

УДК 535.5.511:531.7

© А. И. Семененко, И. А. Семененко

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ И ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ С УЧЕТОМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ НЕКОРРЕКТНОСТИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ. 1. ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СВЕРХТОНКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛЕНОК НА ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В работе проведен анализ особенностей обратной задачи эллипсометрии, проявляющихся при определении полного набора параметров отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой. Разработан способ решения обратной задачи: изложен подход к решению, представляющий собой последовательное прохождение двух этапов. Для каждого этапа сформулирован свой критерий выбора оптимальных значений соответствующих параметров. На первом этапе определяются оптимальные значения параметров подложки, а также значения параметров пленки, соответствующие точке абсолютного минимума функционала обратной задачи. Для случая сверхмалых толщин пленки эти значения из-за экспериментальных ошибок и неточностей в выборе модели исследуемого объекта существенно отличаются от истинных значений параметров пленки. Второй этап является очевидным следствием первого и представляет собой реализацию подхода, изложенного в предыдущей работе [1]. На данном этапе при решении обратной задачи задаются определенные на предыдущем этапе оптимальные значения параметров подложки и с помощью предложенного в работе [1] критерия отбора находятся оптимальные значения параметров пленки. Изложенный подход к решению математически некорректной обратной задачи успешно опробован в численном эксперименте для разных вариантов экспериментальных ошибок. В работе рассмотрено также влияние нарушенного слоя на поверхности подложки.

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

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исследование поверхностной структуры твердых тел и жидкостей — это интересная с научной точки зрения и практически важная задача. Такая структура проявляется в самых различных формах. Это могут быть сверхтонкие пленки естественного окисла на полупроводниках и металлах, нарушенные слои, возникающие в результате той или иной обработки поверхности твердых тел, а также естественная структура поверхности жидкостей, связанная с их общими свойствами и изменяющаяся при добавках различных веществ. Во всех этих случаях обратная задача эллипсометрии является математически некорректной. Такая математическая некорректность проявляется в том, что даже относительно слабые экспериментальные ошибки заметно искажают истинные значения параметров, характеризующих поверхностную структуру. Однако при наличии экспериментальных ошибок степень проявления математической некорректности может быть самой разной. Для е-

стественных окислов выраженная некорректность обратной задачи обусловлена их сверхмалой толщиной. Что касается нарушенных слоев, то здесь толщина не играет особой роли и основной причиной заметного проявления некорректности является слабое отличие оптических параметров таких слоев от их объемных значений.

Нарушенные слои присутствуют всегда, и это обстоятельство надо учитывать при исследовании сверхтонких пленок, имеющих другую природу, нежели нарушенные слои. Но и сам нарушенный слой, как правило, имеет более выраженную по оптическим параметрам верхнюю часть с относительно небольшой, в том числе и сверхмалой, толщиной. Подобную структуру, по-видимому, имеет и поверхность жидкостей. Таким образом, задача по исследованию поверхностной структуры твердых тел и жидкостей является довольно сложной, и она, естественно, не сводится только к определению параметров некоторой сверхтонкой поверхностной пленки при заданных параметрах подложки. Тем более что математическая некор-

ректность такой упрощенной задачи значительно усиливается из-за неточного задания оптических параметров подложки. Поэтому речь может идти только об одновременном определении всех параметров однослойной системы — как поверхностной пленки, так и подложки. В этом случае, если иметь в виду реальные объекты, для подложки определяются некоторые эффективные значения их оптических констант. Для поиска оптимального решения математически некорректной обратной задачи относительно всех параметров однослойной системы необходим критерий отбора такого решения. Построение критерия отбора оптимального решения для всех наиболее важных случаев проявления математической некорректности обратной задачи и является главной целью представляемого цикла работ. В работах этого цикла предполагается рассмотреть следующие основные типы однослойных отражающих систем, требующих учета математической некорректности обратной задачи:

1. прозрачная сверхтонкая пленка—слабо поглощающая (полупроводниковая) подложка;
2. слабо поглощающая (полупроводниковая) сверхтонкая пленка—прозрачная подложка;
3. прозрачная сверхтонкая пленка—металлическая подложка;
4. нарушенный поверхностный слой на диэлектрике (сапфир, оптическое стекло);
5. поверхностная структура жидкостей.

Для всех этих типов однослойных отражающих систем существует единый общий подход к решению математически некорректной обратной задачи, однако есть и немаловажные особенности, по которым данные типы отражающих систем различаются.

Рассмотрение особенностей обратной задачи эллипсометрии, возникающих при исследовании прозрачных сверхтонких поверхностных пленок на слабо поглощающих (полупроводниковых) материалах, начато в работе [1]. При этом параметры подложки считались заданными. В данной работе предложен новый подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для указанного типа однослойной системы, основанный на использовании отвечающих набору углов падения светового пучка измерений. Приведено общее описание некоторого однотипного набора параметров-критериев, использование которых, как показал основанный на моделировании экспериментальных ошибок численный эксперимент, позволяет найти оптимальное решение обратной задачи относительно толщины и показателя преломления пленки (при известных значениях оптических постоянных подложки), отличающееся высокой точностью. Однако для реальных исследуемых объектов оптические постоянные подложки не могут быть заданы точно. Во-первых, это обу-

словлено сложной структурой поверхности любого материала, а значит, и подложки. Во-вторых, между пленкой и подложкой всегда возникает некоторый переходный слой. Данные факторы являются причиной того, что подложка характеризуется уже некоторыми эффективными значениями оптических параметров, которые могут заметно отличаться от оптических констант, 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, обусловленные неточным описанием (считающейся известной) подложки. В связи с этим в работе [1] изучено также влияние ошибок в задании оптических постоянных подложки на точность определения параметров сверхтонкой пленки. Рассмотренные в данной работе варианты численного эксперимента, связанные с неточным заданием показателя преломления n_0 подложки, отличаются существенным сдвигом точки абсолютного минимума функционала S_0 обратной задачи от ее исходного положения, связанного с точными значениями параметров. В этом их сильное отличие от вариантов неточного задания коэффициента поглощения κ_0 подложки, для которых наблюдается относительно слабый сдвиг точки абсолютного минимума. Очевидно, основной интерес представляет характер оптимального решения обратной задачи, полученного (для разных вариантов неточного задания обоих параметров подложки) с использованием упомянутых выше параметров-критериев. Показано, что для всех вариантов неточного описания подложки оптимальное решение обратной задачи демонстрирует заметный рост ошибок в толщине пленки, обусловленный возрастанием ошибок в описании оптических свойств подложки. В то же время, показатель преломления пленки определяется с более высокой точностью.

Проведенный в работе [1] 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. Данный вывод еще более усиливается, если учесть сложную структуру поверхности практически любой подложки. В этом случае затруднительно ответить на вопрос, с какой же точностью задаются оптические параметры подложки, поэтому, сводя обратную задачу к определению параметров только лишь поверхностной пленки, мы рискуем допустить существенные ошибки в значениях параметров не только пленки, но и подложки. Есть и еще одна существенная причина, указывающая на целесообразность ре-

шения обратной задачи с целью определения полного набора параметров однослойной системы. Определив при такой постановке задачи достаточно точно параметры поверхностной пленки, мы приходим к принципиальной возможности расшифровать тонкую структуру поверхности самой подложки. В рамках однослойной модели тонкая структура поверхности подложки включается в ее эффективные оптические параметры. Используя при указанном условии на точность определения параметров основной поверхностной пленки метод последовательных приближений, предложенный в работе [2], мы и приходим к возможности разделения сложной подложки на ее однородную часть и некоторую поверхностную структуру.

В работе [1] обратная задача по определению всех параметров отражающей системы [прозрачная сверхтонкая пленка—слабопоглощающая (полупроводниковая) подложка] не решалась. Отмечено лишь на основании общих представлений, что процесс определения параметров такой системы разбивается на два этапа. В связи с изложенными выше соображениями основной целью настоящей работы является анализ особенностей обратной задачи по определению полного набора параметров указанной системы, а также разработка способа ее решения.

1. АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПО ОДНОВРЕМЕННОМУ ОПРЕДЕЛЕНИЮ ВСЕХ ПАРАМЕТРОВ ОДНОСЛОЙНОЙ ОТРАЖАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

Как и в работе [1], анализ проведем на основе численного эксперимента. Значения показателя преломления n пленки и оптических констант n_0 и κ_0 подложки целесообразно оставить прежними

$$n = 1.50, \quad n_0 = 3.865, \quad \kappa_0 = 0.023. \quad (1)$$

Основное рассмотрение проведем для толщины пленки

$$d = 2.5 \text{ нм}. \quad (2)$$

Длина световой волны определяется значением $\lambda = 632.8 \text{ нм}$. Что касается углов падения φ_0 светового пучка, то они изменяются от 50 до 75° с шагом 2.5° .

Ошибки в поляризационных углах $\Psi[i]$ и $\Delta[i]$, определяемых в численном эксперименте на наборе углов падения φ_0 (параметр i — это номер соответствующего угла падения), распределены случайным образом в интервалах

$$(-\xi_0, \xi_0) \text{ и } (-\eta_0, \eta_0), \quad (3)$$

где величины ξ_0 и η_0 определяют максимальные

отклонения (в ту или другую сторону) поляризационных углов $\Psi[i]$ и $\Delta[i]$ от их точных значений $\Psi_0[i]$ и $\Delta_0[i]$. Углы $\Psi[i]$ и $\Delta[i]$ в численном эксперименте играют роль "экспериментальных" значений поляризационных углов.

В численном эксперименте при решении обратной задачи используется известное выражение для функционала S_0 , но надо иметь в виду, что в этом выражении (см. [1]) экспериментальные значения поляризационных углов $\Psi_e[i]$ и $\Delta_e[i]$, отвечающие i -му углу падения, определяются формулами

$$\Psi_e[i] = \Psi[i], \quad \Delta_e[i] = \Delta[i]. \quad (4)$$

Перейдем теперь к рассмотрению особенностей обратной задачи. При определении полного набора параметров отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой особенности обратной задачи обусловлены не только экспериментальными ошибками в поляризационных углах и неточным выбором модели системы. Они имеют место и в идеальном случае, когда нет ошибок ни в эксперименте, ни в выборе модели. И связано это со сверхмалой толщиной пленки. Поэтому рассмотрение особенностей начнем с идеального случая.

1.1. Особенности идеального случая

Для такой ситуации в численном эксперименте полагаем

$$\xi_0 = \eta_0 = 0, \quad (5)$$

а расчет углов $\Psi[i]$ и $\Delta[i]$, предполагая правильный выбор модели, ведем для однослойной системы с параметрами (1) и (2). Главная особенность этого случая состоит в том, что конечный результат решения обратной задачи в значительной степени определяется выбором начальной точки по показателю преломления n пленки и практически не зависит от выбора начальных значений остальных параметров. Это проявляется в том, что в процессе решения обратной задачи параметр n сначала несколько удаляется от своего начального значения, а затем возвращается к нему, оставаясь до окончания вычислительного процесса в непосредственной близости от него. Что касается остальных параметров, то их конечные значения фактически определяются выбором начального значения параметра n . Причем характер данного процесса остается неизменным при любом выборе начального значения показателя преломления пленки. Например, при выборе (в качестве начальных) значений $n = 1.30$ и $n = 1.70$ точка абсолютного минимума функционала S_0 соответственно дает следующие результаты

$$\begin{cases} n = 1.300, & d = 3.277 \text{ нм}; \\ n_0 = 3.864, & \kappa_0 = 0.0217. \end{cases} \quad (6)$$

$$\begin{cases} n = 1.699, & d = 2.230 \text{ нм}; \\ n_0 = 3.866, & \kappa_0 = 0.0235. \end{cases} \quad (7)$$

Как видим из выражений (6) и (7), значения оптических констант подложки, полученные при выбранных начальных значениях параметра n , не слишком отличаются от их точных значений (1). Существенное отклонение от точного значения (2) наблюдается для толщины d и, конечно, для показателя преломления n , который остается вблизи его начального значения. Ситуация улучшается по мере приближения начального значения параметра n к его точному значению (1), но даже при выборе начального значения $n = 1.50$ абсолютно точного решения для всех параметров мы не получим. Как следует из результатов для этого случая:

$$\begin{cases} n = 1.501, & d = 2.498 \text{ нм}; \\ n_0 = 3.86501, & \kappa_0 = 0.02301, \end{cases} \quad (8)$$

ошибки сведутся к самым минимальным значениям, но они останутся, в том числе и для параметра n . И только в том случае, если зафиксировать для параметра n его точное значение $n = 1.50$, для остальных параметров также будет получено точное решение. В то же время необходимо отметить следующий важный момент. Если вернуться к рассмотренному в работе [1] простейшему случаю, когда параметры подложки считаются заданными, и для них выбрать, например, значения из выражений (6) или (7), то для параметров пленки независимо от выбора отвечающей им начальной точки будут получены значения из выражений (6) или (7).

Перейдем теперь к следующему шагу в рассмотрении особенностей обратной задачи.

1.2. Особенности, обусловленные экспериментальными ошибками

Остановимся на наиболее сильном из рассмотренных в работе [1] вариантов

$$\xi_0 = \eta_0 = 10', \quad d = 2.5 \text{ нм}. \quad (9)$$

В этом случае "экспериментальная" ошибка для каждого из углов Ψ и Δ по абсолютной величине случайным образом меняется от 0 до $10'$. При этом используем то же самое распределение случайных ошибок, что и в работе [1]. Что касается толщины пленки, то ее значение выбрано таким (см. (2)), чтобы в наиболее четкой форме продемонстрировать особенности обратной задачи, обусловленные экспериментальными ошибками.

Особенности обратной задачи, имеющие место

для идеальной ситуации и связанные с поведением показателя преломления пленки n , наблюдаются, естественно, и при наличии экспериментальных ошибок. Однако экспериментальные ошибки значительно усиливают эти особенности. Независимо от выбора для параметра n начального значения обратная задача в случае варианта (9) дает одно и то же решение для остальных параметров:

$$d = 0.00, \quad n_0 = 3.8546, \quad \kappa_0 = 0.2049. \quad (10)$$

А сам параметр n остается в непосредственной близости от выбранного начального значения. Как видим, экспериментальные ошибки, отвечающие варианту (9), очень сильно влияют на обратную задачу. Пленка исчезает, и уже не имеет никакого значения, как ведет себя параметр n . Таким образом, основную роль играет подложка. Ее показатель преломления n_0 сам по себе изменяется не так уж сильно, хотя и такое изменение является решающим для всей рассматриваемой отражающей системы. А вот коэффициент поглощения κ_0 увеличивается на порядок.

Совершенно очевидно, что с ослаблением экспериментальной ошибки характер решения несколько меняется. В качестве примера рассмотрим более слабый вариант, также изученный в работе [1]:

$$\xi_0 = \eta_0 = 5', \quad d = 2.5 \text{ нм}. \quad (11)$$

Данный вариант по конечным результатам практически не отличается от предыдущего. Обратная задача при любом выборе начального значения параметра n приводит к результатам:

$$d = 0.00, \quad n_0 = 3.8527, \quad \kappa_0 = 0.2028. \quad (12)$$

Здесь по-прежнему пленка имеет нулевую толщину, а оптические константы подложки почти не отличаются от таковых в предыдущем варианте. Это указывает на равноценность вариантов (9) и (11). Для обоих вариантов при заданных точных значениях оптических параметров подложки точка абсолютного минимума функционала S_0 по показателю преломления n пленки одинаково отходит от точного значения параметра n , но только в противоположных направлениях (см. [1]).

Наконец, рассмотрим еще более слабый вариант [1]:

$$\xi_0 = \eta_0 = 3', \quad d = 2.5 \text{ нм}. \quad (13)$$

Если судить по значению $n = 1.3877$ показателя преломления пленки в точке абсолютного минимума функционала S_0 в ситуации, рассмотренной в работе [1], то это тоже не слабый вариант. И все же результаты для данного варианта совершенно другие. Они близки, в том числе и для параметра n ,

к результатам идеального случая (см. (5)–(7)), причем при всех способах задания начального значения параметра n . Поэтому мы не будем их воспроизводить. Отметим только, что переход к самому слабому (по величине экспериментальных ошибок) из рассмотренных в работе [1] вариантов

$$\xi_0 = \eta_0 = 1', \quad d = 2.5 \text{ нм}, \quad (14)$$

а это уже совсем близко к завершению предельного перехода к случаю $\xi_0 = \eta_0$, еще более усиливает приближение к результатам идеального случая.

При анализе полученных в данном подразделе результатов обращает на себя внимание характер изменения (относительно точных значений) оптических постоянных подложки при решении обратной задачи. Показатель преломления подложки меняется слабо, а вот коэффициент поглощения — во многих случаях довольно сильно. Возникает вопрос, каким образом изменятся параметры поверхностной пленки, отвечающие точке абсолютного минимума функционала S_0 , если зафиксировать один из оптических параметров подложки — показатель преломления n_0 или коэффициент поглощения κ_0 ? Речь не идет о фиксации обоих параметров подложки. Этот случай подробно рассмотрен в работе [1], там же используется и критерий отбора оптимального решения относительно параметров пленки. Поэтому интерес представляет только возможное изменение ситуации при фиксации лишь одного из параметров подложки.

При задании точного значения $n_0 = 3.865$ мы приходим к точным значениям остальных параметров только в идеальном случае, но при наличии экспериментальных ошибок ситуация совсем другая. Для варианта (9) при задании начального значения $n = 1.40$ результаты следующие:

$$d = 1.320, \quad n = 1.816, \quad \kappa_0 = 0.09486; \quad (15)$$

причем по своему характеру они слабо зависят от выбора начального значения параметра n . Исключение связано лишь с небольшой окрестностью вокруг точного значения $n = 1.50$ и касается оно только параметра n . При выборе начального значения параметра n в этой окрестности конечное значение этого параметра не столь сильно, как указано в (15), отличается от начального значения. В общем, это очень плохие результаты, значения параметров значительно отходят от своих точных значений. Хотя они, безусловно, лучше тех, к которым приходим при освобожденном параметре n_0 (см. (10)). Задание неточного значения параметра n_0 для варианта (9) может только значительно ухудшить ситуацию, поэтому нет никакого смысла фиксировать любое значение этого параметра. Аналогичных результатов следовало бы

ожидать и для более слабого варианта (11). Прежде всего, здесь сохраняется та же тенденция в поведении параметров, что и для варианта (9). Относительно своих точных значений толщина d уменьшается, а параметры n и κ_0 увеличиваются. При этом для варианта (11) данная тенденция выражена гораздо сильнее. Эти результаты столь выразительны, что их стоит привести:

$$d = 0.708, \quad n = 4.590, \quad \kappa_0 = 0.2461. \quad (16)$$

Здесь обращает на себя внимание не только существенное уменьшение толщины d и возрастание коэффициента κ_0 , но особенно возрастание показателя преломления пленки. Такая ситуация может встретиться и при другом варианте случайных ошибок, поэтому стоит отметить относительное поведение показателя преломления n поверхностной пленки. Параметр n возрастает в гораздо большей степени, нежели в случае, когда фиксируются оба оптических параметра подложки [1]. Такое поведение параметра n в случае варианта (11) связано с отмеченным выше характером случайного распределения экспериментальных ошибок в данном варианте (см. [1]). Таким образом, освобождение параметра κ_0 стимулирует для данного варианта резкое возрастание величины n и уменьшение толщины d , а также существенное возрастание самого параметра κ_0 .

Характер результатов меняется только в случае еще более слабых вариантов (13) и (14). Для варианта (13) при задании точного значения $n_0 = 3.865$ получающиеся результаты занимают промежуточное положение между идеальным случаем и вариантом (9). А вариант (14) уже довольно близок к идеальной ситуации, которая, как выясняется (см. (5)–(8)), дает неплохие результаты для оптических параметров подложки, но не так уж хорошо (кроме случая (8)) определяет параметры поверхностной пленки.

Коэффициент поглощения κ_0 в общем случае изменяется по сравнению с показателем преломления n_0 гораздо сильнее. Это означает, что даже сравнительно большие ошибки в задании коэффициента κ_0 не так уж сильно искажают конечные результаты. При этом основной интерес состоит в том, насколько эти результаты отличаются от точных значений соответствующих параметров. Поэтому рассмотрим решение обратной задачи при фиксации данного коэффициента и прежде всего оценим результаты, получающиеся при задании точного значения $\kappa_0 = 0.023$. Сначала обратимся к варианту (9). Результаты для этого варианта, отвечающие начальным значениям

$$n = 1.35, \quad n = 1.50, \quad n = 1.65, \quad (17)$$

соответственно запишутся:

$$d = 2.994, \quad n = 1.348, \quad n_0 = 3.8654; \quad (18)$$

$$d = 2.488, \quad n = 1.509, \quad n_0 = 3.8661; \quad (19)$$

$$d = 2.282, \quad n = 1.653, \quad n_0 = 3.8667. \quad (20)$$

Первое впечатление, возникающее при взгляде на результаты (17)–(20), таково, как если бы для варианта (9) получено решение (см. (19)), которое с хорошей точностью определяет значения параметров отражающей системы. Однако это ложное впечатление. Оно возникает только потому, что в проводимом численном эксперименте известны точные значения параметров отражающего объекта. При изучении реальных объектов их параметры неизвестны. Поэтому при анализе результатов (17)–(20) надо забыть о точных значениях параметров отражающей системы. В этом случае при оценке результатов надо руководствоваться каким-то критерием. В качестве такого критерия естественно было бы выбрать минимальную величину отклонения параметра n от его начального значения. Однако, как следует из выражений (17)–(20), такой критерий не позволяет выбрать правильное решение из некоторого набора таковых. Причем это относится ко всем решениям, отвечающим любому начальному значению n , по крайней мере из интервала (1.35; 1.65). Не помогает здесь и изучение поведения параметра n_0 . При задании других значений κ_0 картина аналогична. Конечно, можно руководствоваться некоторыми предположениями относительно значения параметра n , но в этом случае возникают затруднения с определением параметра κ_0 . Это подтверждается изучением результатов, соответствующих заданию других значений данного параметра. Кроме того, заранее присваивая какое-то значение показателю преломления n пленки, мы ограничиваем себя в возможностях по исследованию поверхностной структуры объекта. Это особенно проявляется при исследовании поверхностных пленок, показатель преломления которых в силу ряда причин может сильно изменяться с уменьшением толщины пленки вплоть до сверхмалых значений.

Аналогичные результаты имеют место и для варианта (11). Для более слабых вариантов (13) и особенно (14) наблюдается приближение к идеальному случаю. При этом особенности идеального случая в ситуации с заданием конкретных значений κ_0 сохраняют (относительно параметров d , n и n_0) свой характер (см. (5)–(8)). Стоит только отметить, что в данной ситуации параметры n и n_0 , отвечающие различным начальным значениям n , сохраняют выраженную устойчивость отно-

сительно изменения параметра κ_0 .

В следующем разделе, посвященном выбору оптимального решения обратной задачи при исследовании отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленки, мы вернемся к обсуждению результатов данного подраздела. А пока обратимся к обсуждению особенностей обратной задачи, возникающих в результате использования неточной модели отражающей системы.

1.3. Особенности обратной задачи, обусловленные неточным выбором модели отражающего объекта

По-прежнему будем рассматривать однослойную систему с параметрами d и n слоя, определяемыми выражениями (1) и (2). Однако подложка имеет более сложную структуру. Параметры n_0 и κ_0 ее однородной части не меняются, они определяются выражением (1), а нарушенный поверхностный слой по показателю преломления очень слабо отличается от однородной части подложки. Исследование такого объекта будем вести на основе однослойной модели. При этом будем использовать поляризационные углы, рассчитанные для однослойной системы с параметрами (1) и (2) с учетом нарушенного слоя. Задача состоит в том, чтобы определить параметры d и n однородного слоя, а также эффективные значения оптических параметров подложки, которые по-прежнему будем обозначать, как n_0 и κ_0 . При этом необходимо выяснить, как скажется наличие нарушенного слоя на значениях параметров пленки и подложки, т. е. насколько они будут отличаться от значений (1) и (2). Однако в данном подразделе мы будем решать другую, вспомогательную, но не менее важную, задачу. Эта задача состоит в том, чтобы выявить особенности в решении обратной задачи, обусловленные неточностью выбранной модели. Для этого экспериментальные ошибки исключим из рассмотрения, т. е. положим $\xi_0 = \eta_0 = 0$. В конечном итоге данная задача состоит в том, чтобы установить характер обусловленной неучтенным нарушенным слоем математической некорректности обратной задачи относительно параметров однослойной системы.

Рассмотрим разные наборы параметров d_1 , n_1 , κ_1 нарушенного слоя. Нет смысла перебирать большое множество наборов. Возьмем из них наиболее выразительные. Прежде всего для коэффициента поглощения κ_1 будем задавать два его предельных значения $\kappa_1 = 0.00$ и $\kappa_1 = 0.023$, соответствующие прозрачной пленке и поглощающей подложке. Для толщины нарушенного слоя выберем значение $d_1 = 10$ нм, которое при слабом (от-

носителем показателя преломления) оптическом контрасте не подавляет основной сверхтонкий поверхностный слой. Что касается показателя преломления n_1 нарушенного слоя, то для него выбираем значения, которые мало отличаются от показателя $n_0 = 3.865$ однородной части подложки, но в то же время четко демонстрируют эффект влияния на оптические свойства подложки в целом, т. е. на ее эффективные оптические параметры.

Для начала рассмотрим следующий набор параметров нарушенного слоя:

$$d_1 = 10 \text{ нм}, \quad n_1 = 3.860, \quad \kappa_1 = 0.00, \quad (21)$$

для которого показатель преломления n_1 очень слабо отличается от показателя $n_0 = 3.865$. Данному набору отвечают некоторые значения параметров d , n и n_0 , κ_0 , причем n_0 , κ_0 — это уже эффективные оптические параметры подложки. Как и в идеальном случае, который характеризуется не только отсутствием экспериментальных ошибок, но и точностью (отсутствием нарушенного слоя) однослойной модели, результаты для параметров d , n и n_0 , κ_0 зависят также и от выбора начального значения показателя преломления n поверхностной пленки. При выборе (в качестве начальных) значений $n = 1.30$, $n = 1.50$ и $n = 1.70$ точка абсолютного минимума функционала S_0 соответственно дает следующие результаты:

$$\begin{cases} n = 1.306, & d = 3.090 \text{ нм}; \\ n_0 = 3.8473, & \kappa_0 = 0.02742; \end{cases} \quad (22)$$

$$\begin{cases} n = 1.502, & d = 2.384 \text{ нм}; \\ n_0 = 3.8481, & \kappa_0 = 0.02830; \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{cases} n = 1.699, & d = 2.134 \text{ нм}; \\ n_0 = 3.8488, & \kappa_0 = 0.02860. \end{cases} \quad (24)$$

В этих результатах обращает на себя внимание заметное уменьшение эффективного показателя преломления n_0 сложной подложки по сравнению не только с его значением для однородной части подложки, но также и с показателем n_1 нарушенного слоя. Кроме того, заметно вырастает коэффициент поглощения κ_0 . И оба эти параметра сохраняют отмеченную тенденцию к монотонному изменению. Что касается характера изменения параметров пленки по сравнению с идеальным случаем, то показатель n практически не меняется, а изменение толщины d не носит принципиального характера.

Таким образом, прозрачный нарушенный слой с параметрами (21) основное влияние оказывает на

оптические параметры подложки. Важно отметить, что примерно такие же параметры характеризуют однослойную систему и в том случае, когда нарушенный слой и однородная часть подложки совпадают по показателю преломления, но различаются по коэффициенту поглощения. Такая картина соответствует набору (21), в котором параметр n_1 принимает значение $n_1 = 3.865$. Это указывает на большую роль (в случае прозрачного нарушенного слоя) коэффициента κ_0 в формировании параметров сложной подложки. По мере дальнейшего уменьшения показателя преломления n_1 прозрачного нарушенного слоя параметр n_0 продолжает уменьшаться, а коэффициент κ_0 — заметно увеличиваться. При этом значения параметра n пленки, отвечающие разным начальным значениям этого параметра, практически не изменяются, оставаясь в непосредственной близости к соответствующим начальным значениям. Несколько заметнее изменяются значения толщины d пленки. Но это все до определенной границы в изменении параметра n_1 . До этой границы прозрачный нарушенный слой в основном формирует оптические константы подложки, не особенно влияя на параметры пленки. А после прохождения данного граничного значения параметра n_1 неучтенный нарушенный слой в полной мере влияет и на параметры поверхностной пленки. Вот эту разделительную границу и надо определить. Это очень важная задача. По мере уменьшения параметра n_1 заметные изменения в параметрах пленки в первую очередь соответствуют начальным значениям параметра n , которые меньше истинного значения $n = 1.50$. Эти изменения уменьшают разброс параметров пленки, обусловленный зависимостью от начальных значений. Для наглядности приведем результаты, соответствующие следующему набору параметров прозрачного нарушенного слоя:

$$d_1 = 10 \text{ нм}, \quad n_1 = 3.800, \quad \kappa_1 = 0.00; \quad (25)$$

$$\begin{cases} n = 1.440, & d = 3.045 \text{ нм}, \\ n_0 = 3.8330, & \kappa_0 = 0.03332; \end{cases} \quad (26)$$

$$\begin{cases} n = 1.544, & d = 2.780 \text{ нм}, \\ n_0 = 3.8336, & \kappa_0 = 0.03370; \end{cases} \quad (27)$$

$$\begin{cases} n = 1.718, & d = 2.555 \text{ нм}, \\ n_0 = 3.8346, & \kappa_0 = 0.03402. \end{cases} \quad (28)$$

Результаты, определяемые выражениями (25)–(28), относятся к начальной стадии переходного процесса к указанной разделительной границе и четко указывают на уменьшение разброса значе-

ний параметров пленки. А это означает уменьшение зависимости параметров пленки от выбора начального значения параметра n . Заметное изменение параметров пленки постепенно распространяется и на оставшуюся часть области начальных значений. При этом нарушенный слой по-прежнему влияет и на параметры сложной подложки, причем характер такого влияния постепенно изменяется. Такой переход через указанную границу имеет принципиальное значение.

Рассмотрим теперь другие наборы параметров нарушенного слоя, отличающиеся от предыдущих наборов (типа (21)) коэффициентом поглощения κ_1 , совпадающим с коэффициентом $\kappa_0 = 0.023$ для однородной части подложки. Очевидно, в этом случае изменения в параметрах подложки и пленки в связи с отсутствием оптического контраста в сложной подложке по коэффициенту поглощения связаны только с изменением показателя преломления n_1 нарушенного слоя. Используя разные наборы, в которых показатель n_1 последовательно уменьшается начиная от значения $n_0 = 3.865$ приходим к тем же выводам, что и в предыдущем случае. Это относится также и к роли разделительной границы по показателю преломления n_1 . Поэтому ограничимся рассмотрением набора

$$d_1 = 10 \text{ нм}, \quad n_1 = 3.765, \quad \kappa_1 = 0.023, \quad (29)$$

в котором показатель n_1 заметно меньше, чем в последнем наборе (25) предыдущего случая. Это позволит в более четкой форме проследить за приближением к разделительной границе. Что касается начального отсчета результатов, то он, очевидно, определяется выражениями (5)–(8) для идеального случая. Для набора (29) при выборе тех же начальных значений $n = 1.30$, $n = 1.50$ и $n = 1.70$ точка абсолютного минимума функционала S_0 дает результаты:

$$\begin{cases} n = 1.505, & d = 3.295 \text{ нм}, \\ n_0 = 3.8408, & \kappa_0 = 0.03135; \end{cases} \quad (30)$$

$$\begin{cases} n = 1.540, & d = 3.207 \text{ нм}, \\ n_0 = 3.8410, & \kappa_0 = 0.03151; \end{cases} \quad (31)$$

$$\begin{cases} n = 1.735, & d = 2.920 \text{ нм}, \\ n_0 = 3.8424, & \kappa_0 = 0.03205. \end{cases} \quad (32)$$

Выражения (30)–(32) еще в большей мере, нежели (26)–(28), указывают на уменьшение разброса параметров пленки, связанного с выбором начальных значений параметра n . Однако этот процесс резко замедляется с удалением (в сторону возрастания) начальных значений от отметки $n = 1.50$.

В данном подразделе нас интересует лишь нарушенный слой, малоотличающийся по оптическим свойствам от однородной подложки. Результатов, полученных для двух предельных относительно коэффициента κ_1 случаев, вполне достаточно, чтобы сделать правильные выводы и для случая произвольного, из интервала $(0; 0.023)$, значения κ_1 . Что касается дальнейшего уменьшения параметра n_1 , то это уже переход к случаю двухслойной отражающей системы, у которой к разряду сверхтонких относится либо одна, либо обе пленки. Однако данный случай в настоящей работе не рассматривается.

Выявленные особенности обратной задачи, обусловленные влиянием неучтенного нарушенного слоя на подложке, прямо указывают на математическую некорректность обратной задачи. Существенная зависимость результатов, найденных по точке абсолютного минимума функционала S_0 обратной задачи, от выбора начальных значений показателя преломления n пленки делает невозможным установление оптимального решения по абсолютному минимуму S_0 . В первую очередь это касается параметров сверхтонкой поверхностной пленки. Выше обсуждался критерий отбора оптимального решения по минимальной величине отклонения найденных значений параметра n от соответствующих начальных значений этого параметра. Но по той же причине он не проходит и здесь. Кстати, он не работает и в идеальном случае, для которого в ситуации со сверхтонкой пленкой также наблюдается зависимость результатов (см. (5)–(8)) от выбора начального значения параметра n . Можно сказать, что и в идеальном случае обратная задача для отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой является математически некорректной. Только здесь причиной появления математической некорректности является исключительно сверхмалая толщина пленки.

2. О ВЫБОРЕ ОПТИМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ВСЕХ ПАРАМЕТРОВ ОДНОСЛОЙНОЙ ОТРАЖАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

Предварительный анализ решения обратной задачи, найденного для реального объекта с применением классического подхода, т. е. по точке абсолютного минимума функционала S_0 , можно провести, используя полученные в настоящей работе результаты численного эксперимента. Прежде всего необходимо выяснить характер зависимости решения от выбора начального значения показателя преломления n поверхностной пленки. Причина такой зависимости кроется не только в

экспериментальных ошибках. Она наблюдается и в идеальном случае (см. (5)–(8)). Однако в любом случае эта зависимость обусловлена сверхмалой толщиной поверхностной пленки. Если наблюдается резкое и очевидное уменьшение толщины d и такое же очевидное увеличение коэффициента поглощения κ_0 при фактическом сохранении показателя преломления n_0 , то это указывает на первостепенную роль экспериментальных ошибок. Для вариантов экспериментальных ошибок (9) и (11) такое поведение указанных параметров носит ярко выраженный характер и описывается формулами (10) и (12). Если же подобное поведение параметров проявляется слабо, но заметная зависимость от начальных значений n имеет место, то можно говорить о сверхмалой толщине пленки и слабой роли экспериментальных ошибок. Для выяснения роли экспериментальных ошибок можно использовать и другие приемы. Например, имеет смысл исследовать решение обратной задачи, зафиксировав одно из предполагаемых значений показателя преломления подложки n_0 . В этом случае вывод можно сделать исходя из найденных значений параметров d , n и κ_0 . Если в поведении этих параметров наблюдается тенденция типа (15) и (16), то по ее выраженности можно судить о роли экспериментальных ошибок. Что касается фиксирования показателя преломления n пленки, причем в условиях, когда данный параметр слабо отклоняется от своего начального значения, то этот случай фактически сводится к одному из рассмотренных приемов (см. (10) и (12)).

Если говорить об оценке влияния не очень выраженного нарушенного слоя на поверхности подложки, то здесь ситуация сложнее. В условиях слабого проявления фактора экспериментальных ошибок и наличия зависимости результатов от выбора начальных значений параметра n можно говорить лишь о сверхмалой толщине пленки, не связывая это только с нарушенным слоем. Даже заметное увеличение коэффициента поглощения κ_0 , связанное с неучтенным нарушенным слоем, можно объяснить влиянием сравнительно небольших экспериментальных ошибок.

Проведенные рассуждения позволяют сделать важные качественные выводы. Однако этого явно недостаточно для точного описания отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой. Рассмотренные особенности говорят о сильно выраженной математической некорректности обратной задачи по одновременному определению всех параметров однослойной отражающей системы. В этом случае для отбора (из множества возможных решений) оптимального решения необходим хорошо работающий критерий.

В работе [1] на основе общих рассуждений сде-

лан вывод, что обратная задача в ее самой общей постановке разбивается на два очевидных этапа и с учетом этого может быть выбран наиболее рациональный путь решения этой задачи. Анализ установленных в настоящей работе особенностей действительно указывает на необходимость введения двух этапов в решении обратной задачи, каждому из которых отвечает свой критерий выбора оптимальных значений соответствующих параметров. Рассмотрим основные вехи в реализации такого подхода.

Пусть точные значения оптических параметров подложки заданы. В этом случае по абсолютному минимуму функционала S_0 обратной задачи определяются параметры прозрачной подложки, которые мы обозначим как

$$d_{\min}, n_{\min}. \quad (33)$$

Для сверхтонких пленок под влиянием экспериментальных ошибок и неточностей в выборе модели отражающего объекта параметры d_{\min} и n_{\min} не совпадают с истинными значениями параметров пленки. Эти несовпадения часто бывают таковы, что говорить о приблизительном или даже грубом описании сверхтонкого слоя вообще невозможно. К таким же или гораздо худшим результатам приходим и при неточном задании оптических параметров подложки, особенно показателя преломления [1]. Важно отметить, что при неточном задании параметров подложки предложенный в работе [1] критерий отбора оптимального решения для сверхтонкой пленки работает уже не так хорошо, как в случае, когда фактор экспериментальных ошибок является единственным. Ситуация особенно усложняется при наличии нарушенного слоя на подложке. В связи с этим на первый план выдвигается задача по достаточно точному определению оптических параметров подложки, в том числе и эффективных. На первом этапе решается именно эта задача. При этом определению подлежат параметры из набора

$$(n_0)_{opt}, (\kappa_0)_{opt}, d_{\min}, n_{\min}, \quad (34)$$

где $(n_0)_{opt}$ и $(\kappa_0)_{opt}$ — это оптимальные значения оптических параметров подложки, а d_{\min} и n_{\min} определены выше (см. (33)).

Анализ рассмотренных в настоящей работе особенностей обратной задачи позволил сформулировать вполне обоснованный критерий, использование которого дает возможность с достаточной точностью определить оптические параметры подложки, т. е. их оптимальные значения $(n_0)_{opt}$ и $(\kappa_0)_{opt}$, а также параметры d_{\min} и n_{\min} . Последнее — это естественное следствие процедуры по

использованию сформулированного критерия. При этом важно отметить следующее. Параметры $(n_0)_{opt}$ и $(\kappa_0)_{opt}$ включают в себя и влияние нарушенного слоя, т. е. в общем случае они представляют собой некоторые эффективные значения оптических параметров подложки. А что касается величин d_{min} и n_{min} , то, будучи связанными единым процессом с параметрами $(n_0)_{opt}$ и $(\kappa_0)_{opt}$, они в основном обусловлены теперь влиянием только экспериментальных ошибок. Таким образом, на первом этапе определяются оптимальные значения оптических параметров подложки и создаются условия для перехода ко второму этапу в решении обратной задачи.

Второй этап является очевидным следствием первого и представляет собой реализацию подхода, изложенного в работе [1]. При решении на данном этапе обратной задачи задаются определенные на предыдущем этапе параметры $(n_0)_{opt}$, $(\kappa_0)_{opt}$ и с помощью предложенного в работе [1] критерия отбора оптимального решения находятся параметры сверхтонкой пленки. При этом величины d_{min} и n_{min} , также определенные на первом этапе, непосредственного участия в процессе решения обратной задачи не принимают. Их значения достигаются в конце последовательности промежуточных решений при выходе на точку абсолютного минимума функционала обратной задачи.

Изложенный подход, представляющий собой последовательное прохождение двух этапов, успешно опробован в численном эксперименте для

всех использованных выше (см. также работу [1]) вариантов экспериментальных ошибок. Значения параметров n_0 и κ_0 подложки определены с большой точностью, причем точность может быть значительно повышена за счет увеличения трудоемкости вычислительного процесса. Опробованы также варианты с нарушенным слоем на поверхности подложки. Полученные при этом результаты имеют важное практическое значение и будут приведены в следующей работе, посвященной исследованию естественных окисных пленок на кремнии и арсениде галлия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2010. Т. 20, № 4. С. 132–142.
2. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2007. Т. 17, № 1. С. 53–61.

*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 17.01.2011.

SOLID BODY AND LIQUID SUPERFICIAL STRUCTURE STUDY BY ELLIPSOmetry CONSIDERING MATHEMATICAL INVERSE PROBLEM INCORRECTNESS.

1. ON FEATURES OF THE INVERSE PROBLEM IN THE STUDY OF THE SUPERTHIN SUPERFICIAL FILMS ON SEMICONDUCTORS

A. I. Semenenko¹, I. A. Semenenko²

¹*Institute for Applied Physics NAS, Sumy, Ukraine*

²*Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg*

The work analyses features of the inverse problem of ellipsometry arising in determination of the whole set of parameters of a reflecting system with superthin superficial film. The way for the solution of the inverse problem is developed: the approach to the solution, representing consecutive passage of two stages is stated. Criterion for the choice of optimum values of the corresponding parameters is formulated for each

stage. Optimum values of substrate parameters and value of the film parameters corresponding to a point of functional absolute minimum of an inverse problem are determined at the first stage. For superthin films these values are significantly different from the true values of the film parameters because of the experimental errors and because of experimental errors and discrepancies in the choice of the model of the object under study. The second stage is an obvious consequence of the first one and represents realization of the approach described in the previous work [1]. At this stage of the solution of the inverse problem the optimum values of substrate parameters defined at the previous stage are set and by means of criteria of selection offered in the work [1] optimum values of parameters of the film are determined. This approach to the solution of the mathematically incorrect inverse problem is successfully tested in the numerical experiment for different variants of experimental errors. Influence of the broken layer on substrate surfaces is also discussed in the work.

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