

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. 3. ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ВСЕХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ СО СВЕРХТОНКИМИ ОКИСНЫМИ ПЛЕНКАМИ НА ОСНОВЕ РЕАЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Работа посвящена дальнейшему развитию метода последовательных приближений в решении математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для полупроводников со сверхтонкими окисными пленками. Основной целью здесь является разработка дополнительной процедуры, обеспечивающей выбор однозначного решения. Речь идет о процедуре, направляющей процесс сходимости к оптимальным значениям параметров, наиболее приближенным к их точным значениям. Это уточнение к методу сделано на основе реального эксперимента. Для этого использованы измерения, проведенные на образце арсенида галлия в нескольких точках образца. При этом получена важная информация, касающаяся неоднородности подобных образцов вдоль поверхности и связанная с характером обработки образцов. Подвергнут сомнению способ сертификации поверхности полупроводников по определенным признакам, не затрагивающим наличия выраженного нарушенного слоя.

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

### ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В предыдущих работах [1–3] проведен анализ особенностей обратной задачи эллипсометрии, проявляющихся при определении полного набора параметров отражающей системы со сверхтонкой поверхностной пленкой, а также разработан способ ее решения. При этом рассмотрены два способа решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии относительно всех параметров отражающего объекта типа прозрачная сверхтонкая поверхностная пленка на полупроводниковой подложке. Один из них предложен в работе [2] и представляет собой последовательное прохождение двух этапов. На первом этапе определяются оптимальные значения параметров подложки, а на втором — поверхностной пленки. Для каждого этапа устанавливается свой критерий выбора оптимальных значений соответствующих параметров. Однако проведенный анализ показал недостаточность такого подхода. Более естественным и последовательным является второй способ решения задачи [3], при котором подложка и пленка самосогласованным образом участвуют в реализации соответствующей процедуры. В этом случае решение относительно всех параметров отражающей системы достигается одновременно.

Конкретная реализация такого подхода, по сути, представляет собой метод последовательных приближений, на каждом шаге которого используется предложенный в работе [1] критерий отбора оптимальных значений параметров сверхтонкой пленки при фиксированных значениях оптических параметров подложки. Можно сказать, что каждый шаг данного метода — это фактически те два этапа в решении обратной задачи, которые предложены в работе [2] и проанализированы в настоящей работе.

Метод последовательных приближений, предложенный для решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии относительно всех параметров отражающего объекта, разработан на основе численного эксперимента. И некоторая неопределенность в выборе конкретного пути реализации данного метода как раз и обусловлена характером численного эксперимента. В этом случае мы заранее знаем точные значения определяемых параметров, а это в той или иной мере сказывается на выборе окончательного наиболее обоснованного решения. При экспериментальном исследовании реальных образцов по известным причинам нельзя ориентироваться на точные значения их параметров. Это заставляет провести дополнительный анализ метода последовательных

приближений. В конечном итоге результатом такого анализа явилась разработка дополнительной процедуры, обеспечивающей однозначный выбор решения обратной задачи. Именно на основе данной процедуры в настоящей работе проведено экспериментальное исследование арсенида галлия со сверхтонкой окисной пленкой.

## 1. АНАЛИЗ ОСНОВНЫХ ПОЛОЖЕНИЙ МЕТОДА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Основные положения метода последовательных приближений изложены в работе [3]. Имея в виду дальнейшее развитие метода, кратко и в нужной последовательности опишем эти положения.

На каждом шаге метода последовательных приближений задаются начальные значения

$$n_0^{(0)}, \kappa_0^{(0)} \quad (1)$$

показателя преломления  $n_0$  и коэффициента поглощения  $\kappa_0$  подложки, и по схеме оптимального решения обратной задачи [1] определяются соответствующие значения параметров пленки

$$d_{opt}, n_{opt}. \quad (2)$$

Затем для того же шага реализуется обратный процесс, т. е. фиксируются оптимальные значения (2) параметров  $d$  и  $n$  пленки и по точке абсолютного минимума функционала  $S_0$  находятся параметры подложки

$$n_0^{(1)}, \kappa_0^{(1)}. \quad (3)$$

В общем случае пары (1) и (3), определяющие (для данного шага) начальные и конечные значения оптических параметров подложки, не совпадают. Более того, величины

$$V_n = |n_0^{(0)} - n_0^{(1)}|, \quad V_\kappa = |\kappa_0^{(0)} - \kappa_0^{(1)}| \quad (4)$$

определенным образом связаны с процессом сходимости параметров отражающего объекта к их конечным оптимальным значениям.

Исключительное значение имеет правильный выбор начальных значений  $n_0^{(0)}, \kappa_0^{(0)}$  параметров подложки, причем на каждом шаге метода последовательных приближений. В работе [3] особое внимание обращено на выбор начальных значений  $n_0^{(0)}, \kappa_0^{(0)}$  для первого шага метода. Для данного шага величина  $n_0^{(0)}$ , с одной стороны, не должна слишком отличаться от точного значения параметра  $n_0$ , а с другой — обеспечивать выполнение следующего условия для показателя преломления  $n$  пленки в точке абсолютного минимума функ-

ционала  $S_0$ :

$$n_{\min} \rightarrow 1. \quad (5)$$

Данное условие при любом типе экспериментальных ошибок обязательно связано с выполнением неравенства [1]

$$n_0^{(0)} < (n_0)_{true}, \quad (6)$$

где  $(n_0)_{true}$  — точное значение показателя преломления  $n_0$ .

Величину  $n_0^{(0)}$ , исходя из условия (6), легко подобрать для любого объекта рассматриваемого типа. При этом, как следует из результатов работы [1], нетрудно обеспечить достаточно слабое отличие данной величины от ее точного значения. Для этого, добившись выполнения условия (5) при некотором значении величины  $n_0$ , необходимо затем увеличивать  $n_0$  до некоторого предела, все еще обеспечивающего выполнение условия (5), которое можно записать еще и в виде

$$n_{\min} = 1 + \alpha, \quad \alpha \ll 1. \quad (7)$$

Что касается начального значения  $\kappa_0^{(0)}$  коэффициента поглощения  $\kappa_0$ , то здесь ситуация сложнее. Трудности возникают даже для известного материала подложки, и связаны они не только с характером поверхности подложки. В связи с этим приведем некоторые общие соображения, основанные на результатах работы [1]. При подборе величины  $n_0^{(0)}$  в соответствии с условиями (5)–(7) величина  $d_{opt}$  из (2) уменьшается по сравнению с истинным значением толщины. Выбрав начальное значение  $\kappa_0^{(0)}$  в соответствии с условием

$$\kappa_0^{(0)} > (\kappa_0)_{true}, \quad (8)$$

мы в еще большей мере искажаем (в сторону уменьшения) величину  $d_{opt}$ . Поэтому целесообразно выбирать величину  $\kappa_0^{(0)}$  в соответствии с условием

$$\kappa_0^{(0)} < (\kappa_0)_{true}. \quad (9)$$

Данное условие приводит к обратному эффекту [1] и в какой-то степени стабилизирует значение величины  $d_{opt}$ . Для полной определенности целесообразно остановиться на нулевом начальном значении коэффициента  $\kappa_0$

$$\kappa_0^{(0)} = 0. \quad (10)$$

Таким образом, сформулированные в работе [3] правила выбора начальных значений показателя преломления и коэффициента поглощения подложки для первого шага метода не требуют каких-либо предварительных данных, касающихся точных значений параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$ . Эти правила обеспечивают неплохой старт при использовании метода последовательных приближений для решения обратной задачи. Уже на первом шаге определяются неплохие значения показателей преломления пленки и особенно подложки. Что касается толщины пленки и коэффициента поглощения подложки, то они на данном шаге определяются с гораздо меньшей точностью. Эти результаты находят в полном соответствии с характером взаимосвязи между параметрами отражающей системы со сверхтонкой пленкой. При фиксировании неточных значений параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  оптимальные значения параметров пленки, найденные с использованием соответствующего критерия-параметра [1], ведут себя по-разному. Оптимальное значение показателя преломления  $n$  относительно слабо реагирует на изменение параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$ . В то же время для всех случаев 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. Аналогичная картина наблюдается и в случае обратной связи между параметрами пленки и подложки, когда в качестве параметров пленки фиксируются их значения, определенные по схеме оптимального решения. В этом случае показатель  $n_0$ , найденный по точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ , относительно слабо отличается от его исходного значения  $n_0^{(0)}$ . Однако в отношении коэффициента  $\kappa_0$  в общем случае это неверно. Несмотря на такое различие в поведении  $n_0$  и  $\kappa_0$ , связанные с ними величины  $V_n$  и  $V_\kappa$  (см. (4)) сопровождают процесс сходимости параметров отражающего объекта к их конечным оптимальным значениям, достигая на последней стадии процесса минимальных значений. В то же время величины  $V_n$  и  $V_\kappa$ , необходимые для описания процесса сходимости, не являются достаточными для выбора правильного решения. Необходимы и другие характеристики процесса.

Для любого следующего шага метода последовательных приближений также необходимо задавать начальные значения  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$ . В работе [3] величина  $n_0^{(0)}$  задается соотношением

$$n_0^{(0)} = n_0^{(1)}, \quad (11)$$

где  $n_0^{(1)}$  — конечное значение показателя  $n_0$ , найденное на предыдущем шаге. Это вполне обоснованно и связано с близостью величины  $n_0^{(1)}$  к точному значению показателя преломления подложки. В принципе, таким же образом можно задавать и начальное значение  $\kappa_0^{(0)}$  коэффициента поглощения подложки

$$\kappa_0^{(0)} = \kappa_0^{(1)}. \quad (12)$$

Но можно также использовать пошаговый способ задания величины  $\kappa_0^{(0)}$ :

$$\kappa_0^{(0)} = \kappa_0^{(1)} + \delta\kappa_0, \quad (13)$$

где  $\kappa_0^{(1)}$  — конечное значение параметра  $\kappa_0$  на предыдущем шаге,  $\delta\kappa_0$  — шаг параметра  $\kappa_0$ . Шаг  $\delta\kappa_0$  задается и может меняться по мере приближения к точным значениям параметров отражающего объекта.

Прежде чем перейти к оценке способов задания начальных значений  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$ , следует обратить особое внимание на следующий момент, отмеченный в работах [1] и [3]. Варьируя значения параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  подложки, мы получаем возможность полного контроля над величинами  $d_{\min}$  и  $n_{\min}$ , отвечающими (при заданных параметрах  $n_0$  и  $\kappa_0$ ) точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ . Это означает, что всегда независимо от характера экспериментальных ошибок можно добиться того, чтобы величины  $d_{\min}$  и  $n_{\min}$  при определенных значениях параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  проходили через оптимальные значения  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$  параметров пленки

$$d_{\min} = d_{opt}, \quad n_{\min} = n_{opt}. \quad (14)$$

При этом первое впечатление таково, что при выполнении условий (14) соответствующие значения параметров  $n_0$ ,  $\kappa_0$  и  $d_{opt}$ ,  $n_{opt}$  будут наиболее приближены к истинным значениям. Однако это не совсем так. Можно только сказать, что связанные с условиями (14) величины

$$W_d = |d_{\min} - d_{opt}|, \quad W_n = |n_{\min} - n_{opt}| \quad (15)$$

всегда достигают минимальных значений при подходе к правильному решению, но по этому признаку они не являются достаточными для выбора правильного решения. По этому признаку не является достаточным и комплекс величин  $V_n$ ,  $V_\kappa$  и  $W_d$ ,  $W_n$ . Дополнительный анализ показывает, что если ограничиться изучением поведения толь-

ко этих четырех величин, то выбор решения не будет однозначным.

Начальные значения  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$  на каждом шаге должны быть определенным образом согласованы между собой. Предложенный в работе [3] способ согласования, основанный на выборе из некоторой последовательности начального значения  $\kappa_0^{(0)}$  при заданном начальном значении  $n_0^{(0)}$ , по замыслу должен улучшить процесс сходимости к оптимальным значениям параметров, наиболее приближенным к их точным значениям. Однако и здесь возникает проблема однозначного выбора решения.

## 2. ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ МЕТОДА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Изложив основные положения метода последовательных приближений и сделав замечания, касающиеся проблемы однозначного выбора решения и роли параметров

$$V_n, V_\kappa \text{ и } W_d, W_n$$

в выборе правильного решения, перейдем теперь к дальнейшему развитию метода. Основной целью здесь является разработка дополнительной процедуры, обеспечивающей выбор однозначного решения. Иначе говоря, речь идет о процедуре, направляющей процесс сходимости к оптимальным значениям параметров, наиболее приближенным к их точным значениям.

Прежде всего коснемся основного смысла в том выборе начальных значений  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$ , который определяется соотношениями (5)–(7) и (9), (10). При выполнении условий (5) или (7), а также (10) величины  $d_{\min}$  и  $n_{\min}$ , отвечающие (при заданных параметрах  $n_0$  и  $\kappa_0$ ) точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ , в основном определяются начальным значением  $n_0^{(0)}$ , слабо отличающимся от точного значения показателя преломления подложки. В связи с этим возникает вопрос, по какой же причине выбрано нулевое значение величины  $\kappa_0^{(0)}$  на первом шаге. Этот выбор обусловлен, очевидно, не только соображениями, как указано выше, полной определенности в начальных значениях. Проблема выбора начальных значений  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$ , причем не только на первом шаге, непосредственно связана с решением главной проблемы. Поэтому рассмотрим этот вопрос подробнее.

В работе [3] показано, что экспериментальные ошибки в поляризационных углах, парадоксальным образом искажающие параметры сверхтонкой пленки, совершенно нормально воздействуют на

параметры подложки. Иначе говоря, математическая некорректность обратной задачи проявляется почти исключительно на параметрах сверхтонкой пленки. Устойчивость оптических параметров подложки к экспериментальным ошибкам физически понятна. Очевидно также, что по всем признакам, связанным с решением обратной задачи, главным для полупроводниковой подложки является показатель преломления  $n_0$ . При прохождении начиная с первого шага некоторой последовательности шагов начальные значения  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$  меняются в соответствии с принятыми правилами. Если эти правила каким-то образом не согласованы между собой, то возникает сложная картина, не позволяющая провести полный анализ, связанный с решением главной проблемы. Согласование по начальному значению  $\kappa_0^{(0)}$  при фиксированном значении  $n_0^{(0)}$ , предложенное в работе [3], также не является достаточно простым и не может быть принято за основу при проведении указанного анализа. Наиболее простая и физически понятная ситуация возникает, если рассматривать возрастающую последовательность начальных значений показателя преломления подложки

$$\{n_0^{(0)}\} \quad (16)$$

при фиксированном начальном значении  $\kappa_0^{(0)}$  коэффициента поглощения, входящем в некоторую вторичную возрастающую последовательность

$$\{\kappa_0^{(0)}\}. \quad (17)$$

Обе эти последовательности — как основная, так и вторичная — характеризуют основные диапазоны для параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$ . Первые элементы этих последовательностей в соответствии с характером их выбора ограничивают эти диапазоны снизу. Что касается конечных элементов последовательностей, ограничивающих диапазоны сверху, то они удовлетворяют определенным условиям и проявляются очевидным образом при рассмотрении данных последовательностей, т. е. задавать их заранее нет никакого смысла. Для дальнейшего нам понадобится описание свойств первого и последнего элементов последовательности (16), имеющих место при любом значении  $\kappa_0^{(0)}$  из последовательности (17). Для первого элемента из (16) ситуация ясна. Этот элемент относительно слабо отличается от точного значения  $n_0$ , удовлетворяет условию (6), а соответствующая ему величина  $n_{\min}$  определяется условиями (5) и (7). Что касается величины  $d_{\min}$ , то она, как следует из работы [1], удовлетворяет условиям

$$d_{\min} \gg (d)_{true}, \quad d_{\min} \gg d_{opt}. \quad (18)$$

Последний элемент последовательности (16) также относительно слабо отличается от точного значения  $n_0$ , удовлетворяет условиям

$$n_0^{(0)} > (n_0)_{true}, \quad n_0^{(0)} > (n_0)_{opt}, \quad (19)$$

а отвечающие ему величины  $n_{min}$  и  $d_{min}$ , в соответствии с результатами работы [1], удовлетворяют условиям

$$n_{min} \gg (n)_{true}, \quad n_{min} \gg n_{opt}, \quad (20)$$

$$d_{min} > (d)_{true}, \quad d_{min} > d_{opt}. \quad (21)$$

Следует отметить, что условия (21), отвечающие последнему элементу, значительно слабее условий (18), соответствующих первому элементу последовательности (16).

Интерес представляют и основные свойства первого и последнего элементов вторичной последовательности (17). Для первого элемента выбирается нулевое значение (см. (10)). При точном значении показателя  $n_0$  отвечающие первому элементу величины  $n_{min}$  и  $d_{min}$  подчиняются условиям (см. [1])

$$n_{min} \approx (n)_{true}, \quad d_{min} > (d)_{true}. \quad (22)$$

Последний же элемент последовательности (17) и отвечающие ему величины  $n_{min}$  и  $d_{min}$  удовлетворяют условиям (см. [1])

$$\kappa_0^{(0)} > (\kappa_0)_{true}, \quad (23)$$

$$n_{min} > (n)_{true}, \quad n_{min} > n_{opt}, \quad (24)$$

$$d_{min} < (d)_{true}. \quad (25)$$

Но этот элемент нельзя выбрать, исходя из условий (23)–(25). Он определяется в процессе решения основной задачи, основанного на исследовании последовательностей (16) и (17).

Проследим за поведением величин  $d_{min}$ ,  $n_{min}$  и  $d_{opt}$ ,  $n_{opt}$  при движении вдоль последовательности (16) при некотором фиксированном значении  $\kappa_0^{(0)}$  из последовательности (17). С увеличением  $n_0^{(0)}$ , начиная от первого элемента, условия (5) и (7), а также (18) ослабевают, т. е. меняется относительное расположение точек

$$(d_{min}, n_{min}) \quad \text{и} \quad (d_{opt}, n_{opt}). \quad (26)$$

Эти точки сближаются. Данный процесс удобно описывать, представив условия (5), (7) и (18) для случая сближения точек (26) в виде

$$(d_{min} - d_{opt}) > 0, \quad (n_{min} - n_{opt}) < 0. \quad (27)$$

При дальнейшем увеличении  $n_0^{(0)}$  разности величин, указанные в условиях (27), проходят через ноль, а сами неравенства (27) меняются на противоположные (по знаку неравенства)

$$(d_{min} - d_{opt}) < 0, \quad (n_{min} - n_{opt}) > 0. \quad (28)$$

Это означает, что точки начинают расходиться.

Двигаясь вдоль последовательности (16) при фиксированном значении  $\kappa_0^{(0)}$  из (17), мы находим не только величины  $d_{min}$ ,  $n_{min}$  и  $d_{opt}$ ,  $n_{opt}$ , но также и параметры  $n_0^{(1)}$  и  $\kappa_0^{(1)}$ , определяемые по точке абсолютного минимума функционала  $S_0$  при заданных значениях  $d_{opt}$ ,  $n_{opt}$ . Для всего процесса сближения точек, когда имеют место неравенства (27), выполняются очень важные условия

$$(n_0^{(0)} - n_0^{(1)}) < 0, \quad (\kappa_0^{(0)} - \kappa_0^{(1)}) < 0. \quad (29)$$

Переход к процессу расхождения точек (26) сопровождается не только переходом от условия (27) к условию (28), но также и изменением характера неравенств (29), которые в этом случае принимают вид

$$(n_0^{(0)} - n_0^{(1)}) > 0, \quad (\kappa_0^{(0)} - \kappa_0^{(1)}) > 0. \quad (30)$$

Описанный переход можно идентифицировать, используя соответствующие ему неравенства (27)–(30), точнее, изменения характера этих неравенств. Величины, входящие в эти неравенства, определяют параметры  $V_n$ ,  $V_\kappa$  и  $W_d$ ,  $W_n$  (см. (4) и (15)). Эти величины, а значит, и параметры  $V_n$ ,  $V_\kappa$  и  $W_d$ ,  $W_n$  проходят через ноль. Процесс носит дискретный характер, поэтому процедура минимизации данных параметров, имеющая место для точки перехода, может быть записана в виде

$$W_d = |d_{min} - d_{opt}| \approx 0, \quad W_n = |n_{min} - n_{opt}| \approx 0, \quad (31)$$

$$V_n = |n_0^{(0)} - n_0^{(1)}| \approx 0, \quad V_\kappa = |\kappa_0^{(0)} - \kappa_0^{(1)}| \approx 0. \quad (32)$$

Для определенности можно еще сказать, что указанный переход в относительном расположении точек (26) — это переход точки минимума  $(d_{min}, n_{min})$  через точку оптимальных значений  $(d_{opt}, n_{opt})$ . Такого рода переход наблюдается при любом значении  $\kappa_0^{(0)}$  из (17). Это связано с тем, что основную роль в перемещении точки минимума (26) играет показатель  $n_0$ , т. е. последовательность (16) начальных значений  $n_0^{(0)}$ . Отсюда сле-

дует, что факт минимизации параметров  $V_n, V_\kappa$  и  $W_d, W_n$ , имеющий место в любой точке перехода, являясь необходимым для выбора решения обратной задачи, не является достаточным для такого выбора. Задача состоит в том, чтобы из множества переходов точки минимума  $(d_{\min}, n_{\min})$  через точку оптимальных значений  $(d_{opt}, n_{opt})$  выбрать тот переход, которому соответствует оптимальное решение, наиболее приближенное к точному решению обратной задачи. И поскольку каждому такому переходу соответствует определенное значение  $\kappa_0^{(0)}$ , то правильный выбор перехода означает и выбор величины  $\kappa_0$ , как одного из параметров решения обратной задачи. Что касается остальных параметров решения, то они находятся с помощью простых соотношений. В результате полное решение обратной задачи запишется

$$\begin{cases} d_{true} \approx d_{\min} \approx d_{opt}, & n_{true} \approx n_{\min} \approx n_{opt}; \\ n_0 \approx n_0^{(0)} \approx n_0^{(1)}, & \kappa_0 \approx \kappa_0^{(0)} \approx \kappa_0^{(1)}. \end{cases} \quad (33)$$

где величины  $d_{\min}, d_{opt}, n_{\min}, n_{opt}, n_0^{(0)}, \kappa_0^{(0)}$  и  $n_0^{(1)}, \kappa_0^{(1)}$  соответствуют выбранному переходу.

Сформулируем теперь правило, с помощью которого устанавливается переход точки минимума  $(d_{\min}, n_{\min})$  через точку оптимальных значений  $(d_{opt}, n_{opt})$ , отвечающий параметру  $\kappa_0^{(0)}$ , наиболее близкому к его точному значению. Основную роль в изменении относительного расположения точек (26), как уже указывалось, играет показатель преломления подложки  $n_0$ . Роль коэффициента поглощения  $\kappa_0$  относительно невелика, но лишь до тех пор, пока параметр  $n_0$  находится вне некоторого минимального интервала с центром в точке  $n_{0\ pas}$ , определяющей момент перехода. Данный интервал назовем интервалом перехода. Таким образом, вне интервала перехода основную роль играет показатель  $n_0$ , внутри же интервала действие параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  сравнивается и лишь с приближением к центру интервала начинает доминировать параметр  $\kappa_0$ . Основным интересом представляет сам интервал перехода и поведение величин  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$  как функций параметра  $n_0$

$$d_{opt} = f_1(n_0), \quad n_{opt} = f_2(n_0) \quad (34)$$

в пределах этого интервала.

Рассмотрим поведение функций  $f_1(n_0)$  и  $f_2(n_0)$  в окрестности точки  $n_{0\ pas}$ . Введем левостороннее  $\delta f_{1(2)}^{(-)}$  и правостороннее  $\delta f_{1(2)}^{(+)}$  при-

ращения этих функций при удалении от точки  $n_{0\ pas}$  влево и вправо на одну и ту же (для всех  $\kappa_0^{(0)}$ ) величину:

$$\delta f_{1(2)}^{(-)} = |f_{1(2)}(n_0) - f_{1(2)}(n_{0\ pas})|, \quad n_0 < n_{0\ pas}, \quad (35)$$

$$\delta f_{1(2)}^{(+)} = |f_{1(2)}(n_0) - f_{1(2)}(n_{0\ pas})|, \quad n_0 > n_{0\ pas}, \quad (36)$$

где

$$|n_0 - n_{0\ pas}| = \text{const}. \quad (37)$$

Значения приращений  $\delta f_{1(2)}^{(-)}$  и  $\delta f_{1(2)}^{(+)}$  зависят от того, насколько сильно величина  $\kappa_0$  отличается от ее точного значения. Чем сильнее это отличие, тем большие значения приобретают данные приращения. С приближением коэффициента  $\kappa_0$  к точному значению указанные приращения становятся все более слабыми, достигая минимальных величин при достижении коэффициентом  $\kappa_0$  точного значения

$$\kappa_0 = (\kappa_0)_{true}. \quad (38)$$

В этом случае переход обусловлен исключительно параметром  $n_0$ . В пределах интервала перехода данный параметр не только слабо отличается от точного значения. Ослабевает при выполнении условия (38) и его действие на величины  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$ . Этим и объясняется минимальная выраженность приращений величин  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$  (функций  $f_1(n_0)$  и  $f_2(n_0)$ ) при выполнении условия (38).

Из предыдущего ясно, что установление совокупности переходов точки минимума  $(d_{\min}, n_{\min})$  через точку оптимальных значений  $(d_{opt}, n_{opt})$ , отвечающих набору параметров  $\kappa_0^{(0)}$  из последовательности (17), принципиальных затруднений не представляет. Из этой совокупности выбираем переход, которому отвечает минимальная выраженность приращений величин  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$  (функций  $f_1(n_0)$  и  $f_2(n_0)$ ), т. е. оптимальное значение коэффициента  $\kappa_0$ . Затем, используя параметры  $d_{\min}, d_{opt}, n_{\min}, n_{opt}, n_0^{(0)}, \kappa_0^{(0)}$  и  $n_0^{(1)}, \kappa_0^{(1)}$ , соответствующие данному переходу, с помощью соотношений (33) находим оптимальное решение обратной задачи, наиболее приближенное к точным значениям параметров отражающей системы.

Таким образом, разработанная в настоящей работе процедура, дополняя метод последовательных приближений, обеспечивает однозначный выбор решения обратной задачи. В следующем

разделе на основе данной процедуры проведено экспериментальное исследование арсенида галлия с естественной сверхтонкой окисной пленкой.

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ С ЕСТЕСТВЕННОЙ ОКИСНОЙ ПЛЕНКОЙ

Используем метод последовательных приближений в его последней модификации для экспериментального исследования арсенида галлия. На поверхности изучаемого образца присутствует естественная окисная пленка, относящаяся по своей толщине к разряду сверхтонких пленок. Измерения поляризационных углов в целях выявления неоднородности поверхности проведены в нескольких точках образца для набора углов падения светового пучка. Данный набор включает в себя углы от 50 до 74 градусов через 2 градуса, всего 13 углов падения. Здесь мы приведем результаты только для двух характерных точек образца. Поляризационные углы  $\Psi$  и  $\Delta$  для этих точек приведены в таблице (см. Приложение). Подробно остановимся на результатах, описывающих свойства образца в первой точке.

В соответствии с характером дополнительной процедуры к методу последовательных приближений рассмотрим последовательности (16) и (17) для начальных значений  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$ . Первые элементы этих последовательностей с выбранными в соответствии с условиями (5)–(7) и (9), (10) значениями

$$n_0^{(0)} = 3.800, \quad \kappa_0^{(0)} = 0.00 \quad (39)$$

позволяют дать первоначальную оценку значений оптических параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  подложки и параметров  $d$  и  $n$  пленки. В этом случае точка абсолютного минимума функционала  $S_0$ , правила отбора оптимальных значений параметров пленки [1], а также параметры  $n_0^{(1)}$  и  $\kappa_0^{(1)}$  обратного процесса (см. (3)) дают следующие результаты

$$d_{\min} = 32.8041, \quad n_{\min} = 1.0564, \quad (40)$$

$$d_{\text{opt}} = 6.2234, \quad n_{\text{opt}} = 1.5205, \quad (41)$$

$$n_0^{(1)} = 3.8360, \quad \kappa_0^{(1)} = 0.0200. \quad (42)$$

В общем случае на основе условий (5)–(7) и (9), (10) и соотношений, аналогичных (40)–(42), можно неплохо оценить параметры  $n_0$  и  $n$ , хуже оценивается толщина  $d$  и особенно грубо — коэффициент поглощения  $\kappa_0$ . Но это в общем случае, в данном же конкретном случае коэффициент  $\kappa_0$  также оценивается, как будет видно из дальнейше-

го, весьма неплохо. И зависит это от выбора в соответствии с условиями (5)–(7) параметра  $n_0^{(0)}$ . Если, придерживаясь тех же условий (5)–(7), выбрать в качестве параметра  $n_0^{(0)}$  значения

$$n_0^{(0)} = 3.8100, \quad n_0^{(0)} = 3.8200, \quad (43)$$

все более приближающиеся к точному значению  $n_0$ , то коэффициент  $\kappa_0$  оценивается все хуже и хуже. Для второго из соотношений (43) результат для параметра  $\kappa_0$  становится очень плохим. То же самое, только в менее выраженной форме, происходит и с толщиной  $d$ . Такая согласованность параметров  $d$  и  $n$  закономерна. В то же время, значения параметров  $n_0$  и  $n$  при увеличении величины  $n_0^{(0)}$ , не нарушающем условий (5)–(7), по крайней мере не становятся хуже. Отметим также, что при переходе к значениям (43) величины  $d_{\min}$  и  $n_{\min}$  соответственно уменьшаются и увеличиваются.

Для реализации разработанной в предыдущем разделе процедуры сначала установим, причем для любого значения  $\kappa_0^{(0)}$  из последовательности (17), два значения  $n_0^{(0)}$ :

$$n_0^{(0)} = 3.8350, \quad n_0^{(0)} = 3.8360. \quad (44)$$

Из них меньшее обеспечивает выполнение условия

$$n_{\min} < n_{\text{opt}}, \quad (45)$$

а второе — условия

$$n_{\min} > n_{\text{opt}}. \quad (46)$$

Затем рассмотрим отрезок между этими значениями  $n_0^{(0)}$

$$[3.8350; 3.8360] \quad (47)$$

и проведем процедуру деления отрезка для каждого значения  $\kappa_0^{(0)}$  из последовательности (17). Разделим этот отрезок пополам и перейдем к половинному отрезку, концам которого отвечают значения  $n_0^{(0)}$ , также удовлетворяющие условиям (45) и (46). Продолжив процедуру деления, мы подойдем к переходу точки минимума ( $d_{\min}, n_{\min}$ ) через точку оптимальных значений ( $d_{\text{opt}}, n_{\text{opt}}$ ). В результате приходим к некоторой совокупности таких переходов, отвечающих набору параметров  $\kappa_0^{(0)}$  из последовательности (17). Для каждого перехода выполняются условия (27)–(30), а также (31) и (32).

Из полученной совокупности переходов выбираем тот переход, которому отвечает коэффициент поглощения

$$\kappa_0^{(0)} = 0.0210. \quad (48)$$

Именно на таком переходе реализуются минимальные приращения величин  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$  (функций  $f_1(n_0)$  и  $f_2(n_0)$ ). Этому переходу отвечает значение

$$n_0^{(0)} = n_{0\ pas} = 3.8356. \quad (49)$$

Используя значения (48) и (49) величин  $n_0^{(0)}$ ,  $\kappa_0^{(0)}$ , а также  $d_{opt}$  и  $n_{opt}$ , отвечающих выбранному переходу, находим решение обратной задачи, наиболее приближенное к точному решению

$$\begin{cases} d \approx 6.309 \text{ нм}, & n \approx 1.5006, \\ n_0 \approx 3.8356, & \kappa_0 \approx 0.0210. \end{cases} \quad (50)$$

Для второй точки образца на первом этапе также используем начальные значения (39). В этом случае точка абсолютного минимума функционала  $S_0$ , правила отбора оптимальных значений параметров пленки [1], а также параметры  $n_0^{(1)}$  и  $\kappa_0^{(1)}$  обратного процесса (см. (3)) дают следующие результаты

$$d_{min} = 18.0266, \quad n_{min} = 1.1274, \quad (51)$$

$$d_{opt} = 7.1685, \quad n_{opt} = 1.5166, \quad (52)$$

$$n_0^{(1)} = 3.8202, \quad \kappa_0^{(1)} = 0.0114. \quad (53)$$

Не вдаваясь в подробности и используя ту же процедуру, приведем окончательное решение обратной задачи:

$$\begin{cases} d \approx 7.088 \text{ нм}, & n \approx 1.5084, \\ n_0 \approx 3.8201, & \kappa_0 \approx 0.0205. \end{cases} \quad (54)$$

Наблюдающееся заметное различие в параметрах двух точек образца арсенида галлия мы обсудим ниже. А сейчас вернемся к вопросу о выборе на первом этапе в соответствии с условиями (5)–(7) и (9), (10) начальных значений  $n_0^{(0)}$  и  $\kappa_0^{(0)}$  (см. (39)). Начальное значение  $\kappa_0^{(0)}$  остается неизменным (нулевым). Что же касается параметра  $n_0^{(0)}$ , то, как отмечено для первой точки, разумное уменьшение величины  $n_0^{(0)}$ , приближающее значение  $n_{min}$  к единице, не ухудшая предварительных данных о параметрах  $n_0$  и  $n$ , существенно улучшает эти данные для параметров  $d$  и  $\kappa_0$ . Этот вы-

вод подтверждается и на примере второй точки. Определим для этой точки начальное значение  $n_0^{(0)}$  в соотношении (39) меньшей величиной

$$n_0^{(0)} = 3.790, \quad (55)$$

при которой величина  $n_{min}$  еще больше приближается к единице. В этом случае значения  $d_{min}$  и  $n_{min}$ , и предварительные данные для всех четырех параметров запишутся:

$$d_{min} = 25.7984, \quad n_{min} = 1.0838, \quad (56)$$

$$d_{opt} = 7.0967, \quad n_{opt} = 1.5149, \quad (57)$$

$$n_0^{(1)} = 3.8202, \quad \kappa_0^{(1)} = 0.0172. \quad (58)$$

Сравнивая (41) и (42) с (50), а также (57) и (58) с (54), видим, что предварительные данные о параметрах отражающей системы, полученные путем соответствующего выбора начального значения  $n_0^{(0)}$  в соотношении (39), позволяют правильно ориентироваться при нахождении оптимального решения обратной задачи.

Сравнивая (50) и (54), видим, что параметры арсенида галлия с естественной окисной пленкой, соответствующие двум точкам образца, заметно различаются. Если внимательно посмотреть на таблицу, то можно заметить различие и в значениях углов  $\Psi$  и  $\Delta$ , отвечающих двум точкам образца. Подобное различие наблюдается и по другим точкам образца. Это указывает на неоднородность поверхности образца. В то же время исследованный образец прошел сертификацию после химико-механической обработки. Все дело в том, что сертификация образцов после такой обработки проводится по признакам, не связанным с наличием нарушенного поверхностного слоя. С помощью различных методов, включая атомно-силовую микроскопию, выявляются дефекты на поверхности, например шероховатости. Если данные методы указывают на почти идеальную (в ее геометрическом понимании) поверхность, то на этом основании, как правило, заявляют об отсутствии нарушенного поверхностного слоя. Но такой вывод является следствием весьма грубой ошибки. Геометрически гладкая поверхность скрывает под собой нарушенный слой, выраженный настолько, что не считается с этим никак нельзя. Это устанавливается не только путем решения обратной задачи эллипсоидометрии. Измерения проводятся на наборе углов падения светового луча, включающем в себя и угол Брюстера. А на угле Брюстера ярко проявляются хорошо известные особенности в поведении измеряемых поляризационных углов. По характеру размытия этих особенностей также можно судить о степени выраженности нарушенного



слоя. Кроме этого, есть еще один надежный и весьма простой способ определения степени неоднородности отражающей поверхности — это разброс результатов измерений углов  $\Psi$  и  $\Delta$  по 4 измерительным зонам прибора. Данный межзонный разброс резко усиливается в окрестности угла Брюстера, что связано с малостью (в этой окрестности) амплитуды  $p$ -волны. Понятно, что с уменьшением амплитуды влияние неоднородной поверхности на  $p$ -волну усиливается, а это в конечном итоге приводит к усилению межзонного разброса измеряемых поляризационных углов. Оценивая величину межзонного разброса в окрестности угла Брюстера и учитывая, что неоднородность реальной отражающей поверхности (в рассматриваемом случае — геометрической гладкости окаймляющей поверхности) обусловлена наличием нарушенного слоя, можно сделать каче-

ственный вывод о выраженности нарушенного поверхностного слоя. Так вот, все три упомянутых способа указывают на достаточную выраженность нарушенного слоя и после использования химико-механической обработки поверхности образцов. В этом вопросе можно сослаться и на опыт оптиков-технологов. В настоящий момент не существует метода механической обработки (а она предшествует химико-механической обработке, затрагивающей лишь незначительную по толщине часть поверхности), который обеспечивал бы однородность нарушенного слоя вдоль поверхности. Такие рассуждения подтверждаются не только измерениями на образцах арсенида галлия. Такого же типа неоднородность наблюдается и на образцах сапфира, прошедших сертификацию после химико-механической обработки.

### Приложение

Поляризационные углы  $\Psi$  и  $\Delta$  для двух точек образца арсенида галлия для набора углов падения светового пучка

Угол падения, $\varphi_0$ (град)	Точка 1		Точка 2	
	$\Psi$ (град)	$\Delta$ (град)	$\Psi$ (град)	$\Delta$ (град)
50.00	31.38	176.15	31.36	175.84
52.00	30.00	175.74	29.95	175.34
54.00	28.90	175.23	28.47	174.71
56.00	26.88	174.51	26.86	174.00
58.00	25.17	173.82	25.09	173.10
60.00	23.22	172.87	23.20	172.14
62.00	21.14	171.84	21.12	170.91
64.00	18.88	170.30	18.83	169.23
66.00	16.33	168.15	16.36	166.93
68.00	13.61	165.25	13.60	163.22
70.00	10.63	160.32	10.70	157.53
72.00	7.48	150.78	7.63	147.18
74.00	4.56	125.78	4.91	121.03

### 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. 2011. Т. 21, № 1. С. 103–113.
3. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 2. С. 44–52.

г. Сумы, Украина (Семененко А.И.)

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

Контакты: Семененко Альберт Иванович,  
sem199@mail.ru

Материал поступил в редакцию 17.07.2011.

**SOLID BODY AND LIQUID SUPERFICIAL STRUCTURE STUDY  
BY ELLIPSOmetry CONSIDERING MATHEMATICAL  
INVERSE PROBLEM INCORRECTNESS.  
PART 3. ON THE DETERMINATION OF ALL THE PARAMETERS  
OF SEMICONDUCTORS WITH SUPERTHIN OXIDE FILMS  
ON THE BASIS OF THE REAL EXPERIMENT**

**A. I. Semenenko<sup>1</sup>, I. A. Semenenko<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Sumy, Ukraine*

<sup>2</sup>*Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg*

The work is devoted to the further development of the method of progressive approximation in the solution of mathematically incorrect ellipsometry inverse problem for the semiconductors with superthin oxide films. The main task is development of the additional procedure providing the choice of the only solution. The procedure directing convergence process to optimum parameter values mostly approximate to their true values is discussed. This improvement of the method is made on the basis of the real experiment. For this purpose measurements made on the sample of gallium arsenide in several point of the sample were used. Important data concerning heterogeneity of such samples along their surface and associated with the character of sample treatment were obtained. Certification method of semiconductors surface due to certain signs which are not associated with the presence of the expressed damaged layer was questioned.

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