

УДК 535.5.511:531.7

© А. И. Семененко, И. А. Семененко

ОБОСНОВАНИЕ И ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИ НЕКОРРЕКТНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ.

2. О РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ НА МНОЖЕСТВЕ НАБОРОВ УГЛОВ ПАДЕНИЯ СВЕТОВОГО ПУЧКА

Рассмотрен способ решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии, основанный на использовании некоторого множества наборов углов падения светового пучка на образец. Показано, что решение обратной задачи на множестве наборов углов падения приводит к относительной простоте и надежности процесса решения, а также к большой точности, с которой определяются все четыре параметра отражающей системы со сверхтонкой пленкой. Предложенный способ решения позволяет преодолеть существенные трудности, возникающие, из-за сверхмалой толщины пленки, и в идеальном случае, когда отсутствуют экспериментальные ошибки, но применяется традиционный подход к решению обратной задачи относительно всех 4 параметров однослойной отражающей системы.

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

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Новый подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии, предложенный в работе [1] и развитый в ряде последующих работ (см., например, [2]), основан на использовании измерений поляризационных углов Ψ и Δ , отвечающих некоторому набору углов падения светового пучка на образец. Это является необходимым условием для успешного применения метода. Однако, как показывает анализ, проведенный в работе [3], выбор комплекса углов падения светового пучка не может быть произвольным. Угловой комплекс должен обеспечивать правильный предельный переход к идеальному случаю, когда отсутствуют экспериментальные ошибки в используемых поляризационных углах Ψ и Δ , а отражающая система является строго однослойной. Для идеального случая при точно заданных оптических параметрах подложки величины

$$d_{\min} \text{ и } n_{\min}, \quad (1)$$

определяющие параметры пленки в точке абсолютного минимума функционала S_0 обратной задачи, имеют одинаковые значения для любого углового комплекса, и эти значения совпадают с точными значениями $(d)_{\text{tru}}$ и $(n)_{\text{tru}}$ параметров пленки

$$d_{\min} = (d)_{\text{tru}}, \quad n_{\min} = (n)_{\text{tru}}. \quad (2)$$

Эта особенность идеальной ситуации может быть записана в виде следующих функциональных соотношений:

$$d_{\min}(\alpha) = \text{const}, \quad n_{\min}(\alpha) = \text{const}, \quad (3)$$

$$d_{\min}(\alpha) = (d)_{\text{tru}}, \quad n_{\min}(\alpha) = (n)_{\text{tru}}, \quad (4)$$

в которых параметр α определяет комплекс углов падения светового пучка (см. [3]), принимая любые возможные значения. В то же время оптимальные значения

$$d_{\text{opt}} \text{ и } n_{\text{opt}} \quad (5)$$

толщины и показателя преломления пленки при тех же точно заданных параметрах подложки совпадают с величинами (1), а значит, и с точными значениями $(d)_{\text{tru}}$ и $(n)_{\text{tru}}$ параметров пленки не на всех комплексах углов падения светового пучка. Это означает, что предельный переход к идеальному случаю

$$d_{\text{opt}} \rightarrow (d)_{\text{tru}}, \quad n_{\text{opt}} \rightarrow (n)_{\text{tru}} \quad (6)$$

при использовании методов решения математически некорректной задачи реализуется не для любого углового комплекса. В работе [3] на ряде

примеров показано, что существует только один угловой комплекс, на котором реализуется предельный переход (6). Вводя для параметра α , соответствующего этому основному угловому комплексу, обозначение α_0 , перепишем выражения (6), определяющие предельный переход к идеальной ситуации, в более конкретной форме:

$$d_{\text{opt}}(\alpha_0) \rightarrow (d)_{\text{ту}}, \quad n_{\text{opt}}(\alpha_0) \rightarrow (n)_{\text{ту}}. \quad (7)$$

Без учета описанных свойств угловых комплексов возможны ошибки в определении параметров отражающей системы, дополняющие ошибки, обусловленные погрешностями в измерении поляризационных углов Ψ и Δ , а также отклонениями от модели однослойного образца. Такого рода ошибки при произвольном выборе углового комплекса возникают и в идеальной ситуации, т. е. они носят универсальный характер. От них можно избавиться только при правильном выборе основного комплекса углов падения светового пучка. Однако правильный выбор основного углового комплекса связан с изучением некоторого множества угловых комплексов. При этом возникают дополнительные возможности в решении математически некорректной обратной задачи эллипсометрии.

В работе [3] подробно описаны основные положения методики, предназначенной для выбора основного углового комплекса. Суть этой методики сводится следующему. Обратная задача решается на некотором множестве угловых комплексов. При этом решение разбивается на два этапа. На первом этапе обратная задача решается относительно оптических параметров подложки n_0 и κ_0 . Решением будут те значения этих параметров, которые обеспечивают минимальный разброс величин d_{min} и n_{min} , определяемых в точке абсолютного минимума функционала S_0 , по угловым комплексам множества. На втором этапе по значениям оптических параметров подложки, обеспечивающим указанную минимизацию, для каждого углового комплекса находятся оптимальные значения d_{opt} и n_{opt} параметров пленки. Основным будет тот угловой комплекс, для которого выполняются соотношения

$$d_{\text{opt}} \approx d_{\text{min}}, \quad n_{\text{opt}} \approx n_{\text{min}}. \quad (8)$$

Если соотношения (8) не выполняются ни для одного углового комплекса множества, то данное множество необходимо расширить. Найденный описанным способом основной угловой комплекс одновременно определяет и параметры d и n , совпадающие с указанными в (8) величинами.

Таким образом, решение обратной задачи на

множестве угловых комплексов позволяет избежать ошибок, обусловленных неправильным выбором основного комплекса. Кроме того, использование множества угловых комплексов приводит к дополнительным возможностям в решении обратной задачи. Прежде всего это касается определения оптических параметров n_0 и κ_0 подложки, особенно коэффициента поглощения. Прежний подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии сталкивается с некоторыми трудностями в определении коэффициента поглощения подложки. Однако приведенная в работе [3] схема решения обратной задачи на множестве угловых комплексов нуждается в более детальной разработке. Это связано с тем, что выбор оптических параметров подложки, при котором реализуются условия (3), не является однозначным. По этой причине, а также ввиду некоторой неопределенности в отношении структуры поверхности реальных объектов для детальной разработки метода целесообразно использовать численный эксперимент с моделированием экспериментальных ошибок в поляризационных углах. Данная задача является основной целью настоящей работы. При этом для выявления в чистом виде некоторых закономерностей будет рассмотрен также и идеальный случай.

1. РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ НА МНОЖЕСТВЕ УГЛОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ДЛЯ ИДЕАЛЬНОГО СЛУЧАЯ

Идеальный случай рассмотрим на примере численного эксперимента для той же модели однослойной отражающей системы, что и в предыдущих работах. Параметры системы имеют значения

$$d = 2.50 \text{ нм}, \quad n = 1.50; \quad (9)$$

$$n_0 = 3.865, \quad \kappa_0 = 0.023. \quad (10)$$

Длина световой волны определяется значением $\lambda = 632.8 \text{ нм}$. Изучается идеальный случай, поэтому экспериментальные ошибки не моделируются и рассчитанные поляризационные углы строго соответствуют параметрам (9) и (10) однослойной системы. Будем предполагать, что неизвестны все 4 параметра данного отражающего объекта. В этом случае из-за сверхмалой толщины пленки, несмотря на идеальную ситуацию, возникают значительные трудности в решении обратной задачи относительно всех параметров системы. Главная особенность этого случая, как показано в работе [4], состоит в том, что конечный результат решения обратной задачи в значительной степени определяется выбором начальной точки по показателю преломления n пленки и практически не зависит

от выбора начальных значений остальных параметров. Это проявляется в том, что в процессе решения обратной задачи параметр n сначала несколько удаляется от своего начального значения, а затем возвращается к нему, оставаясь до окончания вычислительного процесса в непосредственной близости от него. Что касается остальных параметров, то их конечные значения фактически определяются выбором начального значения параметра n . Причем характер данного процесса остается неизменным при любом выборе начального значения показателя преломления пленки. Таким образом, при определении полного набора параметров отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой особенности обратной задачи обусловлены не только экспериментальными ошибками в поляризационных углах и неточным выбором модели системы. Они имеют место и в идеальном случае, когда нет ошибок ни в эксперименте, ни в выборе модели. И связано это со сверхмалой толщиной пленки. По этой причине к решению обратной задачи для рассматриваемого в настоящей работе идеального случая целесообразно подходить с тех же позиций, что и для случая с экспериментальными ошибками в поляризационных углах. В этом случае использование идеальной ситуации поможет более четко проследить закономерности, имеющие место при решении обратной задачи на множестве угловых комплексов.

Рассмотрим приведенное в работе [3] множество комплексов углов падения светового пучка на образец, в котором N_f углов каждого комплекса определяются соотношениями

$$\varphi_0[i] = \begin{cases} \varphi_{0b} + (i-1)h, & i = 1, \dots, (N_f - 2); \\ \varphi_0[N_f - 2] + h_1, & i = (N_f - 1); \\ \varphi_{0f} + \alpha, & i = N_f, \end{cases} \quad (11)$$

где φ_{0b} и $\varphi_{0f} + \alpha$ — это начальный и конечный углы каждого комплекса; h — шаг прохождения от угла $\varphi_0[1]$ к углу $\varphi_0[N_f - 2]$; h_1 — шаг от угла $\varphi_0[N_f - 2]$ к углу $\varphi_0[N_f - 1]$. Параметры φ_{0b} , φ_{0f} , h , h_1 и N_f имеют одни и те же значения для каждого углового комплекса, переменным является только параметр α . Это означает, что последовательность углов

$$\varphi_0[1], \dots, \varphi_0[N_f - 1] \quad (12)$$

сохраняется для всех комплексов, меняется только за счет переменного параметра α конечный угол

$\varphi_0[N_f]$. Постоянные величины из соотношений (11) определим значениями

$$\begin{aligned} \varphi_{0b} &= 50.50^\circ, \quad h = 2.00^\circ, \quad h_1 = 1.00^\circ, \\ \varphi_{0f} &= 74.00^\circ, \quad N_f = 14. \end{aligned} \quad (13)$$

Меняя значения параметра α , а значит, и конечного угла $\varphi_0[N_f]$, мы изменяем и угловой комплекс, для которого в работе [3] принято обозначение $F(\alpha)$. Ограничимся рассмотрением множества угловых комплексов

$$M = \{F(\alpha_1), \dots, F(\alpha_7)\}, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0.00; \quad \alpha_2 = 0.20; \quad \alpha_3 = 0.25; \quad \alpha_4 = 0.30; \\ \alpha_5 &= 0.35; \quad \alpha_6 = 0.40; \quad \alpha_7 = 0.50. \end{aligned} \quad (15)$$

Оптимальные значения параметров пленки

$$d_{\text{opt}}(\alpha), \quad n_{\text{opt}}(\alpha) \quad (16)$$

в работе [3] определены на угловых комплексах множества (14) при точно заданных параметрах n_0 и κ_0 подложки. В этой ситуации каждая из кривых (16) пересекает одну из соответствующих прямых (3), (4) в одной точке $\alpha = \alpha_0$, определяя точные значения параметров пленки (см. (7) и (8)). Однако обратная задача, разбиваясь на два этапа, решается относительно всех параметров отражающей системы. На первом этапе она решается относительно оптических параметров n_0 и κ_0 подложки. Что касается параметров пленки, то на первом этапе они не подлежат определению, хотя на самом деле, определив параметры подложки, мы вплотную подходим к определению параметров пленки. Тем не менее разбиение на два этапа имеет определенный смысл.

На первом этапе для параметров пленки интерес представляют только их значения (1) в точке абсолютного минимума функционала S_0 , а также оптимальные значения (5). При этом как минимальные, так и оптимальные значения параметров пленки определяются для каждого углового комплекса множества M (см. (14)), причем при произвольных в общем случае значениях параметров подложки. Точнее, значения параметров подложки предварительно принимаются такими, чтобы соответствующие минимальные значения параметров пленки не казались слишком уж нереальными. Прежде всего это относится к выбору показателя преломления n_0 подложки. В этих условиях, чтобы найти оптимальные значения параметров подложки, необходимо прежде всего выяснить основ-

ные свойства минимальных и оптимальных значений параметров пленки, связанные с характером их зависимости от параметров подложки. Это очень важный момент, поэтому остановимся на нем подробнее.

1.1. Основные свойства минимальных и оптимальных значений параметров пленки

Рассмотрим две точки. Одна из них

$$(d_{\min}, n_{\min}) \quad (17)$$

образована минимальными значениями, а вторая

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

оптимальными значениями параметров пленки. Из предыдущих работ следует, что точка (17) очень подвижна даже при слабом изменении показателя преломления подложки. В то же время точка оптимальных значений (18) обладает ограниченной подвижностью. Это обеспечивает переход точки минимума через точку оптимальных значений с последующим расхождением этих точек. Такая особенность данных точек и ее использование для решения математически некорректной обратной задачи в сжатой форме описаны во введении к работе [3]. Однако здесь необходимо сделать существенное уточнение, связанное в первую очередь с поведением составляющих каждой из точек (17) и (18) при изменении не только показателя преломления, но также и коэффициента поглощения подложки. Имея в виду модель отражающей системы (9) и (10), остановимся сначала на поведении величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$, соответствующих какому-то одному угловому комплексу. Основной вклад в изменение величины $n_{\min}$ вносит показатель преломления n_0 подложки. Например, при любом значении коэффициента κ_0 из интервала

$$\kappa_0 \in (0.00, 0.040) \quad (19)$$

изменение показателя n_0 в пределах интервала

$$n_0 \in (3.864, 3.866) \quad (20)$$

сказывается на величине $n_{\min}$ значительно сильнее, нежели изменение коэффициента κ_0 в пределах интервала (19) при любом фиксированном значении параметра n_0 из интервала (20). Более того, для случая сверхтонкой пленки (9) выход параметра n_0 за пределы интервала (20), как правило, приводит к явно нереальным значениям величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$. Относительно величины $d_{\min}$ можно сказать, что вклад параметров n_0 и κ_0 в изменение данной величины сравним, хотя большую роль

играет все-таки параметр n_0 . Что касается оптимальных значений d_{opt} и n_{opt} , то их зависимость от параметров n_0 и κ_0 подложки носит другой характер. Произвольно меняя параметры n_0 и κ_0 в пределах интервалов (19) и (20), мы наблюдаем для каждого углового комплекса, весьма малое изменение величины n_{opt} , в основном оно проявляется лишь в четвертом знаке после запятой. А вот величина d_{opt} более подвижна. При любом заданном значении коэффициента κ_0 из интервала (19) влияние показателя n_0 на данную величину также незначительно. Однако при фиксированном в пределах интервала (20) значении n_0 наблюдается заметное влияние коэффициента κ_0 на изменение величины d_{opt} . Используя отмеченные свойства минимальных и оптимальных значений параметров пленки, рассмотрим процесс определения оптимальных значений параметров подложки.

Процесс определения оптимальных значений параметров подложки начинается с выбора начального значения показателя преломления n_0 подложки. Основное требование при этом сводится к тому, чтобы выбранное начальное значение приводило к физически разумным значениям величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$. В рассматриваемом случае это обеспечивается выбором параметра n_0 в пределах интервала (20). После этого устанавливается набор значений коэффициента поглощения κ_0 . В качестве такого набора, например, выбираем

$$\kappa_0 = 0.015, 0.020, 0.022, 0.023, \\ 0.024, 0.026, 0.030. \quad (21)$$

Затем для каждого значения κ_0 из набора (21) рассматривается процесс движения к точке абсолютного минимума функционала S_0 . Этот процесс определяет, причем для всех угловых комплексов из множества (14), минимальные значения $d_{\min}$ и $n_{\min}$, а также оптимальные значения d_{opt} и n_{opt} . В целях наглядности для минимальных и оптимальных значений параметров пленки введем следующие функциональные зависимости

$$d_{\min}(F(\alpha_i); n_0, \kappa_0), \quad n_{\min}(F(\alpha_i); n_0, \kappa_0), \quad (22)$$

$$d_{\text{opt}}(F(\alpha_i); n_0, \kappa_0), \quad n_{\text{opt}}(F(\alpha_i); n_0, \kappa_0), \\ i = 1, 2, \dots, 7. \quad (23)$$

Выражения (22) и (23) показывают зависимость минимальных и оптимальных значений параметров пленки от угловых комплексов при заданных

значениях показателя преломления n_0 и коэффициента поглощения κ_0 подложки. Причем прежде всего задается начальное значение показателя n_0 , при котором последовательно фиксируются значения коэффициента κ_0 из набора (21). При этом для каждой пары (n_0, κ_0) минимальные и оптимальные значения параметров пленки находятся для всех угловых комплексов множества (14). Иначе говоря, функциональные зависимости (22) и (23), найденные расчетным путем, определяют совокупность минимальных и оптимальных значений параметров пленки, соответствующих паре (n_0, κ_0) , в которой параметры n_0 и κ_0 задаются указанным выше способом.

В идеальном случае обратная задача может решаться с использованием двух разных подходов. Один из них основан на преимущественном использовании минимальных значений $d_{\min}$ и $n_{\min}$, во втором же подходе основную роль играют оптимальные значения d_{opt} и n_{opt} параметров пленки. Рассмотрим оба подхода.

1.2. Первый подход к решению обратной задачи

В этом подходе основную роль играют минимальные значения параметров пленки. В связи с этим введем величины

$$\delta d_{\min}(n_0, \kappa_0), \quad \delta n_{\min}(n_0, \kappa_0), \quad (24)$$

определяющие для каждой пары (n_0, κ_0) разброс минимальных значений параметров пленки по угловым комплексам множества (14). Величины (24) очень важны для установления оптимальных значений параметров подложки, а затем и оптимальных значений параметров пленки. Поэтому рассмотрим основные свойства этих величин. Эти свойства связаны с существованием некоторого граничного значения $(\kappa_0)_{gr}$ для коэффициента поглощения подложки. Для величин (24) относительно данного граничного значения имеют место следующие соотношения:

$$\left. \begin{aligned} \delta d_{\min}(n_0, \kappa_0) &= 0 && \text{при } \kappa_0 = (\kappa_0)_{gr}, \\ \delta d_{\min}(n_0, \kappa_0) &\neq 0 && \text{при } \kappa_0 \neq (\kappa_0)_{gr}, \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

и аналогично для второй величины из (24)

$$\left. \begin{aligned} \delta n_{\min}(n_0, \kappa_0) &= 0 && \text{при } \kappa_0 = (\kappa_0)_{gr}, \\ \delta n_{\min}(n_0, \kappa_0) &\neq 0 && \text{при } \kappa_0 \neq (\kappa_0)_{gr}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

В данных выражениях отличие величин (24) от нуля увеличивается с удалением параметра κ_0 от его граничного значения. Справедливость соот-

ношений (25) и (26) устанавливается расчетным путем. Для этого фиксируется начальный параметр n_0 , и последовательно проверяются на предмет выявления нулевых значений величин (24) значения параметра κ_0 из набора (21). Значение параметра κ_0 , при котором величины (24) обращаются в нуль, определяет граничное значение $(\kappa_0)_{gr}$. Это граничное значение, определяемое в процессе решения обратной задачи, в идеальном случае совпадает с точным значением коэффициента поглощения подложки

$$(\kappa_0)_{gr} = (\kappa_0)_{\text{тн}}. \quad (27)$$

Однако данное граничное значение в стадии его определения в какой-то степени зависит от выбора начального значения параметра n_0 и плотности набора (21), т. е. первоначально оно определяется не по нулевым, а по некоторым минимальным ненулевым значениям величин (24). А это означает, что в этом случае для пары $(n_0, (\kappa_0)_{gr})$ величины $d_{\min}$ и $n_{\min}$ имеют некоторый отличный от нуля разброс по угловым комплексам. Неточность, связанная с дискретностью набора (21), очевидно, устраняется легко, если задается конкретная допустимая величина этой неточности. И тогда можно считать, что для уточненной пары $(n_0, (\kappa_0)_{gr})$ величины $d_{\min}$ и $n_{\min}$ имеют одинаковые значения на всех угловых комплексах множества (14). Но эти значения в общем случае не совпадают с точными значениями параметров пленки, причем такое несовпадение при выборе начального значения n_0 из интервала (20) может быть весьма значительным. В такой ситуации задача состоит в том, чтобы приблизить параметр n_0 к его точному значению и одновременно уточнить граничное значение $(\kappa_0)_{gr}$, а вместе с ним (см. (27)) и коэффициент поглощения κ_0 подложки.

Для уточнения параметра n_0 используем значения функционала S_0 в точке абсолютного минимума этого функционала. Значение функционала, достигнутое на начальной стадии, когда граничное значение $(\kappa_0)_{gr}$ определяется при произвольном выборе в пределах интервала (20) параметра n_0 , обозначим S_{0b} . Величина S_{0b} зависит от углового комплекса множества (14), и определяться она должна по своему минимальному значению на одном из комплексов при значении коэффициента поглощения

$$\kappa_0 = (\kappa_0)_{gr}. \quad (28)$$

Фиксируя указанное в (28) значение κ_0 , изменяем, начиная от начального значения, параметр n_0 таким образом, чтобы функционал при выполнении условия

$$S_0 < S_{0b} \quad (29)$$

монотонно уменьшался. В результате при некотором значении параметра n_0 и значении (28) коэффициента κ_0 достигается некоторое минимальное значение S_0 , соответствующее одному из угловых комплексов. Значение параметра n_0 , при котором заканчивается процесс уменьшения функционала S_0 , обозначим n_{0e} . После этого, фиксируя параметр n_0

$$n_0 = n_{0e}, \quad (30)$$

уточняем и граничное значение $(\kappa_0)_{gr}$. Для этого используется изложенная выше процедура. Процесс уточнения граничного значения $(\kappa_0)_{gr}$ сопровождается дальнейшим уменьшением величины функционала S_0 . Очевидно, при фиксировании параметров подложки на значениях, определяемых уточненными величинами $(\kappa_0)_{gr}$ и n_{0e} , на всех угловых комплексах достигаются нулевые значения величин $\delta d_{\min}(n_0, \kappa_0)$ и $\delta n_{\min}(n_0, \kappa_0)$. А это означает, что всем угловым комплексам множества (14) в этом случае соответствуют одинаковые значения $d_{\min}$ и $n_{\min}$. И поскольку в данной ситуации функционал S_0 достигает наименьшего значения, то процесс по определению параметров подложки можно считать завершенным. Параметры подложки в этом случае определяются уточненными величинами $(\kappa_0)_{gr}$ и n_{0e} (см. (28) и (30)). В принципе они могут сколь угодно мало отличаться от своих точных значений (10). В такой ситуации минимальные значения $d_{\min}$ и $n_{\min}$, одинаковые для всех угловых комплексов, определяют практически точные значения (9) параметров пленки. Как уже отмечалось [4], даже в идеальном случае отражающей системы со сверхтонкой пленкой возникают значительные трудности в определении всех 4 параметров этой системы. Эти трудности обусловлены использованием традиционного подхода к решению обратной задачи. В то же время изложенный здесь подход к решению обратной задачи, использующий множество угловых комплексов, позволяет успешно решить данную задачу. И здесь очень важно, что если основной интерес представляет именно идеальный случай или же очень близкий к нему, то нет необходи-

мости d_{opt} и n_{opt} параметров пленки. Однако нас интересует переход к реальному случаю, поэтому необходимо вспомнить об оптимальных значениях параметров пленки. Среди угловых комплексов множества (14) существует такой комплекс, которому отвечают оптимальные значения параметров пленки, практически, совпадающие с найденными минимальными значениями $d_{\min}$ и $n_{\min}$, а значит, и сточными значениями параметров пленки. Существование такого основного комплекса подтверждает правильность результатов, полученных в рамках изложенного здесь подхода.

1.3. Второй подход к решению обратной задачи

В данном подходе основную роль играют оптимальные значения параметров пленки. Приведенные в подразделе 1.1 функциональные зависимости (23) определяют совокупность оптимальных значений параметров пленки, соответствующих паре (n_0, κ_0) , в которой параметры n_0 и κ_0 задаются указанным выше способом. Совокупность оптимальных значений при заданной паре (n_0, κ_0) находится для всех угловых комплексов множества (14). При этом составляющая n_{opt} этой совокупности весьма слабо зависит от параметров n_0 и κ_0 подложки. Что касается составляющей d_{opt} , то при заданном параметре κ_0 она слабо зависит от параметра n_0 , но заметно меняется с изменением величины κ_0 .

Как и в первом подходе, фиксируется начальный параметр n_0 , и последовательно задаются значения параметра κ_0 из набора (21). Будем исходить из того, что существует угловой комплекс из множества (14), которому на одной из пар (n_0, κ_0) соответствуют оптимальные значения, практически совпадающие с точными значениями параметров пленки

$$\begin{aligned} d_{\text{opt}}(F(\alpha_i), n_0, \kappa_0) &\approx (d)_{\text{tru}}; \\ n_{\text{opt}}(F(\alpha_i), n_0, \kappa_0) &\approx (n)_{\text{tru}}. \end{aligned} \quad (31)$$

Рассмотрим обратный процесс, когда по оптимальным значениям (31) рассчитываются путем соответствующей минимизации функционала S_0 значения n_0 и κ_0 . При этом расчет идет для всех угловых комплексов множества (14), включая и тот, на котором выполняются соотношения (31). Значения параметров подложки, найденные таким путем, обозначим

$$n_{0\min}, \kappa_{0\min}. \quad (32)$$

Очевидно, в идеальном случае разброс по угловым комплексам величин $n_{0\min}$, $\kappa_{0\min}$, рассчитанных по оптимальным значениям (31), практически равен нулю

$$\delta n_{0\min} \approx 0, \delta \kappa_{0\min} \approx 0. \quad (33)$$

Однако мы не знаем заранее, на каком угловом комплексе и на какой паре (n_0, κ_0) значений параметров подложки реализуется описанный процесс. Эта проблема решается следующим образом: задается пара (n_0, κ_0) . Для нее по оптимальным значениям, соответствующим одному из угловых комплексов, рассчитываются, причем для всех угловых комплексов, значения $n_{0\min}$ и $\kappa_{0\min}$ параметров подложки и определяется разброс $\delta n_{0\min}$ и $\delta \kappa_{0\min}$ этих значений по угловым комплексам. Этот процесс при заданной паре (n_0, κ_0) повторяется для каждого углового комплекса множества (14). В результате получаем совокупность значений

$$\{(\delta n_{0\min}, \delta \kappa_{0\min})\}. \quad (34)$$

В этой совокупности каждая пара, определяя разброс величин $n_{0\min}$ и $\kappa_{0\min}$ по угловым комплексам множества (14), соответствует одному из угловых комплексов этого множества. Из совокупности (34) выбирается та пара значений, которая определяет минимальный разброс величин $n_{0\min}$ и $\kappa_{0\min}$ по угловым комплексам. Тем самым выбирается и соответствующий угловой комплекс, а значит, и отвечающие ему оптимальные значения d_{opt} и n_{opt} . Совокупность значений (34) находится для каждой пары (n_0, κ_0) из числа рассматриваемых пар, и для каждой такой пары определяется угловой комплекс, на котором реализуются оптимальные значения d_{opt} и n_{opt} , обеспечивающие минимальный разброс величин $n_{0\min}$ и $\kappa_{0\min}$ по угловым комплексам. В итоге, сравнивая результаты, полученные для всех пар (n_0, κ_0) , находим из их числа главную пару. Ей отвечает основной угловой комплекс с оптимальными значениями d_{opt} и n_{opt} , обеспечивающими наименьший (из общего числа минимальных разбросов) разброс величин $n_{0\min}$ и $\kappa_{0\min}$ по угловым комплексам. В идеальном случае этот наименьший разброс, отвечающий основному угловому комплексу главной пары (n_0, κ_0) , стремится к нулю

$$\delta n_{0\min} \rightarrow 0, \delta \kappa_{0\min} \rightarrow 0. \quad (35)$$

На этом заканчивается решение обратной зада-

чи для идеального случая с использованием второго подхода. Это решение реализуется на основном угловом комплексе главной пары, определяя оптимальные значения параметров подложки и пленки, практически совпадающие для выбранной отражающей системы с точными значениями (9) и (10). Здесь необходимо сделать следующее уточнение. Параметры пленки очевидно определяются оптимальными значениями (31) на основном угловом комплексе главной пары (n_0, κ_0) . Что касается параметров подложки, то они находятся по значениям $n_{0\min}$ и $\kappa_{0\min}$, отвечающим основному угловому комплексу главной пары (n_0, κ_0)

$$n_0 = n_{0\min}, \kappa_0 = \kappa_{0\min}. \quad (36)$$

Возникает вопрос, связанный со значениями параметров главной пары (n_0, κ_0) . Как и в первом подходе, в процессе решения они уточняются. Однако главное уточнение касается коэффициента поглощения κ_0 и параметра α , определяющего основной угловой комплекс. Уточнение показателя преломления n_0 носит подчиненный характер. Величина n_0 подстраивается к процессу уточнения параметров κ_0 и α , связанному с использованием описанной выше обратной процедуры. Это связано со слабой зависимостью оптимальных значений параметров пленки от показателя n_0 . Мы не будем подробно описывать процесс уточнения величин κ_0 и α . Отметим только, что он подобен процессу уточнения параметров n_0 и κ_0 , подробно описанному в предыдущем подразделе, но уже без использования величины функционала S_0 .

Важно также отметить, что на основном угловом комплексе наблюдается правильный предельный переход. При таком переходе минимальные значения $d_{\min}$ и $n_{\min}$, одинаковые для всех угловых комплексов главной пары (n_0, κ_0) , совпадают с оптимальными значениями d_{opt} и n_{opt} на основном угловом комплексе. Причем эти минимальные значения рассчитываются по найденным значениям параметров подложки (см. (36)) путем минимизации функционала S_0 . Это тот момент, который является общим для обоих подходов к решению обратной задачи.

2. РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ НА МНОЖЕСТВЕ УГЛОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ДЛЯ РЕАЛЬНОГО СЛУЧАЯ

Реальный случай рассмотрим на примере однослойной отражающей системы с параметрами (9) и (10). Поляризационные углы этой системы рас-

считаны для угловых комплексов множества (14). Моделирование экспериментальных ошибок в поляризационных углах носит случайный характер. При этом максимальные отклонения (в ту или другую сторону) поляризационных углов от их точных значений определяются величинами ξ_0 и η_0 . Для этих величин принимаем значения

$$\xi_0 = \eta_0 = 10 \text{ мин.} \quad (37)$$

Ошибки в поляризационных углах, обусловленные значениями (37), в эллипсометрии относятся к разряду больших ошибок. Причем их роль значительно возрастает в связи со сверхмалой толщиной пленки.

В настоящей работе мы не ставим задачу доведения численного эксперимента, основанного на моделировании экспериментальных ошибок, до конкретных чисел. Распределение "экспериментальных" ошибок при заданных величинах ξ_0 и η_0 может быть самым разным. По этой причине мы ограничимся здесь общими результатами проведенного анализа.

2.1. Общие результаты анализа

Сразу отметим, что первый подход к решению обратной задачи для рассматриваемого случая в связи с принятыми здесь большими "экспериментальными" ошибками в поляризационных углах не может быть использован. Эти ошибки при точно заданном параметре n_0 и при любых значениях параметра κ_0 из набора (21) приводят, причем на всех угловых комплексах, к следующим значениям величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$:

$$d_{\min} > 4.00 \text{ нм}, \quad n_{\min} < 1.20. \quad (38)$$

Неравенства (38) очевидно указывают на выраженную математическую некорректность обратной задачи в рассматриваемом случае. В этих условиях необходимо дать оценку двум разным подходам к решению обратной задачи.

Значения величин $d_{\min}$ и $n_{\min}$, определяемые неравенствами (38), подавляют отмеченные для первого подхода закономерности в поведении данных величин. Поэтому попытки использования первого подхода к решению обратной задачи наталкиваются на значительные трудности. Эти трудности связаны с подбором оптических параметров подложки, прежде всего показателя преломления n_0 . Такого рода трудности можно было бы обойти, обратившись к обратному процессу, ведущему от оптимальных значений d_{opt} и n_{opt} к параметрам подложки n_0 и κ_0 . Но это уже выход на второй подход к решению обратной задачи.

В связи с этим остановимся на характере зависимости оптимальных значений d_{opt} и n_{opt} параметров пленки от оптических параметров подложки. Для рассматриваемого случая эта зависимость остается практически такой же, как и в описанной выше идеальной ситуации. Оптимальное значение n_{opt} для любого углового комплекса очень слабо зависит от параметров n_0 и κ_0 подложки. В то же время оптимальное значение d_{opt} при заданном коэффициенте поглощения κ_0 также слабо зависит от показателя n_0 , но заметно меняется с изменением величины κ_0 . Отличие от идеального случая проявляется только на величине параметров d_{opt} и n_{opt} . Если параметр n_{opt} практически не меняется при уходе от идеальной ситуации, то d_{opt} , наоборот, изменяется заметно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы не останавливаемся здесь на деталях, связанных с решением обратной задачи для реального случая. Отметим только, что в рассматриваемом случае, когда "экспериментальные" ошибки в поляризационных углах приводят к выраженной математической некорректности обратной задачи, второй подход к решению обратной задачи полностью оправдывает себя. Это проявляется не только в относительной простоте процесса решения, но и в большой точности, с которой определяются все 4 параметра отражающей системы. Однако необходимо обратить внимание на главную причину таких результатов. Основные преимущества рассмотренного способа решения математически некорректной обратной задачи в первую очередь связаны с привлечением множества угловых комплексов, т. е. множества наборов углов падения светового пучка на образец. В работе, посвященной исследованию реальных образцов со сверхтонкими пленками, процесс решения обратной задачи на множестве угловых комплексов будет рассмотрен детально.

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. 2012. Т. 22, № 1. С. 44–51.
3. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2012. Т. 22, № 4. С. 30–37.
4. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 1. С. 103–113.

Украина, г. Сумы (Семененко А.И.)

Первый Московский государственный медицинский
университет им. И.М. Сеченова (Семененко И.А.)

Контакты: Семененко Альберт Иванович,
Sem199@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 31.10.2012

FEASIBILITY AND PRACTICAL SUPPLEMENT OF SOLUTION METHODS FOR MATHEMATICALLY INCORRECT INVERSE PROBLEM OF ELLIPSOMETRY.

2. ON SOLUTION OF INVERSE PROBLEM ON MULTIPLE SET OF LIGHT BEAM ANGLE OF INCIDENCE

A. I. Semenenko¹, I. A. Semenenko²

¹Sumy, Ukraine

²I.M. Sechenov First Moscow State Medical University

The method for the mathematically incorrect inverse task of ellipsometry, based on the use of some set of sets angles of incidence of a light bunch on the sample is considered is discussed. It was shown, that the solution of the inverse task on set of angles of incidence results in a relative simplicity and reliability of the process of solution, and also to increased accuracy with which all four parameters of reflecting system with a super thin film are defined. The offered method of the solution allows to overcome the essential difficulties arising, because of a midget thickness of a film, and in an ideal case when there are no experimental errors, but the traditional approach to the solution of an inverse problem concerning all 4 parameters of single-layered reflecting system is used.

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