	3,596	5,05
8	3264,6	3,615	3,615	6,20
9	2141,1	3,412	3,413	5,75
10	3050,5	3,655	3,656	5,50

повий вигляд такого спектра наведено на рис. 3. Знаючи $R(\lambda)$, стандартним чином були розраховані координати колірності зразка в системі xyY [11]:

$$x = \frac{X}{X + Y + Z}, \quad y = \frac{Y}{X + Y + Z},$$

$$X = k \int S(\lambda)R(\lambda)\bar{x}(\lambda) d\lambda,$$

$$Y = k \int S(\lambda)R(\lambda)\bar{y}(\lambda) d\lambda,$$

$$Z = k \int S(\lambda)R(\lambda)\bar{z}(\lambda) d\lambda,$$

де $S(\lambda)$ – спектральний розподіл потужності випромінювання стандартного освітлювача (для денного світла це освітлювач D65), $\bar{x}(\lambda)$, $\bar{y}(\lambda)$ та $\bar{z}(\lambda)$ – функції змішування кольорів, k – константа нормування. Інтегрування проводиться по всій видимій області спектра.

Ці координати порівняли з одержаними фотографічним методом в області зондування ($x = 0,272, y = 0,313$). Критерієм відповідності обрали відстань ΔE_{ab}^* у рівноконтрастному колірному просторі $L^*a^*b^*$ [11], яка показує, наскільки два кольори є близькими. Щоб її визначити, потрібно перейти до відповідної системи координат, тоді

$$\Delta E_{ab}^* = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2}.$$

Зазначені колориметричні величини також внесено до табл. 1, вони відповідають спостережуваному візуально блакитному кольору зразка в області зондування. Таке порівняння підтверджує, що двошарова однорідна модель доволі точно описує оптичні властивості зразка поруватого кремнію (загальноприйнятий поріг колірності розрізнення складає 4). Але все ж не слід забувати, що одному й тому ж кольору можуть відповідати різні спектри відбивання. Описаний колориметричний підхід, таким чином, є лише додатковим засобом контролю.

Загальна глибина пор, в основному, залежить від часу травлення зразка. Сума одержаних товщин $d_1 + d_2 \approx 2,5$ мкм добре узгоджується з літературними даними для зразків, одержаних протягом приблизно 3 хвилин травлення [1–3].

Однак, в реальності структура шарів може бути неоднорідною, що потребує окремої перевірки. Як було відзначено вище, для одержання коректного розв'язку оберненої еліпсометричної задачі очікуваний оптичний профіль зразка потрібно описати певною функцією.

Припустимо, що верхній шар системи однорідний і зафіксуємо його параметри n і d , скориставшись значеннями, одержаними на попередньому етапі моделювання для одного з розв'язків. Проміжний шар вважатимемо неоднорідним, тобто таким, що має певний розподіл показника заломлення n за глибиною. Для моделювання неоднорідності обрали лінійний профіль як найпростіший (рис. 2, б, показник заломлення змінюється від n_{21} до n_{22}). Оптимальні параметри середнього шару

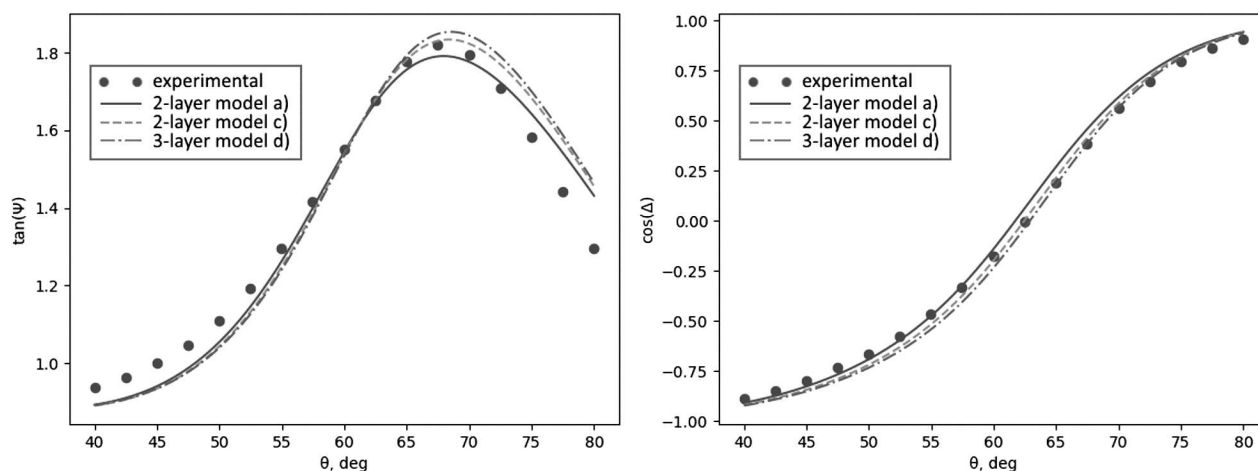


Рис. 4. Експериментальні (точки) та теоретичні (лінії) залежності величин $\tan\psi$ та $\cos\Delta$ від кута падіння θ , розраховані для розв'язку №1 згідно з теоретичними моделями а), с) та d)

Таблиця 3. Товщини d , показники заломлення n першого та другого шарів і характеристики колірності x , y , ΔE_{ab}^* , одержані в рамках лінійної моделі в зовнішнього шару (плівки)

№ розв'язку	d , нм	n_{11}	n_{12}	MSE, $\times 10^{-3}$	x	y	ΔE_{ab}^*
1	149,8	1,464	1,550	4,67	0,268	0,301	4,8
2	151,5	1,455	1,537	4,68	0,269	0,302	4,5
3	152,6	1,449	1,530	4,71	0,270	0,303	4,2
4	148,3	1,472	1,562	4,71	0,267	0,300	5,1
5	147,7	1,475	1,568	4,75	0,267	0,300	5,2
6	147,2	1,477	1,574	4,78	0,266	0,300	5,3
7	146,6	1,480	1,579	4,84	0,266	0,299	5,4
8	146,2	1,481	1,585	4,89	0,266	0,299	5,5
9	156,5	1,427	1,507	4,93	0,272	0,305	3,8
10	144,4	1,487	1,610	5,22	0,264	0,298	5,9

Таблиця 4. Товщини d , показники заломлення n і характеристики колірності x , y , ΔE_{ab}^* окисленої плівки, одержані в рамках тришарової моделі з

№ розв'язку	d_0 , нм	n_0	d_1 , нм	n_1	MSE, $\times 10^{-3}$	x	y	ΔE_{ab}^*
1	128,5	1,505	19,1	1,674	4,28	0,267	0,300	5,4
2	130,1	1,493	19,3	1,653	4,31	0,268	0,301	5,1
3	131,0	1,487	19,4	1,642	4,34	0,269	0,302	4,7
4	127,0	1,514	19,2	1,693	4,30	0,266	0,299	5,6
5	126,2	1,518	19,3	1,702	4,31	0,265	0,298	5,8

було знайдено для кожного з 10 відібраних раніше розв'язків із застосуванням такої процедури. Одержані результати зведені в табл. 2.

Аналізуючи одержані параметри шарів і значення середнього квадратичного відхилення MSE за результатами використання однорідної моделі, виявляємо дві тенденції. Перша – в моделі неоднорідного проміжного шару маємо більшу товщину d_2 в середньому на 10%, аніж в моделі однорідного шару, і на стільки ж вище значення MSE. Друга – лінійний розподіл виходить дуже пологим, тож модель фактично вироджується до випадку однорідного шару. Звідси можемо зробити висновок про ймовірну однорідність показника заломлення n_2 проміжного шару за глибиною.

Припустимо тепер, що неоднорідним є верхній шар (рис. 2, в): його показник заломлення змінюється лінійно від n_{11} до n_{12} . Зафіксуємо параметри середнього шару згідно з результатами однорідної моделі і виконаємо знову аналогічні розрахунки для тих же 10 розв'язків. Одержані результати зведено в табл. 3.

З цієї таблиці можна бачити, що залежність показника заломлення верхнього шару від глибини існує – він змінюється в середньому від $n_{11} = 1,47$ до $n_{12} = 1,56$. Товщина окисленого шару в неоднорідній і однорідній моделях виходить приблизно така сама (з точністю до 2%), а MSE зменшується приблизно на 4%.

Так само, як і для однорідної моделі a , розраховано спектри відбивання $R(\lambda)$, координати кольорності зразка x, y та їх відхилення від спостережуваного кольору в просторі $L^*a^*b^*$. Порівняно з однорідною моделлю, ця відмінність менша, що підтверджує адекватність одержаних результатів.

Наостанок верхній окислений шар у теоретичній моделі розбили на два однорідних шари (тришарова модель d). Перший із них міг би описати можливий результат взаємодії залишків продуктів реакції при їх контактуванні з атмосферним повітрям. Параметри шару неокисленого поруватого кремнію були зафіксовані (табл. 1). На цей раз розрахунки таблиць виконували лише для перших 5 розв'язків, результати наведено в табл. 4.

Видно, що зовнішній шар плівки має більшу товщину d_0 , аніж її внутрішній шар d_1 , а їх сума збігається з раніше одержаними товщинами окисленого шару d_1 із точністю 1%. Відповідні середні показники заломлення складають: $n_0 = 1,50$, $n_1 = 1,67$.

MSE зменшилось на 9% порівняно з попереднім розглядом, однак, ΔE_{ab}^* зросло на 12%. В цілому можна сказати, що така розширена тришарова модель найкраще описує, ніж попередні моделі, еліпсометричні результати вимірювань зразка.

Наочною ілюстрацією справедливості застосованого теоретичного підходу є вид суміщуваних при мінімізації MSE експериментальних та розрахованих еліпсометричних функцій. Відповідні графіки для розв'язку №1 показано на рис. 4.

4. Висновки

Поверхнева область реального поруватого кремнію має складну структуру. В ній можна виділити, власне, сам поруватий кремній на підкладинці із монокристалічного кремнію і верхню окислену його частину.

Верхня частина (плівка) є результатом взаємодії продуктів електрохімічних реакцій із атмосферним повітрям, в той час як внутрішня – це власне поруватий кремній, утворений на момент вимкнення струму, пори якого заповнені продуктами електрохімічних реакцій і доступ до них атмосферного повітря відсутній.

Оптичні властивості поруватого кремнію добре описуються двошаровою моделлю. Загальна його товщина (близько 2,5 мкм) добре узгоджується з літературними даними відповідно до технології виготовлення даного зразка. Втім, більш імовірно, що глибинний шар поруватого кремнію є однорідним по своїй товщині, а поверхневий окислений шар має складніший розподіл показника заломлення. Для його опису підходить як лінійний, так і двоступінчатий профіль показника заломлення.

Одержані значення показників заломлення приповерхневих шарів поруватого кремнію свідчать, що до його складу входять оксиди кремнію (з показником заломлення, близьким до 1,45), залишки неокисленого кремнію з показником заломлення приблизно 3,9, доступ до якого заблоковано оксидами, і порожні пори.

Поруватий кремній характеризується яскраво вираженою інтерференцією в поверхневому шарі, що може бути використано для додаткової оцінки його товщини, яка становить близько 150 нм. Застосовані методи колориметрії демонструють добре узгодження розрахованого і виміряного кольору

рів зразка, що підтверджує адекватність результатів моделювання.

Описаний підхід може бути застосований не лише до поруватого кремнію, а й до різноманітних діелектричних, напівпровідникових чи металевих матеріалів, які мають неоднорідну приповерхневу область (наприклад, оптичного скла [12]). Для провідних середовищ не можна нехтувати уявною частиною показника заломлення, що входить до теоретичної моделі. Метод дозволяє порівнювати адекватність декількох наперед заданих моделей оптичного профілю і визначати серед них найкращу. Але конкретний вигляд цих моделей потрібно обирати, виходячи з особливостей формування структури досліджуваного об'єкта.

1. T. Lohner, D.J. Wentink, E. Varsonyi, M. Fried. In *Proceeding of the 2nd Japan-Central Europe Joint Workshop "Modeling of Materials and Combustion"* (Budapest, November 7–9, 1996). Edited by I. Vajda (Technical University of Budapest, 1997), p. 66.
2. M. Fried, T. Lohner, O. Polgar, P. Petric, E. Vazsonyi, I. Barsony, J.P. Piel, J. L. Stehle. Characterization of different porous silicon structures by spectroscopic ellipsometry. *Thin Solid Films* **276**, 223 (1996).
3. C. Robert, L. Bideux, B. Gruzza, M. Cadoret, T. Lohner, M. Fried, E. Vazsonyi, G. Gergely. Spectroellipsometry and electron spectroscopy of porous Si thin films on p^+ substrates. *Thin Solid Films* **317**, 210 (1998).
4. V.A. Makara, V.A. Odarych, O.V. Vakulenko, O.I. Dacenco. Ellipsometric studies of porous silicon. *Thin Solid Films* **342**, 230 (1999).
5. V.A. Odarych. *Applied Photometric Ellipsometry* ("Pulsary" Kyiv Univ. Publ., 2017) (in Ukrainian).
6. *Porous Silicon: From Formation to Application*. Vol. 2: *Biomedical and Sensor Applications*. Edited by G. Korotcenkov (Taylor and Francis Group, 2016).
7. A.L. Yampolskiy, O.V. Makarenko, L.V. Poperenko, V.O. Lysiuk. Ellipsometry of hybrid noble metal-dielectric nanostructures. *Semicond. Phys. Quant. Electron. Optoelectron.* **21**, 412 (2018).
8. P.H. Berning. Theory and calculations of optical thin films. In *Physics of Thin Films, Vol. 1*. Edited by G. Hass (Academic Press, 1963), p. 69.
9. L.N. Acquaroli. Matrix method for thin film optics. e-print arXiv:1809.07708v1 (2018).
10. R. Storn, K. Price. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *J. Glob. Optim.* **11**, 341 (1997).
11. *Colorimetry: Understanding the CIE System*. Edited by J. Schanda (Wiley, 2007).
12. O.V. Makarenko, L.V. Poperenko, O.I. Zavalistyi, A.L. Yampolskiy. Ellipsometric diagnostics of a transient surface layer in optical glass. *Ukr. J. Phys.* **64**, 442 (2019).

Одержано 25.05.19

O.I. Zavalistyi, O.V. Makarenko,
V.A. Odarych, A.L. Yampolskiy

THE STRUCTURE OF OXIDE FILM ON THE POROUS SILICON SURFACE

S u m m a r y

A prolonged stay of porous silicon in the air environment gives rise to structural changes in its surface layer, and the standard single-layer model is not sufficiently accurate to describe them. In this work, the structure of the near-surface layer in porous silicon is studied using the polygonal ellipsometry method. A combined approach is proposed to analyze the angular ellipsometry data for the parameters ψ and Δ . It consists in the application of the multilayer medium model and the matrix method, while simulating the propagation of optical radiation in this medium in order to obtain the theoretical angular dependences of $\tan \psi$ and $\cos \Delta$. In this method, the dependence of the sought optical profile on the specimen depth is an additional condition imposed on the multilayer model. Evolutionary numerical methods are used for finding the global minimum of the mean squared error (MSE) between the corresponding theoretical and experimental dependences, and the parameters of an optical profile are determined. A model in which the inner non-oxidized layer of porous silicon is homogeneous, whereas the refractive index in the outer oxidized layer has a linear profile, is analyzed. It is shown that the linear and two-step models for the refractive index of an oxidized film provided the best agreement with the experimental ellipsometric functions. The adequacy of the theoretical model is also confirmed by determining the color coordinates of the specimen.