ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2007, том 17, № 1, с. 53–61

ИССЛЕДОВАНИЯ, ПРИБОРЫ, МОДЕЛИ И МЕТОДЫ АНАЛИЗА

УДК 535.5.511:531.7

© А. И. Семененко, И. А. Семененко

О НОВЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ "НУЛЕВОЙ" ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМОЙ. ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ РЕАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР. 7. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ ОБЪЕМНЫХ МАТЕРИАЛОВ. МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО НЕРАЗРУШАЮЩЕГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ ПОВЕРХНОСТИ

Рассмотрены методы решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии. Предложен новый критерий выбора оптимального решения, успешно опробованный в численном эксперименте. На основе результатов численного эксперимента предложен метод последовательного неразрушающего восстановления оптического профиля поверхности. Новый критерий использован также для определения параметров сверхтонких окисных пленок на кремнии, при этом получены физически обоснованные результаты.

ВВЕДЕНИЕ

Метод эллипсометрии очень чувствителен к изменению каждого параметра отражающей системы. В частности, игнорирование реальной структуры отражающей поверхности при нахождении оптических постоянных объемных материалов (подложки) приводит к тому, что мы в этом случае определяем некоторые эффективные оптические постоянные, отличающиеся от истинных. Использование эффективных значений параметров подложки для расчета толщины и оптических постоянных нанесенных на эту подложку пленок приводит к определенным, иногда значительным ошибкам. По этой причине при исследовании оптических свойств различных материалов приходится считаться с наличием на отражающих поверхностях естественных окисных пленок, переходных слоев, шероховатостей. Особо следует отметить очень важную роль нарушенных поверхностных слоев. Но исследование структуры реальной поверхности представляет и большой самостоятельный интерес, поэтому одновременное определение параметров подложки и отражающей поверхности является исключительно важной задачей эллипсометрии. При этом надо учитывать также и потребности спектральной эллипсометрии. Спектральная эллипсометрия обладает большими возможностями, однако в ее практических приложениях возникает необходимость предварительного знания, причем с достаточно большой точностью, дисперсии оптических постоянных базовых материалов, составляющих поверхностные структуры. Определение дисперсии оптических постоянных с достаточной точностью является трудной задачей, особенно для поглощающих материалов. Здесь можно ожидать очень крупных отклонений от истинных значений, обусловленных игнорированием реальной поверхностной структуры.

Нарушенные поверхностные слои относительно слабо отличаются от объема по оптическим постоянным, но, как правило, характеризуются большой толщиной (до десятков микрометров); поэтому их учет является обязательным при определении оптических постоянных различных материалов. В работе [1] были получены новые результаты, связанные с нарушенными поверхностными слоями на различных материалах. На основе оригинальных теоретических результатов создана математическая программа, позволяющая на основе сложных моделей определять параметры нарушенных слоев любой толщины (порядка нескольких десятков микрометров) на поверхности прозрачных материалов. Для соответствующего отбора точек минимума и выбора из них точки глобального минимума разработана специальная процедура. Однако в этой работе не ставилась задача реализации предельного перехода к однородной подложке, оптические постоянные которой совпадают с оптическими постоянными объемного материала.

Задача существенно усложняется при исследовании нарушенных слоев на поглощающих материалах (например, на полупроводниках), обладающих естественной окисной пленкой на поверхности, причем такая пленка во многих случаях имеет сверхмалую толщину. Окисная пленка и поглощающие нарушенные слои, обладающие большой протяженностью и оптической неоднородностью по толщине, превращают поверхность поглощающих материалов в сложный для исследования объект. В этом случае резко возрастает по сравнению с прозрачными материалами число неизвестных параметров. Кроме того, малая толщина окисной пленки и слабое отличие оптических постоянных нарушенного слоя от объемных значений являются основной причиной того, что обратная задача эллипсометрии для таких систем становится математически некорректной, причем в значительной степени. Если к тому же ставится задача определения с достаточной точностью оптических постоянных объемного материала (однородной подложки), то проблема еще более усложняется. Как отмечено в работе [2], разработанная ранее математическая программа (см. [1]) с учетом особенностей, обусловленных поглощением материалов, существенно модифицирована. При этом особое внимание обращено на разработку новых критериев выбора оптимального решения обратной задачи. Для данного сложного случая критерий выбора, использованный в работе [1], уже не является достаточным.

Основной целью данной работы является создание новых подходов к определению оптических постоянных различных материалов, а заодно и структуры поверхности, включающей окисные пленки и нарушенные слои, причем подразумеваются не только поглощающие материалы.

1. ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СВЕРХТОНКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛЕНОК

Трудности в решении обратной задачи эллипсометрии, проявляющиеся при попытке определения параметров сверхтонких (менее 10 нм) прозрачных поверхностных пленок на некоторой подложке, проанализированы в работах [3–6] на примере сверхтонкой пленки двуокиси кремния на кремнии (SiO_2—Si). В этих работах оптические постоянные кремния заданы, что является существенным ограничением. Ниже мы откажемся от этого ограничения, но сначала дадим краткий обзор тех результатов работ [3–6], которые непосредственно связаны с использованием классического подхода к решению обратной задачи эллипсометрии. Здесь под классическим подходом понимается выбор решения по абсолютному (наиболее глубокому) минимуму функционала обратной задачи.

Обратная задача для прозрачных пленок достаточной толщины при известных оптических константах подложки довольно проста и может быть решена с помощью номограммы [7]. Однако при переходе к сверхтонким прозрачным пленкам ситуация резко меняется. Параметры таких пленок очень неустойчивы относительно экспериментальных ошибок поляризационных углов, в первую очередь угла Ψ. Анализ циклов номограммы показывает следующее. Если экспериментальная ошибка сдвигает Ψ в сторону меньших значений (влево на номограмме), то показатель преломления сверхтонкой пленки существенно увеличивается, достигая нереальных для SiO_2 значений, в то время как толщина d_1 относительно стабильна. Если же экспериментальная ошибка сдвигает угол Ψ в сторону больших значений (вправо на номограмме), то в этом случае ситуация более сложная. Показатель преломления по-прежнему совершает бросок, но к значению $n_1 = 1$, также достигая совершенно нереальной величины. Что касается толщины пленки, то ее значение увеличивается во много раз.

Таким образом, обратная задача для сверхтонкой прозрачной пленки обладает выраженной математической некорректностью. Ее решение на основе классического подхода, не учитывающего такую некорректность, приводит к абсолютно нереальным результатам.

К математической некорректности при решении обратной задачи для сверхтонких поверхностных пленок может приводить и неточный выбор модели отражающей среды, проявляющийся в пренебрежении даже очень тонким переходным слоем на границе между пленкой и подложкой, а также нарушенным слоем на подложке. В этом случае поведение параметров сверхтонкой поверхностной пленки аналогично рассмотренному выше. К таким же результатам приводит и неточное задание оптических параметров подложки.

Теоретический анализ, проведенный в работах [3–6] для сверхтонких поверхностных пленок с использованием классического подхода к решению обратной задачи, нашел яркое подтверждение при экспериментальном исследовании образцов, каждый из которых представляет собой сверхтонкую пленку SiO_2 на кремнии (см. работу [3]). Были рассмотрены две группы образцов; оптические постоянные подложки (на длине волны $\lambda = 632.8$ нм) фиксировались:

$$n_0 = 3.865, \qquad k_0 = 0.023. \tag{1}$$

Для образцов первой группы реализуется одна из описанных выше ситуаций, показатель преломления пленки $n_1 \to 1$, а ее толщина d_1 достигает значений 30–35 нм. Для образцов второй группы реализуется уже вторая ситуация, для них $n_1 \to 3$, а толщина d_1 изменяется относительно мало. Эти эффекты особенно отчетливо проявляются для предельно тонких пленок, сохраняясь до толщин ~10 нм. Полученные результаты можно объяснить совместным влиянием экспериментальных ошибок и неточным выбором модели отражающей системы, включая ошибки в задании оптических постоянных кремниевой подложки.

Эффект, наблюдаемый при исследовании сверхтонких пленок, очевидно, должен ослабевать с увеличением толщины пленки, что, действительно, наблюдается на исследуемых образцах. Данный эффект зависит также и от количества углов падения в используемом для определения функционала обратной задачи наборе. С увеличением набора углов падения эффект ослабевает, хотя отмеченная тенденция сохраняется.

Исследуя реальные образцы со сверхтонкими пленками, необходимо всегда помнить об экспериментальных ошибках в определении поляризационных углов Ψ и Δ. Для сверхтонких пленок это влияние, конечно, огромно. В то же время систематичность бросков в значениях параметров пленки, наблюдаемая как для образцов первой, так и для образцов второй групп, может быть объяснена, прежде всего, неадекватным выбором модели отражающей среды и ошибками в задании оптических постоянных подложки.

Представляет интерес исследование подобных образцов для случая, когда неизвестными считаются не только параметры пленки, но также и оптические постоянные подложки. Такая задача ближе к физической реальности, хотя модель остается той же самой. В этом случае интересно выяснить, какой из элементов отражающей системы — пленка или подложка — в большей степени подвержен влиянию математической некорректности обратной задачи. Для этого мы использовали результаты экспериментальных измерений углов Ψ и Δ на образцах второй группы, учитывая, что эти измерения проведены на существенно большем наборе углов падения (от 50° до 75° через 2.5°), нежели на образцах первой группы. Величина такого набора проявится в дальнейшем при рассмотрении методов получения устойчивых результатов для изучаемых образцов.

Исследование образцов второй группы, проведенное в предположении, что неизвестными являются также и оптические постоянные подложки, привело к следующему основному результату. Показатель преломления подложки слабо отклоняется (в сторону меньших значений) от указанного в (1), однако заметно уменьшается коэффициент поглощения, истинное значение которого не столь уж велико. В то же время поведение параметров сверхтонкой пленки, в основных чертах, остается прежним. Это может означать, что математическая некорректность обратной задачи сохраняется и в этом случае, причем основная нагрузка, обусловленная математической некорректностью, приходится на сверхтонкую пленку. Понятно также, что незначительное, на первый взгляд, отклонение найденных оптических постоянных подложки от их истинных значений является существенным для сверхтонкой окисной пленки. Безусловно, такая ситуация связана, прежде всего, с неучтенным нарушенным слоем, оптические постоянные которого слабо отличаются от объемных.

2. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИ НЕКОРРЕКТНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

Описанные в предыдущем разделе результаты, касающиеся сверхтонких пленок на подложке с неучтенной поверхностной структурой, получены при использовании классического подхода к решению обратной задачи эллипсометрии. Для интерпретации экспериментальных результатов был использован комплексный метод Бокса (модифицированный метод Нелдера—Мида) [8]. Основные результаты, связанные с классическим подходом к решению некорректной обратной задачи эллипсометрии для сверхтонких поверхностных пленок, приведены в работе [3]. Эти результаты показали, что главной проблемой являются разработка методов решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии и обоснование новых, наиболее рациональных с точки зрения эллипсометрии, критериев выбора оптимальной точки. Для настоящей работы эта проблема является основной.

Использование многоугловых измерений, когда число уравнений значительно превышает число неизвестных параметров, практически само по себе не приводит к уходу от некорректности. Здесь сказывается еще и фактор плохой обусловленности системы основных уравнений эллипсометрии, отвечающих набору углов падения светового пучка. Классический подход к исследованию поверхностных структур, связанный с проведением многоугловых измерений, несмотря на его очевидные недостатки может получить существенное развитие в связи с привлечением методов решения некорректных математических задач [9], к числу которых относится и обратная задача эллипсометрии для сверхтонких поверхностных пленок. Но и в случае, когда задача не является истинно некорректной, использование методов решения некорректных математических задач приводит к существенному улучшению результатов [9].

Для решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии мы используем общую идеологию решения некорректных математических задач, и прежде всего основное положение теории регуляризации о существовании точки оптимального решения [9]. В работах [4–6, 10] отмечен и используется существенный момент, согласно которому процедура минимизации функционала среднеквадратичной невязки S_0, осуществляемая по правилам теории регуляризации [9], равнозначна пошаговой минимизации функционала S_0, осуществляемой обычными методами без привлечения регуляризирующей добавки. Однако здесь важно, что процедура пошаговой минимизации должна обеспечивать наиболее крутой спуск к точке глобального минимума. На стадии практической реализации такого подхода задача сводится к пошаговой минимизации (с отмеченной особенностью) функционала S_0 с остановкой на том шаге, которому отвечает точка оптимального решения. Поэтому важнейшей проблемой при решении некорректных задач является выбор соответствующего критерия остановки [9]. Наиболее часто используется очевидный критерий

$$S_0 \le \delta^2, \tag{2}$$

где δ — средняя ошибка в измерении Ψ и Δ.

Большой численный эксперимент и обработка данных реального эксперимента показали [4–6, 10], что критерий остановки (2), особенно для сверхтонких пленок (в области истинной некорректности), даже при использовании в одном функционале невязки S_0 данных многоугловых измерений, переопределяющих задачу, практически непригоден. Это связано с тем, что величина δ определяется не только чисто приборными ошибками, но также и состоянием отражающей поверхности, ее неоднородностью [11]. Эти две составляющие величины δ, в принципе, можно разделить, однако определение даже приборной составляющей, вообще говоря, затруднено ввиду ее зависимости от характеристик отражающего объекта. В связи с этим возникает необходимость обоснования и использования новых критериев остановки.

В работе [10] дана детальная характеристика одного из методов решения математически некорректной обратной задачи, использованного для интерпретации экспериментальных результатов, относящихся к сверхтонким пленкам [4–6, 10]. Дадим краткий обзор этого метода.

В работах [4–6, 10] использован статистический подход. Для этого задача превращена в многомерную. Рассмотрен достаточно большой набор углов падения; каждому углу φ_{0i} из этого набора $(i = 1, 2, \ldots, N_0)$ сопоставлена пара (d_i, n_i). Из-за экспериментальных ошибок и неадекватности модели эти пары, определенные при классическом подходе к решению обратной задачи на соответствующих углах падения, заметно различаются между собой и совершенно нереальны. В результате в выражении для функционала невязки S_0 каждая пара теоретических значений поляризационных углов (Ψ_i, Δ_i) зависит от параметров (d_i, n_i). Размерность m многомерного пространства, образованного неизвестными параметрами (d_i, n_i), очевидно, составляет

$$m = 2N_0. \tag{3}$$

Выбранная модель наиболее удобна для анализа. Основное ее преимущество состоит в том, что абсолютный минимум каждого слагаемого функционала невязки, а значит и всего функционала, равен нулю, что позволяет легко контролировать приближение к этому минимуму, избегая локальных ловушек путем подбора и совершенствования метода оптимизации.

На основе комплексного метода Бокса [8] для указанной модели разработана математическая программа, позволившая провести большой численный эксперимент, обработать экспериментальные данные и сделать важные выводы относительно выбранных критериев остановки. При этом существенно, что начальная точка выбирается в области основных ограничений по d и n случайным образом.

Для реализации процедуры пошаговой минимизации функционала S_0, проводимой без учета стабилизирующей добавки, поиск минимума на первом этапе осуществляется в пределах сферы сравнительно небольшого радиуса с центром в начальной точке. Найденная точка промежуточного минимума затем становится центром новой сферы и т. д. Радиус сферы в процессе приближения к точке абсолютного минимума регулируется. В пределах каждой сферы используется метод Бокса, причем точки комплекса Бокса задаются случайным образом, а их общее число определяется размерностью пространства.

У реальной (истинной) точки все d_i и все n_i $(i = 1, 2, \ldots, N_0)$ одинаковы, т. е. среднеквадратичный разброс толщин и показателей преломления равен нулю. Оптимальная точка по всем координатам максимально приближается к реальной, что определяется минимальным среднеквадратичным разбросом d и n. В то же время точка абсолютного минимума по среднеквадратичному разбросу гораздо дальше отстоит от реальной. Различаются они и по средним значениям d и n.

Таким образом, в качестве критерия остановки можно использовать минимальное значение среднеквадратичного разброса d и n. При этом в качестве параметров пленки необходимо выбирать средние значения d и n в оптимальной точке.

Поскольку перемещение точек комплекса Бокса в пределах каждой элементарной сферы определяется значениями полного функционала невязки S_0 в этих точках, а сами точки задаются случайным образом, то достижение промежуточного минимума, связанное с уменьшением S_0, совсем не означает, что уменьшаются все слагаемые полного функционала. Часть слагаемых уменьшаются, а остальные увеличивают свои значения. При этом двумерные точки (d_i, n_i), имеющие в общем направленное к точке абсолютного минимума движение, ведут себя относительно своего центра тяжести в процессе перемещения точки многомерного минимума вдоль траектории спуска хаотичным образом.

Вблизи оптимальной точки поведение двумерных векторов становится особым. Здесь напрашивается предположение, что в оптимальной ситуации центр тяжести двумерных точек замедляет свое перемещение. При этом характер поведения двумерных точек относительно их центра тяжести становится в какой-то степени более упорядоченным. Они как бы вращаются относительно данного центра, практически не изменяя среднеквадратичный разброс G и функционал S_0. В связи с этим в работе [10] подробно рассмотрены критерии остановки, связанные с производными от S_0 и G по перемещению вдоль траектории спуска.

В работах [4–6] рассмотренная методика применена для исследования сверхтонких пленок двуокиси кремния на кремнии. Это — те две группы образцов, которые исследованы с использованием классического подхода. Ограниченный набор углов падения (использовались 5 углов) и, следовательно, не слишком большой набор неизвестных параметров [10] не позволили в полной мере проявиться законам математической статистики. Тем не менее, в этих работах были получены близкие к реальным значения толщин и показателей преломления естественных окисных пленок. При этом был получен еще один важный результат. В случае слабой некорректности, когда определенные классическим путем пары (d_i, n_i) довольно случайно группируются вокруг истинной точки, критерий, связанный с минимизацией среднеквадратичного разброса, и критерии, связанные с соответствующими производными, приводят к практически одинаковому результату. Однако в случае истинной некорректности хорошо работают только критерии, относящиеся к производным. Эти производные необходимо использовать во взаимодействии.

Предложенный в работах [4–6, 10] подход к решению некорректной обратной задачи эллипсометрии, предлагающий новые критерии выбора оптимальной точки, приводит к устойчивым результатам и позволяет успешно исследовать поверхностные пленки толщиной от 2 до 10 нм. Но данный подход весьма трудоемок даже при исследовании всего лишь одной пленки; попытки распространить его на более сложные поверхностные структуры наталкиваются на значительные практически непреодолимые трудности. Необходим новый подход к исследованию сложных поверхностных структур, который позволил бы решить проблему определения оптических постоянных объемных материалов. В следующем разделе настоящей работы рассматриваются новые критерии выбора оптимального решения обратной задачи, позволяющие, в принципе, решить данную проблему.

3. НОВЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИ НЕКОРРЕКТНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ СЛОЖНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР

Обратную задачу эллипсометрии, учитывающую сложный характер поверхностных структур, по-прежнему будем решать на основе многоугловых измерений, рассматривая в качестве целевой функции S_0 соответствующую среднеквадратичную невязку. При этом очень важно, чтобы используемый набор углов падения включал в себя не только угол Брюстера. Необходимо достаточно тщательное экспериментальное описание тех участков кривых $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, которым соответствуют достаточно широкий интервал вокруг острия для угла Ψ и вся размытая ступенька для Δ. Это связано с тем, что указанные участки наиболее чувствительны к изменению параметров поверхностных структур. И еще раз обратим внимание на характер описания слоев, толщины которых превышают величину соответствующих периодов (см. работы [1, 2]).

Для решения обратной задачи, как и в предыдущих работах [1, 4–6, 10], используем комплексный метод Бокса [8]. Во всех этих работах применяется математическая программа, основанная на прямом использовании метода Бокса. Она дает неплохие результаты при поиске 7–8 неизвестных параметров системы. Но даже в этом случае, если иметь в виду процедуру пошаговой минимизации вдоль траектории наиболее крутого спуска к точке глобального минимума, такая программа не совсем оправдывает себя. Тем более она не годится при определении оптических констант объемных материалов, особенно поглощающих, когда приходится учитывать очень сложный характер поверхностных структур. Для поглощающих материалов необходимо также учитывать прозрачный слой естественного окисла, который может быть сверхтонким, а в этом случае, подробно описанном в предыдущем разделе, возникают серьезные дополнительные трудности. В связи с этим возникает необходимость существенной модификации метода Бокса.

Нами разработана новая математическая программа. Использование метода Бокса приобретает гораздо более сложный характер. Это относится и к выбору начальной точки, и к набору точек комплекса, но во всех случаях соответствующие процедуры по-прежнему основаны на статистическом подходе. Выделим наиболее существенные моменты данной программы.

Пространство, образованное неизвестными параметрами отражающей системы, определенным образом структурировано. Это позволило существенно увеличить число неизвестных параметров системы без увеличения количества точек в наборе Бокса. Разработана специальная процедура, позволяющая последовательно (пошагово) приближаться к точке глобального минимума по траектории наиболее крутого спуска. Это имеет исключительное значение для использования критериев выбора оптимального решения обратной задачи.

Особое значение при исследовании сложной отражающей системы, в том числе поглощающей, имеет разработка новых критериев выбора оптимального решения обратной задачи. Для данного сложного случая критерий выбора, использованный в работе [1], а тем более критерии, опробованные в работах [4–6, 10], уже не являются достаточными. Поэтому разработаны новые критерии выбора оптимальной точки, основанные на использовании формул метода Холмса, обобщенного на многослойные системы.

В точке оптимального решения неизвестные параметры системы обладают устойчивостью относительно изменения поляризационных углов Ψ и Δ. В основном уравнении эллипсометрии представлены комплексные экспоненты, каждая из которых зависит от параметров соответствующего однородного слоя. Устойчивость параметров каждого слоя означает также и устойчивость соответствующей экспоненты. На неустойчивость параметров экспоненты также реагируют выраженной неустойчивостью. Приведенный в работе [2] способ записи основного уравнения эллипсометрии для N-слойной системы, выделяющий в явной форме экспоненту отдельного j-го слоя, позволил обобщить на случай многослойных поглощающих сред метод Холмса [2]. Было получено выражение для экспоненты j-го слоя, определяющее ее как функцию параметров системы и углов Ψ и Δ; причем под углами Ψ и Δ понимаются как теоретические, так и экспериментальные значения этих углов. На основе таких выражений, записанных для каждого слоя системы, построен функционал S_{exp}. В процессе пошаговой минимизации основного функционала S_0 (целевой функции), осуществляемой вдоль траектории наиболее крутого спуска, оценивается функционал S_{exp}, по минимальному значению которого выбирается точка оптимального решения. В этом и заключается смысл нового критерия, определяющего выбор оптимального решения для многослойной отражающей системы. Данный критерий годится и для простейшей однослойной системы, прежде всего для системы со сверхтонкой пленкой.

В следующем разделе, используя предложенный критерий, мы проанализируем результаты численного эксперимента.

4. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ. МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО НЕРАЗРУШАЮЩЕГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ ПОВЕРХНОСТИ

Теперь проверим эффективность описанного в предыдущем разделе критерия. Прежде чем переходить к анализу экспериментальных результатов, имеет смысл провести численный эксперимент. Для этого рассмотрим отражающую систему, представляющую собой близкий к кремнию поглощающий материал с нарушенным поверхностным слоем и сверхтонкой естественной окисной пленкой на нем. Нарушенный слой аппроксимируем тремя слоями, т. е. вся поверхностная структура состоит из 4 слоев. Для параметров поверхности и подложки зададим следующие значения:

$$\begin{array}{lll} d_4 = 5.00\ \text{нм}, & n_4 = 1.50, & k_4 = 0.000; \\ d_3 = 30.0\ \text{нм}, & n_3 = 3.75, & k_3 = 0.015; \\ d_2 = 105.0\ \text{нм}, & n_2 = 3.80, & k_2 = 0.018; \\ d_1 = 60.0\ \text{нм}, & n_1 = 3.83, & k_1 = 0.020; \\ & n_0 = 3.86, & k_0 = 0.020, \end{array} \tag{4}$$

где возрастание индексов от 0 до 4 соответствует движению от подложки (0) к естественной окисной пленке (4), близкой по оптическим параметрам к SiO_2.

Мы не приводим здесь кривые зависимостей $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, отвечающие системе (4). Отметим только, что они имеют стандартный вид размытого острия для Ψ и нижней размытой ступеньки для Δ. Но важно отметить, что основным фактором, определяющим отклонение этих кривых от их идеального вида, отвечающего однородной подложке, является все-таки несмотря на ее малую толщину окисная пленка. Это обусловлено характером нарушенного слоя, слабо отличающегося по оптическим параметрам от однородной подложки. Данное утверждение легко проверить, если положить $d_4 = 0$ и проследить за соответствующим изменением кривых $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$. Такая ситуация соответствует реальным поверхностным структурам на полупроводниках, например на кремнии.

Вышеизложенное позволяет предположить, что параметры окисной пленки можно определить с достаточной точностью, если воспользоваться упрощенной моделью (однородная пленка—однородная подложка). Но естественно, что для решения обратной задачи для такой упрощенной модели необходимо использовать значения поляризационных углов Ψ и Δ, рассчитанные для полной теоретической модели (4). При этом очень существенно, чтобы полный набор используемых углов падения давал возможность детального описания кривых $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$, особенно на участках выраженного изменения углов Ψ и Δ.

Оптимальное решение обратной задачи, отвечающее упрощенной модели и полученное с использованием нового критерия, дает для параметров окисной пленки значения, очень близкие к указанным в точной модели (4). Несколько больше изменяются параметры эффективной подложки. Очевидно, интерес представляют и результаты, соответствующие классическому подходу. Точка абсолютного минимума дает для окисной пленки очень близкий к 1.0 показатель преломления и сильно завышенное (примерно в 5 раз) значение толщины пленки, т. е. наблюдается описанная в первом разделе ситуация. Понятно, что такой результат обусловлен математической некорректностью обратной задачи, вызванной в данном случае неадекватным выбором модели. Аналогичные результаты были получены и для других подобных теоретических моделей, в том числе и более сложных по нарушенным слоям. Таким образом, подтверждается эффективность нового критерия, и если основной целью является получение данных об окисной пленке, то вполне можно ограничиться использованием подхода, связанного с упрощением модели и использованием нового критерия для выбора точки оптимального решения. Особо отметим, что при решении обратной задачи для упрощенной модели неизвестные параметры не ограничивались очень узкими интервалами. Более того, неизвестные параметры оставались практически свободными. Это очень важный момент.

Была сделана также попытка, используя полученные результаты, продвинуться существенно дальше в определении параметров полной системы (4). Мы предлагаем метод последовательного неразрушающего восстановления оптического профиля поверхности. Суть этого метода состоит в следующем.

Определение параметров окисного слоя, проведенное на основе упрощенной модели с использованием нового критерия, является первым шагом. На следующем шаге используется уже двухслойная модель, причем ее верхний слой — это окисная пленка с приближенными значениями своих параметров. Что касается нижнего слоя, то он является частью нарушенного слоя с неизвестными параметрами. Совершенно естественно, что при решении обратной задачи для такой двухслойной модели параметры верхнего слоя можно ограничивать достаточно узкими интервалами, а вот параметры нижнего слоя остаются практически свободными. Существенное ограничение параметров верхнего слоя фактически не меняет характера обратной задачи на втором шаге. Использование того же критерия позволяет восстановить, хотя и приближенно, часть нарушенного слоя. Что касается верхнего слоя, то его параметры на втором шаге уточняются. На каждом следующем шаге добавляется очередной слой. Неизвестные параметры нижнего слоя в процессе поиска почти свободны, а параметры остальных слоев, приближенно определенные на предыдущих шагах, ограничиваются относительно узкими интервалами, и их значения уточняются на текущем шаге. Количество шагов в полной теоретической модели известно, для реальных же систем оно определяется сходимостью процесса. Еще раз отметим, что положительный результат при использовании данного метода непосредственно связан с применением нового критерия выбора оптимального решения обратной задачи.

Метод последовательного неразрушающего восстановления оптического профиля поверхности дал неплохие результаты для случая теоретической модели. Его использование для реальных систем требует тщательных измерений углов Ψ и Δ для большого набора углов падения. В принципе, таким путем можно с хорошей точностью определять оптические постоянные объемных материалов.

5. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХТОНКИХ ОКИСНЫХ ПЛЕНОК НА КРЕМНИИ

Привлекая измерения на образцах кремния, использованные в работах [4–6, 10], определим параметры сверхтонких пленок SiO_2 на 4 образцах кремния. Измерения углов Ψ и Δ на этих образцах были проведены на наборе углов падения от 50 до 75° с шагом 2.5°. Угол Брюстера наблюдается примерно на угле падения 75°. Результаты этих измерений приведены в работе [3]. Довольно большой шаг для углов падения и отсутствие измерений справа от угла Брюстера лишают нас возможности в полной мере использовать наиболее выразительные в смысле информативности участки кривых $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$. Численный эксперимент показал, что в этом случае еще можно определить параметры окисных пленок, но метод последовательных приближений уже не реализуется, т. е. оптический профиль поверхности не восстанавливается. По этой причине мы и ограничиваемся определением параметров пленок SiO_2.

Математическая программа с новым критерием выбора оптимального решения обратной задачи позволила получить интересные результаты для пленок SiO_2 на 4 образцах. Образцы пронумеруем так, чтобы возрастанию номера отвечало увеличение степени размытия острия для Ψ и ступеньки для Δ на экспериментальных кривых $\Psi(\varphi_0)$ и $\Delta(\varphi_0)$. Кроме того, для каждого образца оптимальное решение снабдим номером 1, а решение, соответствующее точке абсолютного минимума функционала S_0, номером 2. С учетом данного пояснения ниже приведены полученные результаты.

1-й образец

1. $d_1 = 1.91$, $n_1 = 1.441$, $k_1 = 0.008$;
 $n_0 = 3.858$, $k_0 = 0.000$.
2. $d_1 = 2.91$, $n_1 = 1.217$, $k_1 = 0.000$;
 $n_0 = 3.856$, $k_0 = 0.000$.

2-й образец

1. $d_1 = 3.59$, $n_1 = 1.440$, $k_1 = 0.006$;
 $n_0 = 3.846$, $k_0 = 0.010$.
2. $d_1 = 4.87$, $n_1 = 1.271$, $k_1 = 0.000$;
 $n_0 = 3.843$, $k_0 = 0.001$.

3-й образец

1. $d_1 = 6.19$, $n_1 = 1.413$, $k_1 = 0.001$;
 $n_0 = 3.851$, $k_0 = 0.010$.
2. $d_1 = 7.16$, $n_1 = 1.328$, $k_1 = 0.000$;
 $n_0 = 3.849$, $k_0 = 0.000$.

4-й образец

1. $d_1 = 16.74$, $n_1 = 1.496$, $k_1 = 0.004$;
 $n_0 = 3.862$, $k_0 = 0.019$.
2. $d_1 = 18.38$, $n_1 = 1.415$, $k_1 = 0.000$;
 $n_0 = 3.834$, $k_0 = 0.000$.

По поводу этих результатов можно сразу сказать, что оптимальные решения для всех 4 образцов приблизительно, по крайней мере качественно, повторяют результаты из работ [4–6, 10], относящиеся к тем же образцам. Обращает на себя внимание тот факт, что показатели преломления, соответствующие точкам абсолютного минимума, ниже своих оптимальных значений, причем разница между ними сокращается по мере увеличения толщины пленки (номера образца). Это связано с тем, что степень математической некорректности обратной задачи, обусловленной окисной пленкой, уменьшается с увеличением толщины этой пленки, хотя некорректность связана также и с нарушенными слоями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучение оптического профиля поверхности кремния будет продолжено в рамках данного цикла работ на основе более детальных измерений. Кроме того, используя новый критерий выбора оптимального решения, мы дополнительно изучим поверхность сапфира, а также других оптических материалов. В связи с этим детально будет проработан метод последовательного неразрушающего восстановления оптического профиля поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Семененко А.И., Семененко И.А.* // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 1. С. 35–46.
2. *Семененко А.И., Семененко И.А.* // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 4. С. 19–30.
3. *Бобро В.В., Семененко А.И.* // Научное приборостроение. 2000. Т. 10, № 4. С. 31–37.
4. *Бобро В.В., Мардежов А.С., Семененко А.И.* Обратная задача эллипсометрии для сверхтонких поверхностных пленок // Автометрия. 1997. № 1. С. 50–52.
5. *Семененко А.И., Бобро В.В., Мардежов А.С.* О решении обратной задачи эллипсометрии // Автометрия. 1998. № 1. С. 56–60.
6. *Bobro V.V., Mardezhov A.S., Semenenko A.I.* On the solution of incorrect inverse ellipsometric problem // Proc. SPIE. 1998. V. 3485. P. 354–358.
7. *Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семененко А.И. и др.* Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979. 422 с.
8. *Box M.J.* A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. V. 8. P. 42–51.
9. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 185 с.
10. *Бобро В.В., Семененко А.И.* // Научное приборостроение. 2001. Т. 11, № 2. С. 44–49.
11. *Семененко А.И., Семененко И.А.* // Научное приборостроение. 2005. Т. 15, № 2. С. 88–94.

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

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

Материал поступил в редакцию 18.12.2006.

ON THE NEW POTENTIALS OF ELLIPSOMETRY ARISING FROM THE NULL OPTICAL CIRCUIT. ELLIPSOMETRY OF REAL SURFACE STRUCTURES. 7. DETERMINATION OF BULK MATERIAL OPTICAL CONSTANTS. METHOD FOR SUCCESSIVE NON-DESTRUCTIVE RECOVERY OF THE SURFACE OPTICAL PROFILE

A. I. Semenenko, I. A. Semenenko[*]

Institute of Applied Physics NAS, Ukraine, Sumy
[*]*Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg*

Methods for solving a mathematically incorrect inverse problem are considered. A new criterion for selecting the optimal solution is suggested; the method has been successfully tested in a numerical experiment. Based on the numerical experiment results, a method for successive non-destructive recovery of the surface optical profile has been suggested. The new criterion was also used to determine parameters of super-thin oxide films on silicon; the results obtained were physically reasonable.