



**HAL**  
open science

## Vérification de l'exactitude des indices optiques des couches minces optimisées : relations de Kramers-Kronig

Ayse Akbalik, Jean-Hervé Tortai, Patrick Schiavone

### ► To cite this version:

Ayse Akbalik, Jean-Hervé Tortai, Patrick Schiavone. Vérification de l'exactitude des indices optiques des couches minces optimisées : relations de Kramers-Kronig. ROADEF 2010, Congrès de la Société Française de Recherche Opérationnelle et d'Aide à la Décision, Feb 2010, Toulouse, France. hal-00509747

**HAL Id: hal-00509747**

**<https://hal.science/hal-00509747v1>**

Submitted on 16 Aug 2010

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Vérification de l'exactitude des indices optiques des couches minces optimisées : relations de Kramers-Kronig

Ayse Akbalik<sup>1</sup>, Jean-Hervé Tortai<sup>1</sup>, Patrick Schiavone<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> LTM, CNRS, c/o CEA, 17 av. des martyrs, 38054, Grenoble Cedex, France  
ayse.akbalik@gmail.com, jean-herve.tortai@cea.fr

<sup>2</sup> UMI2958 CNRS-Georgia Tech, Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia 30332  
patrick.schiavone@gatech.edu

Mots-Clés : Nanotechnologie, Kramers-Kronig, problème inverse, indices optiques, ellipsométrie.

## 1 Description du problème

Notre problème se situe dans le domaine des nanotechnologies. Nous cherchons à déterminer les indices optiques de couches minces supposées homogènes (résines ou autres), déposées sur divers substrats (par exemple plaque de silicium) en résolvant un problème inverse. Partant des données obtenues par l'ellipsométrie, nous remontons vers les paramètres inconnus de départ, tels que l'indice de réfraction et le coefficient de l'extinction pour chaque niveau d'énergie. Les données étant bruitées et la précision demandée étant de l'ordre de grandeur du nanomètre, une simple résolution du problème inverse avec des méthodes connues n'est pas suffisante.

L'ellipsométrie consiste à mesurer le changement de l'état de la polarisation de la lumière réfléchie à la surface de l'échantillon. Les données obtenues par l'ellipsomètre sont utilisées lors de l'optimisation. Ayant  $2N$  mesures (2 composants de l'intensité de la lumière pour chaque niveau d'énergie), le but est de calculer  $2N$  inconnues : le coefficient d'extinction  $k_i$  et l'indice de réfraction  $n_i$  pour chaque niveau d'énergie (électron volt-eV)  $i$ . Ici,  $n$  et  $k$  sont les composantes réelles et imaginaires du complexe optique ( $n + ik$ ). Dans notre étude précédente [1], nous décrivons différentes méthodes d'optimisation que nous avons proposées pour calculer ces inconnues (technique de régularisation, recherche dans une librairie préconstruite, optimisation non-linéaire de Matlab). Dans ce papier, nous montrons l'idée de la transformation de Kramers-Kronig (KK) et son application à notre problème pour vérifier si après l'étape d'optimisation nous obtenons des résultats ayant un sens physique.

## 2 Méthode de résolution

Les relations de Kramers-Kronig permettent de déterminer la partie imaginaire à partir de la partie réelle (et réciproquement), d'un système supposé causal, linéaire et stable (voir Equation (1)). Nous donnons les équations sous forme générale, où la partie réelle  $Re$  correspond à  $n$  et la partie imaginaire  $Im$  à  $k$ . Le niveau d'énergie où  $n$  et  $k$  sont cherchés est noté  $w$ .

$$Re(w) = Re(\infty) - 2/\pi \int_0^\infty \frac{xIm(x) - wIm(w)}{x^2 - w^2} dx, \quad Im(w) = 2w/\pi \int_0^\infty \frac{Re(x) - Re(w)}{x^2 - w^2} dx \quad (1)$$

Il suffit donc de connaître la partie imaginaire pour retrouver la partie réelle et vice versa (voir [2]). Par contre, dans la pratique, il est impossible de connaître ces indices jusqu'à l'infini. Dans notre cas, les mesures se font dans l'intervalle de 1.5 eV à 6.5 eV. Il est donc impératif de trouver des fonctions appropriées pour une bonne extrapolation de ces données sur des niveaux d'énergie lointains et pour des énergies plus basses. Suite à de nombreux tests effectués, nous avons déterminé 15 eV comme borne supérieure d'énergie jusqu'où les données doivent être extrapolées. Nous avons également utilisé plusieurs fonctions et techniques d'extrapolation : cubic et spline extrapolation de Matlab, oscillateur Classical (fonction Lorentzienne), fonction de Cauchy inverse, etc. Dans les énergies plus basses un Cauchy absorbant ou un Cauchy transparent est utilisé.

### 3 Résultats

Nous avons testé KK sur plusieurs résines. Pour la plupart des résines le résultat est très satisfaisant. Pour certaines, une meilleure fonction d'extrapolation doit être recherchée. La fonction d'extrapolation la plus robuste s'avérant être la fonction du Cauchy inverse, nous montrons (voir Figure 1) l'application de KK à la résine neb22. KK appliqué à la courbe  $k$  est très proche de la courbe réelle de  $n$ . Dans l'intervalle d'étude [1.5, 6.5] eV, les deux courbes obtenus avec KK confirment l'exactitude des indices obtenus.

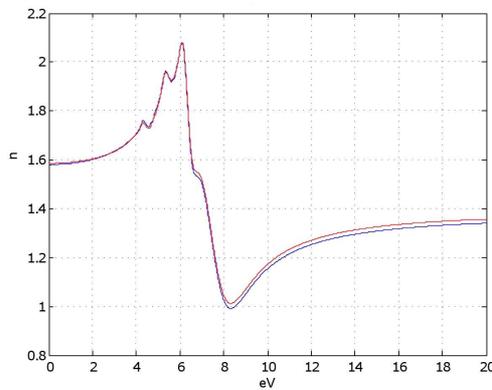


Fig. 1 – Rouge : Kramers Kronig appliqué à  $k$  pour déduire  $n$ . Bleu :  $n$  issu de l'optimisation.

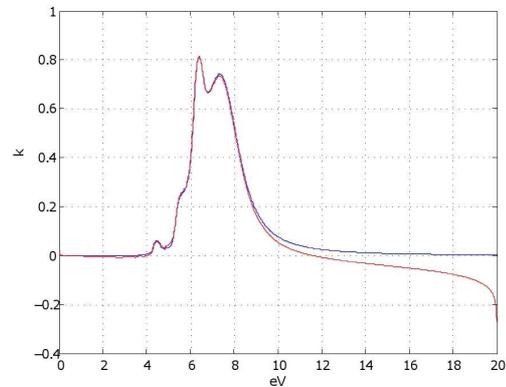


Fig. 2 – Rouge : Kramers Kronig appliqué à  $n$  pour déduire  $k$ . Bleu :  $k$  issu de l'optimisation

### Références

- [1] A. Akbalik, S. Soulan, J-H Tortai, D. Fuard, I. Kone, J. Hazart and P. Schiavone. An inverse ellipsometric problem for thin film characterization : Comparison of different optimization methods. In Proceedings SPIE 2009, Metrology, Inspection and Process Control for Microlithography XXIII, San Jose California, USA.
- [2] A.B. Kuzmenko. Kramers-Kronig constrained variational analysis of optical spectra. Review of scientific instruments, 76, 083108, 2005.