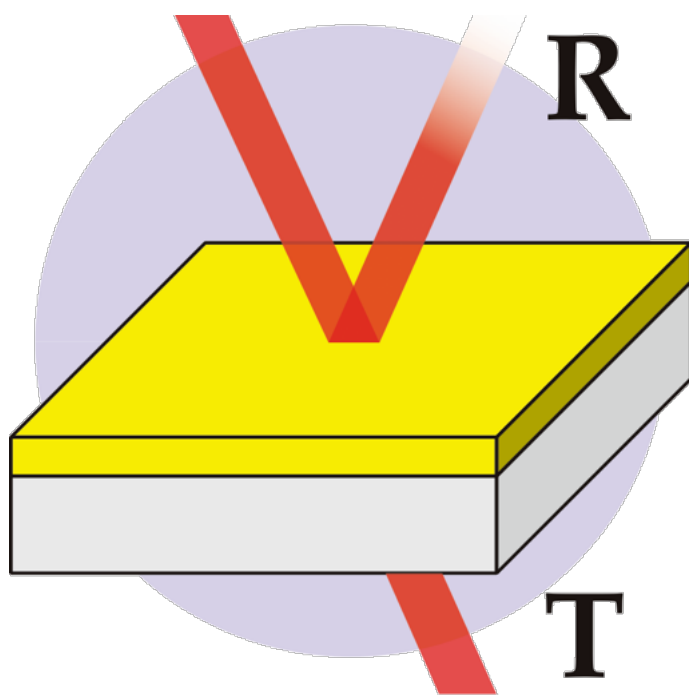


薄膜光学定数導出プログラム Maku マニュアル



はじめに

概要

本ソフトウェアは、研究室などで合成した単層薄膜について、その透過率と反射率スペクトルの干渉フリンジから薄膜の屈折率と膜厚を求めていくプログラムです。光学モデリング機能はありませんが、手動で求めていくのでどのように光学定数を導出されるかがわかるようになっています。薄膜の勉強を始められた方にとって参考になるように、本マニュアルには、その理論や計算方法も記載しました。使用に当たり注意点としては、以下のようになります。

1. シミュレーションは半導体薄膜のバンドギャップ付近の波長領域のスペクトルを想定して設計されています。
2. 基板片面の単層薄膜のみシミュレート可能であり、2層以上レイヤーがある場合は使用できません。
3. 測定データは同一スポットにおける透過率と反射率のスペクトルデータが必要です。透過率または反射率のみでもシミュレーションは可能ですが、使用できる機能には制限があります。
4. 用いる基板はインコヒーレントが条件になります。
5. シミュレーションには基板の屈折率と減衰係数データが必要です。
6. 薄膜が薄く（おおよそ 100 nm 以下）干渉のフリンジがスペクトルにない場合はシミュレーションが難しくなります。

対応 OS

本ソフトウェアは、Xojo でプログラミングされています。64bit アプリケーションになります。対応 OS 次の通りになります。

- Windows 10, 8, 7 SP1
- Mac OS 11.0, 10.11～10.15, 10.10.5

バージョン履歴

バージョン 5 (2021)

- 実行ファイルとして一般公開した
- Windows10 に対応した

バージョン 4 (2017-2020)

- 反射率からも屈折率と膜厚を計算できるようにした

バージョン 3 (2016-2020)

- Xojo で記述。Window 8, Mac OS 10 で使用できるようにした

バージョン 1-2 (2005-2016)

- REALBasic で記述。
- 透過率から屈折率と膜厚を計算する機能を搭載

参考文献

透過反射の計算式および $T/(1-R)$ は、次の文献を基にしております。

Y. Nishikawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **30**, 1008(1998).

I 理論編

1. 透過率と反射率の理論的な計算

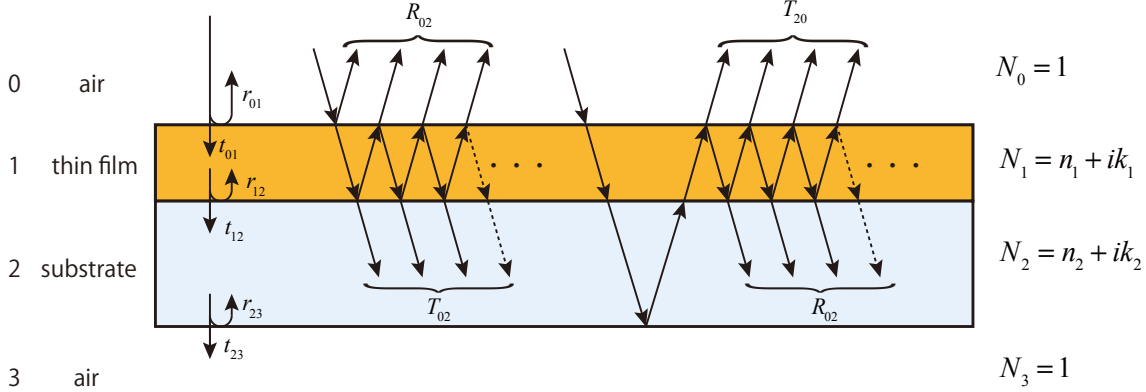


図1 薄膜試料のモデル

図1のように基板の上に薄膜が形成された試料を考える。表面は薄膜側とする。それぞれの複素屈折率は図に示した。 k 層と l 層の境界での振幅反射率 r_{kl} と振幅透過率 t_{kl} はそれぞれ

$$r_{kl} = \frac{N_k - N_l}{N_k + N_l} = |r_{kl}|e^{i\phi_{kl}}, \quad t_{kl} = \frac{2N_k}{N_k + N_l} = |t_{kl}|e^{i\phi_{kl}} \quad (1)$$

である。空気から薄膜に入射した光は空気1と基板2の間で多重反射が起きる。このとき、再び空気側に戻ってきた多重反射光の反射率を R_{02} とすると

$$\begin{aligned} R_{02} &= |r_{01} + t_{01}e_1r_{12}e_1t_{10} + t_{01}e_1r_{12}e_1r_{10}e_1r_{12}e_1t_{10} + \dots|^2 \\ &= |r_{01} + t_{01}e_1r_{12}e_1t_{10}\{1 + r_{10}e_1r_{12}e_1 + (r_{10}e_1r_{12}e_1)^2 + \dots\}|^2 \\ &= \left| r_{01} + \frac{e_1^2 t_{01} t_{10} r_{12}}{1 - e_1^2 r_{10} r_{12}} \right|^2 \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、 e_1 は薄膜内での光の位相であり、薄膜の厚さを d 、光の波長 λ とすると

$$e_1 = \exp\left(\frac{i2\pi N_1 d}{\lambda}\right) \quad (3)$$

である。同様な計算により透過率、反射率は次のようになる。

$$R_{20} = \left| r_{21} + \frac{e_1^2 t_{21} t_{12} r_{10}}{1 - e_1^2 r_{12} r_{10}} \right|^2 \quad (4)$$

$$T_{02} = T_{20} = \frac{n_2}{n_0} \left| \frac{e_1 t_{01} t_{12}}{1 - e_1^2 r_{10} r_{12}} \right|^2 \quad (5)$$

基板の裏側での反射率と透過率は次の式となる。

$$R_{23} = |r_{23}|^2, \quad T_{23} = 1 - R_{23} \quad (6)$$

試料全体の反射率 R と透過率 T は、さらに基板での多重反射を考慮する必要がある。ただし、基板で

の多重反射はインコヒーレントとして干渉は起きないとする。反射率 R は

$$R = R_{02} + T_{02}R_{23}T_{20} + T_{02}R_{23}(R_{20}R_{23})T_{20} + \cdots = R_{02} + \frac{T_{02}^2 R_{23}}{1 - R_{20}R_{23}} \quad (7)$$

同様に透過率 T は

$$T = T_{02}T_{23} + T_{02}R_{23}R_{20}T_{23} + T_{02}(R_{23}R_{20})^2T_{23} \cdots = \frac{T_{23}T_{02}}{1 - R_{20}R_{23}} \quad (8)$$

2. 干渉のフリンジから薄膜の屈折率を求める方法

2-1. 干渉のフリンジの極大値と極小値の導出

N_1 の虚数部の k_1 が十分小さい場合の R_{02} 、 T_{02} について計算をすると、

$$R_{02} = \frac{|r_{10}|^2 + |r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}|\cos(2\Delta + \phi_{12})}{1 + |r_{10}|^2|r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}|\cos(2\Delta + \phi_{12})} \quad (9)$$

$$T_{02} = \frac{n_2}{n_0} \left(\frac{|t_{01}||t_{12}|}{1 + |r_{10}|^2|r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}|\cos(2\Delta + \phi_{12})} \right) \quad (10)$$

ここで Δ は $e_1 = \exp\left(\frac{i2\pi n_1 d}{\lambda}\right) = \exp(i\Delta)$ である。 \cos の値が -1 から 1 まで変動することにより R_{02} と T_{02} は上下する。このことにより反射率と透過率の干渉によるフリンジが発生する。このフリンジ部分のスペクトルを用いることにより薄膜の屈折率の導出が可能である。そこで、 R_{02} と T_{02} の極値を求める。ここでは、計算を簡単にするため基板には光吸収がなく $k_2=0$ とする。

$\cos(2\Delta + \phi_{12}) = -1$ のときは、

$$R_{02(1)} = \frac{(n_1^2 - n_2)^2}{(n_1^2 + n_2)^2} \quad (11)$$

$$T_{02(1)} = \frac{4n_1^2 n_2}{(n_1^2 + n_2)^2} \quad (12)$$

$\cos(2\Delta + \phi_{12}) = 1$ のときは、

$$R_{02(2)} = \frac{(n_2 - 1)^2}{(n_2 + 1)^2} \quad (13)$$

$$T_{02(2)} = \frac{4n_2}{(n_2 + 1)^2} \quad (14)$$

である。 $R_{02(1)}$ と $R_{02(2)}$ の大小を比較すると

$$R_{02(1)} - R_{02(2)} = \frac{(n_1^2 - n_2)^2}{(n_1^2 + n_2)^2} - \frac{(n_2 - 1)^2}{(n_2 + 1)^2} = \frac{2(n_1^2 - n_2^2)}{(n_1^2 + n_2)^2(n_2 + 1)^2} \quad (15)$$

であり、 $n_1 > n_2$ のときは、 $R_{02(1)}$ が極大値、 $R_{02(2)}$ が極小値であり、 $T_{02(1)}$ が極小値、 $T_{02(2)}$ が極大値である。このときの試料全体の R , T を求めると

$$R_{(1)} = 1 - \frac{4n_1^2 n_2}{(n_1^2 + n_2^2)(n_1^2 + 1)} \quad (\text{極大値}) \quad (16)$$

$$T_{(1)} = \frac{4n_1^2 n_2}{(n_1^2 + n_2^2)(n_1^2 + 1)} \quad (\text{極小値}) \quad (17)$$

$$R_{(2)} = \frac{(n_2 - 1)^2}{n_2^2 + 1} \quad (\text{極小値}) \quad (18)$$

$$T_{(2)} = \frac{2n_2}{n_2^2 + 1} \quad (\text{極大値}) \quad (19)$$

となる。 $R_{(2)}$ と $T_{(2)}$ は基板の屈折率しか含んでおらず、 n_2 が波長によらない場合は、 $R_{(2)}$ と $T_{(2)}$ は一定値となる。一方、フリンジ内の $R_{(1)}$ と $T_{(1)}$ は n_1 の情報を含んでおり、 n_2 がわかっているならば n_1 が導出可能である。

また、 $n_1 < n_2$ の場合は、式(15)から $R_{02(1)}$ が極小値、 $R_{02(2)}$ が極大値と入れ替わる。よって、 R , T を求めると

$$R_{(1)} = 1 - \frac{4n_1^2 n_2}{(n_1^2 + n_2^2)(n_1^2 + 1)} \quad (\text{極小値}) \quad (20)$$

$$T_{(1)} = \frac{4n_1^2 n_2}{(n_1^2 + n_2^2)(n_1^2 + 1)} \quad (\text{極大値}) \quad (21)$$

$$R_{(2)} = \frac{(n_2 - 1)^2}{n_2^2 + 1} \quad (\text{極大値}) \quad (22)$$

$$T_{(2)} = \frac{2n_2}{n_2^2 + 1} \quad (\text{極小値}) \quad (23)$$

となる。

2-2. フリンジの極大値と極小値の屈折率による変化

図2は基板の屈折率 $N_2 = 2 + i0$ としたときの基板の屈折率 n_1 を変化させたときの $R_{(1)}$ と $R_{(2)}$ の変化である。 $n_1 > n_2$ のときは $R_{(1)}$ から n_1 は一義的に決まるが、 $n_1 < n_2$ のときは $R_{(2)}$ を用いると n_1 は2つの解を持つ。したがって経験的に n_1 を決定させるか、さもなければ $n_1 > n_2$ となる基板を用いる必要がある。

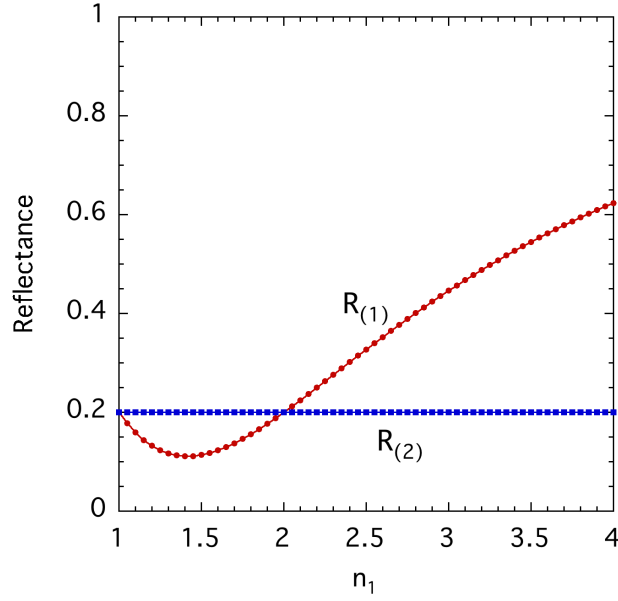


図2 n_1 によるフリンジの極大値と極小値

2-3. n_1 の導出方法

プログラムでは $R_{(1)}$ (または $T_{(1)}$) の値のみを用いず、 $R_{(1)}$ と $R_{(2)}$ の相乗平均または相加平均の値を用いて実測値と比較して求める。反射率の測定エリア内で薄膜に膜厚分布があると、干渉のフリンジの振幅が小さくなる。その場合は相乗平均を用いると精度が上がる場合がある。

また、金属基板など $k_2 > 0$ のときは、 R に極大値と極小値に ϕ_{12} が含まれる。なぜなら R_{20} は

$$R_{20} = \frac{|r_{10}|^2 + |r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}| \cos(2\Delta - \phi_{12})}{1 + |r_{10}|^2|r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}| \cos(2\Delta + \phi_{12})} \quad (24)$$

であり、 $\cos(2\Delta + \phi_{12}) = 1$ のときは

$$R_{20} = \frac{|r_{10}|^2 + |r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}| \cos(2\phi_{12})}{1 + |r_{10}|^2|r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}|} \quad (25)$$

$\cos(2\Delta + \phi_{12}) = -1$ のときは

$$R_{20} = \frac{|r_{10}|^2 + |r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}| \cos(2\phi_{12} - \pi)}{1 + |r_{10}|^2|r_{12}|^2 - 2|r_{10}||r_{12}|} \quad (26)$$

となるからである。式(25)と(26)を式(7),(8)に代入して $R_{(1)}$, $R_{(2)}$, $T_{(1)}$, $R_{(2)}$ が得られる。

3. 干渉次数の決定方法および膜厚と $n_1(\lambda)$ の導出

式(9)において R_{02} が極値を持つためには

$$2\Delta + \phi_{12} = \frac{4\pi n_1 d}{\lambda} + \phi_{12} = m\pi \quad \text{ただし } m = 1, 2, \dots \quad (27)$$

となる。 m は干渉次数と呼び整数である。測定された干渉のフリンジ内で長波長側から短波長側へ反射率または透過率の極値での波長を順に $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s, \dots$ とする。式(27)を変形して

$$n_{1s} = \frac{\lambda_s}{4\pi d}(m_s\pi - \phi_{12}), \quad m_{s+1} = m_s + 1 \quad (28)$$

となる。干渉次数 m_s と基板の屈折率 n_{1s} は、波長 λ_s での値である。この式から d と m_1 が決まれば λ_s での n_{1s} が決定できることがわかる。特に m_s は整数であることから他の物理量よりずっと求めやすい。プログラムでは干渉シリンジの干渉次数を決定させることを重視している。

m_1 の決定方法を説明する。まず、波長 λ_1 と λ_2 での R または T の極値を用いて 2-3 の方法で n_{11} を求める。次に、ラフに d を決定する。 λ_1 と λ_2 の間では n_1 と ϕ_{12} は変化しないとする

$$\frac{4\pi n_{11}d}{\lambda_1} + \phi_{12} = m_1\pi, \quad \frac{4\pi n_{11}d}{\lambda_2} + \phi_{12} = (m_1 + 1)\pi \quad (29)$$

となる。この 2 つの式を連立させれば、

$$d = \frac{1}{4n_{11}} \times \frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (30)$$

となり d が求まる。さらに、この d と n_{11} を用いて式(28)を用いて波長 λ_1 での干渉次数 m_1 を計算するが、たいていの場合、 m_1 は整数にならない。そこで、求めた m_1 を四捨五入した値 m'_1 とそれに近い整数 $m'_1 \pm 1, m'_1 \pm 2$ の 5 つ程度を m_1 の候補として挙げて、最終的に一つに絞る。 m_1 の決定方法は次の通りである。まず、式(28)を変形した

$$d = \frac{\lambda_1}{4\pi n_{11}}(m_1\pi - \phi_{12}) \quad (31)$$

により m_1 にその候補を代入して膜厚 d を決定する。この d と干渉次数 m_1 のセットを用いて式(28)に代入すればフリンジ内の極値での n_{1s} が次々と求まる。このようにして求めた極値の波長での n_{1s} のそれぞれ点を直線的に結んで $n_1(\lambda)$ を計算し、 d と $n_1(\lambda)$ を式(7),(8)に代入して R, T を計算する。この計算はすべて m_1 の候補に対して行う。 m_1 の候補からの絞り込みは、

- ① 計算した R, T とその実測値との誤差
- ② $n_1(\lambda)$ のスペクトルの形

から判断し決定する。 m_1 の偶奇は、実際と逆になっていると干渉フリンジの極大と極小が入れ替わり R, T のシリンジの振動の上下が実測値と逆になるので、すぐに判定できる。また、バンドギャップ以下の $n_1(\lambda)$ は波長が短くなると n_1 は大きくなるセルマイヤーの分散公式が成り立つ。不適切な m_1 では波長が短くなると n_1 が小さくなることから除外できる。そして方法②により計算した R, T とその実測値との誤差が最も小さくなる m_1 を候補から選び干渉次数を決定する。

4. 膜厚と $n_1(\lambda)$ の導出

前節は干渉次数を求めることが目的であった。そのとき(31)式から求めた d を膜厚としてもよいが、 d には誤差が含まれている。その理由は、そのとき計算した n_{11} には誤差が生じるからである。そこで、 d を微調整して式(28)で $n_1(\lambda)$ を再計算して R, T スペクトルが計算値と合うようにする。こうして、膜厚と屈折率がより正確に求めることが可能である。

$n_1(\lambda)$ は式(25)から求めた極値の波長での n_{1s} を直線的に結んだものとしているが、セルマイヤーの分散公式から手動でフィッティングさせることも可能である。特に膜厚が薄い場合に有効である。

$n_1(\lambda)$ は薄膜の光吸収がゼロとして求めていることに注意が必要である。透過率は k_1 が小さくても影響受けやすい。したがって薄膜に弱い吸収がある場合は、反射率の干渉フリンジを用いて n_{11} を計算したほうが良い。

5. 吸収係数 $\alpha(\lambda)$ または $k_1(\lambda)$ の導出

干渉のフリンジは膜厚や屈折率を導出するのには役立つが k_1 を求めるのには厄介な存在である。そこで次の計算を行う。

$$\begin{aligned} \left(\frac{T}{1-R} \right)^{-1} &= \frac{(1-R_{02})(1-R_{20}R_{23}) - T_{20}^2 R_{23}}{T_{23}T_{02}} \\ &= \frac{1-R_{02}}{T_{23}T_{02}} - \frac{R_{23}}{T_{23}} \left(R_{20} \frac{1-R_{02}}{T_{02}} + T_{20} \right) \end{aligned} \quad (32)$$

この式の第2項はガラス基板なら $R_{23}=0.04$ 程度である。したがってほぼ第一項のみと考えることができる。さらに計算すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{T}{1-R} \right)^{-1} &\cong \frac{1-R_{02}}{T_{23}T_{02}} \\ &= \frac{(1-|r_{01}|^2)(e^{\alpha d} - e^{-\alpha d}|r_{12}|^2)}{|t_{01}|^2|t_{12}|^2|t_{23}|^2} + \frac{4|r_{01}||r_{12}|\sin(2\Delta + \phi_{12})\sin(\phi_{10})}{|t_{01}|^2|t_{12}|^2|t_{23}|^2} \end{aligned} \quad (33)$$

ここで、 α は薄膜の光吸収係数であり $k_1 = \lambda\alpha/4\pi$ の関係がある。この式では干渉を起こす Δ が第二項に入っているが、干渉のフリンジが起きる波長では $\sin(\phi_{10})$ はかなり小さいため第二項は無視できる。また、薄膜の吸収が大きい場合は第一項が大きくなるので、やはり第二項は無視できる。結局、 $T/(1-R)$ は干渉を打ち消すスペクトルとして用いることができる。したがって式(32)を用いて $T/(1-R)$ を計算し、実測値と比較して α を決定することができる。

6. 再調整

前節により吸収係数を導出後、干渉のフリンジで薄膜に吸収があると、R,T スペクトルが少しシミュレーションとずれる。これは 2-3. の計算では $k_1 = 0$ としていたためである。そこで、さらに d を 2-4. と同様に微調整する。必要があれば、また吸収係数を計算し同様の調整を繰り返すことで d は収束するはずである。

I 使用方法編

ここに記載されている順番で解析を行ってください。

1. ファイルの選択

最初に測定データをメニューの **ファイル** → **データを開く** から読み込みます。データフォーマットに合わせて区切り等を選択し OK を押します。測定データの透過率と反射率の測定波長は一致している必要があります。

ファイルのフォーマットは、次の通りです。

波長 区切りコード 透過率 区切りコード 反射率 改行コード

ただし、波長は nm の単位になります。

データ区切り タブ、コンマ、スペースが使用できます。自動判別できますがファイルにヘッダ部分がありますと誤判定する場合があります。

データの並び 透過率と反射率の順番は指ここで定めます。

データの形式 透過率と反射率は百分率（パーセント）の場合はパーセントを選択します。

データが始まる行 ヘッダがある場合はデータ部分の開始の行を入力ください。

データのトリミング 不必要なデータがあれば「する」を選択して波長範囲を入力ください。

データフォーマット

1: nm,T,R
2: 300,0,0.5659374
3: 302,0,0.5613289
4: 304,0,0.5572545
5: 306,0,0.5537082
6: 308,0,0.5506814

データ区切り

☐ タブ ☒ コンマ ☐ スペース

データの並び

☐ 反射→透過 ☒ 透過→反射

データの形式

☐ パーセント ☒ 割合 (最大1)

データが始まる行 1

データのトリミング

☒ しない ☐ する 最小波長 0 最大波長 0

Cancel OK

2. 基板の選択

メニューの **基板** → **基板の選択** から基板の屈折率と減衰係数のデータが入った nk ファイルを選択します。基板ファイルは Substrate フォルダに入っています。初期状態では SiO₂、BK7、Si の nk ファイルが入っています。また、Substrate(Sopra) フォルダにも Sopra S.A.社により提供されている nk データのファイル¹⁾が入っています。このフォルダにもない基板を用いる場合は、別の方法で独自に測定して作成するか、インターネットに公開されているデータベース²⁾や参考文献から引用して作成する必要があります。nk ファイルのフォーマットは波長(nm)、屈折率、減衰係数の順で、区切りコードはタブとなります。

1) Sopra の nk データが公開されている HP

<http://www.sspectra.com/sopra.html>

2) たとえば FILMETRICS 社の HP

<https://www.filmetricsinc.jp/refractive-index-database>

基板の厚さ 減衰係数がゼロでない場合は正確に入力します。

基板裏面反射 裏面が鏡面の場合は「反射あり」にチェックを入れます。裏面が研磨されていない場合や反射防止の対策をされている場合は「反射あり」のチェックを外します。この場合は、 R_{23} と T_{23} がゼロとして計算されるため、透過率はゼロになります。

基板

使用した基板のn,kファイルを選択し、厚さと裏面について入力ください。

ファイル

ファイル名 ファイルは選択されていません 選択

基板の厚さ

基板に光吸収があり多重反射が想定される場合は実測の値を入力します。 0.5 mm

基板裏面の反射

基板の裏面が鏡面でない場合はチェックを外します。 ☒ 反射あり
透過率はゼロになります。

基板ファイルの内容

閉じる

3. 平坦化処理

メニューの **計算** → **平坦化処理** により、測定データのノイズ処理をします。透過率・反射率スペクトルの測定系で CCD の検出器を用いる場合は、赤外光領域の S/N 比が悪いためスペクトルにノイズが出ます。そのノイズにより、この後のピーク検出に支障が生じる場合は、データの飛びのカットや平坦化にチェックを入れてください。平坦化は単純移動平均処理のため、スペクトルによってはデータの鈍りが発生します。通常は、この処理はスキップします。



4. 干渉のシリンジ内のピーク検出

メニューの **計算** → **干渉ピーク (ピーク法)** により、干渉のフリンジでのピーク波長を検出します。

ピーク検出測定データ 透過率か反射率のどちらのフリンジからピークを検出するか決めます。薄膜に弱い吸収がある場合は、反射率を選んだ方がこの後の屈折率の計算が正確に算出されます。

ピーク検出波長範囲 ピークは長波長側から検出しますが、開始波長を選ぶことができます。短波長側は自動にチェックを入れると、透過率が小さくなったとき検出を終了します。終了波長を指定する場合は自動のチェックを外して波長を入力します。

ピーク検出方法 最小二乗法ボタンを押してピーク位置を計算させます。計算結果は下に表示され、スペクトルウインドウに○で極値の位置が表示されます（○の右横の数字は干渉次数を示しますが、干渉次数はまだ計算していないのでゼロと表示されます）。このときピークが検出されない場合はピークの検出感度の値を変えて再計算させてください。ピークは検出されているが、正しい波長でない場合は単純法ボタンを押して計算させます。もしピークでない波長をピークとして検出した場合は、ピークリストから該当のピークのチェックを外してください。

干渉ピーク

ピーク検出測定データ

☒ 透過率 ☐ 反射率

ピーク検出開始波長範囲

長波長側からピークを検出します。開始波長を小さくすることで長波長でのピークの不確かさを除けます。短波長側は透過率が小さくなったとき検出を終了させる場合は自動にチェックします。終了波長を指定する場合は自動のチェックを外して波長を入力します。

1100 nm から ☒ 自動 または 300 nm まで

ピーク検出方法

単純法でピーク検出した後、ピーク近傍を二次関数とし最小二乗法によりピーク位置をより正確に割り出します

最大値・最小値を探します。最小二乗法に問題があるときはこちらで検索します。

ピークの検出感度を設定できます。ピークが検出できない場合はしきい値を調整します。 0.01

干渉ピークで取り除きたいもののチェックを外します。

チェック	波長(nm)	p/d	透過率
------	--------	-----	-----

Cancel OK

5. 干渉次数と屈折率の計算

メニューの **計算** → **干渉次数と屈折率（ピーク法）** により、干渉のフリンジから屈折率と干渉次数を計算します。

屈折率計算方法 基板の屈折率の計算方法には干渉シリンジのピークの極大と極小値の相乗平均を取る方法と相加平均を取る方法が選択できます。選択したら 「計算」 ボタンを押します。基板の屈折率を計算できる範囲は干渉フリンジがある範囲内です。範囲外は一定値として処理されます。

最も長波長の極値での屈折率と干渉の次数 検出されたピークで最も波長の長い波長での屈折率 n_{11} と式(28)から求めた m_1 の値が表示されます。解が2つある場合は、屈折率が2つ表示されますので経験則に基づいて選択ください。

屈折率の固定 ピーク法では、ピークの数が少ないときなど、一定値にチェックを入れると式(28)の n_{1s} の計算をせず $n_1(\lambda) = n_{11}$ と一定になります。

最も長波長の極値での干渉の次数（整数値） m_1 の候補を計算し自動的に一つに絞った値が表示されます。その m_1 を使って R, T を計算した結果はスペクトルウインドウにシミュレーションの R, T として表示されます。スライダーを動かすことで、 m_1 の候補を変えることがで、 R, T スペクトルも再計算されます。 m_1 の自動絞り込みが正しいとは限りませんので、一度スライダーを動かして確認ください。特に短波長側で薄膜の吸収が大きいと、間違った絞り込みになることがあります。この場合は、ピーク検出波長範囲を絞ってみてください。

The dialog box is titled "干渉次数と屈折率の計算" (Calculation of Interference Order and Refractive Index). It contains the following sections:

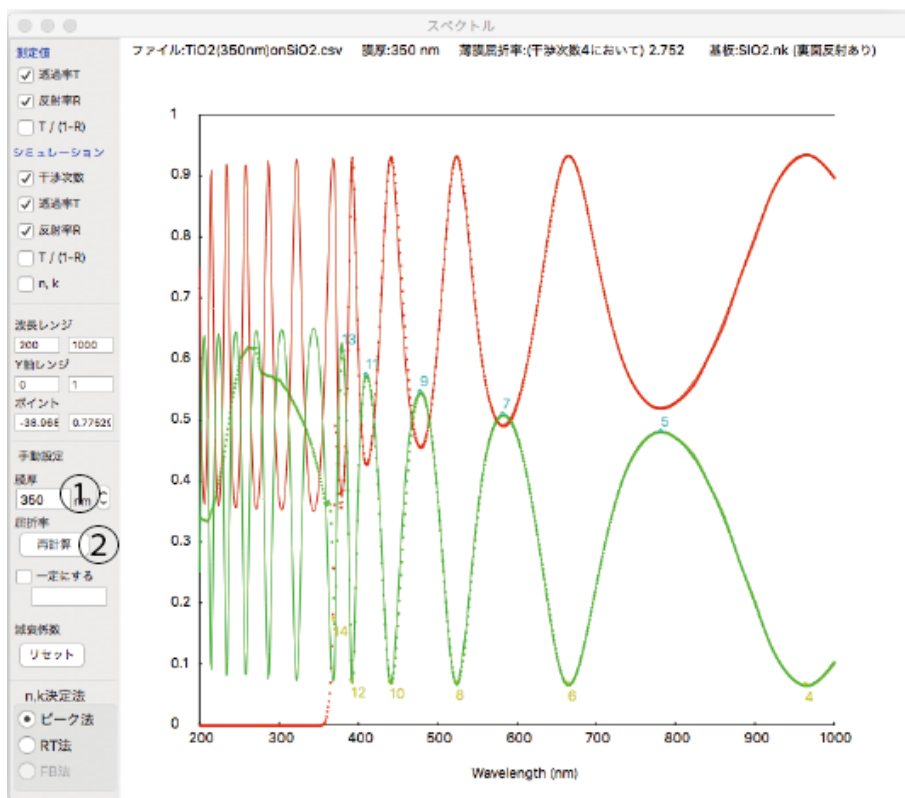
- 屈折率計算方法** (Refractive Index Calculation Method): Two radio buttons for "ピーク値の相乗平均" (Geometric Mean of Peak Values) and "ピーク値の相加平均" (Arithmetic Mean of Peak Values). The "相加平均" button is selected. A "計算" (Calculate) button is to the right.
- フリンジの極値から屈折率を計算した結果、干渉次数の決定の結果** (Results of Refractive Index Calculation from Fringe Extremes and Determination of Interference Order): A text area showing calculation results:
----干渉フリンジで最も長波長での屈折率 n_{11} の計算----
964.11nm, 0.0661 ↓ 782.04nm, 0.4810 ↑ $n_{11} = 2.8, m_1 = 4.295429$
----干渉フリンジで最も長波長での次数の最適値の計算----
次数=2 $\epsilon = 8.614116$
次数=3 $\epsilon = 42.00457$
次数=4 $\epsilon = 0.0598712$
次数=5 $\epsilon = 34.16569$
次数=6 $\epsilon = 1.290988$
次数の最適値 = 4
- 最も長波長の極値での屈折率と干渉の次数** (Refractive Index and Interference Order at the Longest Wavelength Extreme): A section stating "屈折率は次のように計算されました。" (The refractive index was calculated as follows). It shows "屈折率" (Refractive Index) as 2.8 (selected with a radio button) and "次数" (Order) as 4.295429. There is also an option for "解なし" (No solution).
- 屈折率の固定** (Fixing the Refractive Index): A checkbox labeled "干渉の山と谷が少なく自動で計算が困難な場合は、チェックを入れて屈折率を固定にして計算してください" (If there are few peaks and valleys in the interference, making automatic calculation difficult, check this to fix the refractive index for calculation). The checkbox is unchecked. Below it, a text field shows "一定値" (Fixed Value) as 2.8, with a "にする" (Set to) button.
- 最も長波長の極値での干渉の次数（整数値）** (Interference Order (Integer Value) at the Longest Wavelength Extreme): A section stating "実測データと最も一致するような長波長での極値の次数を自動計算します。スライダーで次数を変更することもできます。直接や次数を入力したり屈折率を変えた場合は、再計算を押してください。" (The order of the extreme value at the longest wavelength that best matches the measured data is automatically calculated. You can also change the order with the slider. If you directly input the order or change the refractive index, please press the recalculate button). It features a "干渉次数" (Interference Order) input field with the value 4, a slider, and a "再計算" (Recalculate) button.

At the bottom of the dialog are "Cancel" and "OK" buttons.

6. 微調整

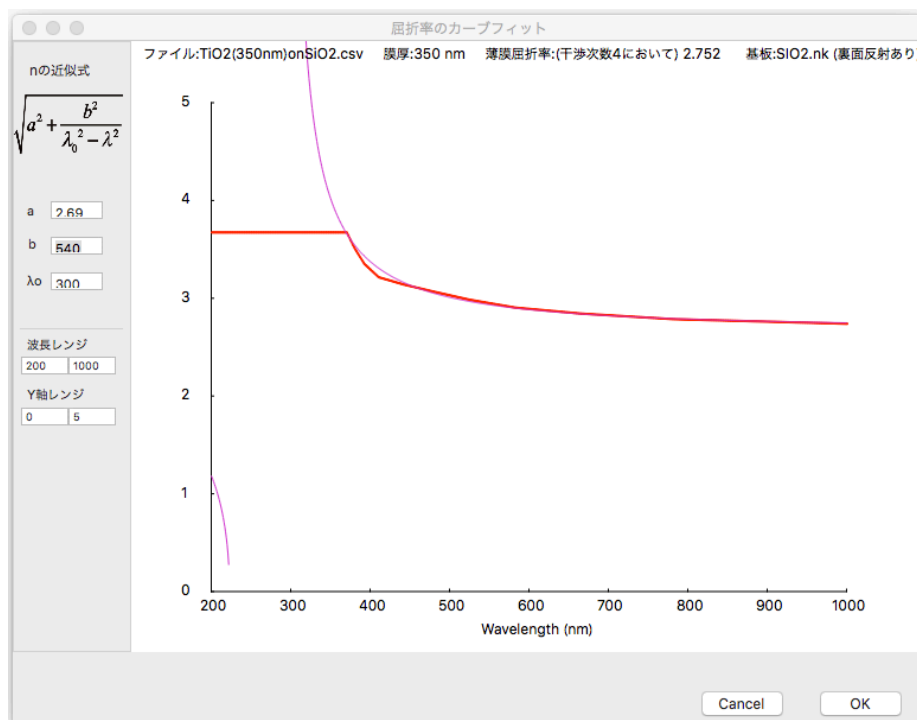
求めた n_{11} に誤差があるため干渉フリンジのスペクトルが測定値と一致しない場合があります。そのときは、スペクトルウインドウの①で膜厚を微調整し、②の再計算ボタンを押して、屈折率 $n_1(\lambda)$ を再計算させます。この作業は手動で行いますので、何回か繰り返します。

以上で膜厚の導出は終わりです。膜厚はスペクトルウインドウの上部に表示されます。



7. 屈折率のカーブフィット

メニューの **計算** → **屈折率のカーブフィット** より屈折率 $n_1(\lambda)$ をセルマイヤーの分散公式を用いてなめらかなにすることができます。屈折率 $n_1(\lambda)$ は干渉フリンジの各ピークにおいてその屈折率を計算したものを直線的に結んだものですのでピーク以外波長の屈折率の値を補完することができます。ただし、膜厚を導出することを目的とするなら、この作業は不要です。また、フリンジがなくなる短波長側の屈折率は一定して処理しており、不自然になります。これをセルマイヤーの分散公式で補うことも可能ですが、減数係数が増えていく波長領域では、うまく表現できません。



8. 光吸収係数の導出

メニューの **計算** → **吸収係数の決定** より薄膜の光吸収係数スペクトルを求めることができます。光吸収係数の決定方法は2つあります。透過率と反射率を測定したデータは、通常 $T/(1-R)$ を選びます。透過率の測定データしかない場合は、簡易的な方法での計算になります。反射率の測定データしかない場合は、光吸収係数を導出することができません。 $T/(1-R)$ を選択した場合は、式(33)を用いて光吸収係数を計算します。透過率が1%以下になると測定が難しくなってきます(ただし、光度分光計には0.001%以下でも測定できるものがあります)。したがって、吸収係数が高い場合は透過率の測定限界により精度が決まり、吸収係数が小さい場合は干渉フリンジの影響を受けます。

光吸収係数の計算が終わると光吸収スペクトルが表示されます。さらに、シミュレーションの R, T も k_2 を計算した結果が表示されます。



9. 保存

メニューの ファイル → データの保存 より計算結果を保存することができます。ダイアログがでますが、ピーク法を選んでセーブします。保存データのフォーマットは次のようになります。

ヘッダ

File name : mela4-3-kaiseki.TXT

測定データのファイル名

Substrate : SI02

基板のファイル名

n, k analyzed by peak fitting method

解析方法

Thickness : 570.2865 nm Refractive Index: 2.126

膜厚と屈折率(n_{11})

Peak list from Reflectance spectrum

干渉フリンジのピーク検出データ (透過率 or 反射率)

干渉フリンジのピークリスト (タブ区切り)

順に波長、p/d (1:極大値 -1:極小値)、測定値、干渉次数

wavelength (nm)	p/d	value	order of interference
969.2185	1	0.2787522	5
818.5158	-1	0.0685554	6
709.0134	1	0.2994879	7
631.7049	-1	0.0711098	8
570.7366	1	0.3233693	9
525.2714	-1	0.0756323	10
488.428	1	0.3502843	11
460.1373	-1	0.0838521	12
437.818	1	0.3761654	13
420.5287	-1	0.1035748	14
406.8823	1	0.2932184	15
395.5016	-1	0.200379	16

各種データ (タブ区切り)

順に波長、光子エネルギー、透過率と反射率 (測定値)、n(屈折率)、k(減数係数)、光吸収係数

Wavelength (nm)	Photon energy (eV)	Transmittance	Reflectance	n	k	Absorption Coefficient (1/cm)
200.23	6.192878	0.14815	0.27365	2.775057	0.0408734	25652.02
200.5	6.184539	0.14286	0.27289	2.775057	0.0419661	26302.31
200.77	6.176222	0.13793	0.26576	2.775057	0.0432699	27083.03
201.05	6.16762	0.13793	0.29267	2.775057	0.0422903	26433.01

III その他

使用にあたって

バグや使用にあたって改善点がありましたら連絡ください。その際、可能でしたら使用した測定データをいただくと今後の改善に役立てることができます。

本ソフトウェアを使用して計算したデータについては、その保証は致しません。ご自身の責任のもとで使用ください。

本ソフトウェアは、薄膜の研究をされている学生のために開発したものです。商用での目的や改造しての配布は禁止とします。

今後の方針

反射率のクラマース・クローニツヒにより、透過率が小さいときの n, k を求める機能をつけたいと思っています。

お問い合わせ先

羽渕 仁恵

岐阜工業高等専門学校 電気情報工学科

habuchi@gifu-nct.ac.jp