

УДК 535.5.511:531.7

© А. И. Семененко, И. А. Семененко

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ И ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ С УЧЕТОМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ НЕКОРРЕКТНОСТИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ. 2. О СПОСОБАХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВСЕХ ПАРАМЕТРОВ ОТРАЖАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ — ПРОЗРАЧНОЙ СВЕРХТОНКОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ПЛЕНКИ НА ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПОДЛОЖКЕ

Рассмотрены два способа решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии относительно всех параметров отражающего объекта типа "прозрачная сверхтонкая поверхностная пленка на полупроводниковой подложке". Один из них предложен в нашей предыдущей работе и представляет собой последовательное прохождение двух этапов. На первом этапе определяются оптимальные значения параметров подложки, а на втором — поверхностной пленки. Для каждого этапа устанавливается свой критерий выбора оптимальных значений соответствующих параметров. Однако проведенный анализ показал недостаточность такого подхода. Более естественным и последовательным является второй способ решения задачи, при котором подложка и пленка самосогласованным образом участвуют в реализации соответствующей процедуры. В этом случае решение относительно всех параметров отражающей системы достигается одновременно. Конкретная реализация такого подхода, по сути, представляет собой метод последовательных приближений, на каждом шаге которого используется критерий отбора оптимальных значений параметров сверхтонкой пленки при фиксированных значениях оптических параметров подложки. Можно сказать, что каждый шаг данного метода — это, фактически, те два этапа в решении обратной задачи по первому способу.

Кл. сл.: эллипсометрия, поляризационные углы, математически некорректная обратная задача, критерий, оптимальное решение, численный эксперимент, сверхтонкая пленка, подложка, оптические постоянные

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Выраженная математическая некорректность обратной задачи эллипсометрии, проявляющаяся при исследовании отражающей системы с прозрачной сверхтонкой поверхностной пленкой, заставляет искать новые нетрадиционные пути решения обратной задачи. Этой проблеме посвящены предыдущие работы [1, 2]. В работе [1] предложен новый подход к решению математически некорректной обратной задачи для прозрачных сверхтонких поверхностных пленок на подложке с известными значениями оптических постоянных, основанный на использовании экспериментальных данных, отвечающих набору углов падения светового пучка. Введены параметры критерии, позволяющие находить оптимальное решение обратной задачи, наиболее близкое к точному решению. Результаты численного экспе-

римента показали большую точность оптимального решения при определении параметров сверхтонких пленок. В то же время установлено большое влияние ошибок в задании оптических постоянных подложки на точность оптимального решения. В результате сделан вывод о необходимости одновременного определения всех параметров отражающей системы — как сверхтонкой пленки, так и подложки. В связи с этим в работе [2] проведен анализ особенностей обратной задачи, проявляющихся при определении полного набора параметров отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой. Кроме того, в общих чертах изложен способ решения обратной задачи, представляющий собой последовательное прохождение двух этапов. Для каждого этапа устанавливается свой критерий выбора оптимальных значений соответствующих параметров. На первом этапе определяются оптимальные значения параметров

подложки, а также значения параметров пленки, соответствующие точке абсолютного минимума функционала обратной задачи. Для случая сверхмалых толщин пленки эти значения из-за экспериментальных ошибок и неточностей в выборе модели исследуемого объекта существенно отличаются от истинных значений параметров пленки. Второй этап является очевидным следствием первого и представляет собой реализацию подхода, изложенного в работе [1]. На данном этапе при решении обратной задачи задаются определенные на предыдущем этапе оптимальные значения параметров подложки и с помощью предложенного в работе [1] критерия отбора находятся оптимальные значения параметров пленки. Однако дальнейший анализ показал недостаточность такого подхода. Более естественным и последовательным является способ решения задачи, при котором подложка и пленка самосоогласованным образом участвуют в реализации соответствующей процедуры. В этом случае решение относительно всех параметров отражающей системы достигается одновременно. Конкретная реализация такого подхода, по сути, представляет собой метод последовательных приближений, на каждом шаге которого используется критерий отбора оптимальных значений параметров сверхтонкой пленки. Можно еще сказать, что каждый шаг данного метода — это фактически те самые два этапа в решении обратной задачи, о которых идет речь в работе [2].

В соответствии со сказанным настоящая работа строится по следующему плану. Сначала дается анализ двухэтапного подхода к решению обратной задачи. При этом формулируются условия, при которых данный способ решения является достаточно целесообразным. Затем описывается метод последовательных приближений, являющийся наиболее общим способом решения обратной задачи для случая сверхтонких пленок. В реализации этого метода естественным образом используются и некоторые элементы двухэтапного подхода.

АНАЛИЗ ДВУХЭТАПНОГО ПОДХОДА К РЕШЕНИЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

В работах [1, 2] на основе общих рассуждений сделан вывод, что обратная задача в ее самой общей постановке разбивается на два этапа, и с учетом этого может быть выбран наиболее рациональный путь решения этой задачи. Прежде чем рассматривать эти этапы, обратимся к идеальному случаю, когда нет ошибок ни в эксперименте, ни в выборе модели. В этой ситуации при классическом подходе к решению обратной задачи также

наблюдаются особенности, связанные исключительно со сверхмалой толщиной пленки, в том числе и особенности, обусловленные ошибками в задании оптических параметров подложки. Характер данных особенностей таков, что целесообразно полный набор параметров разделить на две обособленные группы, одна из которых — это параметры подложки

$$n_0, \kappa_0, \quad (1)$$

а вторая — параметры прозрачной пленки

$$d, n. \quad (2)$$

Представляет интерес поведение функционала обратной задачи S_0 относительно параметров группы (1), причем в ситуации, когда независимо от значений параметров этой группы достигается абсолютный минимум функционала S_0 . Выясняется, что в условиях абсолютного минимума величина S_0 имеет локальный минимум относительно параметров n_0, κ_0 в точке, определяемой истинными значениями этих параметров. Отсюда следует и способ определения значений оптических параметров подложки, нацеленный на достижение наиболее глубокого локального минимума функционала S_0 . При этом одновременно находятся и значения параметров пленки.

Отметим еще одну особенность идеального случая, связанную с взаимодействием параметров двух групп (1) и (2). Фиксируя значения параметров подложки

$$n'_0, \kappa'_0, \quad (3)$$

отличающиеся в общем случае от их истинных значений, определим по точке абсолютного минимума значения параметров пленки

$$d_{\min}, n_{\min}. \quad (4)$$

Затем, фиксируя значения параметров d и n пленки по их значениям (4) в точке абсолютного минимума, аналогичным образом, т. е. по точке несколько измененного абсолютного минимума, вернемся к параметрам подложки, определив их значения

$$n''_0, \kappa''_0. \quad (5)$$

Для сравнения начальных и конечных значений (3) и (5) введем величины

$$U_n = |n''_0 - n'_0|, \quad U_\kappa = |\kappa''_0 - \kappa'_0|, \quad (6)$$

$$U_{nk} = \sqrt{U_n^2 + U_\kappa^2}.$$

Для идеального случая величины (6) равны нулю

$$U_n = U_\kappa = U_{nk} = 0. \quad (7)$$

Ниже при рассмотрении реальных ситуаций, связанных с экспериментальными ошибками, мы вернемся к этим величинам.

Теперь, имея в виду реальные ситуации, рассмотрим основные вехи в реализации двухэтапного подхода к решению обратной задачи для отражающих объектов со сверхтонкими пленками. Пусть точные значения оптических параметров подложки заданы. В этом случае по абсолютному минимуму функционала S_0 обратной задачи определяются параметры прозрачной пленки $d_{\min}$, $n_{\min}$. Для сверхтонких пленок под влиянием экспериментальных ошибок и неточностей в выборе модели отражающего объекта параметры $d_{\min}$ и $n_{\min}$ не совпадают с истинными значениями параметров пленки. Эти несовпадения часто бывают таковы, что говорить о приблизительном или даже грубом описании сверхтонкого слоя вообще невозможно. К таким же или гораздо худшим результатам приходим и при неточном задании оптических параметров подложки, особенно показателя преломления [1]. Ситуация особенно усложняется при наличии нарушенного слоя на подложке. В связи с этим на первый план выдвигается задача по достаточно точному определению оптических параметров подложки, в том числе и эффективных. На первом этапе решается именно эта задача. При этом определению подлежат параметры из набора

$$(n_0)_{\text{opt}}, (\kappa_0)_{\text{opt}}, d_{\min}, n_{\min}, \quad (8)$$

где $(n_0)_{\text{opt}}$ и $(\kappa_0)_{\text{opt}}$ — это оптимальные значения оптических параметров подложки, а параметры $d_{\min}$ и $n_{\min}$ определены выше.

Необходимо сформулировать вполне обоснованный критерий, использование которого дает возможность с достаточной точностью определить оптические параметры подложки, т. е. их оптимальные значения $(n_0)_{\text{opt}}$ и $(\kappa_0)_{\text{opt}}$. Что касается параметров $d_{\min}$ и $n_{\min}$, то они являются естественным следствием процедуры по использованию соответствующего критерия. При этом важно отметить следующее. Параметры $(n_0)_{\text{opt}}$ и $(\kappa_0)_{\text{opt}}$ включают в себя и влияние нарушенного слоя, т. е. в общем случае они представляют собой некоторые эффективные значения оптических параметров подложки. А что касается величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$, то, будучи связанными единым процессом с параметрами $(n_0)_{\text{opt}}$ и $(\kappa_0)_{\text{opt}}$, они в основном обусловлены теперь влиянием только экспериментальных ошибок. Определив на первом этапе оптимальные значения оптических параметров подложки, мы тем самым создаем условия для перехода ко второму этапу в решении обратной задачи.

Второй этап является очевидным следствием первого и представляет собой реализацию подхода, изложенного в работе [1]. При решении на

данном этапе обратной задачи задаются определенные на предыдущем этапе параметры $(n_0)_{\text{opt}}$, $(\kappa_0)_{\text{opt}}$ и с помощью предложенного в работе [1] критерия отбора оптимального решения находятся параметры сверхтонкой пленки. При этом величины $d_{\min}$ и $n_{\min}$, также определенные на первом этапе, непосредственного участия в процессе решения обратной задачи не принимают. Их значения достигаются в конце последовательности промежуточных решений при выходе на точку абсолютного минимума функционала обратной задачи.

Таким образом, основная задача сводится к реализации первого этапа. При решении этой задачи будем исходить из особенностей идеального случая, связанных с отмеченным выше поведением функционала S_0 , а также с характером величин U_n , U_κ и $U_{n\kappa}$ (см. (6) и (7)). Прежде всего рассматриваются условия, когда при любых заданных значениях параметров подложки n_0 и κ_0 параметры пленки d и n определяются значениями $d_{\min}$ и $n_{\min}$, обеспечивающими абсолютный минимум функционала S_0 . В этих условиях, названных выше условиями абсолютного минимума, функционал S_0 имеет локальный минимум относительно параметров подложки n_0 , κ_0 в точке, определяемой истинными значениями этих параметров. Это всегда наблюдается для идеального случая. Интерес представляет поведение функционала S_0 в реальной ситуации.

Для определенности рассмотрим ту же модель отражающей системы, что и в работах [1, 2]:

$$n = 1.50; \quad n_0 = 3.865; \quad \kappa_0 = 0.023, \quad (9)$$

причем для толщины пленки выбираем значение

$$d = 2.5 \text{ нм}. \quad (10)$$

Длина световой волны определяется значением $\lambda = 632.8 \text{ нм}$, а углы падения φ_0 светового пучка изменяются от 50 до 75° с шагом 2.5° . Напомним также, что величины ξ_0 и η_0 в численном моделировании экспериментальных ошибок определяют максимальные отклонения (в ту или другую сторону) поляризационных углов от их точных значений.

При самых слабых экспериментальных ошибках характер локального минимума величины S_0 сохраняется, однако в общем случае поведение этой величины гораздо сложнее. В работах [1, 2] рассмотрены четыре варианта "экспериментальных" ошибок в поляризационных углах, определяемых величинами ξ_0 и η_0 . При этом ни для од-

ного из этих вариантов локальный минимум функционала S_0 относительно обоих параметров подложки не сохраняется. Он сохраняется лишь для первых двух самых слабых вариантов:

$$\xi_0 = \eta_0 = 1 \text{ мин}, \quad d = 2.5 \text{ нм}, \quad (11)$$

$$\xi_0 = \eta_0 = 3 \text{ мин}, \quad d = 2.5 \text{ нм}, \quad (12)$$

но только относительно параметра κ_0 подложки. Для этих вариантов решение основной задачи первого этапа носит относительно простой характер. В этом случае по глубине минимума функционала S_0 мы не можем одновременно определить значения параметров n_0 и κ_0 , однако можем указать приближенное значение параметра κ_0 , имея в виду его дальнейшее уточнение. В этой ситуации выбирается значение параметра κ_0 , и на некоторой последовательности параметра n_0 определяются величины U_n , U_κ и $U_{n\kappa}$. В идеальном случае данные величины равны нулю (см. (7)). При наличии же экспериментальных ошибок, а также неточностей в выборе модели отражающего объекта они имеют минимум в точке, определяющей оптимальные значения параметров n_0 и κ_0 . Исходя из этого находим на выбранной последовательности параметра n_0 его оптимальное значение. После этого можно несколько уточнить и значение параметра κ_0 . В результате, находим оптимальные значения обоих параметров подложки.

Для третьего и четвертого вариантов "экспериментальных" ошибок в поляризационных углах, рассмотренных в работах [1, 2]:

$$\xi_0 = \eta_0 = 5 \text{ мин}, \quad d = 2.5 \text{ нм}, \quad (13)$$

$$\xi_0 = \eta_0 = 10 \text{ мин}, \quad d = 2.5 \text{ нм}, \quad (14)$$

локальный минимум функционала S_0 не сохраняется ни по одному из параметров n_0 и κ_0 подложки. В этом случае необходимо находить минимум величин U_n , U_κ и $U_{n\kappa}$ на выбранных последовательностях обоих параметров n_0 и κ_0 . В принципе, это можно сделать, но такой способ определения оптимальных значений параметров подложки сопряжен с очень громоздкой вычислительной процедурой. Таким образом, двухэтапный подход к решению обратной задачи не является наиболее рациональным. Есть другой способ решения математически некорректной обратной задачи для отражающих систем со сверхтонкой поверхностной пленкой. По сути он представляет собой метод последовательных приближений, на каждом шаге которого используется критерий отбора значений параметров сверхтонкой пленки. Можно еще ска-

зать, что каждый шаг данного метода — это фактически и есть те самые два этапа в решении обратной задачи, о которых идет речь выше [1, 2]. Рассмотрим этот метод.

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ МЕТОДОМ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Прежде чем перейти к самому методу, остановимся на некоторых важных моментах, касающихся характера математической некорректности обратной задачи. Параметры сверхтонкой поверхностной пленки при фиксировании точных значений оптических параметров подложки испытывают очень сильное влияние экспериментальных ошибок. Речь идет о величинах $d_{\min}$ и $n_{\min}$, определяющих абсолютный минимум функционала S_0 . Картина кардинально меняется, если фиксируются точные значения параметров d и n пленки и определяются по точке абсолютного минимума функционала S_0 параметры подложки. Продемонстрируем это на примере выбранной для численного эксперимента модели отражающей системы. Фиксируя точные значения параметров d и n пленки, определенные выражениями (9) и (10), найдем значения параметров подложки, соответствующие четырем принятым вариантам экспериментальных ошибок. Располагая варианты в порядке возрастания максимальной экспериментальной ошибки в поляризационных углах (см. (11)–(14)), запишем эти значения

$$\begin{cases} n_0 = 3.864811, & \kappa_0 = 0,022808; \\ n_0 = 3.865471, & \kappa_0 = 0,023449; \\ n_0 = 3.864024, & \kappa_0 = 0,021509; \\ n_0 = 3.866100, & \kappa_0 = 0,023419. \end{cases} \quad (15)$$

Как видим, значения параметров подложки, определенные (при точно заданных параметрах пленки) по точке абсолютного минимума функционала S_0 , не так уж сильно отличаются от их точных значений, указанных в выражении (9). Можно даже сказать, что это вполне приемлемые значения. Таким образом, экспериментальные ошибки в поляризационных углах, парадоксальным образом искажающие параметры сверхтонкой пленки, совершенно нормально воздействуют на параметры подложки. Иначе говоря, математическая некорректность обратной задачи проявляется почти исключительно на параметрах сверхтонкой пленки.

Причина математической некорректности обратной задачи при исследовании сверхтонких пленок связана не только с экспериментальными ошибками в поляризационных углах Ψ и Δ . В не-

меньшей мере, а во многих случаях и в гораздо большей степени, математическая некорректность связана с неточным заданием оптических параметров подложки. Необходимо отметить следующий момент. Варьируя значения параметров n_0 и κ_0 подложки, причем в довольно узких интервалах вокруг истинных значений этих параметров, мы получаем возможность полного контроля над влиянием экспериментальных ошибок. Принципиально важно, что существует возможность гибкого изменения величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$, связанная с прохождением параметров n_0 и κ_0 через указанные узкие интервалы. Это означает, что величины $d_{\min}$ и $n_{\min}$ при определенных значениях параметров n_0 и κ_0 независимо от характера экспериментальных ошибок проходят через истинные значения d_{true} и n_{true} параметров пленки

$$d_{\min} = d_{\text{true}}, \quad n_{\min} = n_{\text{true}}. \quad (16)$$

При этом соответствующие значения параметров n_0 и κ_0 будут наиболее приближены к истинным значениям.

Обратим внимание еще на два момента, непосредственно связанные с предыдущей ситуацией (16). При фиксировании неточных значений параметров n_0 и κ_0 оптимальные значения параметров пленки, найденные с использованием соответствующего критерия-параметра [1], ведут себя по-разному. Оптимальное значение показателя преломления n относительно слабо реагирует на изменение параметров n_0 и κ_0 . В то же время для всех случаев неточного задания обоих параметров подложки наблюдается заметный рост (в оптимальном решении обратной задачи) ошибок в толщине пленки, обусловленный возрастанием ошибок в описании оптических свойств подложки. Интерес представляет и обратная связь между параметрами пленки и подложки, когда в качестве значений параметров пленки фиксируются их значения, определенные по схеме оптимального решения. В этом случае показатель n_0 , найденный по точке абсолютного минимума функционала S_0 , довольно слабо отличается от соответствующего значения из выражения (15). Однако в отношении коэффициента κ_0 в общем случае это неверно. Таким образом, для определения показателей преломления пленки и подложки, близких к их оптимальным значениям, целесообразно использовать две процедуры. Одна из этих процедур реализуется по схеме оптимального решения обратной задачи [1] при фиксировании некоторых значений параметров n_0 и κ_0 . Вторая же процедура имеет обратный характер, в результате ее использования

мы возвращаемся к параметрам n_0 и κ_0 , но уже на другом уровне, и прежде всего это касается показателя преломления n_0 .

Для описания результата последовательного использования двух таких процедур введем величины, аналогичные параметрам U_n , U_κ и $U_{n\kappa}$ (см. (6)). Для большей определенности, имея в виду последующее описание метода последовательных приближений, используем совершенно другие обозначения. При выполнении первой процедуры, фиксируя начальные значения параметров подложки

$$n_0^{(0)}, \quad \kappa_0^{(0)}, \quad (17)$$

отличающиеся от их истинных значений, определим по схеме оптимального решения [1] значения параметров пленки

$$d_{\text{opt}}, \quad n_{\text{opt}}. \quad (18)$$

Затем, фиксируя параметры d и n пленки по их значениям (18), аналогичным образом вернемся к параметрам подложки, определив их значения

$$n_0^{(1)}, \quad \kappa_0^{(1)}. \quad (19)$$

Для сравнения начальных и конечных значений (17) и (19) введем величины

$$V_n = |n_0^{(1)} - n_0^{(0)}|, \quad V_\kappa = |\kappa_0^{(1)} - \kappa_0^{(0)}|, \quad (20)$$

$$V_{n\kappa} = \sqrt{V_n^2 + V_\kappa^2}.$$

Рассмотрим теперь возможность решения обратной задачи методом последовательных приближений. На каждом шаге данного метода применяются две описанные выше процедуры. Схематично такой процесс описывается формулами (17)–(20). Очень важно правильно выбрать начальные значения $n_0^{(0)}$, $\kappa_0^{(0)}$, с которых начинается первый шаг метода. Величина $n_0^{(0)}$, с одной стороны, должна не слишком отличаться от точного значения параметра n_0 , а с другой — обеспечить выполнение условия

$$n_{\min} \rightarrow 1. \quad (21)$$

Данное условие при любом типе экспериментальных ошибок обязательно связано с выполнением неравенства [1]

$$n_0^{(0)} < (n_0)_{\text{true}}. \quad (22)$$

Величину $n_0^{(0)}$, исходя из условия (21), легко подобрать для любого объекта рассматриваемого типа. При этом, как следует из результатов работы [1], она достаточно слабо будет отличаться от точ-

ного значения параметра n_0 . Что касается начального значения $\kappa_0^{(0)}$ коэффициента поглощения κ_0 , то здесь ситуация сложнее. Трудности возникают даже для известного материала подложки, и связаны они не только с характером поверхности подложки. При подборе величины $n_0^{(0)}$ в соответствии с условиями (21) и (22) величина d_{opt} из (18) уменьшается по сравнению с истинным значением толщины. Выбрав начальное значение $\kappa_0^{(0)}$ в соответствии с условием

$$\kappa_0^{(0)} > (\kappa_0)_{\text{true}}, \quad (23)$$

мы в еще большей мере искажаем (в сторону уменьшения) величину d_{opt} . Поэтому целесообразно выбирать величину $\kappa_0^{(0)}$ в соответствии с условием

$$\kappa_0^{(0)} < (\kappa_0)_{\text{true}}. \quad (24)$$

Данное условие приводит к обратному эффекту [1] и в какой-то степени стабилизирует значение величины d_{opt} . Для полной определенности остановимся на нулевом начальном значении коэффициента $\kappa_0^{(0)}$

$$\kappa_0^{(0)} = 0. \quad (25)$$

Для рассматриваемой модели отражающей системы, исходя из результатов работы [1] и учитывая условия (21) и (22), можем сразу указать и начальное значение показателя преломления подложки

$$n_0^{(0)} = 3.855. \quad (26)$$

Отметим, что начальное значение (25) остается неизменным для любой отражающей системы рассматриваемого типа "сверхтонкая поверхностная пленка на полупроводниковой подложке". Что касается начального значения $n_0^{(0)}$, то оно может меняться, обеспечивая в любом случае выполнение соотношений (21) и (22) при условии минимального отклонения от точного значения параметра n_0 . При этом условие минимального отклонения величины $n_0^{(0)}$ от точного значения параметра n_0 выполняется уже на начальной стадии предельного перехода (21). Это означает, что не требуются какие-либо предварительные данные, касающиеся точного значения параметра n_0 .

Сформулированные условия выбора начальных значений $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ обеспечивают неплохой старт при использовании метода последовательных приближений для решения обратной задачи. Рассмотрим суть метода на примере идеального случая, после чего перейдем к решению обратной задачи

для четырех вариантов экспериментальных ошибок (см. (11)–(14)).

Идеальный случай, $\xi_0 = \eta_0 = 0$.

Любой метод решения обратной задачи обязательно должен апробироваться на идеальном варианте, когда отсутствуют экспериментальные ошибки и точно выбрана модель отражающей системы. В нашем случае идеальный вариант определяется выражениями (9) и (10) и приведенными сразу после (10) данными о длине световой волны и наборе углов падения. Начальные значения $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ для первого шага метода последовательных приближений выберем в соответствии с (25) и (26). В этом случае точка абсолютного минимума дает следующие значения для величин d_{min} и n_{min} :

$$d_{\text{min}} = 20.597, \quad n_{\text{min}} = 1.03685. \quad (27)$$

Как видим, величина n_{min} соответствует условию (21), подтверждая тем самым выполнение неравенства (22). Используя критерий отбора оптимальных значений параметров d и n , на траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала S_0 , находим величины d_{opt} и n_{opt} , отвечающие начальным значениям (25) и (26) для 1-го шага:

$$d_{\text{opt}} = 2.6706, \quad n_{\text{opt}} = 1.5023. \quad (28)$$

Затем фиксируем параметры d и n пленки по их значениям (28) и определяем соответствующие значения параметров подложки

$$n_0^{(1)} = 3.86505, \quad \kappa_0^{(1)} = 0.01022. \quad (29)$$

Таким образом, уже на первом шаге определяются неплохие значения показателей преломления пленки и особенно подложки

$$n = n_{\text{opt}} = 1.5023, \quad n_0 = n_0^{(1)} = 3.86505. \quad (30)$$

Что касается толщины пленки и коэффициента поглощения подложки, то они на первом шаге определяются с гораздо меньшей точностью:

$$d = d_{\text{opt}} = 2.6706, \quad \kappa_0 = \kappa_0^{(1)} = 0.01022. \quad (31)$$

Результаты (30) и (31) для первого шага находятся в полном соответствии с отмеченным выше характером взаимосвязи между параметрами отражающей системы со сверхтонкой пленкой.

Для второго, как и для любого следующего шага метода последовательных приближений, также необходимо задавать начальные значения $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$. Величину $n_0^{(0)}$ целесообразно задавать, используя значение $n_0^{(1)}$, найденное на предыдущем шаге:

$$n_0^{(0)} = n_0^{(1)}. \quad (32)$$

Это вполне обосновано и связано с близостью величины $n_0^{(1)}$ к точному значению показателя преломления подложки. Задавать таким же образом начальное значение $\kappa_0^{(0)}$ коэффициента поглощения подложки нельзя, ибо в этом случае мы будем фактически топтаться на месте. Поэтому начальное значение $\kappa_0^{(0)}$ будем задавать формулой

$$\kappa_0^{(0)} = \kappa_0^{(1)} + \delta\kappa_0, \quad (33)$$

где $\kappa_0^{(1)}$ — конечное значение параметра κ_0 на предыдущем шаге, $\delta\kappa_0$ — шаг параметра κ_0 .

Очевидно, для второго шага рассматриваемого идеального случая величина $\kappa_0^{(1)}$ определяется выражением (29). Шаг $\delta\kappa_0$ задается и может меняться по мере приближения к точным значениям параметров отражающего объекта.

На последовательности шагов по параметрам n_0 и κ_0 подложки реализуется процесс сходимости к оптимальным значениям всех параметров отражающей системы, наиболее приближенным к их точным значениям. Окончание данного процесса определяется по минимальным значениям величин V_n , V_κ и $V_{n\kappa}$ (см. (20)). Для тех же целей можно использовать и величины

$$\begin{aligned} W_d &= |d_{\text{opt}} - d_{\text{min}}|, \quad W_n = |n_{\text{opt}} - n_{\text{min}}|, \\ W_{dn} &= \sqrt{W_d^2 + W_n^2}, \end{aligned} \quad (34)$$

определяемые на текущем шаге оптимальными значениями и значениями в точке абсолютного минимума параметров пленки. Эти величины, очевидно, дают тот же результат, но они имеют гораздо более выраженный минимум в точке, определяющей оптимальное решение обратной задачи. По этой причине использование величин W_d , W_n и W_{dn} должно носить обязательный характер.

Нет смысла приводить окончательные результаты в численном выражении. Отметим только, что даже в идеальном случае к точным значениям параметров мы не приходим. Для параметров n_0 и κ_0 ошибка, определяющая отклонение от точных значений, проявляется в пятом знаке после запятой, а для параметров d и n — в третьем знаке. Это связано с двумя причинами. Во-первых, для объекта со сверхтонкой пленкой обратная задача в сильной степени математически некорректна и в идеальном случае. Во-вторых, точность определения параметров пленки связана с особенностями правил отбора оптимальных значений [1]. А эти особенности обусловлены характером движения

вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала S_0 . Точность процесса пошаговой минимизации вдоль этой траектории зависит от радиуса элементарной сферы, в пределах которой выбрасываются точки комплекса Бокса [3]. Этот радиус непосредственно определяет шаг движения вдоль траектории. Чем меньше радиус, а значит, и шаг, тем точнее работают правила отбора. Но при этом существенно увеличивается объем вычислительной работы. В конечном итоге это обстоятельство и определило точность полученных для идеального случая оптимальных значений параметров пленки.

Реальные варианты, определяемые экспериментальными ошибками.

Речь пойдет о вариантах численного эксперимента, отличающихся максимальными отклонениями от точных значений поляризационных углов, т. е. параметрами ξ_0 и η_0 . Мы не будем подробно рассматривать все четыре варианта (см. (11)–(14)). Рассмотрим здесь, причем схематично, только третий вариант (13), оказавшийся особенно неудобным и требующим огромной вычислительной работы при использовании двухэтапного подхода к решению обратной задачи. Однако характер окончательных результатов в общих чертах опишем для всех вариантов. Метод последовательных приближений для решения обратной задачи подробно описан для идеального случая и в основных чертах одинаково реализуется для всех вариантов. Поэтому остановимся лишь на результатах первого шага для варианта (13) и ограничимся общим описанием всех вариантов. Кроме того, коснемся процедуры согласования начальных значений показателя преломления и коэффициента поглощения подложки для каждого шага метода, начиная со второго.

Начальные значения $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ для первого шага по-прежнему выбираем в соответствии с (25) и (26). В этом случае точка абсолютного минимума дает похожие на (27) значения

$$d_{\text{min}} = 18.7927, \quad n_{\text{min}} = 1.04030. \quad (35)$$

Затем, используя правила отбора оптимальных значений параметров пленки, находим величины d_{opt} и n_{opt} и определяем отвечающие им значения параметров подложки $n_0^{(1)}$ и $\kappa_0^{(1)}$:

$$d_{\text{opt}} = 2.6900, \quad n_{\text{opt}} = 1.49100; \quad (36)$$

$$n_0^{(1)} = 3.864018, \quad \kappa_0^{(1)} = 0.009173. \quad (37)$$

Таким образом, как и в идеальном случае, на первом шаге определяются неплохие значения показателей преломления пленки и подложки:

$$n = n_{\text{opt}} = 1.49100, \quad n_0 = n_0^{(1)} = 3.864018. \quad (38)$$

Что касается толщины пленки и коэффициента поглощения подложки, то они на первом шаге определяются с гораздо меньшей точностью:

$$d = d_{\text{opt}} = 2.6900, \quad \kappa_0 = \kappa_0^{(1)} = 0.00917. \quad (39)$$

В то же время стоит обратить особое внимание на поведение (см. (38)) показателя преломления n_0 подложки. Его значение уже на первом шаге практически повторяет соответствующее значение из выражения (15), определяющего параметры подложки при фиксировании точных значений параметров пленки. То же самое наблюдается и для остальных вариантов экспериментальных ошибок.

Прежде чем перейти к описанию окончательных результатов, рассмотрим характер взаимосвязи начальных значений показателя преломления и коэффициента поглощения подложки для каждого шага. Исходя из общих соображений, можно утверждать, что начальные значения $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ должны быть согласованы между собой. Такое согласование достигается с помощью довольно простой процедуры следующего характера. На данном шаге по начальным значениям $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ сначала определяются отвечающие точке абсолютного минимума функционала величины d_{min} и n_{min} , а затем в обратном процессе по установленным значениям d_{min} и n_{min} находятся параметры n_0'' и κ_0'' подложки, которые в общем случае не совпадают с начальными значениями. Очевидно, это тот процесс, который в первом разделе схематично описывается в обозначениях (3)–(5). Данный процесс характеризуется величинами U_n , U_κ и $U_{\text{нк}}$ (см. (6)), которые с учетом новых обозначений, соответствующих методу последовательных приближений и касающихся начальных значений, запишутся:

$$\begin{aligned} U_n &= |n_0'' - n_0^{(0)}|, \quad U_\kappa = |\kappa_0'' - \kappa_0^{(0)}|, \\ U_{\text{нк}} &= \sqrt{U_n^2 + U_\kappa^2}. \end{aligned} \quad (40)$$

Определив на последовательности начальных значений $\kappa_0^{(0)}$, определяемых формулой (33), при заданном начальном значении $n_0^{(0)}$ величины U_n , U_κ и $U_{\text{нк}}$ и установив пару $(n_0^{(0)}, \kappa_0^{(0)})$, которой соответствуют минимумы этих величин, мы тем самым устанавливаем (для текущего шага) согласованные между собой начальные значения. Это позволяет ускорить и улучшить процесс сходимости к оптимальным значениям параметров, наиболее приближенным к их точным значениям. Следует отметить, что для идеального случая вели-

чины U_n , U_κ и $U_{\text{нк}}$ равны нулю (см. (7)) и рассмотренная процедура теряет смысл. В этой ситуации согласование начальных значений достигается выбором достаточно малого шага $\delta\kappa_0$ для параметра κ_0 .

Не приводя численных выражений, дадим общее описание окончательных результатов. Прежде всего отметим, что для всех четырех вариантов экспериментальных ошибок окончательные оптимальные значения оптических параметров подложки очень слабо (начиная с пятого знака после запятой) отличаются от соответствующих значений из выражения (15), определяющего параметры подложки при фиксировании точных значений параметров пленки. Причем для показателя преломления подложки это наблюдается уже на первом шаге. Что касается параметров d и n пленки, то их оптимальные значения отличаются от точных значений, начиная с третьего знака после запятой. Учитывая характер математической некорректности обратной задачи для рассматриваемой модели отражающего объекта, можно утверждать, что метод последовательных приближений позволяет получать хорошие результаты. Как и в идеальной ситуации, точность может быть несколько улучшена за счет регулирования процесса пошаговой минимизации функционала S_0 вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума.

Результаты, полученные в работах [1, 2] и в настоящей работе, носят законченный характер и могут быть использованы для исследования реальных объектов со сверхтонкой пленкой. При этом речь пока идет об отражающих объектах типа "прозрачная сверхтонкая поверхностная пленка на полупроводниковой подложке".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2010. Т. 20, № 4. С. 132–142.
2. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 1. С. 103–113.
3. Box M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. V. 8. P. 42–51.

*Институт прикладной физики НАН Украины,
г. Сумы (Семененко А.И.)*

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург (Семененко И.А.)*

Контакты: Семененко Альберт Иванович,
sem199@mail.ru

Материал поступил в редакцию 13.04.2011.

SOLID BODY AND LIQUID SUPERFICIAL STRUCTURE STUDY BY ELLIPSOMETRY CONSIDERING MATHEMATICAL INVERSE PROBLEM INCORRECTNESS.

2. FEATURES OF THE RETURN PROBLEM AT RESEARCH OF THE SUPERTHIN SUPERFICIAL FILMS ON SEMICONDUCTORS

A. I. Semenenko¹, I. A. Semenenko²

¹*Institute for Applied Physics NAS, Sumy, Ukraine*

²*Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg*

The work analyses the features of a return problem ellipsometry, evident at definition of a full set of parameters of reflecting system with a superthin superficial film. The way of the solution of a return problem was developed: the approach to the solution consisting of two consecutive stages is described. Criterion of an optimum values choice of corresponding parameters is formulated for each stage. Optimum values of parameters of a substrate are determined at the first stage, as well as value of parameters the films corresponding to a point of an absolute functional minimum of a return problem. For a case of midget thickness of a film these values are significantly differ from the true film parameters because of experimental errors and discrepancies in the model of the investigated object. The second stage is an obvious consequence of the first one and represents realization of the approach stated in the previous work. At this stage the solution of a return problem the optimum values of parameters of a substrate defined at the previous stage are set and by means of criteria of selection offered in work [1] optimum values of parameters of a film are determined. The stated approach to the solution of mathematically incorrect return problem is successfully tested in numerical experiment for different variants of experimental errors. Influence of the broken layer on substrate surfaces is also discussed in the work.

Keywords: ellipsometry, polarization angles, mathematically incorrect inverse problem, criterion , optimum solution, numerical experiment, super-thin film, ground, optical constants