

УДК 535.5

Решение обратной задачи эллипсометрии по нахождению двух неизвестных параметров неоднородной диэлектрической пленки на известной подложке с использованием модифицированного метода Холмса / О. А. Шептунов // Научное приборостроение. - 1992. - Т.2. - N 2. - С. 15-23.

Предлагается простой способ определения двух неизвестных параметров неоднородной диэлектрической пленки при известной подложке по данным эллипсометрических измерений. При этом конечное уравнение с разделением переменных получено на основе аналитических формул прямой задачи, полученных во втором борновском приближении. Для решения указанного уравнения используется модифицированный метод Холмса. Разработан алгоритм поиска. Приведены численные примеры по восстановлению неизвестных параметров профиля диэлектрической проницаемости неоднородной пленки экспоненциального вида. Исследуется вопрос неоднозначности получаемых решений, обсуждаются пути по ее устранению. Библ.-5 назв. Ил.-3.

О. А. Шептунов

(Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург)

**РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ
ПО НАХОЖДЕНИЮ ДВУХ НЕИЗВЕСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ
НЕОДНОРОДНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ
НА ИЗВЕСТНОЙ ПОДЛОЖКЕ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОГО
МЕТОДА ХОЛМСА**

Часто эллипсометрические исследования поверхностных структур указывают на наличие неоднородного переходного слоя, учет которого может привести к серьезным погрешностям при интерпретации полученных результатов. Поэтому большую практическую значимость приобретают задачи, позволяющие не только описать указанные структуры, но и восстановить их параметры.

Как указывалось в работах [1, 2], рассмотрение неоднородных поверхностных систем целесообразно вести на уровне модельного подхода. В этом случае число неизвестных параметров, описывающих данную структуру, можно значительно уменьшить по сравнению с многослойным представлением. Кроме того, использование приближенных подходов для решения прямой задачи позволяет упростить и ускорить обращение параметров при решении обратной. Для большей определенности последующего изложения в качестве примера модельного подхода рассмотрим подложку с известной диэлектрической проницаемостью ϵ_2 , на которой расположена неоднородная пленка, диэлектрическая проницаемость которой меняется по закону $\epsilon = \epsilon_2 + (\epsilon_c - \epsilon_2) \exp(-2z/d)$ (модель медленно нарастающая экспонента [2], где d — характеристическая толщина неоднородной пленки; ϵ_c — значение диэлектрической проницаемости неоднородной пленки на границе воздух—пленка при $z = 0$).

Если постановка прямой задачи при рассмотрении систем неоднородная пленка—подложка сводится к определению аналитических выражений для комплексного относительного коэффициента отражения ρ , то целью обратной, в данном случае, является определение параметров модельного профиля диэлектрической проницаемости неоднородной пленки в случае, когда параметры подложки считаются известными.

При определении двух параметров однородной диэлектрической пленки в практике эллипсометрии достаточно давно используется "полуаналитический" метод Холмса [3—5]. Его применение возможно в тех случаях, когда аналитически удается отделить один неизвестный параметр от другого. В классическом методе Холмса для диэлектрических систем толщина однородной пленки d разделяется с ее показателем преломления n так, что выполняется следующее уравнение:

$$d = \hat{f}(n), \quad (1)$$

где $\hat{f}(n)$ — комплексная функция от одной переменной n . Поскольку d величина сугубо действительная, поиск истинного значения n осуществляется численным решением уравнения $\text{Im} [\hat{f}(n)] = 0$, при этом искомое значение d легко определяется как $d = \text{Re} [\hat{f}(n^*)]$, где n^* — значение показателя преломления, соответствующее нулевой мнимой части функции $\hat{f}(n)$.

По результатам работ [1, 2] проведены исследования по выявлению возможности разделения переменных для борновского приближения второго порядка и вариационного метода Швингера, которые показали, что получить уравнение, подобное (1), можно только для борновского подхода.

Обозначим ρ_m измеренный относительный коэффициент отражения. Тогда основное уравнение эллипсометрии при использовании второго борновского приближения можно переписать в виде

$$r_s^{\text{pert2}} \rho_m = r_p^{\text{pert2}}.$$

Общие аналитические выражения для коэффициентов отражения r_s^{pert2} и r_p^{pert2} приведены в работе [2]. Результатом разделения переменных при этом является кубическое уравнение с комплексными коэффициентами, зависящими только от толщины пленки d :

$$X^3 + A(d)X^2 + B(d)X + C(d) = 0, \quad (2)$$

где $X = (\epsilon_c - \epsilon_2) / \epsilon_2$; $A(d)$, $B(d)$, $C(d)$ — некоторые коэффициенты, зависящие только от d .

Очевидно, что для каждой из предполагаемых моделей аналитический вид коэффициентов $A(d)$, $B(d)$, $C(d)$ будет свой. Переменная X при этом зависит только от неизвестной ϵ_c — диэлектрической проницаемости на уровне, соответствующем границе воздух — неоднородная пленка. Решением уравнения (2) являются, как известно, три (в общем случае) комплексных корня вида

$$X_1 = T + S - A/3, \quad (3)$$

$$X_2 = (T + S)/2 + i(T - S)\sqrt{3}/2 - A/3, \quad (4)$$

$$X_3 = (T + S)/2 - i(T - S)\sqrt{3}/2 - A/3, \quad (5)$$

где $T = \sqrt[3]{-q/2 + \sqrt{Q}}$; $S = \sqrt[3]{-q/2 - \sqrt{Q}}$; $q = 2(A/3)^3 - AB + C$;
 $Q = (p/3)^3 + (q/2)^3$; $p = -A^2/3 + B$.

Изначально предполагая, что рассматриваемая неоднородная пленка является диэлектрической, необходимо при анализе каждого из корней (3) — (5) предположить, что

$$\text{Im} [X_i(d)] = 0. \quad (6)$$

Таким образом, поиск истинного значения толщины пленки d осуществляется численным решением уравнения (6), а значение неизвестной ϵ_c можно определить через соответствующую реальную часть X :

$$\epsilon_c = \epsilon_2 (1 + \text{Re}(X)). \quad (7)$$

Здесь рассматривается адаптированное применение поискового метода Холмса, при этом основные отличия метода от его классического варианта являются непринципиальными: в классическом варианте задача сводится к

квадратному уравнению, а не к кубическому; численный поиск в нашем случае осуществляется варьированием толщины слоя d , в классическом — n (или ϵ).

По результатам работы [2] можно показать, что для модели медленно нарастающая экспонента коэффициенты A , B , C , входящих в уравнение (2), определяются следующим образом:

$$A = \frac{1}{L} \left[\frac{it_{p0}^2 K^2 \beta_2}{2q_1} + t_{p0}^2 K^2 q_2 \frac{d(\beta_1 - \beta_2)/2 - \beta_2 \beta_1}{2q_1} + \frac{\beta_1^2}{4q_1 q_2} \times \right. \\ \left. \times \left[\omega^4/c^4 t_{s0}^2 \epsilon_2^2 r_{s0} \rho_m + t_{p0}^2 q_2^4 r_{p0} + t_{p0}^2 K^4 r_{p0} - 2t_{p0}^2 K^2 q_2^2 r_{p0} \right] + \right. \\ \left. + d(\beta_1 - \beta_2) \frac{t_{p0}^2 K^4 - \omega^4/c^4 t_{s0}^2 \epsilon_2^2 \rho_m - t_{p0}^2 q_2^4}{4q_1 q_2} \right];$$

$$B = \frac{i}{L} \frac{\beta_1}{2q_1} \left[\omega^2/c^2 t_{s0}^2 \epsilon_2 \rho_m + t_{p0}^2 (q_2^2 - K^2) \right];$$

$$C = (r_{s0} \rho_m + r_{p0})/L,$$

$$L = \frac{t_{p0}^2 K^2}{4q_1 q_2} \left[2r_{p0} \beta_1 \beta_2 (q_2^2 - K^2) - 2q_2^2 [d(\beta_2 - \beta_3)/2 - \beta_3 \beta_1] - \right. \\ \left. - K^2 d(\beta_1 + 2\beta_2 - 3\beta_3)/2 - 2i\beta_3 q_2 \right],$$

где q_1 , q_2 — вертикальные составляющие волнового вектора в воздухе и подложке, соответственно; ω — угловая частота зондирующего излучения в воздухе; c — скорость света; t_{s0} , t_{p0} , r_{s0} , r_{p0} — "невозмущенные" коэффициенты пропускания и отражения для s и p поляризованных волн (при отсутствии неоднородной пленки); K — тангенциальная составляющая волнового вектора; $\beta_k = d/(2k - i2q_k d)$ для $k = 1, \dots, 3$.

При рассмотрении уравнения (2) важным является численное исследование мнимых частей корней (3) — (5) как функций от толщины пленки d . С этой целью на основе указанных формул, а также уравнения (7) составлена программа, в которой в качестве "измеряемого" относительного коэффициента отражения ρ_m на предварительном этапе использовалось значение, полученное из решения прямой задачи с помощью второго борновского приближения. Результатами счета такой программы являлись три массива данных, которые соответствовали функциональным зависимостям мнимых частей трех рассматриваемых корней кубического уравнения от толщины неоднородной пленки.

В качестве примера на рис. 1, а представлены указанные зависимости для случая, когда расчет велся при угле падения $\varphi_1 = 45^\circ$, а параметры неоднородного экспоненциального слоя были следующими: $\epsilon_c = 1.8$, $\epsilon_2 = 2$, $d = 20$ нм. Зависимость $\text{Im}(X_1)$ имеет в данном случае вид функции с экстремумом, не пересекающейся с осью $\text{Im}(X) = 0$, что говорит об отсутствии решения, удовлетворяющего уравнению (6). Напротив, два других монотонно изменяющихся корня такое пересечение имеют: $\text{Im}(X_2) = 0$ имеет решение при $d_2 = 16.1$ нм, а $\text{Im}(X_3) = 0$ — при $d_3 = 20$ нм. Таким образом, в данной ситуации истинное

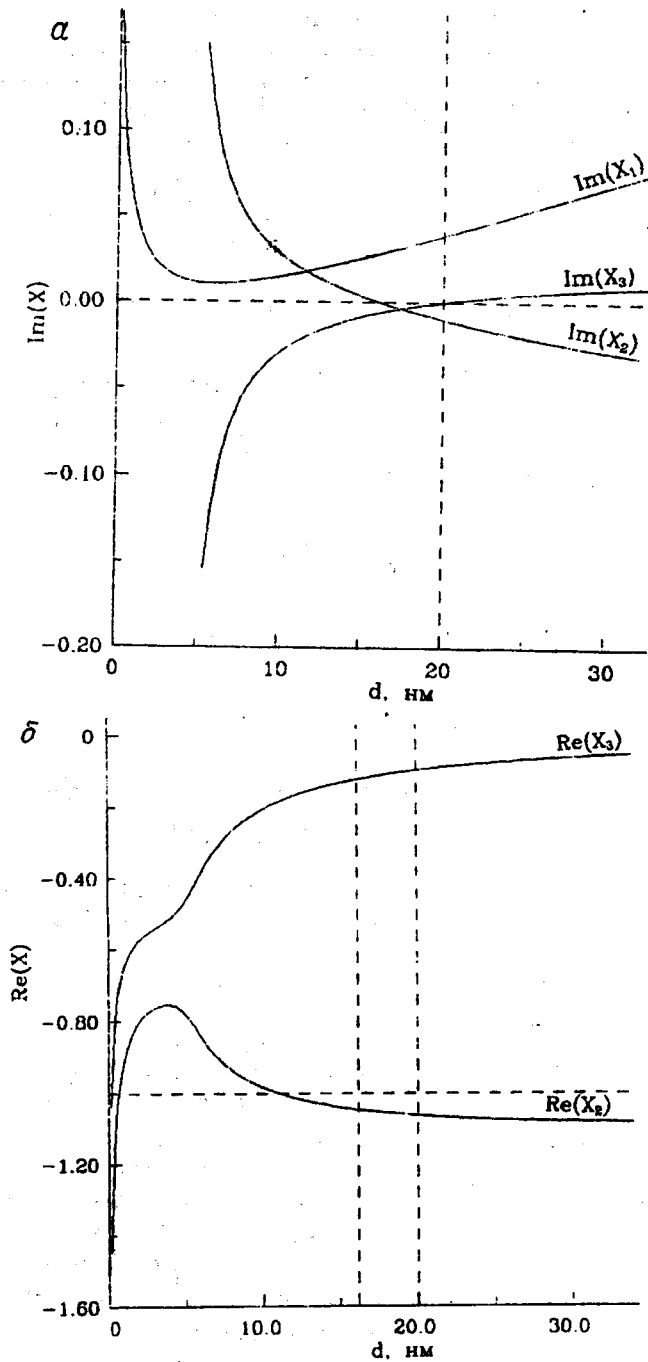


Рис. 1. Зависимости мнимых частей трех корней (а) и реальных частей двух корней (б) кубического уравнения от толщины пленки d

значение толщины соответствует решению уравнения для мнимой части X_3 . Но, поскольку истинное значение толщины на практике неизвестно, встает вопрос о выборе из двух допустимых решений одного.

На рис. 1, б даны функциональные зависимости $\text{Re} [X_2(d)]$ и $\text{Re} [X_3(d)]$. При $d_2 = 16.1$ нм $\text{Re} [X_2(d)] = -1.5$, а при $d_3 = 20$ нм $\text{Re} [X_3(d)] = -0.1$. Тогда по формуле (7) значения соответствующих ϵ_c равны: $\epsilon_c^{(2)} = -0.1$ и $\epsilon_c^{(3)} = 1.8$. Таким образом, решение $\epsilon_c^{(2)}$ не является физически реализуемым, поскольку для диэлектриков всегда выполняется условие $\epsilon_c > 1$. В результате остается одно решение $\epsilon_c = 1.8$, $d = 20$ нм, которое является искомым. Другие особенности получаемых решений приведены ниже.

На основе проведенных исследований вида целевой функции создан алгоритм решения обратной задачи по нахождению двух неизвестных параметров неоднородного слоя по результату эллипсометрических измерений на одном угле падения. Схема алгоритма имеет следующий вид:

1. Ввод начальных данных: длины волны падающего излучения λ_0 , диэлектрической проницаемости внешней среды ϵ_1 , диэлектрической проницаемости подложки ϵ_2 и угла падения φ_1 , а также результата измерения комплексного относительного коэффициента отражения ρ_m ; вычисление коэффициентов r_{p0} , r_{s0} , t_{s0} , t_{p0} ; присвоение текущего значения номеру корня $Z = 0$.

2. $Z := Z + 1$, $d = 1 \text{ \AA}$; вызов подпрограммы $\text{ROOT}(d)$ для расчета мнимого значения Z -го корня при толщине d ; $X_z^i = \text{Im}(X_z)$.

3. $d := d + 10$; вызов подпрограммы $\text{ROOT}(d)$; $X_z^k = \text{Im}(X_z)$; определение логической переменной $L2 = [(X_z^n - X_z^k) < 0]$; проверка условия $(d - 10) = 1$, в случае выполнения — присвоение логической переменной $L1$ значения $L2$, в противном случае — переход на п. 4.

4. Если выполняется неравенство $L1 \neq L2$, то выдача сообщения об отсутствии решения для Z -го корня и переход на п. 11, если не выполняется — переход на п. 5.

5. Проверка неравенства $X_z^n X_z^k < 0$, при выполнении — переход на п. 6, в противном случае — переход на п. 3 с присвоением $X_z^n := X_z^k$.

6. $d^n := (d - 10)$; $d^k := d$; $d^t := d^k$.

7. Вызов подпрограммы $\text{ROOT}(d^t)$; если выполняется условие $d^t = d^k$, то $P_z = \text{Im}(X_z)$, если не выполняется, то $X_z^i = (P_z / |P_z|) \text{Im}(X_z)$, $X_z^r = \text{Re}(X_z)$ и переход на п. 8.

8. Если $|X_z^i| < 10^{-13}$, то $\epsilon_c = \epsilon_2 (1 + X_z^r)$, в противном случае переход на п. 10.

9. Если $\epsilon_c > 1$, то вывод искомого значения ϵ_c и d переход на п. 11, если нет — выдача сообщения об отсутствии решения для Z -го корня и также переход на п. 11.

10. Если $X_z^i < 0$, то $d^n := d^t$; если $X_z^i > 0$, то $d^k := d^t$; $d^t = (d^n + d^k)/2$; переход на п. 7.

11. При $Z \leq 3$ переход на п. 2, в противном случае завершение поиска.

Алгоритм построен на последовательном анализе всех корней кубического уравнения, что обусловлено тем, что нельзя заранее сказать, в каком из них содержится искомое решение. Кроме того, эмпирически установлено, что на-

личие экстремума функции $\text{Im}[X(d)]$ не является присущей чертой только первого корня, как это имеет место в примере, приведенном выше.

В качестве поискового использован простейший метод дихотомии, что отражено в п. 10 приведенного алгоритма. Для удобства поиска все монотонно изменяющиеся функции искусственно преобразуются к монотонно возрастающим. Это объясняет смысл операций, проводимых в п. 7.

Программа составлена на языке Microsoft FORTRAN-77 (версия 3.20). Основным ее достоинством с точки зрения пользователя является то, что при ее эксплуатации не требуется введения никаких начальных точек, и она пригодна для рассмотрения любых диэлектрических систем.

Рассмотрим некоторые особенности при ее практическом использовании. В качестве "измеряемого" относительного коэффициента отражения ρ_m на предварительном этапе использовалось значение, полученное из прямой задачи, решенной на уровне второго борновского приближения. При этом не учитывается систематическая погрешность, вносимая приближением, и ошибка при восстановлении искомых параметров, определяемая в основном точностью машинного счета, составляла приблизительно 10^{-14} . При использовании же в качестве расчетного ρ_m значения, полученного по точным (разбиением по

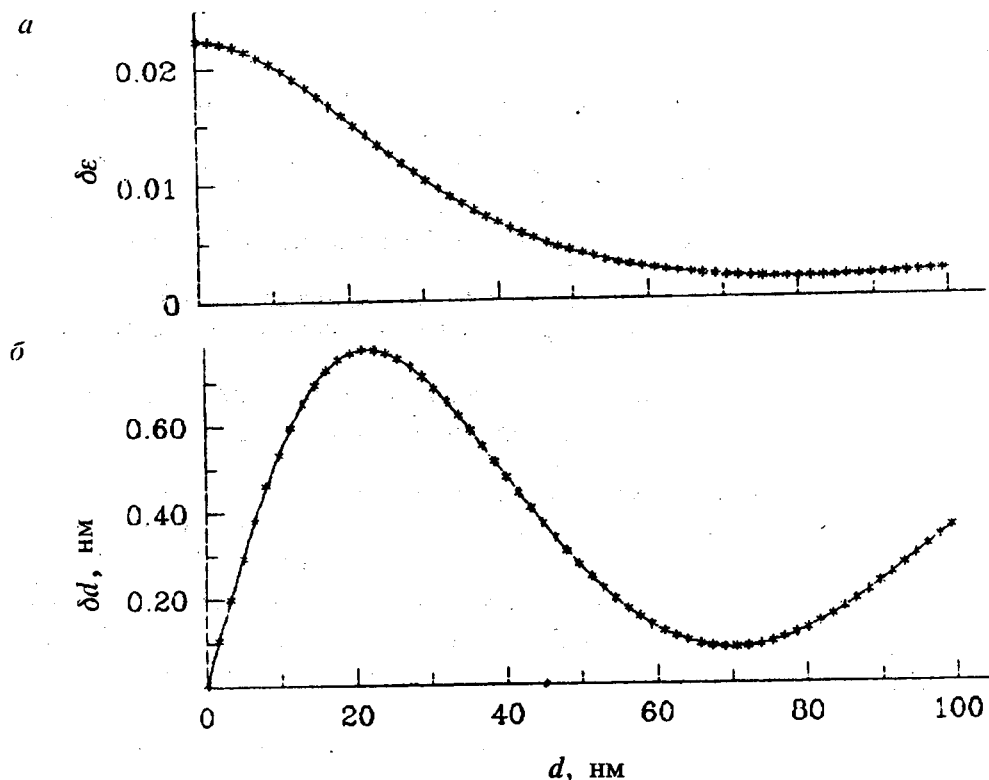


Рис. 2. Абсолютные погрешности обращения ϵ_c (а) и d (б) для модели медленно нарастающая экспонента с изменением толщины пленки при $\varphi_1 = 45^\circ$, $\epsilon_c = 1.6$, $\epsilon_2 = 2$

слоям) формулам, отражающим реальную картину взаимодействия поляризованного света с неоднородной структурой, ситуация изменяется. В этом случае точность восстановления ε_c и d зависит как от выбранной модели, так и от ее параметров. В качестве примера на рис. 2 показаны функциональные зависимости абсолютной погрешности обращения ε_c и d , полученные для модели *медленно нарастающая экспонента* при варьировании толщины пленки. Наименьшая погрешность δd достигается при восстановлении параметров тонких пленок (< 5 нм), абсолютная погрешность $\delta \varepsilon_c$ здесь максимальна. В этом смысле можно говорить о приближенном характере решений обратной задачи.

Численное тестирование созданных программ показало также, что в некоторых случаях возможно неоднозначное определение параметров. Например, при рассмотрении обратной задачи для модели *медленно нарастающая экспонента* оказалось, что при восстановлении неизвестных параметров уплотненного неоднородного переходного слоя (когда $\varepsilon_c > \varepsilon_2$) условие $\varepsilon_c > 1$ (см. п. 9 алгоритма) выполняется для двух корней, и программа выдает два набора значений ε_c и d . Так, если коэффициент ρ_m , получаемый из решения точной прямой задачи, соответствует входным данным $\varepsilon_c = 2$, $\varphi_1 = 45^\circ$, $d = 200 \text{ \AA}$, $\varepsilon_c = 2.2$, то результаты счета обратной задачи будут следующими:

$$d = 27.7391 \text{ \AA}; \varepsilon_c = 6.7486,$$

$$d = 206.4519 \text{ \AA}; \varepsilon_c = 2.1952.$$

В этом случае необходимо использовать другой критерий для выделения истинного решения. Таковым был выбор минимального из двух значений величины $F_i = |\rho_c^i - \rho_m|$, где ρ_m — "измеренное" значение относительного коэффициента отражения, а ρ_c^i — значение, полученное при подстановке величин d и ε_c для i -го решения в точную прямую задачу. В рассмотренном примере для первого решения обратной задачи имеем $F_1 = 1.0827 \cdot 10^{-1}$, для второго $F_2 = 2.4093 \cdot 10^{-4}$. Тогда очевидно, что за истинное следует принять второе решение.

Кроме возможности получения нескольких решений имеют место ситуации, когда при подстановке в качестве ρ_m значения, полученного в результате решения прямой задачи для профиля другого типа, обратная задача, тем не менее, находит физически допустимое решение. Например, в обратную задачу для нахождения параметров профиля типа *медленно нарастающая экспонента* введено значение ρ_m , соответствующее величинам $\varepsilon_c = 2$, $\varphi_1 = 45^\circ$, $d = 100 \text{ \AA}$, $\varepsilon_c = 1.6$, которое было получено для модели *быстро нарастающей экспоненты* [1]. Результатами счета обратной задачи оказались следующие параметры: $d = 72.04858 \text{ \AA}$; $\varepsilon_c = 1.32868$. При подстановке этих значений в прямую задачу для медленно нарастающей экспоненты значение F оказалось равным величине $1.98 \cdot 10^{-4}$, т. е. достаточно низким (с учетом того, что всегда существует систематическая ошибка, вызванная использованием приближен-

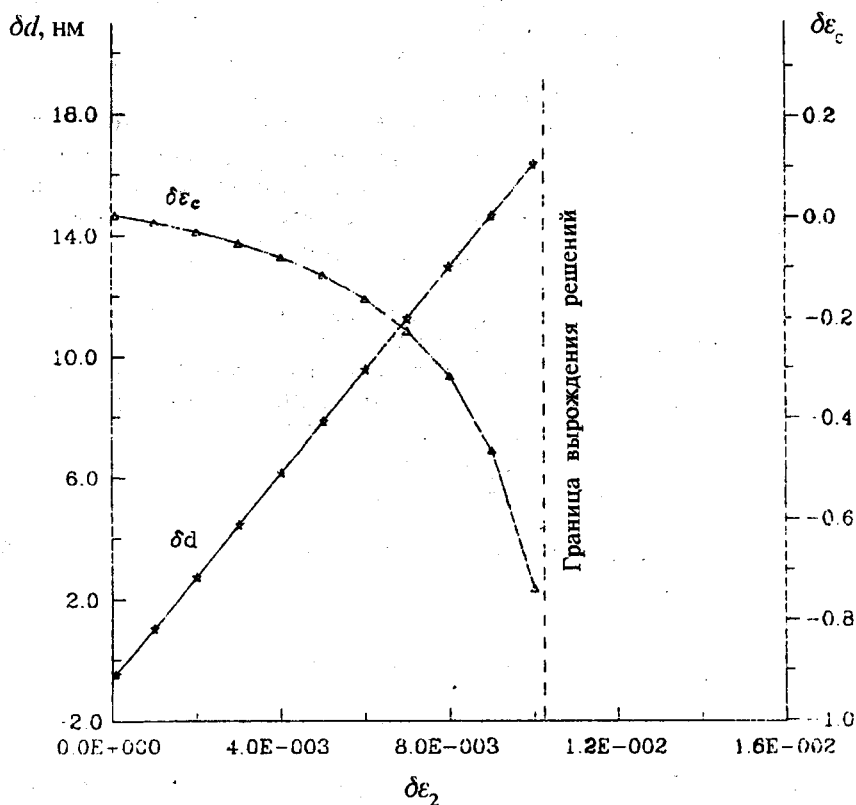


Рис. 3. Абсолютные погрешности при восстановлении ϵ_c и d в зависимости от абсолютного отклонения истинного значения диэлектрической проницаемости подложки ϵ_2 от вводимого значения

ного подхода), чтобы отбросить это решение. При проведении измерения на другом угле падения (например, при 70°) порядок величины F сохранился. Поэтому в данном случае невозможно сказать, чем вызвано такое рассогласование — неправильным выбором модели или погрешностями приближенного решения обратной задачи. Тогда наиболее корректным способом по выявлению истинного вида модели неоднородного слоя и его параметров является сравнение значений F , полученных на основе данных обратных задач для различных моделей профилей диэлектрической проницаемости неоднородной пленки. Для примера, приведенного выше, результаты обращения величин d и ϵ_c при подстановке ρ_m в обратную задачу для быстро нарастающей экспоненты оказались следующими: $d = 100.0932 \text{ \AA}$; $\epsilon_c = 1.6018$, а значение F при этом $1.014 \cdot 10^{-5}$, что на порядок лучше предыдущего.

Существенным недостатком задач, решаемых по методу Холмса, и его модификаций является относительно сильная зависимость получаемых решений от точности, с которой известна диэлектрическая проницаемость подложки ϵ_2 . Возможны даже случаи, когда при превышении некоторого значения

погрешности $\delta\epsilon_2$ такие программы вообще не выдают никаких решений. Это же относится и к приведенной выше задаче.

В качестве примера рассмотрим обращение параметров неоднородного слоя с медленно нарастающей экспонентой, которые при компьютерном моделировании полагались равными $d = 200 \text{ \AA}$; и $\epsilon_c = 2.2$. На рис. 3 показаны кривые ошибок восстановления d и ϵ_c в зависимости от точности $\delta\epsilon_2 = \epsilon_2^{er} - \epsilon_2$, где ϵ_2 — истинное значение диэлектрической проницаемости подложки и ϵ_2^{er} — значение, вводимое исследователем. На графике использованы следующие обозначения: $\delta d = d - d^{in}$; $\delta\epsilon_c = \epsilon_c - \epsilon_c^{in}$, где d и ϵ_c — истинные значения неоднородной пленки, а d^{in} и ϵ_c^{in} — значения, получаемые после решения обратной задачи. Из рис. 3 видно, что поведение ошибки обращения δd носит линейный характер (угол наклона кривой $\delta d = f(\delta\epsilon_2)$ равен величине $1.7 \text{ нм}/10^{-3}$) и с возрастанием $\delta\epsilon_2$ восстанавливаемое значение d^{in} падает по абсолютной величине, а ϵ_c^{in} — возрастает (в случае разуплотненных сред — все наоборот). При достижении некоторого предельного значения $\delta\epsilon_2$, равного в данном случае величине 10^{-2} , программа выдает сообщение об отсутствии решений для всех трех корней, что свидетельствует о вырождении решений (пунктирная линия на графике).

Таким образом, требуемая погрешность вводимого оператором значения ϵ_2 определяется тем, насколько точно необходимо восстановить значения ϵ_c и d и должна быть, по крайней мере, не хуже 0.1 %.

В заключение отметим, что на основе приведенного алгоритма разработаны программы и для других типов функциональных зависимостей диэлектрической проницаемости неоднородной пленки (быстро нарастающая экспонента, линейная зависимость, однородный слой).

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 N 18. - НТО АН СССР, 1988.
2. Шептунов О. А. Анализ применения ряда приближенных методов при рассмотрении системы неоднородная пленка—однородная подложка в эллипсометрии // Научное приборостроение. - 1991. - Т. 1, N 4. - С. 47-61.
3. Пшеницын В. И., Абаев М. И., Лызлов Н. Ю. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях. - Л. : Химия, 1986.
4. Семенов Е. В., Половинкин А. Н. Метод Холмса для расчета многослойных и неоднородных поверхностных структур // Эллипсометрия в науке и технике. Вып. 2. - Новосибирск, ИФП СО РАН, 1991. - С. 148-155.
5. Holmes D. A. On the calculation of thin film refractive index and thickness by ellipsometry // Appl. Opt. - 1967. - V. 6, N 1. - P. 168-169.