

На правах рукописи



Максимова Ольга Александровна

**ОПТИЧЕСКИЕ И МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
МАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУР ПО ДАННЫМ
IN SITU СПЕКТРАЛЬНОЙ МАГНИТООПТИЧЕСКОЙ
ЭЛЛИПСОМЕТРИИ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2020

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН) – обособленном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук»

Научный руководитель: **Овчинников Сергей Геннадиевич**, д. ф.-м. н., профессор, руководитель научного направления «Магнетизм» Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук»

Официальные оппоненты: **Успенская Людмила Сергеевна**, в.н.с., д. ф.-м. н., Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики твердого тела Российской академии наук», г. Черноголовка Московской обл., Россия

Швец Василий Александрович, в.н.с., д. ф.-м. н., Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск, Россия

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ), г. Москва, Россия

Защита состоится

«27» ноября 2020 г. в 10.30 на заседании диссертационного совета Д 003.075.01 в ИФ СО РАН по адресу: 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50, строение 38.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН по адресу 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50, строение 38.

Автореферат разослан « _____ » _____ 2020г.

Учёный секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор



Втюрин Александр Николаевич

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

Синтез новых наноструктур с чередованием магнитных и немагнитных слоев чрезвычайно актуален в связи с бурным развитием нового направления электроники – спинтроники. Это обуславливает актуальность разработки высокоточных и удобных в использовании методов контроля свойств получаемых структур. Неразрушающие *in situ* (т.е. проводимые в камере роста) методы анализа позволяют улучшить воспроизводимость результатов, уменьшить характерные размеры синтезируемых ферромагнитных структур за счет исключения влияния атмосферных газов на пленку. В связи с этим актуально развитие быстродействующих магнитооптических методов анализа ферромагнитных структур в прикладных и исследовательских целях, в том числе, развитие нового метода магнитооптической эллипсометрии (далее по тексту – магнитоэллипсометрии), основанного на измерении магнитооптического экваториального эффекта Керра с помощью спектральной эллипсометрии *in situ* [1, 2].

Магнитоэллипсометрия позволяет получать информацию о тензоре диэлектрической проницаемости и величине магнитного кругового дихроизма [2], а также о связи электронной структуры с магнитными свойствами исследуемого материала. В лаборатории физики магнитных явлений ИФ СО РАН в последние годы совместно с Институтом физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН разработан и создан сверхвысоковакуумный комплекс для получения и *in situ* исследования наноструктур методом спектральной магнитооптической эллипсометрии [1], который позволяет проводить напыление магнитных слоев в присутствии внешнего постоянного магнитного поля и измерение эллипсометрических параметров и их изменений в магнитном поле. Необходимость получения информации о компонентах тензора диэлектрической проницаемости и их зависимости от магнитного поля послужила стимулом к появлению настоящей диссертации.

Целью диссертационной работы является развитие методов анализа данных спектральной магнитооптической эллипсометрии и их применение для экспериментального *in situ* исследования магнитных наноструктур.

Для достижения указанной цели были поставлены следующие задачи:

1. Выполнить анализ моделей различных магнитных наноструктур, включая модели однородной полубесконечной среды, тонкой ферромагнитной пленки на полубесконечной немагнитной подложке и многослойной структуры с ферромагнитным и немагнитными слоями, на предмет установления математической связи измеряемых магнитоэллипсометрических параметров и коэффициентов отражения, несущих информацию о физических свойствах образца.

2. Разработать и реализовать алгоритмы расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости с использованием моделей ферромагнитных наноструктур по данным магнитоэллипсометрических измерений в виде программного кода в среде MATLAB; провести апробацию алгоритмов расчета комплексного магнитооптического параметра в рамках различных моделей для образцов большой толщины, для которых заведомо очевидно, что все модели должны приводить к одинаковому результату.

3. Провести экспериментальные исследования *in situ* эллипсометрических и магнитоэллипсометрических спектров для образцов Fe/SiO₂/Si с разной толщиной слоя ферромагнетика.

4. Провести анализ экспериментальных эллипсометрических и магнитоэллипсометрических данных и выбрать наилучшие модели для образцов Fe/SiO₂/Si разной толщины слоя ферромагнетика.

5. Сопоставить результаты спектральных измерений комплексных диагональных и недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости магнитного слоя для образцов Fe/SiO₂/Si с разной толщиной слоя ферромагнетика с литературными данными и данными расчета тензора диэлектрической проницаемости Fe в рамках теории функционала плотности.

Научная новизна

В работе впервые проведен комплекс теоретических и экспериментальных магнитоэллипсометрических спектральных исследований магнитных наноструктур Fe/SiO₂/Si с разной толщиной слоя Fe на подложке SiO₂/Si. Рассмотрен ряд моделей отражающих систем, учитывающих структуру, толщину, оптические и магнитные свойства слоев, для каждой из них получены соотношения, связывающие наблюдаемые эллипсометрические и магнитоэллипсометрические углы с компонентами тензора диэлектрической проницаемости магнитного слоя. Разработаны и реализованы алгоритмы расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости с использованием моделей ферромагнитных наноструктур по данным магнитоэллипсометрических измерений в виде программного кода в среде MATLAB. Предложенный метод позволяет определять параметры всех диагональных и недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости и толщин слоев для наноструктур с немагнитными и одним магнитным слоями.

Успешно проведена апробация алгоритмов расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости на образце Fe/SiO₂/Si с толстым слоем Fe (160,5 нм). Экспериментально исследованы образцы Fe/SiO₂/Si с толщиной слоя Fe 77,0 нм, 33,5 нм и 11,5 нм в диапазоне 1,38-3,45 эВ. Выбрана наилучшая модель для анализа экспериментальных данных для каждого образца. Полученные спектральные зависимости компонент тензора диэлектрической проницаемости сравниваются с рассчитанными для железа в рамках теории функционала плотности и с литературными данными других авторов.

Практическая значимость работы

Показана новая возможность применения *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии для проведения фундаментальных исследований магнитооптических свойств, анализа всех компонент тензора диэлектрической проницаемости ферромагнетиков. Полученные данные можно будет использовать в дальнейшем для контроля процессов формирования структур «ферромагнетик/полупроводник».

Ключевыми преимуществами являются достаточность, надежность, простота, а также возможность использования разработанных моделей для анализа, как *ex situ*, так и *in situ* измерений, что сокращает время и повышает эффективность анализа экспериментальных данных.

Разработанные модели можно применить как для исследовательских целей, так и в прикладных задачах по контролю качества продукции микроэлектронной промышленности, где используются многослойные эпитаксиальные и поликристаллические ферромагнитные структуры, например, в производстве энергонезависимой магнитной памяти для ЭВМ, высокочувствительных датчиков магнитного поля на эффекте гигантского магнетосопротивления или высококачественных СВЧ-фильтров с высокой добротностью и узкой полосой пропускания.

Основные положения, выносимые на защиту

1 Для расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости ферромагнитных наноструктур по данным магнитоэллипсометрических измерений предложен новый алгоритм, разработанный с использованием различных моделей изотропных ферромагнитных отражающих слоистых систем.

2 Различие спектральных зависимостей всех компонент тензора диэлектрической проницаемости для слоев разной толщины и для объемного железа связано с глубиной проникновения света и подтверждено методом *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии.

3 Для структур Fe/SiO₂/p-Si с толщиной слоя Fe, сопоставимой с глубиной проникновения света (11,5 и 33,5 нм), вклады интерфейсов на границах раздела магнитный/немагнитный слой различаются для диагональных и недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости, определенных методом *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии.

Апробация результатов работы

Основные результаты работы были представлены и обсуждались на следующих международных и российских конференциях:

Восемнадцатая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых «ВНКСФ-18, Красноярск» (Красноярск, Россия, 2012); Всероссийская молодежная научная школа «Актуальные проблемы физики» в рамках фестиваля науки (Ростов-на-Дону, Россия, 2012); 2-я Всероссийская научная конференция «Методы исследования состава и структуры функциональных материалов» МИССФМ-2013 (Новосибирск, Россия, 2013), The 6th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry (ICSE VI in Kyoto) (Kyoto, Japan, 2013); 3-rd international conference Nanomaterials: Application & Properties-2013 – NAP-2013 (Crimea, Ukraine, 2013); Moscow International Symposium on Magnetism – MISM (Moscow, Russia, 2014, 2017); Third Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Vladivostok, Russia, 2015); 24th and 26th Int. Symp. “Nanostructures: Physics and Technology” (Saint Petersburg, Russia, 2016, 2018); Euro-Asian Symposium “Trends in Magnetism” - EASTMAG (Красноярск, Россия, 2016; Екатеринбург, Россия, 2019); 8th Joint European Magnetic Symposia – JEMS-2016 (Glasgow, UK, 2016); Fourth Asian school-conference on physics and technology of nanostructured materials (Vladivostok, Russia, 2018).

Работа в целом докладывалась на научных семинарах лабораторий физики магнитных явлений и фотоники молекулярных систем, отдела физики магнитных явлений Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН (Красноярск, 2020 г.).

Публикации

Основные результаты по теме диссертации опубликованы в 6 статьях, все в журналах, индексируемых базами Web of Science и Scopus, и входящих в перечень ВАК РФ. Кроме этого, опубликовано 20 тезисов в сборниках трудов

всероссийских и международных конференций и симпозиумов. Список основных работ приводится в конце автореферата.

Личный вклад автора состоит в выполнении анализа моделей различных магнитных наноструктур на предмет установления математической связи измеряемых магнитоэллипсометрических параметров и коэффициентов отражения, а также в реализации в виде программного кода в среде MATLAB алгоритмов расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости с использованием моделей ферромагнитных наноструктур по данным магнитоэллипсометрических измерений. Автором диссертации проведена апробация алгоритмов расчета комплексного магнитооптического параметра в рамках различных моделей для образца большой толщины ферромагнитного слоя, проведен анализ и обобщение полного набора экспериментальных данных, а также интерпретация полученных результатов. При участии автора проведены экспериментальные измерения магнитоэллипсометрических спектров. Автором выполнены все этапы обработки эллипсометрических и магнитоэллипсометрических экспериментальных данных с использованием разработанных моделей. Автором проведено сравнение результатов первопринципных расчетов тензора диэлектрической проницаемости железа с экспериментальными данными. Автору принадлежит ведущая роль в написании статей по теме диссертации.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений и списка литературы. Диссертация изложена на 130 страницах машинописного текста, включая 30 рисунков, 5 таблиц, 222 формулы. Библиографический список содержит 97 наименований.

Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России на 2007-2013 годы», государственный контракт № 14.513.11.0016 от 11 марта 2013 г., и в рамках проекта РФФИ №16-42-243058

р_мол_а «Температурные зависимости оптических, магнитооптических, магнитных и структурных свойств силицидов железа», 2017-2018г.

Основное содержание работы

Во введении рассмотрено научное значение и новизна исследований по теме диссертационной работы. Обоснована актуальность, сформулированы цели и задачи диссертации, а также приведены основные положения, выносимые на защиту, и описана структура диссертации.

Первая глава посвящена методу традиционной эллипсометрии, измерению поверхностного магнитооптического эффекта Керра и объединяющей их методики магнитоэллипсометрии. Рассмотрены классические модели отражающих структур с целью упорядочения имеющихся в литературе формул для расчета коэффициентов отражения от магнитных наноструктур. Проведен обзор литературы с целью выявления подходящих вариантов анализа данных от магнитоэллипсометрического сверхвысоковакуумного комплекса [1], однако остановиться на одном из существующих вариантов не удалось. В связи с этим настоящая работа направлена на внедрение и апробацию варианта анализа магнитоэллипсометрических (МЭ) данных, основанного на применении эллипсометрических соотношений, в которых магнитооптический вклад учитывается как возмущение, и анализ *in situ* экспериментов по исследованию магнитных наноструктур с помощью экваториального магнитооптического эффекта Керра.

Во второй главе представлены полученные автором точные математические выражения для анализа МЭ данных с помощью различных моделей ферромагнитных (ФМ) наноструктур, связывающие измеряемые эллипсометрические углы и коэффициенты отражения [A1-A5].

Представлен следующий алгоритм анализа экспериментальных данных:

- 1 Проведение спектральных эллипсометрических измерений без приложения внешнего магнитного поля (получение параметров ψ_0 , Δ_0) и

измерений в конфигурации экваториального магнитооптического эффекта Керра с приложением внешнего магнитного поля ($\psi_0 + \delta\psi$, $\Delta_0 + \delta\Delta$).

2. Выбор модели для описания исследуемого образца и расчет спектральных зависимостей коэффициентов преломления n и поглощения k , определяющих диагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости.

3. Расчет эллипсометрических параметров посредством расчета значений коэффициентов отражения при приложении внешнего магнитного поля и без него в рамках соответствующей модели:

$$R'_p = R'_{p0} + R'_{p1}, \quad (1)$$

$$R''_p = R''_{p0} + R''_{p1}, \quad (2)$$

$$R'_s = R'_{s0} + R'_{s1} = R'_{s0}, \quad (3)$$

$$R''_s = R''_{s0} + R''_{s1} = R''_{s0}, \quad (4)$$

где расписаны в явном виде действительные (обозначены ') и мнимые части (обозначены '') комплексных коэффициентов отражения. Вклад, вносимый внешним магнитным полем в коэффициенты отражения, выделен отдельно и обозначен нижним индексом 1, немагнитные слагаемые обозначены нижним индексом 0.

Получены формулы для разных моделей отражающих систем, которые используются для связи между R'_{p0} , R''_{p0} , R'_{p1} , R''_{p1} , R'_{s0} и R''_{s0} , и измеряемыми ψ_0 , Δ_0 , $\delta\psi$, $\delta\Delta$. Соответственно, получены необходимые выражения для теоретического расчета эллипсометрических и МЭ углов:

$$\operatorname{tg}\psi_0 = \frac{\sqrt{(R'_{p0}R'_{s0} + R''_{p0}R''_{s0})^2 + (R''_{s0}R'_{p0} - R'_{p0}R''_{s0})^2}}{(R'_{s0})^2 + (R''_{s0})^2}, \quad (5)$$

$$\Delta_0 = \operatorname{arctg} \frac{R''_{s0}R'_{p0} - R'_{s0}R''_{p0}}{R'_{p0}R'_{s0} + R''_{p0}R''_{s0}}, \quad (6)$$

$$\delta\Delta = \operatorname{arctg} \frac{R''_{s0}(R'_{p0} + R'_{p1}) - R'_{s0}(R''_{p0} + R''_{p1})}{R'_{s0}(R'_{p0} + R'_{p1}) + R''_{s0}(R''_{p0} + R''_{p1})} - \operatorname{arctg} \frac{R''_{s0}R'_{p0} - R'_{s0}R''_{p0}}{R'_{p0}R'_{s0} + R''_{p0}R''_{s0}}, \quad (7)$$

$$\delta\psi = \arctg \left(\operatorname{tg}(\psi_0) \sqrt{1 + \frac{\chi}{\gamma}} \right) - \psi_0, \quad (8)$$

$$\frac{\chi}{\gamma} = \frac{((R'_{S0})^2 + (R''_{S0})^2)(R'_{p1}{}^2 + R''_{p1}{}^2 + 2(R'_{p0}R'_{p1} + R''_{p0}R''_{p1}))}{(R'_{p0}R'_{S0} + R''_{p0}R''_{S0})^2 + (R''_{S0}R'_{p0} - R'_{S0}R''_{p0})^2}. \quad (9)$$

4. Нахождение спектральных зависимостей действительной Q_1 и мнимой Q_2 частей магнитооптического (МО) параметра Фогта $Q = Q_1 - i Q_2$ посредством проведения для каждой длины волны минимизации суммы квадратов разностей экспериментальных и рассчитанных МЭ параметров $\{(\delta\psi_{exp} - \delta\psi_{calc})^2 + (\delta\Delta_{exp} - \delta\Delta_{calc})^2\}$ методом Нелдера-Мида [3].

5. Расчет значений компонент тензора диэлектрической проницаемости намагниченного ФМ слоя [4]

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon'_{11} - i\varepsilon''_{11} & -i(\varepsilon'_{11} - i\varepsilon''_{11})(Q_1 - iQ_2) & 0 \\ i(\varepsilon'_{11} - i\varepsilon''_{11})(Q_1 - iQ_2) & \varepsilon'_{11} - i\varepsilon''_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon'_{11} - i\varepsilon''_{11} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где $\varepsilon'_{11} - i\varepsilon''_{11} = (n - ik)^2$.

6. Оценка погрешности величины комплексной диэлектрической проницаемости.

Особое внимание уделено описанию шагов 3 и 4 анализа экспериментальных данных для модели однородной полубесконечной среды для объемного ферромагнитного образца на немагнитной подложке, модели «среда - тонкая ферромагнитная пленка - немагнитная подложка», модели многослойной среды для образца с одним ферромагнитным слоем. Для каждой из перечисленных моделей приведены все математические выражения, позволяющие переходить от экспериментальных эллипсометрических и МЭ параметров к тензору диэлектрической проницаемости ФМ слоя в составе исследуемой наноструктуры.

Для модели однородной полубесконечной ферромагнитной среды представлены алгоритмы, как аналитического, так и численного расчета.

Определено, что аналитически задача решается только в случае малости отношений магнитной к немагнитной части для действительной и мнимой части коэффициентов отражения. В общем случае необходимо использовать численные методы. Все алгоритмы анализа данных реализованы в среде MATLAB.

Третья глава посвящена обсуждению результатов, полученных при экспериментальной апробации методики *in situ* интерпретации эллипсометрических и МЭ данных. Для демонстрации метода был изучен образец в форме поликристаллического слоя железа на поверхности SiO₂/Si(100) [A1-A2]. Толщина слоя SiO₂ составляла по данным эллипсометрии 3,8±0,2 нм, толщина слоя железа – 160,5±0,8 нм. Были проведены *in situ* эллипсометрические и МЭ измерения в отсутствие внешнего магнитного поля в спектральном диапазоне 1,38-5 эВ. При проведении МЭ измерений образец перемагничивался в поле 2 кЭ.

С целью апробации алгоритмов анализа экспериментальных данных, были рассчитаны действительная и мнимая части МО параметра Q для данной пленки железа, с использованием различных моделей отражающих структур (Рисунок 1): 1 – модель однородной полубесконечной среды, 2 – модель «среда - тонкая ферромагнитная пленка - немагнитная подложка», 3 – многослойная (в данном случае, частный случай - двухслойная модель «магнитная пленка - немагнитный буферный слой - полубесконечная немагнитная подложка»). Как видно, результаты совпадают между собой. Это ожидаемо, поскольку пленка имеет толщину 160,5 нм, что существенно превышает глубину проникновения света. В данном случае, если бы результаты для более точных моделей давали отклонение от расчетов по самой простой модели, это бы говорило о неточностях написания алгоритмов.

Проведено сравнение зависимостей действительной и мнимой частей МО параметра Q исследованного образца с литературными данными [5], в которых толщина образца составляла 60 нм. Качественное совпадение кривых по спектру показывает наличие характерных оптических переходов во всех

экспериментальных работах, что подтверждает достоверность методики для анализа спектральных магнитооптических свойств различных ФМ пленок с неизвестными оптическими свойствами. Дополнительно проведено сравнение с литературными данными недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости [6, 7, 8]. Также наблюдается качественное согласие, преимущественно с кривыми в работе [6]. Полученный результат дает право сделать вывод о возможности использования разработанных алгоритмов для пленок различной толщины.

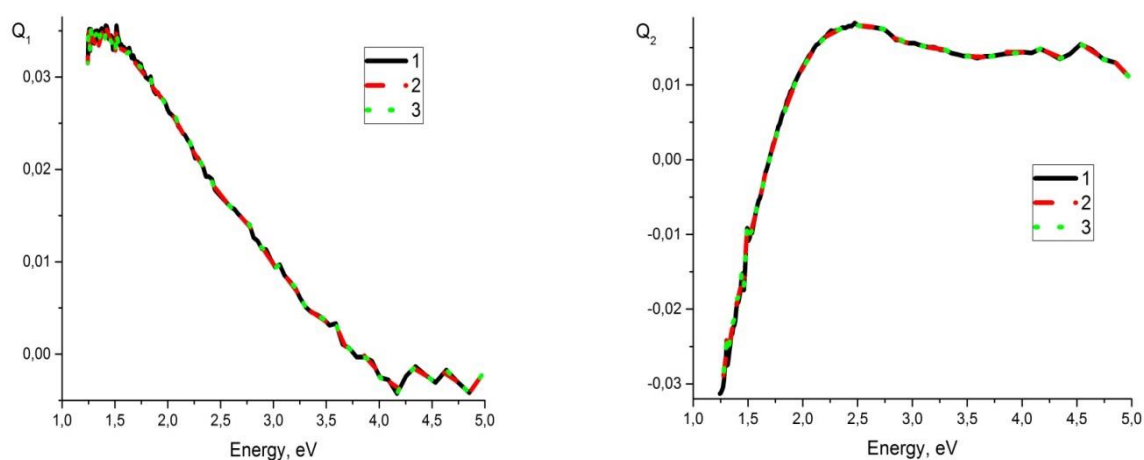


Рисунок 1 – Значения действительной и мнимой частей МО параметра Q , рассчитанные с использованием различных моделей отражающих систем для пленки Fe толщиной 160,5 нм

Четвертая глава посвящена анализу образцов с различной толщиной поликристаллического слоя Fe [А6]. В ней приведены результаты исследования методом магнитоэллипсометрии оптических и магнитооптических свойств ФМ наноструктур системы Fe (ФМ слой) - SiO₂ (изолирующий слой) – Si (подложка) с различной толщиной слоя Fe, для каждого образца выбраны наилучшие модели из предлагаемых к использованию при обработке экспериментальных данных.

Серия из трех образцов была получена методом термического испарения высокочистого железа (99,99+ %) и его осаждения в сверхвысоком вакууме (СВВ) 10^{-7} Па на подложку монокристаллического кремния толщиной 300 мкм

с кристаллографической ориентацией поверхности (100). На поверхности подложки предварительно был химически сформирован слой SiO_2 , толщина которого была не более 2 нм, контролировалась методом спектральной эллипсометрии на воздухе и в дальнейшем использовалась для настройки оптической схемы *in situ* спектральных эллипсометрических измерений. До осаждения железа подложки $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ отжигались в СВВ до 670 К прямым пропусканием тока с целью очистки поверхности от остаточных газов. После отжига *in situ* спектральные эллипсометрические измерения показали уменьшение толщины слоя SiO_2 в среднем на 0,6 нм, что предположительно вызвано близкими дисперсиями оптических постоянных воды и диоксида кремния при субнанометровых толщинах и десорбцией воды с поверхности подложки при отжиге.

Испарение железа в СВВ осуществлялось автотигельным методом с электронно-лучевым нагревом. Технологические условия осаждения Fe и параметры подложек для всех трех образцов были идентичными, с разницей только по времени осаждения Fe. Осаждение Fe и последующие *in situ* измерения проводились с применением специального держателя образца [1] при комнатной температуре. Скорость потока Fe была заранее откалибрована по данным рентгеноспектрального флуоресцентного анализа (РСФА) с использованием анализатора ARL QUANT'X (Thermo Scientific) и составляла около 1,3 нм/мин. Для получения дополнительных данных о толщине и химическом составе пленок Fe все образцы впоследствии исследовались методом РСФА в пересчете плотности железа при нормальных условиях $7,874 \text{ г/см}^3$. Толщина Fe по данным РСФА для образцов 1, 2 и 3 составила $77,0 \pm 0,6$, $33,5 \pm 0,6$ и $11,5 \pm 0,6$ нм, соответственно. Результаты измерений толщины SiO_2 по данным спектральной эллипсометрии для всех трёх образцов равны $0,7 \pm 0,2$, $1,8 \pm 0,2$ и $1,0 \pm 0,2$ нм.

Проведение *in situ* спектральных эллипсометрических и МЭ измерений осуществлялось непосредственно после синтеза структур $\text{Fe}/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ в СВВ технологической камере. Применялся быстродействующий спектральный

эллипсометр Эллипс-1891 с приставкой для задания магнитного поля на образце [9]. Поле ферромагнитного насыщения образца задавалось ± 2 кЭ по результатам предварительных измерений петли перемангничивания.

Для расчета оптических показателей использовались данные по спектральной зависимости ϵ_{11} для SiO_2 из работы [10], Возможность применения данных из [10] показана в работе [11], где по эллипсометрическим измерениям пленок $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ с привлечением объемных данных для ϵ_{11} была получена толщина слоя оксида кремния, совпадающая с прямыми измерениями методом электронной микроскопии. Диэлектрическая проницаемость кремния была получена из эллипсометрических измерений монокристаллической подложки $\text{Si}(100)$ при комнатной температуре с учетом шероховатого оксидного слоя по методике из работы [1] в спектральном диапазоне от 1,38 до 3,45 эВ. Суммарная толщина слоя Fe при проведении расчетов ϵ_{11} соответствовала данным результатов РСФА.

В данной главе проведено сравнение значений МО параметра Q , рассчитанного с использованием моделей, описанных в главе 2: a – модель однородной полубесконечной ферромагнитной среды; b – модель «среда - тонкая ферромагнитная пленка - немагнитная подложка»; c – модель двухслойной среды «ферромагнитный слой - немагнитный слой - немагнитная подложка»; d – модель многослойной среды. Учитывая, что реальные многослойные наноструктуры не обладают математически-гладкими межслоевыми границами, в модели d было проанализировано влияние двух дополнительных перемешанных слоев, одинаковых для всех образцов: 1) на границе Fe/SiO_2 , толщиной 0,12 нм с содержанием железа 50%; 2) на границе $\text{Fe}/\text{вакуум}$, толщиной 0,58 нм с содержанием железа 50%. Толщины перемешанных слоев выбраны в соответствии со среднеквадратической шероховатостью, полученной из атомно-силовой микроскопии и соответствуют данным для аналогичных структур из работы [11]. Объемная доля Fe с постоянной по глубине величиной 50% выбрана для простоты расчета модели перемешанного слоя. Магнитооптический вклад от обоих переходных слоев не

учитывался, так как в дополнительных экспериментах нами было обнаружено, что при усредненных толщинах поликристаллического слоя Fe менее 6 нм на SiO₂ при *in situ* МЭ измерениях магнитооптический вклад становится соизмеримым со среднеквадратической погрешностью эллипсометрических измерений. Для описания пограничных слоев в многослойную модель *d* структуры вводились дополнительные слои, диэлектрическую проницаемость которых описывает модель Бруггемана [12], что позволило учесть шероховатость границ раздела. Все слои и среды в расчетах принимались изотропными с резкими границами разделов. При этом в зависимости от оптической толщины анализируемой ФМ структуры приходилось делать выбор в пользу той или иной магнитооптической модели из-за влияния глубины проникновения света, а также учета погрешности.

По результатам расчетов МО параметра Q из измерений спектральной магнитоэллипсометрии для трех исследуемых образцов показано, что толщина ФМ слоя оказывает значительное влияние на результаты расчета по всем моделям. Показано, что расхождение кривых на различных участках спектра коррелирует с глубиной проникновения света в материале. При уменьшении толщины пленки железа уменьшается и длина волны зондирующего излучения, при которой расхождения зависимостей величин Q_1 и Q_2 между моделями начинают превышать величину экспериментальной погрешности измерений. На основе спектральной зависимости глубины проникновения света в Fe для образца 1 с наибольшей толщиной Fe, рассчитанной по формуле [12]

$$d_p = \lambda / (4\pi k), \quad (11)$$

где λ – длина волны излучения, k – коэффициент поглощения, и спектральных зависимостей величин Q_1 и Q_2 , сделан вывод о применимости модели *a* в спектральном диапазоне более 2 эВ, при этом энергия 2 эВ соответствует глубине проникновения света 18 нм. Таким образом, толщина слоя Fe 77,0 нм кратна ~ 4,3 глубины проникновения для модели *a*, что согласуется с оценками чувствительности метода эллипсометрии в ~ 5 глубин проникновения из

работы [12]. Для образцов 2 и 3 толщина слоя железа сопоставима с глубиной проникновения света, что требует учета отражения от внутренних слоев.

На основе дисперсионных зависимостей компонент МО параметра Q получено, что для образца 1 многослойная модель d является избыточной на всем исследуемом спектральном диапазоне, для образца 2 – в диапазоне 2,2 - 3 эВ многослойная модель d является более предпочтительной, чем модели b и c , а для наиболее тонкого образца 3 наилучшей моделью на всем спектральном диапазоне является многослойная модель d , где слои Fe/SiO₂ разделены перемешанным слоем и учитывается дополнительный немагнитный перемешанный слой на границе Fe/вакуум.

Поскольку модель d наиболее полно описывает реальную структуру всех образцов, далее в работе анализируются компоненты тензора ϵ , рассчитанного с применением именно этой модели. На рисунке 2 представлены диагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости слоя Fe для всех трех образцов по данным эллипсометрических измерений в спектральном диапазоне 1,38-3,45 эВ совместно с результатами теоретического расчета [Аб] и измерений других авторов (Г. С. Кринчик [7] и М. R. Query [13] - объемные образцы, G. Neuber [6] - пленки Fe толщиной 60 нм, Р. В. Johnson [14] – среднее значение для пленок толщиной от 29 до 38 нм). Теоретический расчёт тензора ϵ Fe выполнен для объемной среды без влияния температуры в работе [Аб] на основе теории функционала плотности (DFT), в рамках обобщенного градиентного приближения GGA с использованием обменно-корреляционного потенциала PBE, метода проектирования присоединенных волн и с учетом спин-орбитального взаимодействия.

По данным расчетов ϵ_{11} имеется качественное соответствие с измерениями других авторов. Видно монотонное уменьшение мнимой компоненты ϵ_{11} с ростом энергии излучения. Компоненты ϵ_{11} меняются в зависимости от толщины слоя Fe. Для мнимой части ϵ_{11} с уменьшением толщины слоя происходит изменение формы кривых на всем спектральном диапазоне, причем на всех кривых $Im(\epsilon_{11})$ виден широкий максимум, положение

которого зависит от толщины слоя Fe. Для выяснения причин появления максимума на DFT кривой оптической проводимости был проведен спин-поляризованный расчет плотности электронных состояний для объемных образцов [А6]. Определено, что широкий пик переходов электронов со спином «вниз» в диапазоне 2,5-3,5 эВ происходит из-за межзонных переходов из заполненных в незаполненные состояния.

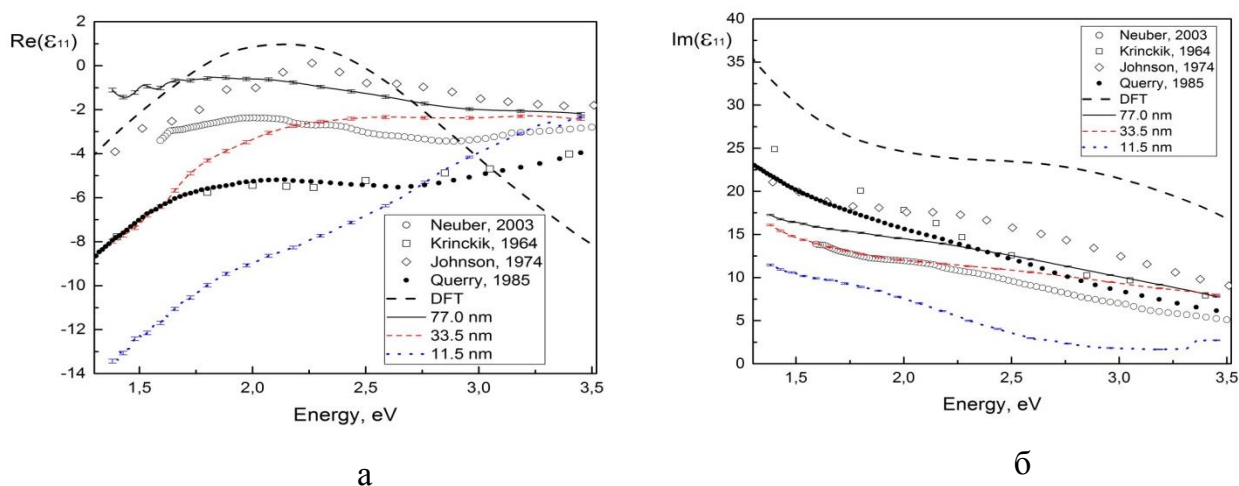


Рисунок 2 – Дисперсии действительной (а) и мнимой (б) компонент ϵ_{11} Fe, рассчитанные из данных *in situ* спектральной эллипсометрии и в рамках DFT [А6] в сравнении с литературными данными [6, 7, 13, 14]

На рисунке 3 показаны дисперсионные зависимости ϵ_{12} , вычисленные для сплошного ФМ слоя Fe всех трех образцов по результатам МЭ измерений, а также результаты DFT расчета [А6] и экспериментальные данные других авторов (Г. С. Кринчик [8] – объемные образцы; G. Neuber [6] – пленки Fe толщиной 60 нм). При сравнении представленных кривых можно отметить качественное согласие $Re(\epsilon_{12})$ из DFT расчета с экспериментом на образцах толщиной 77,0 и 33,5 нм. Характерный наклон кривой для $Im(\epsilon_{12})$ толстого слоя Fe совпадает с литературными данными и DFT расчетом. Наклон наблюдается и в большинстве данных других авторов, использующих толстые непрозрачные поликристаллические пленки железа. В целом прослеживается зависимость амплитуды ϵ_{12} от толщины слоя железа, для более тонких пленок согласие с DFT расчетом не наблюдается. Для экспериментальных результатов настоящей

работы можно отметить изменение наклона кривых $Im(\epsilon_{12})$ и переход в отрицательную область с уменьшением толщины слоя Fe. Спектрограммы ϵ_{12} образца 1 согласуются с данными [6].

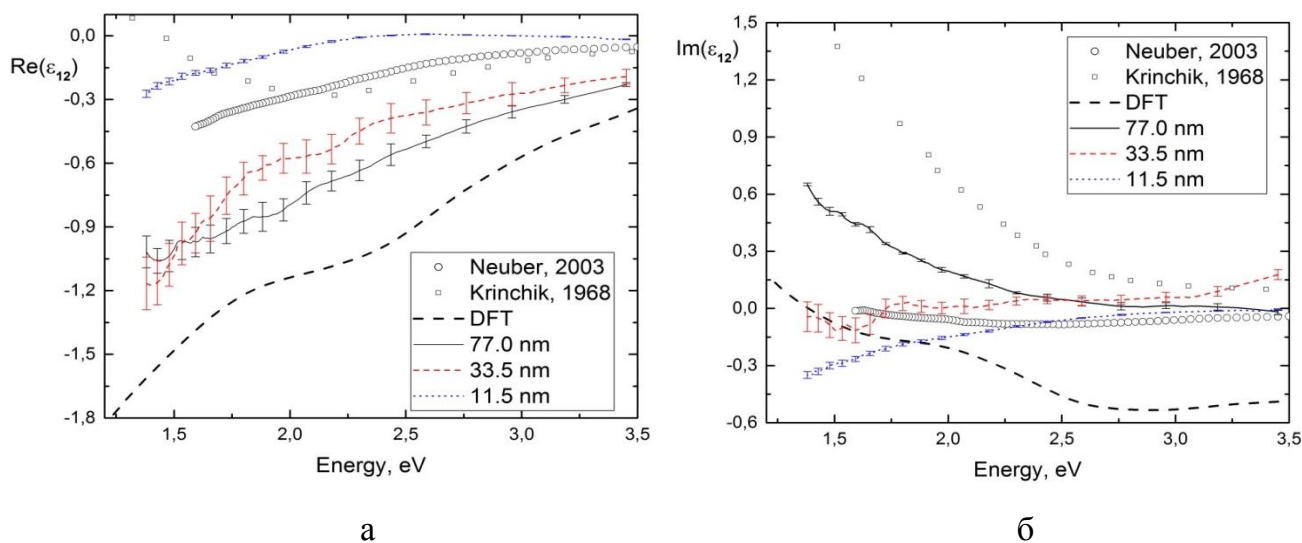


Рисунок 3 – Дисперсии действительной (а) и мнимой (б) компонент ϵ_{12} Fe, рассчитанные из данных *in situ* спектральной эллипсометрии и в рамках DFT [А6] в сравнении с литературными данными [6, 8]

Таким образом, в результате проведенных измерений для тонких поликристаллических слоев Fe было обнаружено значительное влияние толщины как на диагональные, так и на недиагональные компоненты ϵ , что обусловлено, скорее всего, ростом доли поверхностных атомов поликристаллического слоя с уменьшением его толщины и неоднородностей в распределении магнитного момента. Зависимость тензора ϵ Fe от толщины, возникает из-за изменений электронной структуры вблизи поверхности, а также в связи с шероховатостью поверхности, из-за которой также меняется электронная структура вблизи интерфейса. Соответственно, чем меньше толщина магнитного слоя, тем больше вклад интерфейса в значения компонент тензора ϵ . Для толстых слоев железа этим вкладом можно пренебречь, что обуславливает достаточность применения наиболее простой модели *a* для образца Fe/SiO₂/Si с толщиной слоя железа 77,0 нм.

Более того, наблюдается не только изменение амплитуды компонент ε при изменении толщины ферромагнитного слоя, но и изменение характера спектральных зависимостей, что косвенно указывает на смещение по энергии пиков характерных электронных переходов. В подтверждение такого смещения представлены результаты основанного на теории функционала плотности расчета ε для объемного ОЦК железа, которые согласуются с результатами измерений для образца толщиной Fe 77,0 нм.

В заключении сформулированы основные результаты исследования:

1. Для моделей магнитной пленки на подложке и многослойной структуры получены общие выражения, связывающие наблюдаемые в эксперименте эллипсометрические и магнитоэллипсометрические углы с компонентами тензора диэлектрической проницаемости одного магнитного слоя. Для однородной магнитной полубесконечной среды получены аналитические выражения, связывающие компоненты тензора диэлектрической проницаемости с измеряемыми эллипсометрическими и магнитоэллипсометрическими углами, для других моделей эта задача решена численно с минимизацией функций симплекс-методом.
2. Разработаны и реализованы алгоритмы расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости по данным магнитоэллипсометрических измерений в виде программного кода в среде MATLAB; проведена апробация алгоритмов расчета комплексного магнитооптического параметра с использованием модели однородной полубесконечной среды, модели тонкой ферромагнитной пленки на полубесконечной немагнитной подложке и модели двухслойной среды «ферромагнитная пленка - немагнитный буферный слой - полубесконечная немагнитная подложка» на образце Fe/SiO₂/Si, толщина слоя Fe в котором составляла 160,5 нм. В связи с совпадением результатов расчета, выполненных с использованием различных моделей отражающих структур, сделан вывод о возможности использования разработанных алгоритмов для расчета магнитооптического параметра для пленок различной толщины.

3. Для образцов Fe/SiO₂/Si с толщинами слоя Fe 77,0 нм, 33,5 нм и 11,5 нм, полученных в условиях сверхвысокого вакуума, измерены *in situ* эллипсометрические и магнитоэллипсометрические спектры в диапазоне 1,38-3,45 эВ.
4. Для образцов разной толщины слоя железа рассмотрена целесообразность учета интерфейсов и показано влияние учета отражения от внутренних слоев на рассчитанные спектральные зависимости магнитооптического параметра.
5. На основе анализа экспериментальных эллипсометрических и магнитоэллипсометрических данных определено, что оптические и магнитооптические свойства железа в образцах Fe/SiO₂/Si зависят от толщины слоя ферромагнетика.
6. В результате обработки данных спектральных магнитоэллипсометрических измерений определены комплексные диагональные и недиагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости магнитного слоя для образцов Fe/SiO₂/Si с разными толщинами слоя ферромагнетика в спектральном диапазоне 1,38-3,45 эВ. Построен трехмерный график зависимости компонент тензора от толщины слоя железа и энергии падающего излучения.
7. В результате сравнения полученных экспериментальных результатов и рассчитанных компонент тензора диэлектрической проницаемости объемного Fe в рамках теории функционала плотности установлено качественное согласие зависимостей $\varepsilon'_{12}(\omega)$ для толщин 77,0 нм и 33,5 нм с результатами расчета, а для компоненты $\varepsilon''_{12}(\omega)$ качественное согласие имеется только при толщине 77,0 нм. Для более тонких слоев данные расчета объемного образца неприменимы.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

A1. Maximova, O. A. Magneto-ellipsometry as a powerful technique for investigating magneto-optical structures properties / O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, I. A. Yakovlev, D. V. Shevtsov, S. A. Lyaschenko, S. N. Varnakov, S. G.

Ovchinnikov // **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**. — 2017. — Vol. 440. — P. 153.

A2. Maximova, O. A. In situ magneto-optical ellipsometry data analysis for films growth control / O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, S. N. Varnakov, S. A. Lyaschenko, I. A. Yakovlev, I. A. Tarasov, D. V. Shevtsov, O. M. Maximova, S. G. Ovchinnikov // **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**. — 2017. — Vol. 440. — P. 196.

A3. Maximova, O. A. Single-layer model of reflective nanostructures for magneto- ellipsometry data analysis / O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, S. N. Varnakov, S. A. Lyashchenko, S. G. Ovchinnikov // **IOP Conference Series: Materials Science and Engineering**. — 2017. — Vol. 155. — P. 012030.

A4. Maximova, O. A. Two-layer model of reflective ferromagnetic films in terms of magneto-optical ellipsometry studies / O. A. Maximova, S. G. Ovchinnikov, N. N. Kosyrev, S. A. Lyaschenko, // **Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics**. — 2017. — Vol. 10. — P. 223.

A5. Maximova, O. A. Multilayered ferromagnetic nanostructures study: processing data from magneto-ellipsometry measurements / O. A. Maximova, S. A. Lyaschenko, S. N. Varnakov, S. G. Ovchinnikov // **Defect and Diffusion Forum**. — 2018. — Vol. 386. — P. 131.

A6. Максимова, О. А. Экспериментальное и теоретическое исследование слоистых ферромагнитных структур методом спектральной *in situ* магнитоэллипсометрии / О. А. Максимова, С. А. Лященко, М. А. Высотин, И. А. Тарасов, И. А. Яковлев, Д. В. Шевцов, А. С. Федоров, С. Н. Варнаков, С. Г. Овчинников // **Письма в ЖЭТФ**. — 2019. — Т. 110. — вып. 3. — С. 155.

Список цитируемой литературы

1. Шевцов, Д. В. Сверхвысоковакуумная многофункциональная установка для синтеза низкоразмерных структур и их *in situ* исследований методом спектральной магнитоэллипсометрии в температурном диапазоне 85-900 К. / Д. В. Шевцов, С. А. Лященко, С. Н. Варнаков // ПТЭ. — 2017. — № 5. — С. 146.

2. Nederpel, P. Q. J. Magneto-optical ellipsometer / P. Q. J. Nederpel, J. W. D. Martens // Review of Scientific Instruments. — 1985. — Vol. 56. — P. 687.
3. Nelder, J. A. A simplex method for function minimization / J. A. Nelder, R. Mead // The Computer Journal. — 1965. — Vol. 7. — P. 308.
4. Соколов, А.В. Оптические свойства металлов /А. В. Соколов. — Москва : Государственное издательство физико-математической литературы,1961.-464 с.
5. Rauer, R. Temperature-dependent spectral generalized magneto-optical ellipsometry for ferromagnetic compounds / R. Rauer, G. Neuber, J. Kunze, J. Bäckström, and M. Rübhausen // Review of Scientific instruments. — 2005. — Vol. 76. — P. 023910.
6. Neuber, G. Temperature-dependent spectral generalized magneto-optical ellipsometry / G. Neuber, R. Rauer, J. Kunze, T. Korn, C. Pels, G. Meier, U. Merkt, J. Bäckström, M. Rübhausen// Applied Physics Letters. — 2003. — Vol. 83 — P. 4509.
7. Кринчик, Г.С. Магнитооптика ферромагнитных материалов / Г.С. Кринчик // Известия Академии наук СССР. — 1964. — Том XXVIII. — №3. — С. 481.
8. Krinchik, G. S. Magneto-optical Properties of Ni, Co, and Fe in the Ultraviolet Visible, and Infrared Parts of the Spectrum / G. S. Krinchik, V. A. Artem'ev // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1968. — Vol. 26. — P. 1080.
9. Способ измерения магнитооптических эффектов *in situ*, патент #2560148RU от 20.08.2015, авторов Н.Н. Косырев, В.Н. Заблуда, И.А. Тарасов, С.А. Лященко, Д.В. Шевцов, С.Н. Варнаков, С. Г. Овчинников.
10. Malitson, I.H. Interspecimen Comparison of the Refractive Index of Fused Silica / I.H. Malitson//Journal of the Optical Society of America.-1965. - Vol. 55. - P. 1205.
11. Volkov, N. V. Magnetic-field- and bias-sensitive conductivity of a hybrid Fe/SiO₂/p-Si structure in planar geometry / N. V. Volkov, A. S. Tarasov, E. V.

Eremin, S. N. Varnakov, S. G. Ovchinnikov, and S. M. Zharkov // Journal of Applied Physics. — 2011. — Vol. 109. — P. 123924.

12. Fujiwara, H. Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications / H. Fujiwara. — Chichester, United Kingdom : John Wiley & Sons Ltd, 2007. — 392 pp.

13. Query, M.R. Optical constants [Электронный ресурс] — Режим доступа: <http://www.dtic.mil/docs/citations/ADA158623>.

14. Johnson, P.B. Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd / P.B. Johnson and R.W. Christy // Physical Review B. -1974.-Vol. 9. -P. 5056.