CC BY

http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-5-73-80

Оригинальная статья Original paper

УДК 621.384.3

РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТОНКИХ ПЛЕНОК КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ТЕПЛОВОГО НЕОХЛАЖДАЕМОГО ДЕТЕКТОРА БОЛОМЕТРИЧЕСКОГО ТИПА

ЧАН ВАН ЧИЕУ¹, К. В. КОРСАК¹, П. Э. НОВИКОВ¹, И. Ю. ЛОВШЕНКО¹, С. М. ЗАВАДСКИЙ¹, Д. А. ГОЛОСОВ¹, А. А. СТЕПАНОВ¹, А. А. ГУБАРЕВИЧ¹, В. В. КОЛОС², Я. А. СОЛОВЬЕВ², Д. С. ЛЕВЧУК², В. Р. СТЕМПИЦКИЙ¹

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (г. Минск, Республика Беларусь) ²ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ» (г. Минск, Республика Беларусь)

Поступила в редакцию 15.06.2023

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2023 Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2023

Аннотация. Повышенный интерес к применению неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа (микроболометров) в инфракрасном или терагерцовом поле обнаружения обоснован их эксплуатационными и технологическими характеристиками, в частности: относительно низкой стоимостью изготовления, высокой эффективностью обнаружения, совместимостью с кремниевой КМОП-технологией, работоспособностью при комнатной температуре. Характеристики таких детекторов зависят от оптимизации критических параметров, которые определяются геометрией конструкции, а также электрическими, оптическими и тепловыми свойствами применяемых материалов. Определение оптических параметров является одним из решающих факторов при проектировании приборных структур микроболометров. В статье исследованы оптические параметры тонких пленок конструкционных материалов микроболометра на основе термочувствительной пленки оксида ванадия, изготовленных в ОАО «ИНТЕГРАЛ». Приведены результаты определения посредством применения метода отражения-передачи оптических констант (коэффициентов преломления *n* и поглощения *k*) тонких пленок по кривой пропускания. Выполнено сравнение результатов компьютерного моделирования спектров пропускания, отражения и поглощения с учетом полученных значений коэффициентов *n* и *k* с данными натурного эксперимента.

Ключевые слова: неохлаждаемый тепловой детектор болометрического типа, микроболометр, инфракрасный детектор, оптические параметры, оксид ванадия, моделирование.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Благодарность. Исследования выполнены в рамках решения задач задания 3.3 Государственной программы научных исследований «Фотоника и электроника для инноваций».

Для цитирования. Расчет оптических параметров тонких пленок конструкционных материалов теплового неохлаждаемого детектора болометрического типа / Чан Ван Чиеу [и др.] // Доклады БГУИР. 2023. Т. 21, № 5. С. 73–80. http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-5-73-80.

CALCULATION OF OPTICAL PARAMETERS OF THIN FILMS OF STRUCTURAL MATERIALS OF THERMAL UNCOOLED BOLOMETRIC TYPE DETECTOR

TRAN VAN TRIEU¹, KIRYL V. KORSAK¹, PAVEL E. NOVIKOV¹, IVAN YU. LOVSHENKO¹, SERGEY M. ZAVADSKI¹, DZMITRY A. GOLOSOV¹, ANDREY A. STEPANOV¹, ALIAKSANDR A. HUBAREVICH¹, VLADIMIR V. KOLOS², YAROSLAV A. SOLOVJOV², DZMITRY S. LIAUCHUK², VIKTOR R. STEMPITSKY¹

¹Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus) ²JSC "INTEGRAL" – "INTEGRAL" Holding Managing Company (Minsk, Republic of Belarus)

Submitted 15.06.2023

Abstract. The increased interest in utilizing uncooled thermal bolometer-type detectors (microbolometers) within the infrared or terahertz detection field is justified by their operational and technological characteristics, in particular: relatively low manufacturing cost, high detection efficiency, compatibility with silicon CMOS technology, and operation at room temperature. The performance of such detectors depends on optimizing critical parameters, which are dictated by both the geometrical design and the electrical, optical, and thermal properties of the materials used. The determination of optical parameters stands as a decisive factor in the design of microbolometer structures. This article delves into the examination of optical parameters of thin films of structural materials of microbolometer based on thermosensitive vanadium oxide film manufactured at JSC "INTEGRAL". The investigation showcases the results of determining optical constants (refractive indexes *n* and absorption coefficients *k*) of thin films from the transmission curve by applying the reflection-transmission method. Furthermore, a comparison is carried out between the results of computer modeling of the transmission, reflection and absorption spectra – taking into account the obtained values of the coefficients *n* and *k* – and the empirical data from the in-situ experiment.

Keywords: uncooled thermal bolometric detector, microbolometer, infrared detector, optical parameters, vanadium oxide, modeling.

Conflict of interests. The authors declare no conflict of interests.

Gratitude. The research was carried out within the framework of solving the tasks of task 3.3 of the State Research Program "Photonics and Electronics for Innovations".

For citation. Tran Van Trieu, Korsak K. V., Novikov P. E., Lovshenko I. Yu., Zavadski S. M., Golosov D. A., Stepanov A. A., Hubarevich A. A., Kolos V. V., Solovjov Ya. A., Liauchuk D. S., Stempitsky V. R. (2023) Calculation of Optical Parameters of Thin Films of Structural Materials of Thermal Uncooled Bolometric Type Detector. *Doklady BGUIR*. 21 (5), 73–80. http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-5-73-80 (in Russian).

Введение

Сферы применения тепловых детекторов постоянно расширяются, например в таких областях, как системы безопасности и наблюдения, пожаротушение, биомедицина. Наиболее перспективное направление развития устройств данного типа – создание эффективных конструкций неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа (микроболометров). Работа микроболометра основана на изменении электрического сопротивления термочувствительного материала (терморезистора) за счет поглощения падающего инфракрасного излучения. Материал термочувствительного слоя микроболометра должен обладать высоким значением температурного коэффициента электрического сопротивления (ТКС) и малыми значениями удельного сопротивления, теплопроводности и шумов. Также важной является возможность использования данного материала в стандартных технологических процессах изготовления полупроводниковых интегральных микросхем, что позволяет формировать микроболометрическую матрицу и считывающую электронику на едином кристалле. Один из материалов, соответствующих описанным требованиям, – это оксид ванадия VO,, пленки которого обладают наилучшим сочетанием показателей: сравнительно высоким ТКС, низким удельным сопротивлением и низкой способностью к созданию помех [1]. Структура микроболометра в виде резонатора Фабри-Перо [2], а также материалы, используемые в структуре (тонкие пленки нихрома, нитрида кремния и оксида ванадия), обеспечивают равномерность поглощения излучения в широком диапазоне частот.

При промышленном производстве тонких пленок наблюдается общая тенденция низкой воспроизводимости критических параметров. То есть использование базовых моделей и приближений для предсказания и описания характеристик изделий приведет к большому расхождению между результатами моделирования и натурных экспериментов. Следовательно, рациональным подходом к решению данных задач является сквозное проектирование [3], что позволит сократить расходы при натурных экспериментах. В процессе исследований авторами разработан и верифицирован метод расчета оптических параметров тонких пленок конструкционных материалов микроболометра с использованием САПР.

Методика определения оптических коэффициентов преломления и поглощения

При проектировании посредством компьютерного моделирования устройств, у которых важны их оптические параметры, такие как отражение (R), пропускание (T) и поглощение (A), исследуются материалы, из которых они состоят. Каждый из оптических параметров состоит из различных компонентов, важнейшими из которых являются коэффициенты преломления (n) и поглощения (k). Несмотря на то, что выразить R и T через n и k (и наоборот) несложно посредством решения нелинейных уравнений численными методами, аналитическое решение этих выражений затруднительно из-за высокой степени нелинейности [4]. Существует несколько численных подходов для решения данной задачи [5]. Наибольший интерес представляет подход, основанный на итерационном методе Ньютона-Рафсона [6], поскольку поиск решения осуществляется путем построения последовательных приближений и основан на принципах простой итерации. В [7] приведено несколько решений на каждой длине волны, включая физически релевантное решение. Приведем уравнения, с помощью которых можно выразить R и T через n и k:

$$T_{total} = \frac{n_3}{n_0} \cdot \frac{\left| t_{23} \right|^2 \left| t_{02} e^{-i\delta_2} \right|^2}{1 - \left| r_{20} e^{-i\delta_2} \right|^2 \left| r_{23} e^{-i\delta_2} \right|^2};$$
(1)

$$R_{total} = |r_{02}|^{2} + \frac{|t_{20}|^{2} |t_{02}e^{-i\delta_{2}}|^{2} |r_{23}e^{-i\delta_{2}}|^{2}}{1 - |r_{20}e^{-i\delta_{2}}|^{2} |r_{23}e^{-i\delta_{2}}|^{2}};$$
(2)

$$r_{ij} = \frac{n_i - n_j}{n_i + n_j} = g_{ij} + ih_{ij};$$
(3)

$$t_{ij} = \frac{2n_i}{n_i + n_j} = 1 + g_{ij} + ih_{ij};$$
(4)

$$nj = nj - ikj,\tag{5}$$

где g_{ij} , h_{ij} – действительная и мнимая компоненты соответственно.

Фазовый угол $\delta_2 = (2\pi / \lambda_0) n_s d_s$, обусловленный подложкой, вычисляется по комплексному индексу подложки n_s и ее толщине d_s . Вне зависимости от того, что используется метод комплексных квадратов, вклад от δ_2 может отличаться от 1, если $k_s > 0$. Уравнения (1), (2) записаны в терминах комплексных эффективных коэффициентов Френеля t_{ij} и r_{ij} . Следует отметить, что когда *i* и *j* – «соседние», как в r_{23} и t_{23} , коэффициенты Френеля [8] задаются формулами (3), (4). Приведенные аналитические уравнения используются для выражения оптических констант. В случае неизвестной пленки (на известной подложке) формулы (1), (2) инвертируются, т.е. решаем (n_1, k_1) в терминах измеренных интенсивностей $R_m(=R_{total})$ и $T_m(=T_{total})$, используя вариант численного метода Ньютона-Рафсона. С помощью метода Ньютона-Рафсона для получения *n* и *k* необходимо найти нули двух функций: $F(n, k) = R_{paccчитанное}(n, k, d) - R_{измеренное} = 0$ и $G(n, k) = T_{paccчитанное}(n, k, d) - T_{измеренное} = 0$. Таким образом, из данных выражений методом оптимизации возможно получить *n* и *k*.

Результаты натурного эксперимента

Для определения оптических коэффициентов преломления и поглощения конструкционных материалов микроболометра получены спектры пропускания, поглощения и отражения на тестовых образцах, изготовленных в ОАО «ИНТЕГРАЛ». Тестовые образцы представляли собой тонкие пленки конструкционных материалов микроболометров, нанесенные на кремниевую подложку КБД-12 толщиной 320 мкм: № 1 – кристаллический кремний слаболегированный толщиной 320 мкм; № 2 и № 3 – пленка нихрома NiCr толщиной 10 и 50 нм соответственно; № 4 – плен-

ка Si₃N₄ толщиной 100 нм, сформированная при температуре 250 °C; № 5 – пленка Si₃N₄ толщиной 100 нм, сформированная при 300 °C; № 6 – пленка оксида ванадия VO_x толщиной 100 нм. Спектры пропускания, поглощения и отражения получены на ИК-Фурье спектрометре Bruker VERTEX 70. Результат измерения представлен на рис. 1.



Fig. 1. Reflection and transmission spectra of samples

На каждом спектре в диапазоне длины волны 9 мкм существует провал, который обусловлен влиянием окружающей среды, происходит падение величин пропускания и отражения образца, и при этом наблюдается рост поглощения излучения воздухом [9]. Поскольку все образцы в своем составе имеют кремниевую подложку, она оказывает влияние на спектры отражения и пропускания образцов в зависимости от материала и его толщины. Так, для пленок нитрида кремния (образцы № 4, 5) влияние подложки в большей степени проявляется для спектра пропускания, а для пленок нихрома (образцы № 2, 3), наоборот, влияние ярко выражено для спектра отражения.

Определение оптических коэффициентов *n* и *k*

На языке программирования Python реализован алгоритм определения параметров *n* и *k* посредством метода Ньютона-Рафсона. Подключались библиотеки math для использования встроенных математических функций и openpyxl [10] – для возможности работы с Excel-файлами, записи и чтения с них. На рис. 2 представлены результаты расчетов зависимости *n* и *k* от длины волны падающего излучения.

Поскольку зависимости n и k имеют большое количество точек, а также некоторые флуктуации, было принято решение провести сглаживание полученных данных методом скользящего среднего с окном усреднения 50 нм. Зависимости n и k от длины волны, полученные с помощью расчета, качественно совпадают с зависимостями, представленными в открытых источниках¹.

¹ Database of Optical Constants. Available: https://refractiveindex.info/?shelf=main&book=Si&page=Aspnes (Accessed 22 September 2023).



Рис. 2. Зависимости n и k от длины волны падающего излучения **Fig. 2.** Dependences of n and k on the wavelength of the incident radiation

Результаты моделирования

С использованием рассчитанных параметров n и k и метода конечных разностей во временной области (FDTD) проведено моделирование спектров поглощения, пропускания и отражения структур, соответствующих образцам № 1–6. 2D-модель была выбрана из-за симметрии вдоль осей X и Y. Падающий свет с длиной волны от 8 до 12 мкм распространялся вдоль оси Z (рис. 3). Периодические граничные условия и идеально согласованные слои применялись перпендикулярно и параллельно оси Z соответственно. Размер моделируемой сетки был установлен от 1 нм для слоя NiCr до 50 нм для воздуха.



Рис. 3. FDTD-модель образцов Fig. 3. FDTD sample model

На рис. 4 представлено сравнение результатов моделирования и натурного эксперимента, где сплошными линиями обозначены модели спектров, а кружками – спектры, полученные при проведении натурного эксперимента.



Рис. 4. Сравнение результатов спектров, полученных с помощью натурного эксперимента и моделирования Fig. 4. Comparison of spectra results obtained by in-situ experiment and modeling

Наибольшая максимальная ошибка наблюдается при моделировании спектра пропускания для образцов № 3 и 4 и составляет 7,53 % (в диапазоне λ от 8 до 9 мкм) и 7,87 % (λ = 11–12 мкм) соответственно, а средняя ошибка – не более 5,86 % для образца № 3 и 4,88 % для № 4. При этом средняя ошибка спектров отражения для данных образцов не превышает 0,79 %. Наименьшая ошибка при моделировании спектров пропускания и отражения получена для образцов № 1, 2: средняя ошибка не превышает 0,26 % (максимальная – 0,65 %) и 0,41 % (0,81 %) соответственно. Для остальных образцов величина средней ошибки лежит в диапазоне 0,60–2,22 %. Таким образом, рассчитанные оптические коэффициенты конструкционных материалов могут быть использованы для дальнейшего исследования оптических характеристик микроболометров посредством компьютерного моделирования.

Заключение

Представлена методика определения и калибровки посредством применения реализованного на языке программирования Python метода Ньютона-Рафсона коэффициентов *n* и *k*, применяемых при компьютерном моделировании оптических характеристик конструкционных материалов теплового неохлаждаемого детектора болометрического типа. При сравнении результатов моделирования и натурного эксперимента для структур, содержащих тонкие пленки конструкционных материалов, нанесенных на кремниевую подложку, установлено, что средняя ошибка составляет не более 5,86 % для спектра пропускания и 2,23 % для спектра отражения. Наименьшая ошибка при моделировании спектров пропускания и отражения получена для кристаллического кремния (средняя ошибка не превышала 0,26 %) и пленки нихрома NiCr толщиной 10 нм (0,41 %).

Список литературы / References

- 1. Rogalski A. (2009) Infrared Detectors for the Future. Acta Physica Polonica A. 116 (3), 389-406.
- Smith P. W., Turner E. H. (1977) A Bistable Fabry-Perot Resonator. *Applied Physics Letters*. 30 (6), 280–281. Doi: 10.1063/1.89367.
- 3. Petrov Yu. V. (ed.) (2015) Computer-Aided Design Systems for Electronic Devices and Systems (E-CAD/EDA Systems). Saint Petersburg, Baltic State Technical University Publ. 64.
- 4. Tsu David V. (1999) Obtaining Optical Constants of Thin Ge_xSb_yTe_z Films from Measurements of Reflection and Transmission. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films.* 17 (4).
- 5. Atkinson K. E. (1978) An Introduction to Numerical Analysis. Canada, John Wiley & Sons Publ. 88-95.
- 6. Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P. (1992) *Numerical Recipes in Fortran, 2nd ed.* New York, Cambridge University Press. 372.
- 7. Nagendra C., Thutupalli G. (1981) Optical Constants of Absorbing Films. Vacuum. 31 (3), 141-145.
- 8. Skaar J. (2006) Fresnel Equations and the Refractive Index of Active Media. Physical Review E. 73 (2).
- 9. Langford A. A., Fleet M. L., Mahan A. H. (1989) Correction for Multiple Reflections in Infrared Spectra of Amorphous Silicon. *Solar Cells*. 27 (1–4), 373–383.
- 10. Hunt J. (2019) Working with Excel Files. In: Advanced Guide to Python 3 Programming. Undergraduate Topics in Computer Science. Springer, Cham.

Вклад авторов

Чан Ван Чиеу выполнил анализ оптических параметров образцов, разработал приложение для расчета параметров *n* и *k*.

Корсак К. В. и Новиков П. Э. провели натурный эксперимент, выполнили анализ оптических параметров образцов, разработали приложение для расчета параметров *n* и *k*, участвовали в подготовке рукописи статьи.

Ловшенко И. Ю. выполнил интерпретацию результатов моделирования, подготовил рукопись статьи.

Завадский С. М. и Голосов Д. А. провели натурный эксперимент, выполнили анализ оптических параметров.

Степанов А. А. и Губаревич А. А. выполнили моделирование оптических параметров, участвовали в подготовке рукописи статьи.

Колос В. В. осуществил постановку задачи для проведения исследования, получил экспериментальные результаты.

Соловьев Я. А. осуществил постановку задачи для проведения исследования.

Левчук Д. С. подготовил образцы для натурного эксперимента, выполнил анализ оптических параметров.

Стемпицкий В. Р. осуществил постановку задач для проведения исследования, участвовал в подготовке рукописи статьи.

Author's contribution

Tran Van Trieu analyzed the optical parameters of the samples, developed an application for the calculation of n and k parameters.

Korsak K. V. and Novikov P. E. conducted field experiment, analyzed optical parameters of samples, developed an application for calculation of n and k parameters, participated in the preparation of the manuscript of the article.

Lovshenko I. Yu. interpreted the modeling results and prepared the manuscript.

Zavadski S. M. and Golosov D. A. carried out the full-scale experiment, analyzed optical parameters.

Stepanov A. A. and Hubarevich A. A. performed modeling of optical parameters, participated in preparation of the manuscript.

Kolos V. V. carried out the problem statement for the research, obtained experimental results. Solovjov Ya. A. carried out the problem statement for the research.

Liauchuk D. S. prepared samples for the full-scale experiment, analyzed optical parameters.

Stempitsky V. R. carried out the formulation of tasks for the study, participated in the preparation of the manuscript of the article.

Сведения об авторах

Чан Ван Чиеу, аспирант кафедры микро- и наноэлектроники Белорусскогогосударственного университета информатики и радиоэлектроники (БГУИР)

Корсак К. В., магистрант кафедры микро- и наноэлектроники БГУИР

Новиков П. Э., магистрант кафедры микро- и наноэлектроники БГУИР

Ловшенко И. Ю., заведующий научно-исследовательской лабораторией «Компьютерное проектирование микро- и наноэлектронных систем» (НИЛ 4.4) НИЧ БГУИР

Завадский С. М., к. т. н., доцент, доцент кафедры электронной техники и технологии, начальник центра «Электронных технологий и технической диагностики технологических сред и твердотельных структур» (Центр 9.1) НИЧ БГУИР

Голосов Д. А., к. т. н., доцент, доцент кафедры электронной техники и технологии, в. н. с. Центра 9.1 НИЧ БГУИР

Степанов А. А., к. т. н., доцент, доцент кафедры микро- и наноэлектроники, с. н. с. лаборатории «Устройства обработки и отображения информации» (НИЛ 4.7) НИЧ БГУИР

Губаревич А. А., н. с. лаборатории НИЛ 4.7 НИЧ БГУИР

Колос В. В., к. ф.-м. н., заместитель заведующего отраслевой лабораторией новых технологий и материалов ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»

Соловьев Я. А., к. т. н., доцент, заведующий отраслевой лабораторией новых технологий и материалов ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»

Левчук Д. С., инж. отраслевой лаборатории новых технологий и материалов ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»

Стемпицкий В. Р., к. т. н., доцент, проректор по научной работе, научный руководитель НИЛ 4.4 НИЧ БГУИР

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь, г. Минск, ул. П. Бровки, б Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники Тел.: +375 17 293-88-90 E-mail: lovshenko@bsuir.by Ловшенко Иван Юрьевич

Information about the authors

Tran Van Trieu, Postgraduate at Micro- and Nanoelectronics Department of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (BSUIR)

Korsak K. V., Master's Student at Micro- and Nanoelectronics Department of the BSUIR

Novikov P. E., Master's Student at Micro- and Nanoelectronics Department of the BSUIR

Lovshenko I. Yu., Head of the Research Laboratory "CAD in Micro- and Nanoelectronics" (Research Lab. 4.4) of R&D Department of the BSUIR

Zavadski S. M., Cand. of Sci., Associate Professor, Associate Professor at the Department of Electronic Engineering and Technology, Head of "Electronic Technologies and Technical Diagnostics of Technological Media and Solid-State Structures" (Center 9.1) of R&D Department of the BSUIR

Golosov D. A., Cand. of Sci., Associate Professor, Associate Professor at the Department of Electronic Engineering and Technology, Leading Researcher at the Center 9.1 of R&D Department of the BSUIR

Stepanov A. A., Cand. of Sci., Associate Professor, Associate Professor at Micro- and Nanoelectronics Department, Senior Researcher at the Research Laboratory "Information Processing and Display Devices" (Research Lab. 4.7) of R&D Department of the BSUIR

Hubarevich A. A., Senior Researcher at the Research Lab. 4.7 of R&D Department of the BSUIR

Kolos V. V., Cand. of Sci., Deputy Head of the Industry Laboratory of New Technologies and Materials of JSC "INTEGRAL" – "INTEGRAL" Holding Managing Company

Solovjov Ya. A., Cand of Sci., Associate Professor, Head of the Industry Laboratory of New Technologies and Materials of JSC "INTEGRAL" – "INTEGRAL" Holding Managing Company

Liauchuk D. S., Engineer of the Industry Laboratory of New Technologies and Materials of JSC "INTEG-RAL" – "INTEGRAL" Holding Managing Company

Stempitsky V. R., Cand of Sci., Associate Professor, Vice-Rector for Academic Affairs, Adviser of the Research Lab. 4.4 of the BSUIR

Address for correspondence

220013, Republic of Belarus, Minsk, P. Brovki St., 6 Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics Tel.: +375 17 293-88-90 E-mail: lovshenko@bsuir.by Lovshenko Ivan Yur'evich