ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2010, том 20, № 4, с. 132–142

ДРУГИЕ ПРИБОРНЫЕ РАЗРАБОТКИ

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. 19. О ВЫБОРЕ ОПТИМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СВЕРХТОНКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛЕНОК

Предложен новый подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для сверхтонких поверхностных пленок, основанный на использовании отвечающих набору углов падения светового пучка измерений. Введены параметры-критерии, позволяющие находить оптимальное решение обратной задачи, наиболее близкое к точному решению. Результаты численного эксперимента показали большую точность оптимального решения при определении параметров сверхтонких пленок. Изучено влияние ошибок в задании оптических постоянных подложки на точность оптимального решения. Дан общий анализ особенностей обратной задачи по одновременному определению всех параметров отражающей однослойной системы со сверхтонкой пленкой.

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

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Решение обратной задачи эллипсометрии представляет собой довольно сложную проблему. Это связано с тем, что во многих случаях эта задача математически некорректна. Математическая некорректность обратной задачи эллипсометрии особенно сильно проявляется при исследовании сверхтонких поверхностных пленок, а также нарушенных поверхностных слоев.

Для нарушенных слоев характерны большие толщины и слабое отличие оптических постоянных от их объемных значений. Последнее обстоятельство и является основной причиной математической некорректности обратной задачи. Ситуация значительно усложняется тем, что толщина нарушенного слоя, как правило, значительно превосходит величину периода поляризационных углов Ψ и Δ по толщине этого слоя, т. е. приходится определять еще и номер периода [1]. Для решения обратной задачи применительно к нарушенным слоям на поверхности прозрачных материалов разработана математическая программа (см. [1]), в которой для соответствующего отбора точек минимума функционала обратной задачи и выбора из них той точки, которой соответствует оптимальное решение, использована специальная процедура. При исследовании нарушенных слоев на некоторых прозрачных материалах (на сапфире и оптических стеклах) обратная задача решалась с использованием трехслойной модели. В итоге были получены интересные результаты [1]. Однако такой подход к решению обратной задачи эллипсометрии не может быть использован при исследовании сверхтонких поверхностных пленок. Но и в случае нарушенных слоев такой способ решения задачи нуждается в существенном усовершенствовании. Необходимость в этом особенно проявляется при исследовании нарушенных поверхностных слоев на поглощающих материалах (например, на полупроводниках), обладающих естественной окисной пленкой на поверхности, причем такая пленка во многих случаях имеет сверхмалую толщину. Очень часто такая окисная пленка, еще более усиливающая математическую некорректность обратной задачи, является главным объектом исследования.

Сверхтонкие поверхностные пленки (менее 10 нм) требуют отдельного рассмотрения. Хорошо известно, что обратная задача для прозрачных пленок достаточной толщины при известных оптических константах подложки довольно проста и может быть решена с помощью номограммы [2]. Однако при переходе к сверхтонким прозрачным пленкам ситуация существенно меняется. Параметры таких пленок очень неустойчивы относительно экспериментальных ошибок поляризационных углов. В этом плане существенными оказываются даже те ошибки в определении поляризационных углов, которые обусловлены, вроде бы, приемлемой точностью лимбов оптических элементов прибора (например, неплохого прибора ЛЭФ-3М-1). Таким образом, обратная задача для сверхтонких пленок обладает выраженной математической некорректностью. Ее решение на основе классического подхода, когда неизвестные параметры определяются по абсолютному (наиболее глубокому) минимуму функционала обратной задачи и, следовательно, математическая некорректность задачи не учитывается, приводит к физически нереальным результатам. Эффект этого рода, 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. Теоретический анализ данной ситуации с привлечением экспериментальных результатов проведен в работах [3–5]. Следует также отметить, что математическая некорректность обратной задачи для сверхтонких пленок обусловлена не только экспериментальными ошибками в определении поляризационных углов, но также неточным выбором модели отражающей системы и ошибками в задании тех параметров, которые считаются известными.

Мы не будем останавливаться на общей идеологии решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии. Она достаточно подробно описана в работе [6]. В то же время в целях более четкого понимания изучаемой здесь проблемы дадим краткую характеристику предложенного в работе [6] способа решения обратной задачи для сверхтонких пленок.

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 [7] 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 [8]. 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 значение функционала $S_{\exp}$, по минимальному значению которого выбирается точка оптимального решения. В этом и заключается смысл предложенного в работе [6] критерия, определяющего выбор оптимального решения для многослойной отражающей системы. Данный критерий использовался в этой работе и для простейшей однослойной системы, прежде всего для системы со сверхтонкой пленкой.

Способ решения обратной задачи, предложенный в работе [6], это продвижение в правильном направлении. Однако у него есть серьезные недостатки. Прежде всего он слабо разработан в математическом плане. Устойчивость экспоненты относительно изменения углов Ψ и Δ должна описываться соответствующими производными по углам Ψ и Δ. А на основе этих производных необходимо записать соответствующие математические выражения, определяющие величины, по минимуму которых находятся параметры сверхтонкой пленки. Кроме того, определение устойчивости (относительно изменения углов Ψ и Δ) параметров пленки через экспоненту снижает чувствительность метода и в конечном итоге приводит к снижению точности оптимального решения обратной задачи. Наконец, не сделан анализ влияния ошибок в задании оптических параметров подложки на точность определения параметров сверхтонкой пленки. Это очень важный момент, без такого анализа нельзя уверенно говорить о возможности одновременного определения параметров сверхтонкой пленки и подложки.

В соответствии с изложенными соображениями основные задачи настоящей работы сводятся к следующим:

1. формулировка общих положений, определяющих новый подход к решению обратной задачи эллипсометрии для сверхтонких поверхностных пленок;
2. численный эксперимент для случая сверхтонкой пленки при заданных значениях оптических постоянных подложки;
3. анализ влияния ошибок в задании оптических параметров подложки на точность определения параметров сверхтонкой пленки;
4. общий анализ обратной задачи для случая одновременного определения всех параметров отражающей системы (сверхтонкая прозрачная пленка—поглощающая подложка);

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ НОВОГО ПОДХОДА К РЕШЕНИЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ СВЕРХТОНКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛЕНОК

Обратную задачу эллипсометрии по-прежнему будем решать на основе многоугловых измерений, рассматривая в качестве функционала (иначе, целевой функции) S_0 среднеквадратичную невязку следующего вида:

$$S_0 = \frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N}[(\Delta_{\mathrm{t}}[i]-\Delta_{\mathrm{e}}[i])^2 + (\Psi_{\mathrm{t}}[i]-\Psi_{\mathrm{e}}[i])^2]. \quad (1)$$

Суммирование в выражении (1) производится по набору углов падения φ_0 светового пучка, т. е. величины $\Delta_{\mathrm{t}}[i], \Psi_{\mathrm{t}}[i]$ и $\Delta_{\mathrm{e}}[i], \Psi_{\mathrm{e}}[i]$ из данного выражения — это соответственно теоретические и экспериментальные значения поляризационных углов, отвечающие i-му углу падения. Набор углов падения должен удовлетворять определенным требованиям. Данному набору должно соответствовать 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 угла Δ. Это условие связано с тем, что указанные участки наиболее чувствительны к изменению параметров поверхностных структур.

Как и в предыдущих работах, для решения обратной задачи используем комплексный метод Бокса [9]. Этот метод должен обеспечивать процесс пошаговой минимизации вдоль траектории наиболее крутого спуска к точке абсолютного минимума функционала S_0. В математической программе, разработанной нами ранее и использованной в предыдущих работах [1, 6], поиск минимума на первом этапе осуществляется в пределах сферы сравнительно небольшого радиуса с центром в начальной точке, выбираемой случайным образом. Найденная точка промежуточного минимума затем становится центром новой сферы и т.д. В пределах каждой сферы используется метод Бокса, причем точки комплекса Бокса задаются случайным образом. В программе предусмотрены специальные приемы, позволяющие успешно избегать локальных минимумов. Благодаря этим приемам ни в какой мере не понадобилось сужать область ограничений для неизвестных параметров. В пределах основной области ограничений выделяются для каждого неизвестного параметра интервалы для выбора начальной точки, причем эти интервалы подбираются таким образом, чтобы случайный выбор начальной точки обладал определенной свободой.

Для решения математически некорректной обратной задачи очень важно, чтобы процесс пошаговой минимизации обеспечивал движение к точке абсолютного минимума функционала S_0 вдоль траектории наиболее крутого спуска. Комплексный метод Бокса основан на статистическом подходе. Каждый найденный этим методом промежуточный минимум, отвечающий соответствующей элементарной сфере, определяется с некоторой точностью. При однократном выбросе комплекса точек Бокса в пределах текущей сферы соответствующий промежуточный минимум может заметно отклоняться от его истинного положения. По этой причине в пределах каждой сферы целесообразно многократно повторять процедуру Бокса, определяя некоторую последовательность точек промежуточного минимума. Но сначала задается исходный комплекс точек, причем в каждой точке определяется значение функционала S_0. Значение функционала определяется и в каждой точке промежуточного минимума, отвечающей своему комплексу точек. Значение функционала для первой точки промежуточного минимума $S_{0\min}$ сравнивается с его максимальным значением $S_{0\max}$ на точках исходного комплекса. И если выполняется условие

$$S_{0\min} < S_{0\max}, \quad (2)$$

то данная точка промежуточного минимума включается в исходный комплекс, вытесняя из него точку с максимальным значением функционала. Преобразованный таким образом исходный комплекс является исходным и для следующей (в пределах той же сферы) точки промежуточного минимума, для которой повторяется та же процедура. И так — для каждой точки промежуточного минимума из указанной последовательности таких точек в пределах одной и той же элементарной сферы. В конечном итоге мы приходим к некоторому преобразованному комплексу точек Бокса, на основе которого окончательно определяется точка промежуточного минимума в пределах текущей сферы. Для решения вопроса о целесообразности такой процедуры необходимо, чтобы число выбросов комплекса точек в пределах каждой сферы превосходило заданное количество точек в самом комплексе. В процессе использования разработанной на основе метода Бокса математической программы выяснилось, что для получения окончательной точки промежуточного минимума на основе преобразованного подобным образом исходного комплекса все еще требуется определенное количество шагов, предусмотренных методом Бокса. И лишь для некоторых элементарных сфер количество таких шагов равно нулю. Это наблюдается даже в том случае, когда определению подлежат всего лишь два неизвестных параметра, а количество точек в комплексе Бокса достигает

20, а этого более чем достаточно. Дальнейшее увеличение числа точек в комплексе Бокса наталкивается на значительные трудности, связанные с громоздкостью вычислительной процедуры и увеличением времени счета, и не приводит к улучшению результата. Описанная выше процедура по многократному выбросу (в пределах каждой элементарной сферы) комплекса точек Бокса в конечном итоге обеспечивает воспроизводимость результатов, получаемых при решении обратной задачи, что полностью подтверждает целесообразность ее использования.

Устойчивость параметров сверхтонкой пленки относительно изменения углов Ψ и Δ, естественно, определяется производными от этих параметров по углам Ψ и Δ. Однако эти производные сами по себе не могут быть использованы как критерии для выбора оптимального решения обратной задачи эллипсометрии. Это объясняется тем, что параметры пленки в процессе решения обратной задачи оказываются определенным образом связанными, причем связь эта устанавливается через некоторую функцию. Поэтому основной интерес представляют производные от этой функции по углам Ψ и Δ, причем данные производные, очевидно, выражаются через производные от отдельных параметров пленки по поляризационным углам. Мы нашли функцию, связывающую параметры сверхтонкой пленки. Производные от нее определяются для каждого угла падения из используемого набора этих углов. Введем обозначения для этих производных:

$$P[i], \qquad i = 1,...,N, \tag{3}$$

где число N определяет количество углов в наборе. Каждая производная $P[i]$ в точке абсолютного минимума функционала S_0 принимает наименьшее значение. Но опять-таки отдельные производные нельзя использовать в качестве критерия при выборе оптимального решения обратной задачи. Значение имеет близость этих производных по величине в каждой промежуточной точке, достигаемой в процессе приближения к точке абсолютного минимума функционала S_0. Степень близости производных $P[i]$, или, точнее, разброс этих производных, можно определить, используя известные математические приемы. В результате мы получили некоторый набор параметров-критериев, из которых хорошо работающими оказались 5 параметров

$$C[i], \qquad i = 1,...,5. \tag{4}$$

Здесь мы не будем уточнять ни саму функцию, связывающую параметры сверхтонкой пленки, ни производные $P[i]$, ни параметры-критерии $C[i]$. Метод, проверяемый в настоящей работе, допускает усовершенствование, касающееся многих интересных случаев проявления математической некорректности обратной задачи эллипсометрии. Эти случаи будут рассмотрены отдельно, а что касается самого подхода к решению обратной задачи, то он будет изложен в сводной работе, посвященной исследованию структуры поверхности твердых и жидких тел.

Параметры-критерии $C[i]$, как и производные $P[i]$, в точке абсолютного минимума функционала S_0 достигают наименьшего значения. Это очень важный момент. Но эти параметры-критерии необходимо также исследовать в целях выявления их локальных минимумов вдоль всей траектории в пространстве параметров пленки, образованной точками промежуточного минимума функционала S_0 и ведущей к точке абсолютного минимума этого функционала. Для этого в пределах каждой элементарной сферы, используя начальную точку (центр сферы) и точку промежуточного минимума, определяем расчетным образом (на основе конечных разностей) производные $P[i]$. Затем на основе этих производных определяем и параметры-критерии $C[i]$. Для этого привлекаются соответствующие математические выражения. Таким образом, параметры-критерии $C[i]$ находятся для каждой элементарной сферы, при этом можно считать, что они соответствуют центру сферы. Данные параметры определяются в процессе движения к точке абсолютного минимума функционала, при этом с помощью несложной процедуры устанавливаются точки, в которых проявляются их локальные минимумы. Значения параметров-критериев в точках локального минимума в процессе движения вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала, не уменьшаются монотонным образом. Они испытывают колебания, причем довольно существенные, при этом между точками локального минимума, очевидно, располагаются точки локального максимума. Анализ показывает, что в этих условиях основную роль играют те точки локального минимума, в которых параметры $C[i]$ по своему значению наиболее близки к их значению в точке абсолютного минимума функционала S_0. Иначе говоря основную роль играют наиболее глубокие точки локального минимума. Следует отметить, что параметры-критерии $C[i]$ несколько отличаются по своим свойствам, т. е. различаются и их точки локального минимума. Но это различие, касающееся последовательности точек локального минимума, незначительно. Сравнительный анализ совокупности параметров-критериев, относящийся к точке оптимального решения обратной задачи, будет дан в следующем разделе, посвященном численному эксперименту.

В идеальной ситуации, когда отсутствуют экспериментальные ошибки, а известные параметры отражающей системы заданы точно, все точки локального минимума параметров $C[i]$ не отличаются выраженной глубиной по сравнению с точкой абсолютного минимума. Положение меняется, когда появляются экспериментальные ошибки, а также неточно заданы считающиеся известными параметры отражающей системы. В такой реальной ситуации указанная выше траектория движения к точке абсолютного минимума несколько сдвигается в сторону от своего идеального положения, как сдвигается и сама точка абсолютного минимума. Причем в случае сверхтонкой пленки точка абсолютного минимума может сдвигаться в сторону совершенно нереальных значений параметров пленки.

Измененная траектория, отвечающая реальной ситуации, не может резко (скачком) изменить свои свойства по сравнению с исходной траекторией (траекторией идеального случая). Единственная выраженная (по глубине) точка минимума на исходной траектории, совпадающая в пространстве параметров отражающей системы с идеальной точкой абсолютного минимума функционала S_0, очевидно, представлена точными параметрами отражающей системы. И эта точка минимума, определяющая точное решение обратной задачи, обязательно имеет свой образ на реальной (измененной) траектории. Назовем этот образ точкой оптимального решения обратной задачи. В точке оптимального решения параметры-критерии $C[i]$ также имеют минимум, причем этот минимум попрежнему заметно выражен по глубине. Второй выраженный по глубине минимум на реальной траектории, как можно вполне обоснованно предположить, приходится на точку абсолютного минимума функционала S_0 в конце этой траектории. Таким образом, на реальной траектории есть только два выраженных по глубине минимума параметров $C[i]$.

Как уже отмечалось, в случае сверхтонкой пленки точка абсолютного минимума как конечная точка реальной траектории может сдвигаться в сторону совершенно нереальных значений параметров пленки. Очевидно, это означает, что реальная точка абсолютного минимума никоим образом не может служить даже для приближенной оценки решения обратной задачи при исследовании сверхтонких пленок. В то же время точка оптимального решения как образ точки точного решения на исходной траектории вполне может определять, причем с достаточной точностью, решение обратной задачи эллипсометрии для случая сверхтонких пленок.

Введенные нами параметры-критерии $C[i]$ как раз и служат для целей нахождения точки оптимального решения. В процессе решения обратной задачи с использованием экспериментальных значений углов Ψ и Δ находятся два выраженных по глубине локальных минимума параметров $C[i]$. Один из них совпадает с однозначно определяемой точкой абсолютного минимума и представляет лишь относительный интерес, характеризуя в определенной мере степень математической некорректности обратной задачи. Второй же минимум позволяет найти оптимальное решение обратной задачи. Здесь надо иметь в виду, что точка оптимального решения несколько меняется при использовании различных параметров-критериев, но принципиального значения это не имеет. Как показывает численный эксперимент, такое изменение весьма незначительно. Поскольку из набора параметров-критериев трудно выделить лучший из них, то целесообразно усреднять оптимальное решение. В то же время использование различных параметров-критериев позволяет обеспечить однозначность в поисках оптимального решения. Такая ситуация иногда возникает, когда реальная ситуация характеризуется большими экспериментальными ошибками, а также существенно неточным заданием считающихся известными параметров исследуемой отражающей системы.

ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ СЛУЧАЯ ПРОЗРАЧНОЙ СВЕРХТОНКОЙ ПЛЕНКИ НА ОДНОРОДНОЙ ПОДЛОЖКЕ

Проведем численный эксперимент для случая отражающей системы, представляющей собой прозрачную сверхтонкую пленку на однородной подложке. Для показателя преломления n пленки и оптических постоянных n_0 и κ_0 подложки зададим следующие значения:

$$n = 1.50\,;\;\; n_0 = 3.865\,;\;\; \kappa_0 = 0.023\,. \tag{5}$$

Для длины световой волны выберем значение $\lambda = 632.8$ нм, характеризующее лазерный источник излучения в приборе ЛЭФ-3М-1. Используемые в численном эксперименте углы падения светового пучка изменяются от 50 до 75 град с шагом 2.50, всего 11 углов. При выбранной длине волны указанные в (5) значения оптических постоянных n_0 и κ_0 определяют кремний, а показатель преломления n пленки близок к показателю для двуокиси кремния SiO_2. Что касается выбора толщины пленки, то здесь мы рассмотрим два ее характерных значения — 2.5 и 5.0 нм.

Для проведения численного эксперимента необходимо предусмотреть возможность моделирования "экспериментальных" ошибок в поляризационных углах Ψ и Δ. Такие ошибки будем моделировать с помощью формул, в которых указана зависимость от угла падения φ_0:

$$\begin{aligned} \Psi[i] &= \Psi_0[i] + \xi_0(2r-1), \\ \Delta[i] &= \Delta_0[i] + \eta_0(2r-1), \end{aligned} \qquad (6)$$

где

$\Psi_0[i]$ и $\Delta_0[i]$ — точные значения поляризационных углов для *i*-го угла падения, отвечающие заданным значениям оптических постоянных отражающей системы (см. (5)) и выбранной толщине пленки;

$\Psi[i]$ и $\Delta[i]$ — значения поляризационных углов для *i*-го угла падения, отвечающие той же отражающей системе, но определенные (относительно их точных значений) уже с какой-то ошибкой;

r — случайное целое число в диапазоне от 0 до 1, активируемое (при выполнении математической программы) для каждого угла падения путем обращения к генератору псевдослучайных чисел Random;

ξ_0 и η_0 — величины, определяющие максимальные отклонения (в ту или другую сторону) поляризационных углов $\Psi[i]$ и $\Delta[i]$ от их точных значений $\Psi_0[i]$ и $\Delta_0[i]$.

Ошибки в поляризационных углах, определяемые на наборе углов падения φ_0 выражениями (6), носят случайный характер. Для углов Ψ и Δ они распределены случайным образом в интервалах $(-\xi_0, \xi_0)$ и $(-\eta_0, \eta_0)$.

В численном эксперименте при решении обратной задачи по-прежнему используется выражение (1) для функционала S_0, но надо иметь в виду, что в этом выражении величины $\Psi_e[i]$ и $\Delta_e[i]$ определяются формулами

$$\Psi_e[i] = \Psi[i], \quad \Delta_e[i] = \Delta[i], \qquad (7)$$

где величины $\Psi[i]$ и $\Delta[i]$ заданы выражениями (6).

Рассмотрим некоторые разновидности численного эксперимента.

Сверхтонкая пленка на однородной подложке с известными оптическими постоянными

В этом случае оптические постоянные подложки n_0 и κ_0 определяются выражениями (5), т. е. они заданы точно, без всяких ошибок. Это означает, что ошибки в поляризационных углах в данной ситуации определяются только выражениями (6) и они аналогичны реальным экспериментальным ошибкам. Эти ошибки также будем называть "экспериментальными". Задавая параметры ξ_0 и η_0, а также точные значения толщины и показателя преломления пленки, мы и находим на основе выражений (6) "экспериментальные" значения поляризационных углов, входящие в выражение (1) для функционала S_0. Показатель преломления пленки для всех рассматриваемых вариантов будем определять выражением (5). Что касается толщины пленки, то для нее, как уже указывалось выше, выбираются только два характерных значения — 2.5 и 5.0 нм. Сначала остановимся на толщине $d = 2.5$ нм. Рассмотрим несколько вариантов "экспериментальных" ошибок.

Первый вариант по величине "экспериментальных" ошибок будет наиболее слабым. Представим его, добавив еще и значение толщины пленки, в виде

$$\xi_0 = \eta_0 = 1', \quad d = 2.5 \text{ нм}. \qquad (8)$$

Здесь "экспериментальная" ошибка для каждого из углов Ψ и Δ по абсолютной величине меняется от 0 до 1 мин. Теоретические значения поляризационных углов $\Psi_t[i]$ и $\Delta_t[i]$, входящие в выражение (1) для функционала S_0, рассчитываются в процессе выполнения математической программы.

Вариант (8), несмотря на кажущуюся малость "экспериментальной" ошибки, является очень важным. Такого же рода ошибки возникают при экспериментальных измерениях на приборе с точностью лимбов оптических элементов в 30 с, например при измерениях на приборе ЛЭФ-3М-1. Но даже такие ошибки при указанной в (8) толщине пленки превращают обратную задачу в математически некорректную. Это означает, что использование в данной ситуации классических методов для решения обратной задачи может приводить к неправильным результатам для сверхтонкой пленки. Иначе говоря, точка абсолютного минимума функционала S_0, по которой при классическом подходе к решению обратной задачи определяются параметры пленки, заметно сдвигается от точки, которой соответствуют точные значения параметров пленки. Исходя из соображений удобства для точки абсолютного минимума функционала S_0 введем обозначение

$$\operatorname{Abs\,Min} S_0 . \qquad (9)$$

Решая обратную задачу для варианта (8) и используя обозначение (9), запишем результаты для параметров пленки, соответствующие точке $\operatorname{Abs\,Min} S_0$:

$$\operatorname{Abs\,Min} S_0 \;—\; d = 2.410 \text{ нм}, \; n = 1.547 . \qquad (10)$$

Как видим, результаты, если иметь в виду, что речь идет о малых приборных ошибках и определении всего лишь двух параметров пленки, не являются такими уж хорошими. Особенно настораживает результат для показателя преломления пленки. Но даже если полученные таким способом результаты в силу характера решаемой проблемы все-таки приемлемы, все равно надо понимать и знать о возможности получения гораздо более точных значений параметров сверхтонкой пленки. Если же есть еще и понимание того, что в реальной ситуации на подложке, как правило, существует еще и нарушенный поверхностный слой, вносящий свои коррективы в решение обратной задачи, то использование методов решения математически некорректной обратной задачи является обязательным и в случаях, аналогичных варианту (8).

Приведем теперь результаты для варианта (8), полученные с использованием параметров-критериев $C[i]$. Для получения оптимального решения обратной задачи использованы все 5 параметров-критериев. И все эти параметры дают качественно одинаковые результаты. Поскольку из них нельзя выделить лучший, приведем усредненный результат:

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.505 \text{ нм}, \quad n = 1.4977 . \qquad (11)$$

При сравнении результатов (10) и (11) бросается в глаза очень высокая точность в определении параметров пленки, достигнутая при использовании параметров-критериев.

Рассмотрим еще три варианта "экспериментальных" ошибок, для которых величины ξ_0 и η_0 принимают значения 3, 5 и 10 мин. И все эти три варианта вполне могут проявиться в обычных серийно выпускаемых приборах с одной и той же точностью лимбов в 30 с. Это связано с тем, что точность отсчета по лимбам оптических элементов не является единственной причиной возникновения экспериментальных ошибок при измерении поляризационных углов. Есть и другие источники ошибок. Это прежде всего использование неточных значений параметров фазового компенсатора, а также трудности с определением точных положений гашения оптических элементов в "нулевом" эллипсометре. Определение параметров компенсатора с достаточной точностью — это очень серьезная проблема, не решенная полностью до сих пор. Что касается измерения положений гашения, то основная проблема здесь не в точности лимбов. Процедура измерения положений гашения очень сложна в окрестности угла Брюстера, а это очень интересная для использования область углов падения. По этой причине рассмотрение в численном эксперименте еще 3 упомянутых выше вариантов "экспериментальных" ошибок представляет непосредственный практический интерес. Последовательно опишем эти варианты. При этом надо иметь в виду, что для каждого варианта рассматривается какое-то одно распределение случайных ошибок. При переходе к другим распределениям результаты несколько меняются, однако общие выводы, касающиеся этих результатов, сохраняются.

Обратимся ко второму варианту:

$$\xi_0 = \eta_0 = 3', \qquad d = 2.5 \text{ нм} . \qquad (12)$$

Здесь для параметров пленки, соответствующих точке $\text{Abs}\,\text{Min}\, S_0$, имеем:

$$\text{Abs}\,\text{Min}\, S_0 \text{ — } \quad d = 2.825 \text{ нм}, \quad n = 1.3877 . \quad (13)$$

Очевидно, результаты (13) неприемлемы при любых разумных требованиях к точности определяемых параметров. Поэтому использование параметров-критериев $C[i]$ в данной ситуации обязательно. В итоге приходим к следующему оптимальному решению обратной задачи относительно параметров пленки:

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.506 \text{ нм}, \quad n = 1.4972 . \qquad (14)$$

Сравнивая результаты (14) и (11), видим, что точность оптимального решения при переходе ко второму варианту случайных "экспериментальных" ошибок сохраняется.

В третьем варианте:

$$\xi_0 = \eta_0 = 5', \quad d = 2.5 \text{ нм} \qquad (15)$$

точка $\text{Abs}\,\text{Min}\, S_0$ еще дальше прежде всего за счет показателя преломления n уходит от своего исходного положения, указывая на совершенно нереальные значения параметров пленки:

$$\text{Abs}\,\text{Min}\, S_0 \text{ — } \quad d = 2.190 \text{ нм}, \quad n = 1.7414 . \qquad (16)$$

Положение коренным образом исправляют параметры-критерии $C[i]$. Они обеспечивают такую же высокую точность в определении параметров пленки, как и в предыдущих вариантах:

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.496 \text{ нм}, \quad n = 1.4986 . \qquad (17)$$

Наконец, перейдем к четвертому варианту:

$$\xi_0 = \eta_0 = 10', \quad d = 2.5 \text{ нм} . \qquad (18)$$

В этом случае точка $\text{Abs}\,\text{Min}\, S_0$ особенно далеко, но уже и за счет толщины пленки, уходит от исходного положения:

$$\text{Abs}\,\text{Min}\, S_0 \text{ — } \quad d = 3.520 \text{ нм}, \quad n = 1.2664 . \qquad (19)$$

Но и для этого варианта параметры-критерии $C[i]$ позволяют определить параметры пленки с достаточно высокой точностью:

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.498 \text{ нм}, \quad n = 1.4964 . \qquad (20)$$

Теперь кратко рассмотрим случай, когда толщина пленки имеет значение

$$d = 5.0\ \text{нм}, \tag{21}$$

а оптические постоянные по-прежнему задаются выражениями (5). Варианты случайных "экспериментальных" ошибок остаются теми же, т. е. они определяются соотношениями (8), (12), (15) и (18), в которых толщина пленки принимает значение (21).

В рассматриваемом случае первый вариант особого интереса не представляет. Для него точка $\text{Abs}\,\text{Min}\,S_0$ дает неплохой результат, но и этот результат можно заметно улучшить, используя параметры-критерии $C[i]$. Только надо иметь в виду, что интересующие нас наиболее глубокие минимумы параметров $C[i]$ в первом варианте располагаются довольно близко друг к другу. Для их разделения необходимо соответствующим образом уменьшить шаг, с которым идет минимизация функционала S_0. В отношении же второго и третьего вариантов можем сказать, что они очень похожи на первый вариант предыдущего случая, когда $d = 2.5$ нм. Имеется в виду как поведение точки $\text{Abs}\,\text{Min}\,S_0$, так и характер оптимального решения обратной задачи.

Особенности четвертого варианта выражены гораздо сильнее. Здесь наблюдается почти то же самое, что и во втором варианте предыдущего случая.

Таким образом, в случае сверхтонкой пленки на однородной подложке использование параметров-критериев $C[i]$ позволяет найти оптимальное решение обратной задачи относительно толщины и показателя преломления пленки (при известных значениях оптических постоянных подложки), отличающееся высокой точностью. Однако в реальной ситуации оптические постоянные подложки не могут быть заданы точно. Во-первых, это обусловлено сложной структурой поверхности любого материала, а значит, и подложки. Во-вторых, между пленкой и подложкой всегда возникает некоторый переходный слой. И то и другое приводит к тому, что подложка характеризуется уже некоторыми эффективными значениями оптических постоянных, которые могут заметно отличаться от оптических постоянных, определяющих объемные свойства подложки. Кроме того, эффективные оптические постоянные зависят от угла падения светового луча. Все это означает, что в реальной ситуации к чисто экспериментальным ошибкам в определении поляризационных углов Ψ и Δ добавляются еще ошибки (они могут быть названы теоретическими), обусловленные неточным описанием (считающейся известной) подложки.

Исходя из высказанных соображений оценим влияние, которое оказывает неточное задание оптических постоянных подложки на точность определения параметров сверхтонкой пленки.

Анализ влияния ошибок в задании оптических постоянных подложки на точность определения параметров сверхтонкой пленки

Данный анализ проведем для той же однослойной системы. Точные значения оптических постоянных этой системы определяются выражениями (5). Для толщины пленки из двух рассматриваемых сначала выберем меньшее значение. Кроме того, для соответствующей направленности анализа случайные "экспериментальные" ошибки исключим из рассмотрения. Таким образом, точная "экспериментальная" ситуация определяется выражениями (5) и соотношениями

$$\xi_0 = \eta_0 = 0, \qquad d = 2.5\ \text{нм}. \tag{22}$$

Для этой ситуации и определяются "экспериментальные" значения углов Ψ и Δ, которые используются для решения обратной задачи при неточно заданных значениях оптических параметров подложки. Задача состоит в том, чтобы выяснить, как сказывается неточное задание параметров подложки на точности определения толщины и показателя преломления сверхтонкой пленки.

Влияние неточного задания параметров n_0 и κ_0 будем выяснять, задавая с ошибкой только один из них. Сначала рассмотрим варианты, когда с ошибкой задается показатель преломления n_0, а коэффициент поглощения κ_0 остается точным. Известно, что изменение параметра n_0 приводит к сдвигу номограммы в основном вдоль координатной оси Ψ. Это касается прежде всего начальной части номограммы. При этом при уменьшении величины n_0 начальная точка номограммы сдвигается влево, а при увеличении — вправо.

Первоначально обратимся к варианту

$$n_0 = 3.855, \qquad \kappa_0 = 0.023, \tag{23}$$

когда параметр n_0 уменьшается на величину 0.01. В этом случае точка $\text{Abs}\,\text{Min}\,S_0$ сдвигается чрезвычайно далеко в сторону нереальных значений параметров пленки:

$$\text{Abs}\,\text{Min}\,S_0 \text{ — } \quad d = 22.583\ \text{нм}, \qquad n = 1.2664. \tag{24}$$

Положение в значительной степени исправляется при использовании параметров-критериев $C[i]$:

$$C[i] \text{ — } \qquad d = 2.357\ \text{нм}, \qquad n = 1.5007. \tag{25}$$

Здесь показатель преломления пленки определяется с большой точностью, а вот с толщиной пленки положение несколько хуже, хотя и этот результат не является плохим.

Для противоположного варианта

$$n_0 = 3.875\,, \qquad \kappa_0 = 0.023\,, \tag{26}$$

когда параметр n_0 увеличивается на величину 0.01, точка $\mathrm{Abs\,Min}\ S_0$ также сильно сдвигается:

$$\mathrm{Abs\,Min}\ S_0 \text{ — } \quad d = 2.807\text{ нм}\,, \qquad n = 2.7856\,, \tag{27}$$

но уже в основном за счет показателя преломления пленки, стремящегося к большим значениям. И в этом случае использование параметров-критериев $C[i]$ значительно исправляет положение:

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.643\text{ нм}\,, \qquad n = 1.4982\,. \tag{28}$$

Сравнивая (25) и (28), видим, что характер полученных на основе использования параметров-критериев $C[i]$ результатов примерно одинаков. Для обоих вариантов толщина изменяется на одну и ту же величину, только в одном случае в сторону уменьшения, а в другом — увеличения. В обоих случаях показатель преломления пленки определяется с хорошей точностью.

При дальнейшем уменьшении или увеличении (с шагом 0.01) параметра n_0 подложки наметившаяся тенденция сохраняется. С уменьшением величины n_0 показатель преломления n пленки в точке $\mathrm{Abs\,Min}\ S_0$ резко устремляется к значению 1.0, а толщина продолжает стремительно увеличиваться. С увеличением же величины n_0 толщина в точке $\mathrm{Abs\,Min}\ S_0$ изменяется относительно слабо, а показатель преломления n продолжает заметно увеличиваться. Что касается оптимального решения, полученного с помощью параметров-критериев $C[i]$, то здесь ситуация следующая. Точность определения толщины пленки продолжает снижаться гораздо сильнее, чем для показателя преломления. Например, при $n_0 = 3.815$ (уменьшение на 0.05) получаем:

$$C[i] \text{ — } \quad d = 1.710\text{ нм}\,, \qquad n = 1.4880\,, \tag{29}$$

а при $n_0 = 3.915$ (увеличение на 0.05):

$$C[i] \text{ — } \quad d = 3.110\text{ нм}\,, \qquad n = 1.5117\,. \tag{30}$$

Те же варианты, но для толщины $d = 5.0$ нм подробно рассматривать не будем. Отметим только, что характер результатов остается тем же.

Теперь рассмотрим варианты, для которых с ошибкой задается коэффициент поглощения κ_0, а показатель преломления n_0 остается точным. Известно и для этого случая, что изменение параметра κ_0 приводит к сдвигу номограммы в основном вдоль координатной оси Δ. Это проявляется прежде всего для начальной части номограммы. При этом при уменьшении величины κ_0 начальная точка номограммы сдвигается вверх (к значению $\Delta = 180°$), а при увеличении — вниз.

Чтобы выяснить влияние неточного задания коэффициента κ_0, достаточно ограничиться рассмотрением всего лишь двух вариантов, причем для толщины пленки $d = 2.50$ нм. Для одного из них коэффициент κ_0 равен нулю, а для другого имеет значение $\kappa_0 = 0.046$, т. е. в 2 раза превосходит точное значение этого коэффициента.

Первый из этих вариантов представляется следующими значениями параметров n_0 и κ_0:

$$n_0 = 3.865\,, \qquad \kappa_0 = 0.0\,. \tag{31}$$

Для него точка $\mathrm{Abs\,Min}\ S_0$ и точка оптимального решения дают следующие значения параметров пленки:

$$\mathrm{Abs\,Min}\ S_0 \text{ — } \quad d = 2.819\text{ нм}\,, \qquad n = 1.4988\,; \tag{32}$$

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.820\text{ нм}\,, \qquad n = 1.4985\,. \tag{33}$$

Как видим, для варианта (31) решения (32) и (33) практически совпадают. Здесь можно отметить высокую точность в определении параметра n и довольно большую ошибку в толщине пленки.

Второй вариант представляется соотношениями

$$n_0 = 3.865\,, \qquad \kappa_0 = 0.046\,. \tag{34}$$

Для него аналогичные решения определяются следующим образом:

$$\mathrm{Abs\,Min}\ S_0 \text{ — } \quad d = 2.054\text{ нм}\,, \qquad n = 1.5885\,; \tag{35}$$

$$C[i] \text{ — } \quad d = 2.176\text{ нм}\,, \qquad n = 1.5070\,. \tag{36}$$

Из (35) и (36) видим, что эти решения заметно различаются по показателю преломления n, но близки по толщине пленки. Здесь также обращают на себя внимание высокая точность оптимального решения относительно параметра n и заметная ошибка в толщине пленки.

Не вдаваясь в подробности, отметим только, что при переходе в тех же вариантах к толщине $d = 5.00$ нм получаем результаты такого же характера.

Таким образом, варианты, связанные с неточным заданием коэффициента поглощения κ_0 подложки, отличаются относительно слабым сдвигом точки $\mathrm{Abs\,Min}\,S_0$ от ее исходного положения. В этом их сильное отличие от вариантов, связанных с неточным заданием параметра n_0. В то же время для всех вариантов неточного задания обоих параметров подложки наблюдается заметный рост (в оптимальном решении обратной задачи) ошибок в толщине пленки, обусловленный возрастанием ошибок в описании оптических свойств подложки.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПО ОДНОВРЕМЕННОМУ ОПРЕДЕЛЕНИЮ ВСЕХ ПАРАМЕТРОВ ОДНОСЛОЙНОЙ ОТРАЖАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

Проведенный выше анализ вариантов неточного задания параметров n_0 и κ_0 подложки указывает на целесообразность решения обратной задачи с целью одновременного определения всех параметров однослойной системы со сверхтонкой пленкой. Этот вывод еще более усиливается, если учесть сложную структуру поверхности практически любой подложки.

В этом случае при выборе наиболее рационального пути решения обратной задачи особую роль приобретает учет влияния скорости изменения поляризационных углов Ψ и Δ по отдельным параметрам отражающей системы, т. е. производных от углов Ψ и Δ по отдельным параметрам. Нетрудно понять, что для сверхтонкой пленки производные по параметрам d и n по порядку их величин одинаковы в той области, где толщина d приближается к своему точному значению. При решении обратной задачи относительно параметров пленки при заданной подложке начальная точка подбирается так, чтобы отвечающие ей параметры d и n по своей величине значительно отличались от их точных значений. При этом толщина d выбирается значительно превосходящей ее точное значение. В этом случае производные от углов Ψ и Δ по толщине d заметно больше, чем производные по показателю преломления n. Это приводит к тому, что начальная часть траектории движения к точке $\mathrm{Abs\,Min}\,S_0$ формируется в основном за счет изменения толщины пленки. И только когда толщина d приближается к своему точному значению, траектория движения активно формируется и за счет изменения показателя преломления. Данный вывод хорошо подтверждается промежуточными результатами решения обратной задачи.

Если же определению подлежат еще и параметры подложки, то надо учитывать также и роль производных от углов Ψ и Δ по оптическим параметрам подложки. Эти производные существенно больше, чем производные по показателю преломления n пленки. В итоге возникает очень интересная ситуация, когда достаточно точное значение показателя преломления n_0 подложки может быть получено задолго до прохождения точки оптимального решения и точки $\mathrm{Abs\,Min}\,S_0$. В этом случае обратная задача разбивается на два очевидных этапа. С учетом этого может быть выбран наиболее рациональный путь решения обратной задачи по одновременному определению всех параметров отражающей системы со сверхтонкой пленкой.

Есть и другие особенности данной обратной задачи в ее общей постановке, непосредственно связанные со структурой математической программы, разработанной на основе метода Бокса.

Высказанные соображения будут конкретизированы в отдельной работе, посвященной исследованию реальных объектов со сверхтонкой пленкой. При этом будут учтены полученные в настоящей работе результаты и сделанные на их основе выводы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Семененко А.И., Семененко И.А.* // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 1. С. 35–46.
2. *Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семененко А.И. и др.* Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979. 422 с.
3. *Бобро В.В., Семененко А.И.* // Научное приборостроение. 2000. Т. 10, № 4. С. 31–37.
4. *Семененко А.И., Бобро В.В., Мардежов А.С.* О решении обратной задачи эллипсометрии // Автометрия. 1998. № 1. С. 56–60.
5. *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.
6. *Семененко А.И., Семененко И.А.* // Научное приборостроение. 2007. Т. 17, № 1. С. 53–61.
7. *Семененко А.И., Семененко И.А.* // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 4. С. 19–30.
8. *Holmes D.A.* On the calculation of thin film refractive index and thickness by ellipsometry // Appl. Opt. 1967. V. 6, № 1. P. 168–173.
9. *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.*)

Контакты: *Семененко Альберт Иванович*, sem199@mail.ru

Материал поступил в редакцию 20.10.2010.

ON THE NEW POTENTIALS OF ELLIPSOMETRY ARISING FROM THE NULL OPTICAL CIRCUIT. ELLIPSOMETRY OF REAL SURFACE STRUCTURES. 19. OPTIMAL SOLUTION CHOICE OF INVERSE PROBLEM IN STUDYING OF ULTRA THIN SUPERFICIAL FILMS

A. I. Semenenko[1], **I. A. Semenenko**[2]

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

A new approach to the solution of mathematically incorrect inverse problem of elipsometry for ultra thin superficial films based on the using of measurements corresponding to angles of incidence set of a light beam is proposed. Parameters-criterion are introduced which allow to find the optimal solution of an inverse problem, the nearest to the exact solution. The results of the numerical experiment showed the great accuracy of the optimal solution during parameters determination of ultra thin films. The errors influence in assigning substrate optical constants on the accuracy of the optimal solution is studied. The general analysis of features of the inverse problem of simultaneous parameters determination of a reflecting single-layer system with ultra thin films is given.

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