
ИССЛЕДОВАНИЯ, ПРИБОРЫ, МОДЕЛИ

И МЕТОДЫ АНАЛИЗА

УДК 535.5.511: 531.7

© А. И. Семенов, И. А. Семенов

**О НОВЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ,
ОБУСЛОВЛЕННЫХ "НУЛЕВОЙ" ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМОЙ.
ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ РЕАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР.
6. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОГЛОЩАЮЩИХ
СИСТЕМ. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ**

В работе рассмотрены общие вопросы эллипсометрии поглощающих сред, непосредственно связанные с решением обратной задачи. Исследованы углы полной поляризации для однослойной системы с поглощающей пленкой произвольной толщины. Подробно рассмотрено основное уравнение эллипсометрии для N -слойной системы с выделенным произвольным j -м слоем, базирующееся на использовании рекуррентных соотношений. Обобщен на случай многослойных сред метод Холмса. Дана общая характеристика метода решения обратной задачи эллипсометрии для многослойных поглощающих систем, включающего в себя новые критерии выбора оптимального решения, основанные на использовании основных формул обобщенного на N -слойные системы метода Холмса.

ВВЕДЕНИЕ

Основной целью настоящей работы является рассмотрение общих положений эллипсометрии поглощающих сред, непосредственно связанных с решением обратной задачи. Сюда относятся:

- исследование углов полной поляризации для однослойной системы с поглощающей пленкой произвольной толщины;
- подробное рассмотрение основного уравнения эллипсометрии для N -слойной системы с выделенным произвольным j -м слоем, базирующегося на использовании рекуррентных соотношений;
- обобщение метода Холмса на случай многослойных сред;
- общая характеристика метода решения обратной задачи эллипсометрии для многослойных поглощающих систем, включающего в себя новые критерии выбора оптимального решения, основанные на использовании основных формул обобщенного на N -слойные системы метода Холмса.

**1. ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ПОВЕДЕНИЯ УГЛОВ
ПОЛНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ДЛЯ СЛУЧАЯ
ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПЛЕНКИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ
ТОЛЩИНЫ НА ОДНОРОДНОЙ ПОДЛОЖКЕ**

В предыдущей работе [1] на основе предложенного общего подхода изучены основные закономерности в поведении углов полной поляризации для однослойной поглощающей отражающей системы. Предложена также схема, на основе ко-

торой легко доказывается, что поляризационный угол Δ на углах полной поляризации $\varphi_0 = \varphi_{0p(s)}$ при соответствующих значениях толщины пленки, как и в случае прозрачных сред, испытывает скачок величиной 180° , т. е. имеет вид ступеньки

$$\Delta(\varphi_{0p(s)} - 0) = 180^\circ, \quad \Delta(\varphi_{0p(s)} + 0) = 0(360^\circ), \quad (1)$$

причем при любых значениях коэффициентов поглощения подложки и пленки, при которых углы полной поляризации еще существуют. Сохраняется также при появлении поглощения и характер поведения угла Δ в процессе перехода (при увеличении толщины пленки) от одного вида ступеньки высотой 180° к другому (от нижней к верхней или наоборот) [2].

Случай "поглощающая подложка—прозрачная пленка" на первый взгляд практически не отличается от случая прозрачной системы [2]. Прежде всего это относится к сохранению факта периодичности по толщине пленки с периодом D_0 эффекта полной поляризации и самих поляризационных углов Δ и Ψ . В то же время для данной системы наблюдается огромное разнообразие в зависимостях $\Delta(\varphi_0)$ и $\Psi(\varphi_0)$, обусловленное дополнительным и очень сильным влиянием коэффициента поглощения подложки k_0 на поведение углов полной поляризации φ_{0p} и φ_{0s} , определяемых уравнениями [1]

$$F_p(\varphi_0) = 0, \quad F_s(\varphi_0) = 0. \quad (2)$$

Функции $F_p(\varphi_0)$ и $F_s(\varphi_0)$ зависят, очевидно, и от оптических постоянных подложки (n_0, k_0) , и пленки (n_1, k_1) . С увеличением k_0 (при заданных n_0, n_1 и $k_1 = 0$) кривые $F_{p(s)}(\varphi_0)$, определенные на угловом интервале $(0, 90^\circ)$, смещаются вниз. Происходит это в основном за счет смещения вниз крайнего левого конца кривых, т. е. за счет уменьшения значения $F_{p(s)}(0)$ (подробнее см. [1]). Все это сказывается не только на количестве и поведении углов $\varphi_{0p(s)}$. От k_0 очень сильно зависят и значения толщины пленки, при которых реализуются углы полной поляризации. Именно это и определяет интерес к системе "поглощающая подложка—прозрачная пленка".

Особый интерес представляет случай поглощающей пленки на прозрачной или поглощающей подложке. Для поглощающей пленки функции $F_p(\varphi_0)$ и $F_s(\varphi_0)$ зависят также и от целого числа m , определяющего максимальное число полных периодов D_0 , содержащихся в толщине пленки d_1 [1]. Последовательно увеличивая m начиная от значения $m = 0$ и проверяя при этом уравнения (2) на наличие решений, устанавливаем то значение

$$m = m_0,$$

при котором первый раз не проявляется ни один из углов полной поляризации (ни одно из уравнений (2) не имеет решения). Определим период, в котором находится толщина пленки d_1 , интервалом

$$(mD_0, (m+1)D_0), \quad (m = 0, 1, 2, \dots), \quad (3)$$

где $(m+1)$ определяет номер периода (номер соответствующего интервала (3)), начинающийся со значения 1. Тогда можно сказать, что самый нижний период (нижний интервал) для d_1 , начиная с которого не проявляются углы полной поляризации, определится как $(m_0 + 1)$ -й период

$$(m_0D_0, (m_0 + 1)D_0). \quad (4)$$

Это, очевидно, означает также, что самым верхним периодом, в котором еще определяются углы полной поляризации, будет m_0 -й период, определяемый интервалом $((m_0 - 1)D_0, m_0D_0)$. Если $m_0 = 0$, то, следовательно, углы $\varphi_{0p(s)}$ не проявляются ни в одном периоде.

Для устранения некоторой неопределенности необходимо сделать уточняющее замечание относительно интервала (3), определяющего $(m+1)$ -й период. Величина D_0 , а значит, и интервал (3) зависят от угла падения φ_0 , т. е. заданная толщина

пленки d_1 при изменении φ_0 может принадлежать периодам с разными номерами. Однако принадлежность d_1 $(m+1)$ -му периоду означает здесь совсем другое. При заданном номере периода уравнения (2) определяют углы $\varphi_{0p(s)}$, а еще одно уравнение (см. [1]) — отвечающие им значения толщины $d_{1p(s)}$ [1]. И вот эти значения $d_{1p(s)}$ как раз и принадлежат периодам (интервалам) (3), которые всегда определяются одним и тем же заданным номером и соответствующими и разными $\varphi_{0p(s)}$. Это можно выразить соотношением

$$d_{1p(s)} \in (mD_0(\varphi_{0p(s)}), (m+1)D_0(\varphi_{0p(s)})) \quad (5)$$

(см. также соотношения (13), приведенные ниже).

Описание поведения углов полной поляризации для случая однослойной системы с поглощающей пленкой, данное в работе [1], носит слишком ограниченный характер и связано прежде всего с предельным переходом $d_1 \rightarrow \infty$ ($m \rightarrow \infty$). В частности, замечание относительно невозможности определения из уравнения $F_p(\varphi_0) = 0$ угла Брюстера для прозрачной подложки, на которой находится поглощающая пленка, также связано с отличными от 0 значениями m ($m > 0$). Таким образом, есть необходимость дать более общее и, по возможности, детальное описание поведения углов полной поляризации $\varphi_{0p(s)}$ для системы с поглощающей пленкой.

Рассмотрим сначала ситуацию, когда поглощением обладает только пленка, т. е.

$$k_0 = 0, \quad k_1 > 0. \quad (6)$$

Здесь, в первую очередь, обращает на себя внимание следующее обстоятельство. Если в предыдущем случае прозрачной пленки на поглощающей подложке с увеличением k_0 кривые $F_{p(s)}(\varphi_0)$ смещаются вниз, то в данном случае, определяемом условиями (6), те же кривые с увеличением уже k_1 смещаются, наоборот, вверх (опять-таки за счет увеличения значения $F_{p(s)}(0)$). Однако здесь есть одна особенность, связанная с зависимостью функций $F_{p(s)}(\varphi_0)$ от числа m . В связи с этим данные функции и соответствующие уравнения будем представлять в более общей форме:

$$F_{p(s)}(\varphi_0, m) = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots, m_0 - 1. \quad (7)$$

При этом углы $\varphi_{0p(s)}$, следующие из уравнений $F_{p(s)}(\varphi_0, m) = 0$, и отвечающие им толщины $d_{1p(s)}$ относятся к $(m+1)$ -му периоду (интервалу (3)).

При $m = 0$, когда толщина пленки d_1 принимает любое значение в пределах первого периода начиная от 0, уравнение $F_p(\varphi_0, 0) = 0$ определит угол Брюстера φ_{0b} для прозрачной подложки, а соответствующая формула из работы [1] покажет, что этому углу отвечает нулевая толщина пленки ($d_1 = 0$). Это очевидный результат, но важно, что он следует из уравнения (7) (при $m = 0$) при любых оптических параметрах поглощающей пленки. Отсюда вытекает и специфика в поведении кривой $F_p(\varphi_0, 0)$. При увеличении k_1 кривая $F_p(\varphi_0, 0)$ действительно смещается вверх, но так, что при любом k_1 она пересекает ось φ_0 в двух точках, определяющих углы p -типа φ_{0p} :

$$\varphi_0 = \varphi_{01p} = \varphi_{0b} \quad \text{и} \quad \varphi_0 = \varphi_{02p}.$$

Первая из этих точек, представляющая угол Брюстера, остается неподвижной, а вторая с ростом k_1 приближается к углу Брюстера ($\varphi_{02p} \rightarrow \varphi_{0b}$). Это означает, что точка минимума кривой $F_p(\varphi_0, 0)$ приходится на интервал $(\varphi_{0b}, \varphi_{02p})$, а сам минимум кривой поднимается при $k_1 \rightarrow \infty$ к оси φ_0 , но всегда остается ниже этой оси.

Кривая $F_s(\varphi_0, 0)$ ведет себя иначе. Пусть при некоторых $k_1 < k_1^{(0)}$ она пересекает ось φ_0 , что означает существование угла полной поляризации s -типа φ_{0s} . Если k_1 увеличивается, проходя значение $k_1^{(0)}$, то кривая $F_s(\varphi_0, 0)$ буквально поднимается над осью φ_0 , нигде не пересекая и не касаясь ее. В этом случае начиная с $k_1^{(0)}$ угол φ_{0s} перестает существовать. Ему на смену приходит второй угол p -типа (φ_{02p}), и возникает описанная выше картина с кривой $F_p(\varphi_0, 0)$.

Таким образом, при $m = 0$ независимо от оптических параметров поглощающей пленки на прозрачной подложке углы полной поляризации не исчезают. А это означает, что для системы "прозрачная подложка—поглощающая пленка" всегда $m_0 > 0$.

Совсем иначе ведет себя кривая $F_p(\varphi_0, m)$ для той же отражающей системы, но при $m > 0$. При заданном $m > 0$ и росте k_1 , как и при заданном k_1 и росте m , эта кривая поднимается вверх, так что в конце концов полностью оказывается над осью φ_0 . Точно так же ведет себя и кривая $F_s(\varphi_0, m)$, но это проявляется, как указано выше, уже при $m = 0$.

Рассмотрим теперь самую общую ситуацию, когда поглощающими являются и пленка, и подложка

$$k_0 > 0, \quad k_1 > 0. \quad (8)$$

В данном случае коэффициенты поглощения подложки (k_0) и пленки (k_1) в своем влиянии на кривые $F_p(\varphi_0, m)$ и $F_s(\varphi_0, m)$ играют противоположную роль. По этой причине можно ожидать новых результатов. При $m = 0$ уравнение $F_p(\varphi_0, 0) = 0$ определит эффективный угол Брюстера $\varphi_{0b\text{эф}}$ и, если уравнение $F_s(\varphi_0, 0) = 0$ не определяет угол φ_{0s} , еще один угол p -типа φ_{02p} . С ростом k_1 (при фиксированных n_0 , k_0 и n_1) кривые $F_p(\varphi_0, 0)$ и $F_s(\varphi_0, 0)$ поднимаются вверх. При этом сначала кривая $F_s(\varphi_0, 0)$ перестает пересекать ось φ_0 (если при $k_1 = 0$ она ее пересекала), оказываясь над ней, а затем и кривая $F_p(\varphi_0, 0)$, пересекая вначале (после подъема $F_s(\varphi_0, 0)$) ось φ_0 в точках $\varphi_{01p} = \varphi_{0b\text{эф}}$ и φ_{02p} , поднимается над осью. В результате при определенном значении k_1 углы полной поляризации перестают существовать. Это означает, что для системы, определяемой условиями (8), предельное число может принимать значение $m_0 = 0$.

Рассмотрим теперь зависимость предельного числа m_0 от коэффициента поглощения k_1 пленки, имея в виду широкий диапазон изменения k_1 . Совершенно очевидно, что число m_0 растет с уменьшением k_1 , точнее: при $k_1 \rightarrow 0$ $m_0 \rightarrow \infty$. Введем функцию $m_0(k_1)$ и опишем ее поведение.

При монотонном увеличении k_1 от некоторого малого значения $k_1^{(0)}$ предельное число m_0 последовательно и скачкообразно уменьшается на 1. Иными словами, существует возрастающая последовательность

$$k_1^{(0)}, k_1^{(1)}, \dots, k_1^{(i)}, \dots, k_1^{(N)}, \quad (9)$$

на каждом элементе которой m_0 уменьшается на 1

$$m_0(k_1^{(i)} + 0) = m_0(k_1^{(i)} - 0) - 1, \quad (10)$$

а в каждом i -м интервале $(k_1^{(i-1)}, k_1^{(i)})$ ($i = 1, 2, \dots, N$) m_0 остается постоянным, причем

$$m_0(k_1^{(i-1)} + 0) = m_0(k_1^{(i)} - 0). \quad (11)$$

При этом важно отметить, что величина i -го интервала $\delta k_1^{(i)} = k_1^{(i)} - k_1^{(i-1)}$ с возрастанием индек-

са i увеличивается. Заметим также, что последний элемент $k_1^{(N)}$ последовательности (9) является предельным, т. е. для любого $k_1 > k_1^{(N)}$ имеем $m_0(k_1) = m_0(k_1^{(N)} + 0) = 0$ или 1.

Введем величины $\delta\varphi_{0p}$ и δd_{1p} , представляющие собой разности углов полной поляризации φ_{02p} и φ_{01p} и отвечающих им толщин пленки $d_{1p}^{(2)}$ и $d_{1p}^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{0p}(k_1, j) &= \varphi_{02p}(k_1, j) - \varphi_{01p}(k_1, j), \\ \delta d_{1p}(k_1, j) &= d_{1p}^{(2)}(k_1, j) - d_{1p}^{(1)}(k_1, j). \end{aligned} \quad (12)$$

Все величины в (12) зависят от коэффициента k_1 и номера периода j (см. рассуждения, связанные с формулами (3) и (4)); в частности, для $d_{1p}^{(2)}$ и $d_{1p}^{(1)}$ имеют место соотношения

$$\begin{aligned} d_{1p}^{(1)}(k_1, j) &\in ((j-1)D_0(\varphi_{01p}), jD_0(\varphi_{01p})), \\ d_{1p}^{(2)}(k_1, j) &\in ((j-1)D_0(\varphi_{02p}), jD_0(\varphi_{02p})). \end{aligned} \quad (13)$$

Предполагая, что k_1 принадлежит i -му интервалу, определимся и с величинами j и m_0 :

$$\begin{aligned} k_1 &\in (k_1^{(i-1)}, k_1^{(i)}), \quad m_0 = m_0(k_1) = m_0(i), \\ 1 &\leq j \leq m_0(i). \end{aligned} \quad (14)$$

В пределах j -го периода уравнения (7), определяющие $\varphi_{01p}(k_1, j)$ и $\varphi_{02p}(k_1, j)$, приобретут соответствующий вид, если в них положить $m = j - 1$.

Представляет интерес поведение величин (12) для случая предельного верхнего периода с номером $j = m_0(i)$. Величины $\delta\varphi_{0p}(k_1, m_0(i))$ и $\delta d_{1p}(k_1, m_0(i))$ достигают некоторых максимальных значений на левом конце $(k_1^{(i-1)} + 0)$, а с возрастанием k_1 уменьшаются, обращаясь в ноль на правом конце $(k_1^{(i)} - 0)$ i -го интервала. Можно еще сказать, что при прохождении возрастающей последовательности (9) на каждом ее i -м элементе величины $\delta\varphi_{0p}$ и δd_{1p} испытывают скачок от 0 (в конце i -го интервала) до некоторых значений (в начале $i + 1$ -го), причем, высота скачка для каждой из этих величин увеличивается с ростом индекса i .

Снова рассмотрим величины (12) для любого заданного k_1 из i -го интервала, но уже для периодов с номерами $j \leq m_0(i)$. Здесь следует отметить, что с уменьшением номера периода j эти величины увеличиваются:

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{0p}(k_1, j-1) &> \delta\varphi_{0p}(k_1, j), \\ \delta d_{1p}(k_1, j-1) &> \delta d_{1p}(k_1, j), \quad j = m_0(i), \dots, 3, 2. \end{aligned} \quad (15)$$

При $j > m_0(i)$ углы полной поляризации уже не проявляются, и величины (12) теряют смысл.

2. ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ N -СЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ С ВЫДЕЛЕННЫМ ПРОИЗВОЛЬНЫМ СЛОЕМ

Основное уравнение эллипсометрии для N -слойной отражающей системы, приведенное в работах [2, 4], уже содержит выделенный слой, причем в одном случае это верхний (N -й) слой [2, 4], в другом же выделенным является произвольный j -й слой [4]. Эти уравнения построены на использовании простых рекуррентных соотношений, позволяющих легко описать любую многослойную систему. Данные рекуррентные соотношения, записанные в работах [2, 4] без вывода, первоначально были получены на основе результатов работы [5], в которой установлена закономерность перемножения любого количества матриц однородных слоев и найдены выражения для элементов полной матрицы N -слойной системы. Однако такой путь довольно сложен, и мы не будем его воспроизводить. Кроме того, полученное в результате данного подхода основное уравнение не имеет вполне законченного очень простого вида.

В настоящей работе мы дадим полный и довольно простой вывод основного уравнения эллипсометрии с выделенным j -м слоем, определяющего поляризационные углы Ψ и Δ для N -слойной системы через рекуррентные соотношения. При этом будем использовать простые исходные выражения, не прибегая к аналитическому выражению для полной матрицы N -слойной системы.

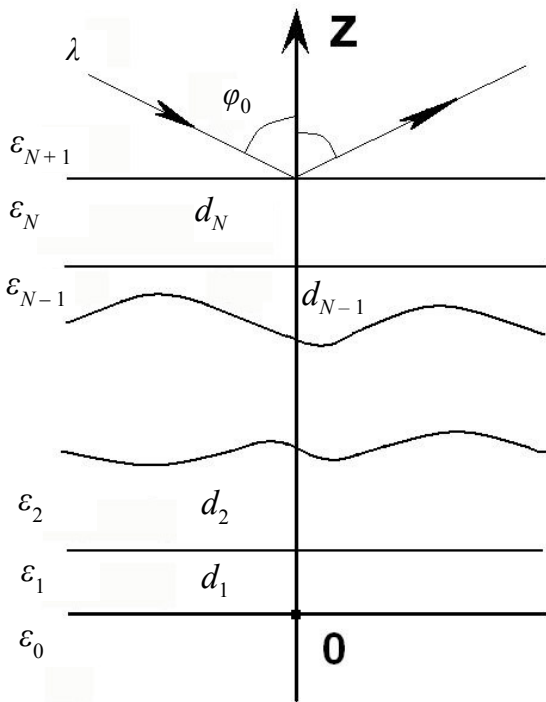
Основное уравнение эллипсометрии для отражающей системы "подложка— N однородных слоев" (см. рисунок) в его наиболее общей форме выражается через элементы полной матрицы Абелеса $\mathbf{M}_{p(s)}(0, z_0)$, представленной в виде произведения матриц отдельных слоев [6]:

$$\mathbf{M}_{p(s)}(0, z_0) = \mathbf{M}_{p(s)}^{(1)}(d_1) \mathbf{M}_{p(s)}^{(2)}(d_2) \dots \mathbf{M}_{p(s)}^{(N)}(d_N). \quad (16)$$

Для матриц удобно использовать новые обозначения

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{p(s)}(0, z_0) &\equiv \mathbf{M}_{p(s)}[1, N], \\ \mathbf{M}_{p(s)}^{(k)}(d_k) &\equiv \mathbf{M}_{p(s)}[k], \quad (k = 1, 2, \dots, N), \end{aligned} \quad (17)$$

с учетом которых (16) запишется:



Схематическое изображение N -слойной отражающей системы

$$\mathbf{M}_{p(s)}[1, N] = \mathbf{M}_{p(s)}[1] \mathbf{M}_{p(s)}[2] \dots \mathbf{M}_{p(s)}[N], \quad (18)$$

где

$$\mathbf{M}_{p(s)}[k] \sim \begin{pmatrix} a_k^{(+)} & \frac{1}{h_{p(s)}[k]} a_k^{(-)} \\ h_{p(s)}[k] a_k^{(-)} & a_k^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

$$h_p[k] = \frac{-g_k}{\varepsilon_k}, \quad h_s[k] = g_k,$$

$$g_k = \sqrt{\varepsilon_k - \varepsilon_{N+1} \sin^2 \varphi_0}, \quad (k = 0, 1, \dots, N, N+1),$$

$$a_k^{(\pm)} = \exp(-2i\delta_k) \pm 1, \quad (20)$$

$$\delta_k = \frac{2\pi}{\lambda} d_k g_k, \quad (k = 1, 2, \dots, N).$$

В формулах (20) ε_0 и ε_{N+1} — диэлектрические проницаемости подложки и внешней среды, ε_k и d_k ($k = 1, 2, \dots, N$) — диэлектрическая проницаемость и толщина k -го однородного слоя (см. рисунок). Будем также иметь в виду, что комплексные амплитудные коэффициенты отражения Френеля для p - и s -волн на границе k -й и $(k+1)$ -й сред определяются формулами

$$r_{p(s)}[k+1, k] = \frac{h_{p(s)}[k+1] - h_{p(s)}[k]}{h_{p(s)}[k+1] + h_{p(s)}[k]}, \quad (21)$$

$$(k = 0, 1, \dots, N),$$

а для матриц выполняются очевидные соотношения:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{p(s)}[k, N] &= \\ &= \mathbf{M}_{p(s)}[k] \mathbf{M}_{p(s)}[k+1] \dots \mathbf{M}_{p(s)}[N], \quad k < N; \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{p(s)}[k, N] &= \\ &= \mathbf{M}_{p(s)}[k] \mathbf{M}_{p(s)}[k+1, N], \quad k < N; \end{aligned}$$

$$\mathbf{M}_{p(s)}[N, N] = \mathbf{M}_{p(s)}[N].$$

Элементы матрицы $\mathbf{M}_{p(s)}[k, N]$ будем обозначать через $m_{p(s)\alpha\beta}[k, N]$ ($\alpha, \beta = 1, 2$). В новых обозначениях исходное основное уравнение эллипсометрии для N -слойной системы имеет следующий вид [6]:

$$\operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) = \frac{R_p}{R_s}, \quad R_{p(s)} \sim \frac{K_{N,p(s)}^{(+)}}{K_{N,p(s)}^{(-)}}, \quad (23)$$

где

$$K_{N,p(s)}^{(\pm)} = G_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] - h_{p(s)}[0] Q_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1], \quad (24)$$

$$\begin{aligned} G_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] &= \\ &= m_{p(s)21}[1, N] \pm h_{p(s)}[N+1] m_{p(s)22}[1, N], \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} Q_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] &= \\ &= m_{p(s)11}[1, N] \pm h_{p(s)}[N+1] m_{p(s)12}[1, N]. \end{aligned} \quad (26)$$

В формуле (23) для $R_{p(s)}$ опущен отрицательный экспоненциальный множитель, общий для R_p и R_s , и, следовательно, не проявляющийся в основном уравнении.

Характер нижеследующих преобразований таков, что выражение (24) для $K_{N,p(s)}^{(\pm)}$ целесообразно представить в виде

$$\begin{aligned} K_{N,p(s)}^{(\pm)} &= A_{p(s)}[0] (G_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] + \\ &+ h_{p(s)}[0] Q_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1]) + \\ &+ B_{p(s)}[0] (G_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] - h_{p(s)}[0] Q_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1]). \end{aligned} \quad (27)$$

Коэффициенты $A_{p(s)}[0]$ и $B_{p(s)}[0]$ в (27), очевидно, должны иметь такие значения, чтобы сохранялось выражение (24):

$$A_{p(s)}[0] = 0, \quad B_{p(s)}[0] = 1. \quad (28)$$

Преобразуем формулы (25) и (26). Для этого представим полную матрицу в виде (см. вторую формулу из (22) при $k = 1$)

$$\mathbf{M}_{p(s)}[1, N] = \mathbf{M}_{p(s)}[1] \mathbf{M}_{p(s)}[2, N]. \quad (29)$$

Учитывая формулы (19) и (29), найдем:

$$G_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] = a_1^{(+)} G_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1] + h_{p(s)}[1] a_1^{(-)} Q_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1], \quad (30)$$

$$Q_{p(s)}^{(\pm)}[1, N+1] = a_1^{(+)} Q_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1] + \frac{1}{h_{p(s)}[1]} a_1^{(-)} G_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1], \quad (31)$$

где величины $G_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1]$ и $Q_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1]$ определяются формулами (25) и (26), в которых надо сделать переход

$$m_{p(s)\alpha\beta}[1, N] \rightarrow m_{p(s)\alpha\beta}[2, N], \quad (\alpha, \beta = 1, 2). \quad (32)$$

Теперь подставим (30) и (31) в выражение (27) для $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$ и сделаем элементарные преобразования, в результате которых появятся коэффициенты отражения Френеля и общий множитель

$$\frac{(h_{p(s)}[1] + h_{p(s)}[0])}{h_{p(s)}[1]},$$

который можно опустить как не имеющий значения ни для $R_{p(s)}$, ни для основного уравнения.

В итоге величина $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$ запишется:

$$K_{N, p(s)}^{(\pm)} \sim A_{p(s)}[1] (G_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1] + h_{p(s)}[1] Q_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1]) + B_{p(s)}[1] (G_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1] - h_{p(s)}[1] Q_{p(s)}^{(\pm)}[2, N+1]). \quad (33)$$

В формуле (33) появились новые величины $A_{p(s)}[1]$ и $B_{p(s)}[1]$, которые определяются через $A_{p(s)}[0]$ и $B_{p(s)}[0]$ (см. (28)):

$$A_{p(s)}[1] = (A_{p(s)}[0] + r_{p(s)}[1, 0] B_{p(s)}[0]) \exp(-2i\delta_1), \quad (34)$$

$$B_{p(s)}[1] = r_{p(s)}[1, 0] A_{p(s)}[0] + B_{p(s)}[0]. \quad (35)$$

Как видим, выражение (33) имеет точно такую же структуру, как и исходное выражение (27) для $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$. Принимая во внимание (34) и (35), можно утверждать, что это первый шаг в направлении движения от подложки к верхней границе системы.

Если затем воспользуемся представлением

$$\mathbf{M}_{p(s)}[2, N] = \mathbf{M}_{p(s)}[2] \mathbf{M}_{p(s)}[3, N] \quad (36)$$

и выражением (33) для $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$, то точно такие же преобразования позволят сделать следующий шаг в определении величины $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$. Используя метод математической индукции, легко показать, что на k -м шаге величина $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$ определится выражением

$$K_{N, p(s)}^{(\pm)} \sim A_{p(s)}[k] \times (G_{p(s)}^{(\pm)}[k+1, N+1] + h_{p(s)}[k] Q_{p(s)}^{(\pm)}[k+1, N+1]) + B_{p(s)}[k] \times (G_{p(s)}^{(\pm)}[k+1, N+1] - h_{p(s)}[k] Q_{p(s)}^{(\pm)}[k+1, N+1]), \quad (37)$$

в котором основные величины определяются формулами, аналогичными (25), (26) и (34), (35):

$$G_{p(s)}^{(\pm)}[k+1, N+1] = m_{p(s)21}[k+1, N] \pm h_{p(s)}[N+1] m_{p(s)22}[k+1, N], \quad (38)$$

$$Q_{p(s)}^{(\pm)}[k+1, N+1] = m_{p(s)11}[k+1, N] \pm h_{p(s)}[N+1] m_{p(s)12}[k+1, N], \quad (39)$$

$$A_{p(s)}[k] = (A_{p(s)}[k-1] + r_{p(s)}[k, k-1] B_{p(s)}[k-1]) \times \exp(-2i\delta_k), \quad (40)$$

$$B_{p(s)}[k] = r_{p(s)}[k, k-1] A_{p(s)}[k-1] + B_{p(s)}[k-1], \quad (41)$$

где $1 \leq k \leq N-1$.

Используя (37), определим $K_{N, p(s)}^{(\pm)}$ на $(N-1)$ -м шаге:

$$K_{N, p(s)}^{(\pm)} \sim A_{p(s)}[N-1] \times (G_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1] + h_{p(s)}[N-1] Q_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1]) + B_{p(s)}[N-1] \times (G_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1] - h_{p(s)}[N-1] Q_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1]). \quad (42)$$

Здесь $A_{p(s)}[N-1]$ и $B_{p(s)}[N-1]$ очевидно определяются соотношениями (40) и (41), а величины $G_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1]$ и $Q_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1]$ — формулами (38) и (39), в которых при $k = N-1$

$$m_{p(s)\alpha\beta}[N, N] = m_{p(s)\alpha\beta}[N], \quad (\alpha, \beta = 1, 2). \quad (43)$$

Учитывая (43), а также формулу (19), определяющую (при $k = N$) матрицу N -го однородного слоя, т. е. элементы $m_{p(s)\alpha\beta}[N]$, найдем

$$G_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1] = h_{p(s)}[N] a_N^{(-)} \pm h_{p(s)}[N+1] a_N^{(+)}, \quad (44)$$

$$Q_{p(s)}^{(\pm)}[N, N+1] = a_N^{(+)} \pm \frac{h_{p(s)}[N+1]}{h_{p(s)}[N]} a_N^{(-)}. \quad (45)$$

Подставляя (44) и (45) в (42) и привлекая формулы (20) и (21), получим окончательные выражения для $K_{N,p(s)}^{(+)}$ и $K_{N,p(s)}^{(-)}$:

$$K_{N,p(s)}^{(+)} \sim A_{p(s)}[N] + r_{p(s)}[N+1, N] B_{p(s)}[N], \quad (46)$$

$$K_{N,p(s)}^{(-)} \sim (-1) (r_{p(s)}[N+1, N] A_{p(s)}[N] + B_{p(s)}[N]), \quad (47)$$

где $r_{p(s)}[N+1, N]$ — коэффициенты отражения Френеля на границе внешней среды и верхнего слоя (см. рисунок), а величины $A_{p(s)}[N]$ и $B_{p(s)}[N]$ удовлетворяют соотношениям (40) и (41), распространённым на случай $k = N$. Множитель (-1) из (47) переходит в выражения для R_p и R_s (после подстановки (46) и (47) в (23)), но в основном уравнении он сокращается, поэтому окончательный вид основного уравнения эллипсометрии будет следующим:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) &= \frac{A_p[N] + r_p[N+1, N] B_p[N]}{r_p[N+1, N] A_p[N] + B_p[N]} \times \\ &\times \frac{r_s[N+1, N] A_s[N] + B_s[N]}{A_s[N] + r_s[N+1, N] B_s[N]}. \end{aligned} \quad (48)$$

Основное уравнение (48) базируется на использовании рекуррентных соотношений, совпадающих с (40) и (41), но имеющих более широкую область применения, поэтому перепишем их в законченной форме:

$$A_{p(s)}[m] = (A_{p(s)}[m-1] + r_{p(s)}[m, m-1] B_{p(s)}[m-1]) \times \exp(-2i\delta_m), \quad (49)$$

$$B_{p(s)}[m] = r_{p(s)}[m, m-1] A_{p(s)}[m-1] + B_{p(s)}[m-1], \quad (50)$$

где $m = 1, 2, \dots, N-1, N$.

Начальными значениями для рекуррентных соотношений являются величины $A_{p(s)}[0]$ и $B_{p(s)}[0]$,

определённые формулами (28). Уравнение (48) совместно с (49) и (50) позволяет легко рассчитать поляризационные углы Ψ и Δ для любой многослойной системы, что особенно важно для математических программ, связанных с расчетом Ψ и Δ .

При $N = 0$ уравнение (48) в соответствии с (28) переходит в уравнение для чистой подложки

$$\operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) = \frac{r_p[1, 0]}{r_s[1, 0]}. \quad (51)$$

Перейдем теперь к выводу основного уравнения эллипсометрии с выделенным произвольным j -м слоем

$$1 \leq j \leq N,$$

точнее, выделим в основном уравнении величину

$$\exp(-2i\delta_j),$$

отвечающую этому слою. Основой для такой процедуры являются рекуррентные соотношения (49) и (50). Величины $A_{p(s)}[m]$ и $B_{p(s)}[m]$, в которых $m = 1, 2, \dots, j-1$, определим данными соотношениями, не прибегая ни к какой модификации этих величин. Для величин $A_{p(s)}[j]$ и $B_{p(s)}[j]$, определённых теми же соотношениями, сделаем элементарные преобразования:

$$A_{p(s)}[j] = A_{0p(s)}[j] \exp(-2i\delta_j), \quad (52)$$

$$A_{0p(s)}[j] = A_{p(s)}[j-1] + r_{p(s)}[j, j-1] B_{p(s)}[j-1], \quad (53)$$

$$B_{p(s)}[j] \equiv B_{0p(s)}[j], \quad (54)$$

$$B_{0p(s)}[j] = r_{p(s)}[j, j-1] A_{p(s)}[j-1] + B_{p(s)}[j-1]. \quad (55)$$

Величины $A_{p(s)}[m]$ и $B_{p(s)}[m]$, в которых $m = j, j+1, \dots, N$, определим теперь в другом более удобном виде, используя (49), (50) и (52–55) и выделяя в явной форме экспоненту j -го слоя — $\exp(-2i\delta_j)$.

В результате для данных величин придем к выражениям с коэффициентами, определяемыми рекуррентными соотношениями другого вида. Чтобы получить эти выражения и соответствующие рекуррентные соотношения, запишем величины $A_{p(s)}[m]$ и $B_{p(s)}[m]$ в наиболее общей форме:

$$A_{p(s)}[m] = f_{p(s)11}[m] \exp(-2i\delta_j) + f_{p(s)12}[m], \quad (56)$$

$$B_{p(s)}[m] = f_{p(s)21}[m] \exp(-2i\delta_j) + f_{p(s)22}[m], \quad (57)$$

где $(m = j, j+1, \dots, N)$.

Коэффициенты $f_{p(s)\alpha\beta}[m]$ ($\alpha, \beta = 1, 2$) удовлетворяют рекуррентным соотношениям. Чтобы найти эти соотношения, рассмотрим сначала выражения (56) и (57) для случая $m = j$:

$$A_{p(s)}[j] = f_{p(s)11}[j] \exp(-2i\delta_j) + f_{p(s)12}[j], \quad (58)$$

$$B_{p(s)}[j] = f_{p(s)21}[j] \exp(-2i\delta_j) + f_{p(s)22}[j]. \quad (59)$$

Сравнивая (58) и (59) с (52) и (54), находим

$$\begin{aligned} f_{p(s)11}[j] &= A_{0p(s)}[j], & f_{p(s)12}[j] &= 0, \\ f_{p(s)21}[j] &= 0, & f_{p(s)22}[j] &= B_{0p(s)}[j], \end{aligned} \quad (60)$$

где $A_{0p(s)}[j]$ и $B_{0p(s)}[j]$ определяются выражениями (53) и (55).

Затем рассмотрим формулы (56) и (57) для случая $m = j + 1$. Чтобы определить коэффициенты $f_{p(s)\alpha\beta}[j + 1]$ из этих формул, воспользуемся рекуррентными соотношениями (49) и (50), записанными для $m = j + 1$. Подставив в них (58) и (59) для $A_{p(s)}[j]$ и $B_{p(s)}[j]$, найдем выражения для $A_{p(s)}[j + 1]$ и $B_{p(s)}[j + 1]$. Представив данные выражения в форме (56) и (57) (при $m = j + 1$), найдем для коэффициентов $f_{p(s)\alpha\beta}[j + 1]$ следующие выражения:

$$\begin{aligned} f_{p(s)11}[j + 1] &= \\ &= (f_{p(s)11}[j] + r_{p(s)}[j + 1, j] f_{p(s)21}[j]) \times \\ &\quad \times \exp(-2i\delta_{j+1}), \\ f_{p(s)12}[j + 1] &= \\ &= (f_{p(s)12}[j] + r_{p(s)}[j + 1, j] f_{p(s)22}[j]) \times \\ &\quad \times \exp(-2i\delta_{j+1}), \\ f_{p(s)21}[j + 1] &= r_{p(s)}[j + 1, j] f_{p(s)11}[j] + f_{p(s)21}[j], \\ f_{p(s)22}[j + 1] &= r_{p(s)}[j + 1, j] f_{p(s)12}[j] + f_{p(s)22}[j]. \end{aligned} \quad (61)$$

Аналогичным образом получаются коэффициенты $f_{p(s)\alpha\beta}[j + 2]$ и все следующие коэффициенты вплоть до $f_{p(s)\alpha\beta}[N]$. Учитывая характер данной последовательности и используя метод математической индукции, легко показать, что коэффициенты $f_{p(s)\alpha\beta}[m]$ удовлетворяют следующим рекуррентным соотношениям:

$$\begin{aligned} f_{p(s)11}[m] &= \\ &= (f_{p(s)11}[m - 1] + r_{p(s)}[m, m - 1] f_{p(s)21}[m - 1]) \times \\ &\quad \times \exp(-2i\delta_m), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{p(s)12}[m] &= \\ &= (f_{p(s)12}[m - 1] + r_{p(s)}[m, m - 1] f_{p(s)22}[m - 1]) \times \\ &\quad \times \exp(-2i\delta_m), \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} f_{p(s)21}[m] &= \\ &= r_{p(s)}[m, m - 1] f_{p(s)11}[m - 1] + f_{p(s)21}[m - 1], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{p(s)22}[m] &= \\ &= r_{p(s)}[m, m - 1] f_{p(s)12}[m - 1] + f_{p(s)22}[m - 1], \end{aligned}$$

где m удовлетворяет условию $m = j + 1, j + 2, \dots, N$.

Полученные рекуррентные соотношения (62) предполагают предварительное использование рекуррентных соотношений (49) и (50) (для $m = 1, 2, \dots, j - 1$) и формул (60), определяющих начальные коэффициенты $f_{p(s)\alpha\beta}[j]$ для соотношений (62).

Теперь можем определить основное уравнение эллипсометрии для N -слойной отражающей системы с выделенным j -м слоем. Для этого представим входящие в основное уравнение (48) величины $A_{p(s)}[N]$ и $B_{p(s)}[N]$ в виде выражений (56) и (57), положив в последних $m = N$:

$$A_{p(s)}[N] = f_{p(s)11}[N] \exp(-2i\delta_j) + f_{p(s)12}[N], \quad (63)$$

$$B_{p(s)}[N] = f_{p(s)21}[N] \exp(-2i\delta_j) + f_{p(s)22}[N]. \quad (64)$$

Коэффициенты $f_{p(s)\alpha\beta}[N]$, входящие в формулы (63) и (64), определяются с помощью рекуррентных соотношений (62).

Подставив (63) и (64) в уравнение (48), после несложных преобразований приходим к основному уравнению эллипсометрии для N -слойной системы с выделенным j -м слоем:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) &= \frac{X_{1p}[N] \exp(-2i\delta_j) + Z_{1p}[N]}{X_{2p}[N] \exp(-2i\delta_j) + Z_{2p}[N]} \times \\ &\quad \times \frac{X_{2s}[N] \exp(-2i\delta_j) + Z_{2s}[N]}{X_{1s}[N] \exp(-2i\delta_j) + Z_{1s}[N]}, \end{aligned} \quad (65)$$

где

$$\begin{aligned} X_{1p(s)}[N] &= \\ &= f_{p(s)11}[N] + r_{p(s)}[N + 1, N] f_{p(s)21}[N], \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} Z_{1p(s)}[N] &= \\ &= f_{p(s)12}[N] + r_{p(s)}[N + 1, N] f_{p(s)22}[N], \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} X_{2p(s)}[N] &= \\ &= f_{p(s)11}[N] r_{p(s)}[N + 1, N] + f_{p(s)21}[N], \end{aligned} \quad (68)$$

$$\begin{aligned} Z_{2p(s)}[N] &= \\ &= f_{p(s)12}[N] r_{p(s)}[N+1, N] + f_{p(s)22}[N]. \end{aligned} \quad (69)$$

Если выделенным является верхний слой $j = N$, то, согласно (60) и (66–69):

$$\begin{aligned} X_{1p(s)}[N] &= A_{0p(s)}[N], \\ Z_{1p(s)}[N] &= r_{p(s)}[N+1, N] B_{0p(s)}[N], \\ X_{2p(s)}[N] &= r_{p(s)}[N+1, N] A_{0p(s)}[N], \\ Z_{2p(s)}[N] &= B_{0p(s)}[N], \end{aligned} \quad (70)$$

и уравнение (65) запишется:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) &= \\ &= \frac{A_{0p}[N] \exp(-2i\delta_N) + r_p[N+1, N] B_{0p}[N]}{r_p[N+1, N] A_{0p}[N] \exp(-2i\delta_N) + B_{0p}[N]} \times \\ &\times \frac{r_s[N+1, N] A_{0s}[N] \exp(-2i\delta_N) + B_{0s}[N]}{A_{0s}[N] \exp(-2i\delta_N) + r_s[N+1, N] B_{0s}[N]}. \end{aligned} \quad (71)$$

Уравнение (71), очевидно, можно получить также, используя (48), (52), (54), полагая в последних $j = N$.

3. МЕТОД ХОЛМСА ДЛЯ N-СЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Способ записи основного уравнения эллипсометрии для N -слойной системы, выделяющий в явной форме экспоненту отдельного j -го слоя, позволяет обобщить на случай многослойных поглощающих сред метод Холмса [7]. Здесь мы ограничимся только приведением основных формул.

Преобразуем уравнение (65), сведя его к квадратному относительно $\exp(-2i\delta_j)$ уравнению. Это уравнение с учетом новых обозначений

$$x \equiv \exp(-2i\delta_j), \quad \rho = \operatorname{tg} \Psi \exp(i\Delta) \quad (72)$$

запишется

$$a_N x^2 + b_N x + c_N = 0, \quad (73)$$

где

$$a_N = \rho X_{1s}[N] X_{2p}[N] - X_{1p}[N] X_{2s}[N], \quad (74)$$

$$\begin{aligned} b_N &= \\ &= \rho (X_{1s}[N] Z_{2p}[N] + X_{2p}[N] Z_{1s}[N]) - \\ &- (X_{1p}[N] Z_{2s}[N] + X_{2s}[N] Z_{1p}[N]), \end{aligned} \quad (75)$$

$$c_N = \rho Z_{1s}[N] Z_{2p}[N] - Z_{1p}[N] Z_{2s}[N]. \quad (76)$$

Из (73) находим выражение для экспоненты j -го слоя:

$$x_{1,2} \equiv (\exp(-2i\delta_j))_{1,2} = \frac{-b_N \pm \sqrt{b_N^2 - 4a_N c_N}}{2a_N}. \quad (77)$$

На выборе знака перед корнем в данном выражении остановимся ниже. А пока представим выражение (77) в удобном для дальнейшего виде:

$$\exp(-2i\delta_j) = F_N, \quad (78)$$

где F_N определяется правой частью формулы (77) с правильно выбранным знаком перед корнем.

С другой стороны, экспонента j -го слоя (через величину δ_j в показателе экспоненты) зависит от оптических постоянных и толщины j -го слоя, а также от показателя преломления внешней среды (см. (20) при $k = j$). Используя это первичное представление экспоненты, запишем (78) в следующем виде:

$$\exp(-i \frac{4\pi}{\lambda} d_j g_j) = F_N. \quad (79)$$

Затем преобразуем уравнение (79), применяя процедуру, аналогичную использованной в работе [1]. Выразим комплексные в общем случае величины ε_j и g_j через оптические постоянные (n_j, k_j) j -го слоя:

$$\varepsilon_j = (n_j - i k_j)^2 = \varepsilon_{j1} - i \varepsilon_{j2}, \quad (80)$$

$$\varepsilon_{j1} = n_j^2 - k_j^2, \quad \varepsilon_{j2} = 2n_j k_j,$$

$$g_j = \sqrt{\varepsilon_j - \varepsilon_{N+1} \sin^2 \varphi_0} = g_{j1} - i g_{j2}, \quad (81)$$

$$2g_{j1} g_{j2} = \varepsilon_{j2},$$

$$\begin{aligned} g_{j1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \times \\ &\times \sqrt{\sqrt{(\varepsilon_{j1} - \varepsilon_{N+1} \sin^2 \varphi_0)^2 + \varepsilon_{j2}^2} + (\varepsilon_{j1} - \varepsilon_{N+1} \sin^2 \varphi_0)}. \end{aligned} \quad (82)$$

В (81) интерес представляет вторая формула, связывающая величины g_{j1} и g_{j2} . При $\varepsilon_{j2} = 0$, что имеет место при $k_j = 0$, $g_{j2} = 0$.

Используя (80–82), приведем уравнение (79) к виду

$$\exp(-i \xi_j) \exp(-\eta_j) = F_N, \quad (83)$$

где

$$\xi_j = \frac{4\pi d_j}{\lambda} g_{j1}, \quad \eta_j = \frac{4\pi d_j}{\lambda} g_{j2}, \quad (84)$$

или

$$\begin{aligned} \xi_j &= \frac{2\pi d_j}{D_{0j}}, \\ \eta_j &= \frac{2\pi d_j}{D_{0j}} \frac{g_{j2}}{g_{j1}} = \frac{\pi d_j}{D_{0j}} \frac{\varepsilon_{j2}}{g_{j1}^2} = \xi_j \frac{\varepsilon_{j2}}{2g_{j1}^2}, \\ D_{0j} &= \frac{\lambda}{2g_{j1}}. \end{aligned} \quad (85)$$

Представим также комплексную правую часть уравнения (83) в экспоненциальном виде:

$$\exp(-i \xi_j) \exp(-\eta_j) = F_{0N} \exp(-i \beta_N), \quad (86)$$

где F_{0N} — модуль, а $(-\beta_N)$ — аргумент комплексной величины F_N , принадлежащий интервалу $(0, -2\pi)$. Комплексное уравнение (86), очевидно, разделяется на два действительных

$$\xi_j = \beta_N + 2\pi m, \quad (m = 0, 1, 2, \dots), \quad (87)$$

$$\exp(-\eta_j) = F_{0N}. \quad (88)$$

Из уравнения (88) непосредственно следует условие на модуль величины F_N :

$$F_{0N} \leq 1, \quad (89)$$

в котором знак равенства отвечает случаю прозрачного j -го слоя, для которого

$$\varepsilon_{j2} = 0, \quad \eta_j = 0. \quad (90)$$

Условием (89) определяется выбор знака перед корнем выражения (77), однако надо иметь в виду, что данное условие строго выполняется, если точно известны все параметры N -слойной системы.

В данной работе метод Холмса не интересует нас в плане непосредственного определения параметров многослойной системы. В то же время приведенные в этом разделе уравнения (87) и (88) представляют большой интерес, но уже несколько другого характера в связи с решением математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для многослойных систем с поглощающими слоями, особенно, если один из поглощающих слоев имеет относительно большую толщину.

4. ОБЩИЕ СВОЙСТВА РЕШЕНИЯ ОСНОВНОГО УРАВНЕНИЯ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ МНОГОСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ С ПОГЛОЩАЮЩИМ СЛОЕМ ОТНОСИТЕЛЬНО БОЛЬШОЙ ТОЛЩИНЫ. МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Рассмотрим N -слойную систему, в которой j -й слой обладает поглощением и имеет относительно

большую толщину. Как увидим ниже, понятие относительно большой толщины здесь точно такое же, как и для прозрачных слоев, описанных в работе [3].

Подставив в уравнение (87) выражение (85) для ξ_j , получим формулу для толщины пленки:

$$d_j = \left(\frac{\beta_N}{2\pi} \right) D_{0j} + m D_{0j}, \quad (m = 0, 1, 2, \dots). \quad (91)$$

Запишем эту формулу в виде

$$d_j = d_{0j} + m D_{0j}, \quad (92)$$

где

$$d_{0j} = \left(\frac{\beta_N}{2\pi} \right) D_{0j}. \quad (93)$$

Поскольку β_N изменяется в пределах интервала $(0, 2\pi)$, то величина d_{0j} удовлетворяет условию

$$0 \leq d_{0j} < D_{0j}. \quad (94)$$

В случае прозрачной пленки величина D_{0j} , определяемая формулой (85), играет роль периода по толщине d_j для поляризационных углов Ψ и Δ . В случае же поглощающей пленки углы Ψ и Δ уже не обладают периодичностью по толщине, однако и в том, и в другом случае периодичностью по толщине d_j с периодом D_{0j} обладает величина β_N , зависящая от толщины пленки через углы Ψ и Δ . С учетом (91–93)

$$\beta_N(d_j) = 2\pi \frac{d_j - m D_{0j}}{D_{0j}} = 2\pi \frac{d_{0j}}{D_{0j}} = \beta_N(d_{0j}) \quad (95)$$

и, следовательно,

$$\beta_N(d_{0j} + m D_{0j}) = \beta_N(d_{0j}). \quad (96)$$

Таким образом, независимо от характера пленки (прозрачная или поглощающая) полная толщина d_j представляется формулой (92), в которой выделяется целое число (начиная от 0) периодов D_{0j} и остаток d_{0j} , меньший величины периода (см. (94)). Период D_{0j} , а следовательно, и остаток d_{0j} зависят от угла падения φ_0 .

Относительно толстой мы называем пленку, толщина которой удовлетворяет условию

$$d_j > D_{0j}, \quad (97)$$

т. е. d_j содержит в себе несколько (как минимум, один) периодов. При исследовании многослойных

систем с такими пленками определение числа периодов, т. е. определение целого числа m из формулы (92) является важнейшей задачей.

В данной работе нас интересуют относительно толстые поглощающие пленки. В принципе, для определения числа периодов, содержащихся в полной толщине d_j поглощающей пленки, можно было бы использовать уравнение (88). Это уравнение после несложных преобразований, связанных с использованием формул (85) и (87), приобретает вид

$$\exp\left(-(\beta_N + 2\pi m)\frac{\varepsilon_{j2}}{2g_{j1}^2}\right) = F_{0N}. \quad (98)$$

Уравнение (98) в общем случае многослойной поглощающей среды, очевидно, не позволяет определить все неизвестные параметры, включая целое число m , а это означает, что необходимо использовать систему уравнений (98), отвечающих некоторому набору углов падения φ_0 . В этом случае предполагается, что толщина d_j определится из формул (92) и (93).

Однако такой подход, представляющий собой обобщение метода Холмса на многослойные среды, по определенным причинам не является удовлетворительным. Обратная задача эллипсометрии для многослойных сред с поглощающими относительно толстыми слоями обладает выраженной математической некорректностью. Особенно это проявляется при исследовании нарушенных слоев на поглощающих материалах, например на полупроводниках. В этом случае приходится учитывать также естественную окисную пленку на поверхности материала. Очень малая толщина окисной пленки, большая протяженность и оптическая неоднородность (по толщине) нарушенного слоя, а также слабое отличие оптических постоянных нарушенного слоя от объемных значений превращают поверхность поглощающих материалов в сложный для исследования объект. Обратную задачу эллипсометрии для таких систем приходится решать с учетом большого числа неизвестных параметров, а это выдвигает жесткие требования к методам решения обратной задачи.

Для решения обратной задачи, как и в работе [3], посвященной исследованию многослойных систем с относительно толстыми прозрачными пленками, будем использовать измерения поляризационных углов Ψ и Δ на многих углах падения, рассматривая в качестве целевой функции соответствующую среднеквадратичную невязку. Набор углов падения должен быть таким, чтобы на нем проявлялись характерные особенности в поведении поляризационных углов, связанные с углами полной поляризации.

Анализ ситуации, связанной с зависимостью от угла падения величин d_{0j} , и D_{0j} , и целого числа m , определяющих полную толщину d_j поглощающего слоя (см. (92)), носит точно такой же характер, как и в работе [3]. Данный анализ показывает, что при решении обратной задачи определению подлежат величины d_{0j} и m , отвечающие только какому-то одному углу падения из используемого набора, например минимальному углу. Это означает, что в основное уравнение эллипсометрии при расчете углов Ψ и Δ для всего набора углов падения подставляется выражение (92), отвечающее выбранному углу падения.

Для решения обратной задачи в случае многослойной поглощающей системы, как и в работе [3], нами использован комплексный метод Бокса [8]. Этот метод, если использовать процедуру пошаговой минимизации, подробно описанную в той же работе [3], дает неплохие результаты при поиске неизвестных параметров системы, число которых не превышает 7–8. При определении большего числа параметров математическая программа, разработанная на основе прямого использования метода Бокса, дает уже неудовлетворительные результаты. Как раз такая ситуация и возникает при исследовании нарушенных слоев на поглощающих материалах, когда приходится учитывать еще и прозрачный слой естественного окисла. В связи с этим мы существенно модифицировали метод Бокса. Использование метода Бокса приобретает гораздо более сложный характер. Это относится и к набору точек комплекса, и к выбору начальной точки, но и в том, и в другом случае соответствующие процедуры по-прежнему основаны на статистическом подходе. Особое значение при исследовании сложной поглощающей системы, один из слоев которой имеет произвольную толщину (может быть относительно толстым), является разработка новых критериев выбора оптимального решения обратной задачи. Для данного сложного случая критерий выбора, использованный в работе [3], уже не является достаточным. Поэтому разработаны новые критерии выбора оптимальной точки, основанные на использовании формул метода Холмса, обобщенного на многослойные системы. Именно поэтому в настоящей работе мы подробно остановились на данном обобщении метода Холмса.

На всех этих вопросах, касающихся решения обратной задачи эллипсометрии для сложных поглощающих систем, мы подробно остановимся в отдельной работе, посвященной исследованию конкретных объектов. При этом важные выводы будут сделаны и на основе численного эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 2. С. 46–57.
2. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2005. Т. 15, № 3. С. 63–76.
3. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 1. С. 35–46.
4. Семененко А.И. // Украинский физический журнал. 1983. Т. 28, № 10. С. 1453–1460.
5. Дагман Э.Е., Семененко А.И. // Украинский физический журнал. 1981. Т. 26, № 5. С. 820–826.
6. Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семененко А.И. и др. Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979. 422 с.
7. Holmes D.A. On the calculation of thin film refractive index and thickness by ellipsometry // Appl. Opt. 1967. V. 6, N 1. P. 168–173.
8. 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.)*

Материал поступил в редакцию 18.09.2006.

**ON THE NEW POTENTIALS OF ELLIPSOMETRY ARISING
FROM THE NULL OPTICAL CIRCUIT.
ELLIPSOMETRY OF REAL SURFACE STRUCTURES.
6. ELLIPSOMETRY OF MULTILAYER ABSORBING SYSTEMS.
A BRIEF OUTLINE**

A. I. Semenenko, I. A. Semenenko*

Institute of Applied Physics NAS, Ukraine, Sumy

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

The paper discusses general problems of the ellipsometry of absorbing media directly related to the inverse problem solution. The angles of perfect polarization for a single-layer system with an absorbing film of arbitrary thickness are studied. A fundamental equation of the ellipsometry of an N -layer system with a particular j -layer based on recurrent relationships is considered in detail. The Holms method is extended to the multi layer medium case. A general characteristic of the approach to the solution of the inverse ellipsometry problem for multilayer absorbing systems is given. It is based on new criteria of finding an optimal solution using basic formulas of the Holms method extended to N -layer systems.