УДК 681. 785. 35

Решение обратной задачи эллипсометрии для некоторых модельных диэлектрических систем неоднородная пленка — подложка / В. Е. Белецкий, О. А. Шептунов // Научное приборостроение. — 1992. — Т. 2. — N 1. — С. 68-73.

Рассмотрена методика решения обратной задачи эллипсометрии, связанная с обращением вариационного метода Швингера, используемого при решении прямой задачи, демонстрируется ее характеристики и возможности применения. Библ. — 3 назв. Ил. — 2.

В.Е. Белецкий, О.А. Шептунов
(Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург)

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ МОДЕЛЬНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СИСТЕМ НЕОДНОРОДНАЯ ПЛЕНКА – ПОДЛОЖКА

При исследовании методами эллипсометрии диэлектрической системы *неоднородная пленка – подложка* встает задача восстановления ее физических параметров. При этом существуют два основных аспекта этой проблемы. Во-первых, исследователей интересует характер возникающего переходного слоя в зависимости, например, от изменений условий обработки объекта (чистка, полировка, травление), условий его роста в эпитаксиальных или вакуумных камерах и т.д. При этом параметры однородной подложки считаются известными. Второй аспект касается проблемы более точного определения параметров подложки, но уже с учетом наличия на ней неоднородной переходной области в противовес тем параметрам, которые были восстановлены при игнорировании такой модели. В любом случае более корректное описание изучаемых структур определяет в дальнейшем оптимизацию их параметров с точки зрения потребностей исследователя.

Наличие хорошо разработанных методов решения прямой задачи эллипсометрии, учитывающей присутствие неоднородного поверхностного слоя, еще не гарантирует обратимости этих методов при реализации обратной задачи. В настоящей статье рассмотрена методика решения обратной задачи эллипсометрии, связанная с обращением вариационного метода Швингера, используемого при решении прямой задачи, демонстрируются ее характеристики и возможности применения.

Выбор модели системы неоднородная пленка – подложка

В работе [1] отмечалось, что рассмотрение неоднородных систем на уровне прямой задачи можно вести, разбивая неоднородный слой на множество однородных, каждый из которых характеризуется своим набором физических параметров. В этом случае, когда исследуемая система представляется в виде многослойной модели, число неизвестных параметров $m = 3M$ весьма велико уже при $M = 2$ (где M – количество слоев), а потому любые численные методы поиска истинного значения этих параметров требуют больших временных затрат и малоустойчивы к ошибкам входных данных в силу большой размерности пространства поиска. Поэтому является целесообразным представление исследуемой системы в виде такой модели, которая учитывала бы некую априорную информацию об исследуемой системе и позволяла таким образом уменьшить по сравнению с многослойной моделью число неизвестных параметров. В этом случае возможно использование модельных неоднородных профилей диэлектрической проницаемости пленки: однородной пленки; линейного профиля (ε, как функция толщины пленки, меняется линейно); экспоненциального профиля (ε возрастает экспоненциально с толщиной пленки).

Можно рассмотреть и другие законы изменения диэлектрической проницаемости в зависимости от толщины слоя. Использование такого подхода позволяет резко снизить число неизвестных параметров для исследуемой системы, например, при рассмотрении диэлектрической неоднородной пленки на диэлектрической подложке число неизвестных варьируется от 2 до 3, и решение обратной задачи уже не видится столь проблематичным, как в случае с многослойной системой.

Постановка обратной задачи

В работе [1] дана постановка прямой задачи при рассмотрении систем *неоднородная пленка – подложка*, которая сводится к определению аналитических выражений для относительного коэффициента отражения ρ при различных моделях функциональной зависимости ε (z) (профиль диэлектрической проницаемости неоднородной пленки). Постановка задачи по решению обратной для рассматриваемой системы сводится, в данном случае, к определению параметров профиля диэлектрической проницаемости неоднородной пленки при неизвестных параметрах подложки по данным эллипсометрических измерений. Как известно, решение обратной задачи эллипсометрии сводится к решению системы нелинейных уравнений; для рассмотренных модельных профилей разного вида количество неизвестных параметров равно двум. В том случае, если диэлектрическая проницаемость подложки также считается неизвестной, общее число параметров, подлежащих восстановлению, увеличивается до трех. Традиционно для решения обратной задачи используется поиск минимума некоторой многомерной функции; вид этой функции может быть различен. Точка минимума целевой функции дает значения искомых параметров, а величина минимума характеризует точность их определения.

Пусть при N углах падения θ_j, $1 \le j \le N$, измеряется комплексный относительный коэффициент отражения $\rho^j_э = \mathrm{tg}\,\psi_j \exp\,(i\Delta_j)$. Выбранная целевая функция имеет вид:

$$F\,(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{j=1}^{N} \left| \, 1 - \rho^j_т / \rho^j_э \, \right| ,$$

где $\rho^j_т = \rho^j_т\,(\,x_1, \ldots, x_n\,)$ – теоретическое значение относительного коэффициента отражения, рассчитываемое на основе формул для вариационного приближения [1] и получаемое при фиксированных значениях параметров $x_1, \ldots, x_n$, которые в то же время являются искомыми при решении обратной задачи.

Методика и алгоритм решения обратной задачи

Основная проблема, стоящая перед исследователем, заключается в выборе метода оптимизации. Подробный численный анализ поверхности $z = F\,(\,x_1, \ldots, x_n\,)$ для профилей различного вида показал, что

знаки собственных чисел матрицы $H\,(\,x\,)$ вторых производных (гессиана) целевой функции

$$(H(x))_{ij} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \, \partial x_j}(x) \right) \quad (1 \le i, j \le n, \ x = (x_1, \ldots, x_n))$$

резко меняются в малой окрестности точки минимума; собственные числа матрицы $H(x)$ положительны только тогда, когда переменные $x_1, \ldots, x_n$ отличаются от своих оптимальных (доставляющих минимум) значений не более чем на 0.01 %;

знаки собственных чисел гессиана целевой функции изменяются во всей области поиска ее минимума.

Следовательно, целевая функция не является выпуклой как в малой окрестности ее минимума, так и во всей области поиска минимума, и, таким образом, классический метод Ньютона неприменим для поиска минимума целевой функции.

На рис. 1 представлен результат графического исследования поверхности $z = F(x_1, \ldots, x_n)$ в виде топограммы сечений этой поверхности плоскостями $x_1 = 1.6$ и $x_2 = 200$. Функция $F(x_1, \ldots, x_n)$ не имеет локальных, а лишь один глобальный минимум, достигающийся при истинных значениях параметров $x_1, \ldots, x_n$. Он является весьма узким: значения целевой функции меняются на восемь порядков при изменении одного из параметров в восьмом знаке. Поэтому для поиска истинных значений параметров $x_1, \ldots, x_n$ целесообразно предложить комбинированный метод, сочетающий метод покоординатного спуска (где координаты — искомые параметры $x_1, \ldots, x_n$) и сеточный. Этот метод сводится к следующему:

1) задается начальная точка $x^0 = (x_1^0, \ldots, x_n^0)$, индекс k, определяющий номер итерации принимается равным 0;

2) полагается $k = k + 1$;

3) номер координаты i находится из условия:

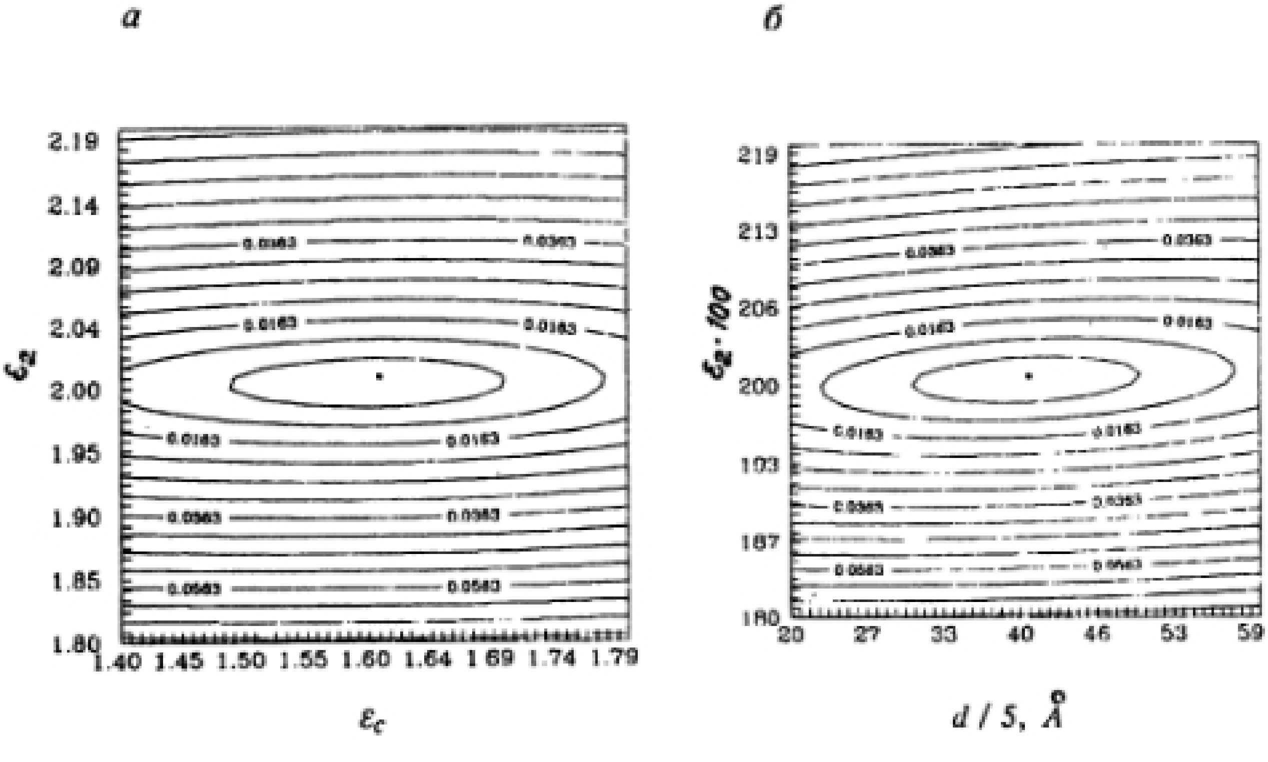

Рис. 1. Топограммы поверхности $z = F(x_1, \ldots, x_n)$ плоскостями: *а* – $d = 200$; *б* – $\varepsilon_c = 1.6$

$$i = \arg\max_j \left| \frac{\partial F}{\partial x_j} \right|, \; 1 \le j \le n ;$$

4) находится граница величины шага $\alpha_{гр}(i)$ по координате x_i в направлении $\partial F / \partial x_i$;

5) новое значение i-й координаты x_i^k вычисляется по формуле:

$$x_i^k(\alpha_k) = x_i^{k-1} - \alpha_k \frac{\partial F}{\partial x_i}(x_1^{k-1}, x_2^{k-1}, \ldots, x_n^{k-1}).$$

Величина шага α_k ищется из условия минимума функции:

$$g(\alpha_k) = F(x_1^{k-1}, \ldots x_{i-1}^{k-1}, x_i^k(\alpha_k), x_{i+1}^{k-1}, \ldots, x_n^{k-1}) ,$$

при этом минимум функции $g(\alpha_k)$ необходимо искать на отрезке $[0, \alpha_{гр}(i)]$ методом половинного деления;

6) если $\alpha_k = 0$, то значение x^k уточняется сеточным методом, в результате чего получается x^* — искомая точка минимума; если нет, то переход на п. 2.

Структура программ

Структура программ, служащих для решения обратной задачи эллипсометрии, имеет одинаковый вид для модельных профилей разного вида. Блок-схема такой программы представлена на рис. 2, где через $F_н$ обозначено новое, а через $F_{ст}$ —старое значения целевой функции в новой $x_н$ и старой $x_{ст}$ точках:

$$F_н = F(x_1^{k-1}, \ldots, x_{i-1}^{k-1}, x_i^k, x_{i+1}^{k-1}, \ldots, x_n^{k-1}), \quad x_н = (x_1^k, \ldots, x_n^k),$$

$$F_{ст} = F(x_1^{k-1}, \ldots, x_{i-1}^{k-1}, x_i^{k-1}, x_{i+1}^{k-1}, \ldots, x_n^{k-1}); \quad x_{ст} = (x_1^{k-1}, \ldots, x_n^{k-1}).$$

Рассмотрим эту блок-схему подробнее на примере программы OBREXP, предназначенной для решения обратной задачи эллипсометрии для выбранного модельного профиля так называемой «медленной экспоненты»: функция $\varepsilon(z)$ диэлектрической проницаемости от толщины пленки z имеет вид ($0 \le z < \infty$, d – характеристическая толщина пленки):

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_1 = 1 ; \; z < 0 \\ \varepsilon_2 + (\varepsilon_c - \varepsilon_2)\exp(-2z/d) ; \; z > 0, \end{cases}$$

где ε_2 – диэлектрическая проницаемость подложки, считающаяся неизвестной исследователю: $\varepsilon_c = x_1$, $d = x_2$, $\varepsilon_2 = x_3$, — искомые параметры. Значения $\rho_т^j$, как было указано, имеют вид:

$$\rho_т^j = \frac{r_p^{\mathrm{var}(j)}}{r_s^{\mathrm{var}(j)}},$$

где $r_p^{\mathrm{var}(j)}$ и $r_s^{\mathrm{var}(j)}$ вычисляются по формулам, представленным в работе [2]. Для удобства вычислений полагаем $x_2 = x_2/100$.

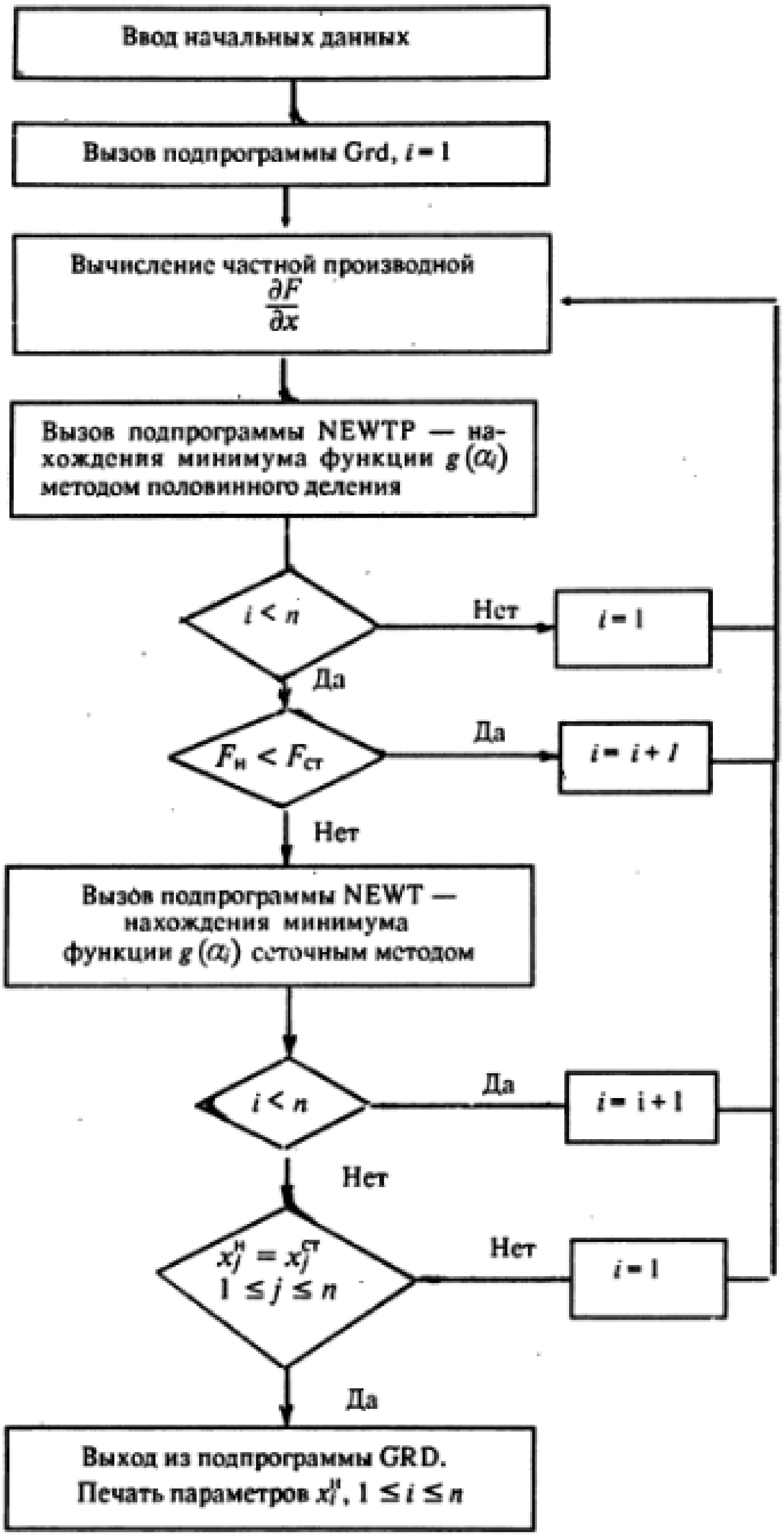

Рис. 2. Блок-схема программы OBREXP

Частные производные $\left|\frac{\partial F}{\partial x_i}\right|$ вычисляются приближенно по формуле

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = \frac{F(x_i + h) - F(x_i - h)}{2h},$$

при этом $h = 0.0001$.

В численном эксперименте в качестве «измеренных» комплексных относительных коэффициентов отражения ρ_3, $j = 1, 2$, взяты решения прямой задачи эллипсометрии для модельного профиля указанного вида на углах падения $\theta_1 = 45^{\circ}$, $\theta_2 = 70^{\circ}$ при следующих истинных значениях параметров x_1, x_2, x_3: $x_1 = 1.6$, $x_2 = 200$ Å, $x_3 = 2.0$. С помощью описанной программы истинные значения параметров ε_c, ε_2 удалось восстановить с точностью 10^{-3} %, а толщину d – с точностью 0.01 Å за время 5 мин на компьютере IBM PC/AT с тактовой частотой 12 МГц с использованием сопроцессора.

Рассмотренная программа нуждается в дальнейшей оптимизации с точки зрения уменьшения временных затрат. При этом не исключена возможность изменения метода поиска минимума целевой функции.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Исследование* вариационного метода Швингера в задаче об отражении поляризованного света от системы неоднородная пленка — подложка/ О. А. Шептунов, Л. М. Асиновский, В. А. Толоконников, А. О.Мишин: Препринт № 18. — НТО АН СССР 1988.

2. *Анализ* применения ряда приближенных методов при рассмотрении системы неоднородная пленка — подложка в эллипсометрии/О. А. Шептунов// Научное приборостроение. —1991. —Т.1, N 4.—С. 47—61.

Рукопись поступила 20.09.91