

УДК 535.5.511: 531.7

© А. И. Семенов, И. А. Семенов

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ И ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ С УЧЕТОМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ НЕКОРРЕКТНОСТИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ. 4. ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ПРОЦЕССА МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ПРОЗРАЧНЫМИ СВЕРХТОНКИМИ ПЛЕНКАМИ

Разработана процедура минимизации функционала обратной задачи в пространстве всех параметров отражающей системы (полупроводниковая подложка—прозрачная сверхтонкая пленка). Это позволяет решить несколько задач. Физически обоснованными становятся правила выбора начальных значений показателя преломления и коэффициента поглощения подложки для первого шага метода последовательных приближений в решении обратной задачи. Эти начальные значения благодаря надежности разработанной процедуры минимизации функционала естественно теперь устанавливать по точке абсолютного минимума функционала в полном пространстве параметров отражающей системы. Это обеспечивает согласованность начальных значений с параметрами пленки, определяемыми в процессе нахождения абсолютного минимума функционала. В то же время это означает и полную согласованность с типами экспериментальных ошибок. Определение типов ошибок дополнено новыми условиями на значения параметров в точке абсолютного минимума функционала. Это позволило более точно классифицировать типы экспериментальных ошибок. В связи с этим появляется возможность определять степень выраженности математической некорректности обратной задачи в зависимости от величины и типа экспериментальных ошибок.

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

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Метод последовательных приближений, предложенный и развитый в работах [1–4] для решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для полупроводников со сверхтонкими окисными пленками, выдвигает определенные требования к выбору начальных значений $n_0^{(0)}$, $\kappa_0^{(0)}$ оптических постоянных подложки для каждого шага этого метода. При этом особое внимание должно быть уделено выбору начальных значений $n_0^{(0)}$, $\kappa_0^{(0)}$ для первого шага метода. Сформулированные в работе [3] правила выбора начальных значений для первого шага не всегда согласуются с характером экспериментальных ошибок. Кроме того, они не дают четкого представления о выраженности математической некорректности обратной задачи. Поэтому данные правила нуждаются в некотором уточнении. Но для начала воспроизведем их в первоначальном виде. Эти правила не требуют каких-либо предварительных данных, касающихся точных значений параметров n_0 и κ_0 . Для первого шага величина $n_0^{(0)}$, с одной стороны, не должна слишком отли-

чаться от точного значения параметра n_0 , а с другой — обеспечивать, причем при любом выборе величины $\kappa_0^{(0)}$, выполнение следующего условия для показателя преломления n пленки в точке абсолютного минимума функционала обратной задачи S_0 :

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

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

$$n_0^{(0)} < (n_0)_{\text{true}}, \quad (2)$$

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

Величину $n_0^{(0)}$ исходя из условия (1) 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 (1) при некотором значении величины n_0 , необходимо затем

увеличивать n_0 до некоторого предела, все еще обеспечивающего выполнение условия (1). Что касается начального значения $\kappa_0^{(0)}$ коэффициента поглощения κ_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 (1) и (2) величина d_{opt} , определенная при заданных параметрах $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ по схеме оптимального решения обратной задачи [1], уменьшается по сравнению с истинным значением толщины. Выбрав начальное значение $\kappa_0^{(0)}$ в соответствии с условием

$$\kappa_0^{(0)} > (\kappa_0)_{true}, \quad (3)$$

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

$$\kappa_0^{(0)} < (\kappa_0)_{true}. \quad (4)$$

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 κ_0

$$\kappa_0^{(0)} = 0. \quad (5)$$

Приведенные здесь правила выбора начальных значений $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ для первого шага метода последовательных приближений, очевидно, не указывают в явной форме на характер математической некорректности обратной задачи. Еще более существенным является то, что данные правила выбора не всегда согласуются с характером экспериментальных ошибок. Продемонстрируем это на примере четырех вариантов "экспериментальных" ошибок в поляризационных углах, рассмотренных в работах [1–3]. Эти варианты соответствуют принятой для численного эксперимента модели отражающей системы

$$\begin{aligned} d &= 2.50 \text{ нм}, \quad n = 1.50, \\ n_0 &= 3.865, \quad \kappa_0 = 0.023. \end{aligned} \quad (6)$$

При этом длина световой волны определяется значением $\lambda = 632.8 \text{ нм}$, а углы падения φ_0 светового пучка изменяются от 50 до 75 град с шагом 2.5°. В численном моделировании эксперимен-

тальных ошибок максимальные отклонения (в ту или другую сторону) поляризационных углов Ψ и Δ от их точных значений определяются величинами ξ_0 и η_0 . Для четырех указанных вариантов величины ξ_0 и η_0 принимают следующие значения:

$$\xi_0 = \eta_0 = 1', \quad (7)$$

$$\xi_0 = \eta_0 = 3', \quad (8)$$

$$\xi_0 = \eta_0 = 5', \quad (9)$$

$$\xi_0 = \eta_0 = 10'. \quad (10)$$

При заданных значениях величин ξ_0 и η_0 распределения случайных "экспериментальных" ошибок могут быть самыми разными, однако во всех предыдущих работах [1–4], как и в данной работе, для каждого варианта рассматривается одно и то же распределение случайных ошибок. Варианты (7–10) по своим характеристикам могут быть разделены на два типа. Для вариантов ошибок первого типа точка абсолютного минимума функционала S_0 по показателю преломления n пленки сдвигается от точного значения параметра n в сторону уменьшения. Можно сказать, что для этого типа ошибок величина n_{min} , соответствующая точке абсолютного минимума функционала S_0 , в общем случае стремится к единице (см. (1)). Для вариантов ошибок второго типа точка абсолютного минимума сдвигается по показателю преломления пленки в противоположном направлении. В этом случае величина n_{min} может значительно превосходить точное значение показателя преломления пленки

$$n_{min} \gg (n)_{true}. \quad (11)$$

В ситуации, когда известны точные значения оптических параметров подложки, к первому типу ошибок можно отнести варианты (7), (8) и (10), а ко второму — вариант (9) (см. [1]). Однако на самом деле, как будет видно ниже, разделение ошибок на указанные типы носит более сложный характер.

Совершенно очевидно, что правила выбора начальных значений $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ для первого шага метода последовательных приближений, сформулированные в работе [3], хорошо согласуются с вариантами экспериментальных ошибок первого типа. В то же время они не согласуются с вариантами ошибок второго типа. Однако это не означает, что при ошибках второго типа данные правила нельзя использовать. Их можно использовать и в этом случае, учитывая, что процесс решения обратной задачи становится несколько сложнее. Но для этого желательно знать заранее, к какому типу

относятся экспериментальные ошибки. Рассмотренные правила выбора начальных значений для первого шага метода такой возможности не предоставляют.

Начальные значения $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ для первого шага метода последовательных приближений, установленные по правилам, сформулированным в работе [3], очевидно, непосредственно не связаны с точкой абсолютного минимума функционала S_0 , определенной в пространстве всех четырех параметров однослойной отражающей системы

$$d, n, n_0, \kappa_0. \quad (12)$$

Здесь имеется в виду, что ни один из четырех параметров (12) не фиксируется в процессе нахождения точки абсолютного минимума функционала S_0 , которую теперь только в этом случае и будем называть точкой абсолютного минимума. Если же при нахождении минимума функционала S_0 фиксируется один или несколько параметров, то такой минимум, как это и принято, будем называть относительным. Что касается параметров d и n сверхтонкой поверхностной пленки, то их значения d_{\min} и n_{\min} , соответствующие начальным значениям $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$, естественно, также не связаны с указанной точкой абсолютного минимума.

В идеальном случае параметры (12) в точке абсолютного минимума функционала S_0 определяются их точными значениями. При наличии же экспериментальных ошибок параметры d и n сверхтонкой пленки в точке абсолютного минимума, которая в этом случае будет несколько сдвинута от ее идеального положения, претерпевают значительные искажения. При этом показатель преломления подложки n_0 , играющий основную роль из всех четырех параметров, изменяется относительно слабо в отличие от коэффициента поглощения подложки κ_0 , который может измениться значительно. Поэтому в качестве начального значения $n_0^{(0)}$ показателя преломления подложки целесообразно взять значение n_0 в точке абсолютного минимума. В этом случае выбор начального значения $\kappa_0^{(0)}$ по точке абсолютного минимума представляется совершенно естественным. Если зафиксировать параметры подложки по их выбранным таким образом начальным значениям

$$n_0 = n_0^{(0)}, \quad \kappa_0 = \kappa_0^{(0)}, \quad (13)$$

то точка соответствующего относительного минимума функционала S_0 определит те значения параметров d и n сверхтонкой пленки, которые отвечают точке абсолютного минимума. Иначе го-

воря, точки относительного и абсолютного минимумов в данном случае совпадут. На траектории, ведущей к точке относительного (абсолютного) минимума, параметры подложки имеют постоянные значения (13), а параметры пленки меняются, проходя через точку их оптимальных для первого шага метода последовательных приближений значений

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

Эти начальные оптимальные значения параметров пленки определяются с помощью правил отбора, установленных в работе [1]. Переход же к следующим шагам метода последовательных приближений происходит по схеме, предложенной в работе [4].

Таким образом, определение (для первого шага) начальных значений $n_0^{(0)}$ и $\kappa_0^{(0)}$ оптических параметров подложки по точке абсолютного минимума функционала S_0 обеспечивает полную согласованность этих начальных значений с реальными параметрами d_{\min} и n_{\min} , определяемыми в процессе нахождения абсолютного минимума функционала. Очевидно, это означает и полную согласованность с типами экспериментальных ошибок (см. (1) и (11)).

В связи с изложенными соображениями основная задача настоящей работы заключается в детальном анализе процесса минимизации функционала обратной задачи S_0 в полном пространстве четырех переменных (12). При этом одновременно изучается степень выраженности математической некорректности обратной задачи в зависимости от величины и типа экспериментальных ошибок.

ОБЩИЙ ПОДХОД К ПРОЦЕССУ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Процесс минимизации функционала обратной задачи в полном пространстве четырех параметров представляет собой довольно сложную процедуру. Обратная задача начинается с задания исходных (или начальных) значений для всех параметров, от которых и начинается движение в сторону точки абсолютного минимума функционала S_0 . Для случая сверхтонких пленок этот процесс сопровождается целым рядом особенностей, частично рассмотренных в работе [2]. Главная особенность 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 ре-

шения 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. Данная особенность имеет место и в идеальном случае, когда нет ошибок ни в эксперименте, ни в выборе модели. И связано это со сверхмалой толщиной пленки.

Однако проведенный в работе [2] анализ не является завершенным. В частности, как увидим ниже, вывод о независимости в случае вариантов ошибок (9) и (10) конечных значений параметров d , n_0 и κ_0 от выбора начальной точки для показателя n не носит общего характера. Кроме того, в работе [2] не ставилась задача по определению абсолютного минимума функционала S_0 . Но эта задача ввиду ее важности является главной для настоящей работы.

Трудности, возникающие при решении обратной задачи относительно полного набора параметров (12), заставляют пойти по более простому пути. Фиксируя либо показатель преломления n , либо толщину d пленки, мы сводим задачу к определению оставшихся трех параметров. Целесообразно фиксировать толщину d . Это не просто удобно, привязка к толщине пленки остальных параметров физически более понятна. В этом случае речь идет об определении относительного минимума функционала S_0 , соответствующего выбранному значению d . Рассматривая набор значений толщины d , мы определяем некоторое множество относительных минимумов функционала S_0 . Каждый относительный минимум характеризуется определенными значениями параметров

$$n, n_0, \kappa_0 \quad (15)$$

и значением $S_{0\min}$ самого функционала. Очевидно, как параметры (15), так и величина $S_{0\min}$ зависят от толщины d . Основным интересом представляется функция

$$S_{0\min} = f(d). \quad (16)$$

Наиболее глубокий минимум на кривой (16) является абсолютным минимумом функционала S_0 . Это легко понять, если учесть определение абсолютного минимума функционала S_0 в полном пространстве, образованном параметрами (12). Установленному таким путем абсолютному мини-

муму, очевидно, отвечают значения параметров (12), соответствующие наиболее глубокому минимуму на кривой (16).

Приведенная схема по определению абсолютного минимума функционала S_0 нуждается в дополнительном уточнении, связанном с выбором начального значения параметра n при нахождении каждого относительного минимума, т. е. при построении кривой (16). При решении обратной задачи для полного пространства параметров (12) результаты определяются выбором начального значения n и меняются при любом изменении этого начального значения [2]. Однако при фиксированном значении толщины d есть только два решения для соответствующего относительного минимума, связанные с выбором начального значения n . Одно из этих решений находится, в частности, при выборе начального значения, равного показателю преломления внешней среды

$$n = 1.00, \quad (17)$$

а второе — показателю преломления подложки

$$n = n_0. \quad (18)$$

Изменяя начальное значение n в пределах интервала

$$(1.00; n_0) \quad (19)$$

и даже выходя за пределы этого интервала, мы лишь переходим от одного решения для относительного минимума к другому. Для определенности будем использовать начальные значения (17) и (18) или близкие к ним. Таким образом, вместо одной функции (16) имеют место две функции

$$S_{0\min} = f_1(d), \quad S_{0\min} = f_2(d). \quad (20)$$

Функция $f_1(d)$ определяется при использовании начального значения (17), а функция $f_2(d)$ — начального значения (18). Определяя для этих функций точки локального минимума и выбирая из них ту, которой отвечает наименьшее значение величины $S_{0\min}$, мы тем самым находим точку абсолютного минимума функционала S_0 и отвечающие ей значения параметров (12). Возникает вопрос, какое значение для величины n_0 , которая сама подлежит определению, необходимо выбрать, чтобы установить начальное значение (18). Этот вопрос решается довольно просто. Необходимо принять для толщины нулевое значение $d = 0$, а в этом случае показатель преломления пленки n перестает играть какую-либо роль, и найти решение для параметров n_0 и κ_0 . Найденный таким образом параметр n_0 в отличие от ко-

эффицента поглощения κ_0 довольно слабо отличается от его точного значения. Это приближенное значение и можно использовать для условия (18).

Возникает еще вопрос о выборе начальных значений для параметров n_0 и κ_0 . Этот выбор не является принципиальным, но он может влиять на скорость численных расчетов, связанных с решением обратной задачи. По этой причине начальное значение для параметра n_0 целесообразно выбрать по результатам решения обратной задачи при условии $d = 0$. В соответствии с этими же результатами можно выбрать и начальное значение для параметра κ_0 . В зависимости от ситуации можно выбрать для него и нулевое значение

$$\kappa_0 = 0. \tag{21}$$

При решении обратной задачи толщина d фиксируется на значениях некоторой последовательности. В этом случае, переходя к каждому следующему значению d , можно устанавливать начальные значения для параметров n (пленки) и κ_0 по тем результатам для этих параметров, которые получены для предыдущего значения d . Понятно, что здесь подразумевается разделение процессов нахождения функций $f_1(d)$ и $f_2(d)$.

Процесс минимизации функционала S_0 должен сопровождаться очень высокой точностью решения обратной задачи. В работе [1] описана процедура многократного выброса комплекса точек Бокса [5] в пределах каждой элементарной сферы, сопровождающей движение вдоль траектории, ведущей к точке минимума. Данная процедура в конечном итоге обеспечивает высокую воспроизводимость результатов, получаемых при решении обратной задачи, что подтверждает целесообраз-

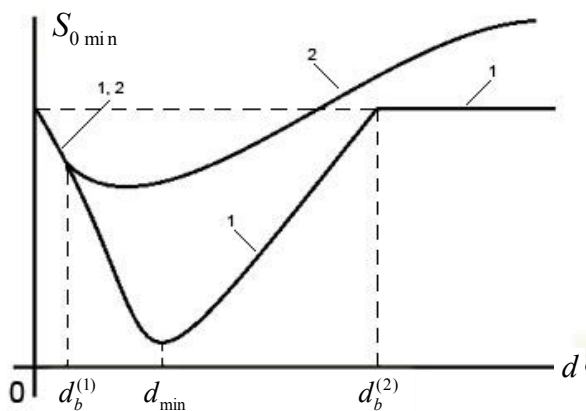


Рис. 1. Схематическое изображение функций $f_1(d)$ (кривая 1) и $f_2(d)$ (кривая 2) для случая вариантов (7) и (8) экспериментальных ошибок

ность ее использования. Количество выбросов комплекса точек Бокса в пределах каждой элементарной сферы может быть довольно большим, но это полностью оправдывается получаемыми результатами.

Рассмотрим теперь особенности процесса минимизации функционала S_0 как для идеального случая, когда отсутствуют экспериментальные ошибки и точно выбрана модель отражающего объекта, так и для различных вариантов экспериментальных ошибок.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ПРОЦЕССА МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА S_0 ДЛЯ ИДЕАЛЬНОГО СЛУЧАЯ И ВАРИАНТОВ (7) И (8) ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОШИБОК

Идеальный случай описывается точной моделью (6), т. е. решение для этого случая известно. Именно в этом и состоит основная ценность точной модели, позволяющей описать исходные зависимости $f_1(d)$ и $f_2(d)$ (см. (20)). Используя эти исходные зависимости, нетрудно описать влияние экспериментальных ошибок. Оптимизация реализуется по правилам, описанным в предыдущем разделе. На рис. 1 функции $f_1(d)$ и $f_2(d)$ представлены в координатной системе $(d, S_{0\min})$ соответственно кривыми 1 и 2. Выделим основные граничные точки $d_b^{(1)}$ и $d_b^{(2)}$ на оси d . На интервале толщин

$$(0, d_b^{(1)}) \tag{22}$$

кривые 1 и 2 совпадают. При толщинах, удовлетворяющих условию $d > d_b^{(1)}$, кривые разделяются, причем кривая 2 идет выше. При этом на кривой 1 проявляется характерная особенность: для толщин

$$d \geq d_b^{(2)} \tag{23}$$

данная кривая приобретает вид прямой, параллельной оси d . Любкой точке на этой прямой отвечают следующие значения параметров n , n_0 , κ_0 и функционала S_0 :

$$n = 1, n_0 = \text{const}, \kappa_0 = \text{const}, S_{0\min} = \text{const}, \tag{24}$$

означающие, что относительный минимум функционала S_0 , соответствующий функции $f_1(d)$, при толщинах, удовлетворяющих условию (23), реализуется на однородной подложке без пленки. Параметры этой подложки, очевидно, не зависят от толщины прозрачной пленки, совпадающей по показателю преломления с внешней средой, и для отражающего объекта (6) имеют значения

$$n_0 \approx 3.8535, \quad \kappa_0 = 0.2044. \quad (25)$$

Для определенности укажем также значения граничных по толщине точек

$$d_b^{(1)} \approx 2.00 \text{ нм}, \quad d_b^{(2)} \approx 23.00 \text{ нм}. \quad (26)$$

На каждой из кривых проявляется по одному локальному минимуму. Локальный минимум на кривой 1 гораздо глубже, величина $S_{0\min}$ в точке данного минимума, как и ожидалось, достигает нулевого значения

$$S_{0\min} = 0. \quad (27)$$

Это и есть точка абсолютного минимума функционала S_0 с параметрами, указанными в (6). Здесь важно отметить, что для идеального случая информация относительно абсолютного минимума функционала S_0 связана с кривой 1.

Перейдем теперь к вариантам экспериментальных ошибок (7) и (8), для которых величины ξ_0 и η_0 , определяющие максимальные отклонения (в ту или другую сторону) поляризационных углов от их точных значений, принимают значения 1 и 3 мин. На первый взгляд, эти варианты, особенно вариант (7), слабо отличаются от идеального случая и не заслуживают большого внимания. Как раз по этой причине мы и объединили рассмотрение идеального случая и вариантов ошибок (7) и (8). Однако, как следует из результатов работы [1], даже в ситуации с известными точными значениями оптических параметров n_0 и κ_0 подложки для данных вариантов ошибок наблюдается заметное отклонение параметров сверхтонкой пленки от их идеальных значений. Для варианта (7) это выражено гораздо слабее, но даже такой эффект необходимо учитывать. В настоящей же работе рассматривается гораздо более сложная ситуация, когда параметры пленки d и n на первом этапе определяются по точке абсолютного минимума функционала S_0 , т. е. в полном пространстве параметров (12). В этом случае можно ожидать усиления соответствующего эффекта для всех вариантов ошибок, в том числе и для самого слабого варианта (7). В то же время по некоторым признакам идеальный случай и варианты (7) и (8) очень похожи, этим оправдывается их рассмотрение в одном разделе.

Изучение влияния ошибок начнем с наиболее слабого варианта (7). Характер кривых 1 и 2 для варианта (7) остается прежним, т. е. их общее расположение по-прежнему описывается схематическим рис. 1. Точка абсолютного минимума функционала S_0 также определяется кривой 1. Меняются только по своей величине соответствующие

параметры. Значения граничных по толщине точек изменяются незначительно

$$d_b^{(1)} \approx 2.25 \text{ нм}, \quad d_b^{(2)} \approx 23.40 \text{ нм}. \quad (28)$$

Участку кривой 1, имеющему вид прямой, параллельной оси d , соответствует подложка без пленки. Параметры n_0 и κ_0 этой подложки имеют значения

$$n_0 \approx 3.8534, \quad \kappa_0 = 0.2042, \quad (29)$$

почти не отличающиеся от значений (25) аналогичных параметров в идеальном случае. Величина $S_{0\min}$ в точке абсолютного минимума, определяемого по кривой 1, уже отличается от нуля:

$$S_{0\min} = 2.655 \cdot 10^{-8}. \quad (30)$$

Что касается параметров пленки и подложки, то в точке абсолютного минимума функционала S_0 они определяются значениями

$$\begin{aligned} d_{\min} &\approx 9.70 \text{ нм}, \quad n_{\min} \approx 1.0838, \\ n_{0\min} &\approx 3.8603, \quad \kappa_{0\min} = 0.00. \end{aligned} \quad (31)$$

Как видно из (31), параметры сверхтонкой пленки в точке абсолютного минимума для случая варианта ошибок (7) очень сильно изменяются относительно их точных значений, причем толщина существенно увеличивается, а показатель преломления — уменьшается. При этом показатель преломления подложки изменяется очень мало, но зато коэффициент поглощения меняется существенно, достигая нулевого значения. Таким образом, вариант ошибок (7), несмотря на кажущуюся незначительность, по своему влиянию на параметры сверхтонкой пленки и коэффициент поглощения подложки является очень существенным. Такого же рода ошибки возникают при экспериментальных измерениях на приборе с точностью лимбов оптических элементов в 30", например, при измерениях на приборе ЛЭФ-3М-1. Но даже такие ошибки, как видим, при исследовании сверхтонких пленок превращают обратную задачу в математически некорректную. При этом степень выраженности математической некорректности значительна.

Вариант экспериментальных ошибок (8) полностью аналогичен варианту (7) и точно так же отображается на схематическом рис. 1. По этой причине мы не будем повторять предыдущий текст и ограничимся приведением значений основных величин, т. е. граничных по толщине точек и основных характеристик абсолютного минимума функционала S_0 :

$$d_b^{(1)} \approx 2.30 \text{ нм}, \quad d_b^{(2)} \approx 24.00 \text{ нм}; \quad (32)$$

$$S_{0\min} = 9.131 \cdot 10^{-8}; \quad (33)$$

$$\begin{aligned} d_{\min} &\approx 11.00 \text{ нм}, & n_{\min} &\approx 1.0730, \\ n_{0\min} &\approx 3.8603, & \kappa_{0\min} &= 0.00. \end{aligned} \quad (34)$$

Обратим также внимание на участок кривой 1, имеющий вид прямой, параллельной оси d . Ему соответствует подложка без пленки. Параметры этой подложки имеют значения

$$n_0 \approx 3.8540, \quad \kappa_0 = 0.2049. \quad (35)$$

Таким образом, варианты экспериментальных ошибок (7) и (8) по своему влиянию на параметры абсолютного минимума функционала S_0 не так уж сильно и различаются. Это связано со случайным характером ошибок. При других наборах случайных ошибок типа (7) и (8) разница во влиянии этих ошибок может быть и более существенной.

Мы определили типы экспериментальных ошибок, исходя из условий (1) и (11), выполняемых для параметра n пленки в точке абсолютного минимума. По этому признаку варианты ошибок (7) и (8) относятся к первому типу. В настоящей работе абсолютный минимум функционала S_0 рассматривается относительно полного набора параметров (12). Поэтому определение типов ошибок необходимо дополнить не только условием на толщину пленки. Исходя из полученных результатов, первый тип ошибок определим следующими условиями:

$$n_{\min} \rightarrow 1.00, \quad d_{\min} \gg (d_{\text{true}}), \quad \kappa_{0\min} \approx 0.00. \quad (36)$$

При уменьшении величины ошибок условия (36) будут ослабевать.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ПРОЦЕССА МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА S_0 ДЛЯ СЛУЧАЯ ВАРИАНТОВ (9) И (10) ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОШИБОК

Варианты экспериментальных ошибок (9) и (10) намного сильнее вариантов (7) и (8). Это следует уже из результатов работы [1]. В общем случае, когда абсолютный минимум функционала S_0 рассматривается относительно полного набора параметров (12), роль этих ошибок еще более возрастает. Рассмотрим варианты (9) и (10) по той же схеме, что и варианты (7) и (8).

Рассмотрим вариант ошибок (9). Общее расположение кривых 1 и 2, представляющих функции $f_1(d)$ и $f_2(d)$, для этого варианта описывается схематическим рис. 2, а. В отличие от вариантов (7) и (8) в данном случае смысл граничных то-

чек $d_b^{(1)}$ и $d_b^{(2)}$ на оси d , а также номер кривой, ответственной за абсолютный минимум функционала S_0 , меняются. Кривая 1 приобретает вид прямой, параллельной оси d , на интервале толщин

$$(0, d_b^{(1)}). \quad (37)$$

Относительный минимум функционала S_0 , соответствующий функции $f_1(d)$, при толщинах, удовлетворяющих условию (37), реализуется на однородной подложке без пленки. Параметры этой подложки для любой точки из интервала (37) имеют одинаковые значения:

$$n_0 \approx 3.8527, \quad \kappa_0 = 0.2028. \quad (38)$$

Кривые 1 и 2 пересекаются в точке, которой соот-

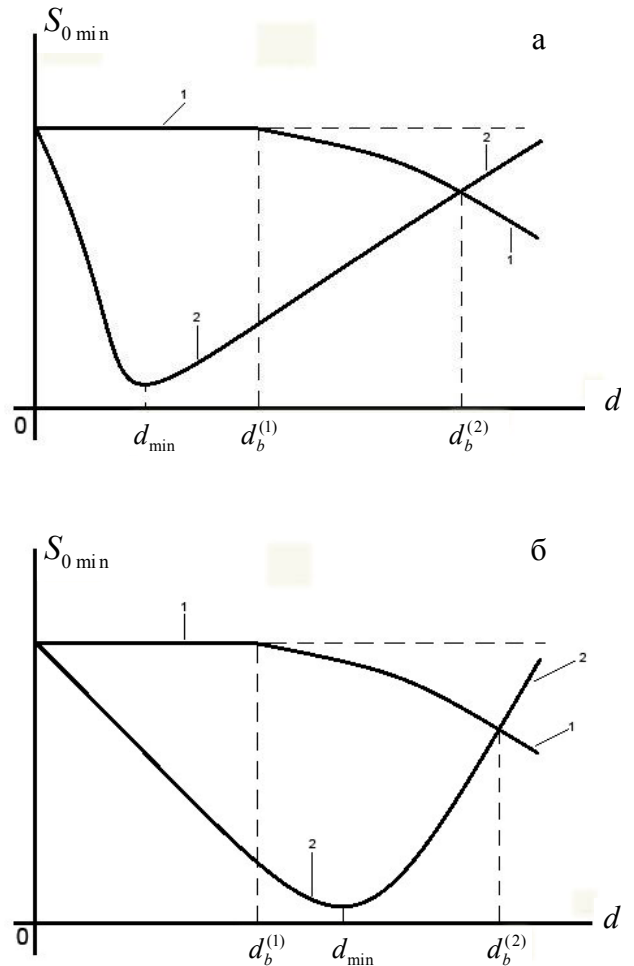


Рис. 2. Схематическое изображение функций $f_1(d)$ (кривая 1) и $f_2(d)$ (кривая 2) для случая вариантов (9) и (10) экспериментальных ошибок. а — вариант (9), б — вариант (10)

ветствует значение толщины $d = d_b^{(2)}$.

Для варианта (9) локальный минимум проявляется не на обеих кривых, а только на кривой 2. Величина $S_{0\min}$ в точке данного минимума достигает значения

$$S_{0\min} = 5.162 \cdot 10^{-7}. \quad (39)$$

Это и есть точка абсолютного минимума функционала S_0 с параметрами

$$\begin{aligned} d_{\min} &\approx 2.00 \text{ нм}, & n_{\min} &\approx 4.9302, \\ n_{0\min} &\approx 3.8994, & \kappa_{0\min} &\approx 0.3884. \end{aligned} \quad (40)$$

Здесь важно отметить, что для варианта (9) информация относительно абсолютного минимума функционала S_0 связана не с кривой 1, как это имеет место для идеального случая и вариантов (7) и (8), а с кривой 2. Для определения положения точки $d = d_{\min}$ относительно граничных точек $d_b^{(1)}$ и $d_b^{(2)}$, необходимо также указать значения последних:

$$d_b^{(1)} \approx 23.00 \text{ нм}, \quad d_b^{(2)} \approx 25.00 \text{ нм}. \quad (41)$$

Как видим, точка $d = d_{\min}$ располагается далеко слева от граничных точек.

Вариант экспериментальных ошибок (10) аналогичен варианту (9). Разница только в том, что точка $d = d_{\min}$ для этого варианта располагается между граничными точками $d_b^{(1)}$ и $d_b^{(2)}$ (см. рис. 2, б), имеющими значения

$$d_b^{(1)} \approx 25.20 \text{ нм}, \quad d_b^{(2)} \approx 33.00 \text{ нм}. \quad (42)$$

Горизонтальному участку кривой 1 отвечает подложка без пленки с параметрами

$$n_0 \approx 3.8546, \quad \kappa_0 = 0.2049. \quad (43)$$

Как и для варианта (9), абсолютный минимум функционала S_0 для варианта (10) определяется локальным минимумом на кривой 2. Приведем основные характеристики этого абсолютного минимума:

$$S_{0\min} = 2.721 \cdot 10^{-6}, \quad (44)$$

$$\begin{aligned} d_{\min} &\approx 30.00 \text{ нм}, & n_{\min} &\approx 4.0698, \\ n_{0\min} &\approx 4.3842, & \kappa_{0\min} &= 0.00. \end{aligned} \quad (45)$$

Проведем краткий сравнительный анализ влияния вариантов ошибок (9) и (10). По признаку (11) эти варианты ошибок относятся ко второму типу,

т. е. вариант (10) меняет свой тип при определении абсолютного минимума функционала S_0 относительно полного набора параметров (12). Но варианты (9) и (10) сильно (принципиально) различаются по параметрам d_{\min} , $\kappa_{0\min}$ и в какой-то степени по параметру $n_{0\min}$. В соответствии с этим второй тип ошибок целесообразно разделить на два подтипа. Первый подтип, к которому относится вариант (9), определим условиями

$$\begin{aligned} n_{\min} &\gg (n)_{\text{true}}, & d_{\min} &< (d)_{\text{true}}, \\ \kappa_{0\min} &\gg (\kappa_0)_{\text{true}}, & n_{0\min} &\approx (n_0)_{\text{true}}. \end{aligned} \quad (46)$$

Ко второму подтипу относится вариант (10), он определяется условиями

$$\begin{aligned} n_{\min} &\gg (n)_{\text{true}}, & d_{\min} &\gg (d)_{\text{true}}, \\ \kappa_{0\min} &\approx 0.00, & n_{0\min} &> (n_0)_{\text{true}}. \end{aligned} \quad (47)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренная в настоящей работе процедура минимизации функционала обратной задачи в пространстве всех параметров отражающей системы (полупроводниковая подложка—прозрачная сверхтонкая пленка) позволяет решить несколько задач. Прежде всего физически обоснованными становятся правила выбора начальных значений показателя преломления и коэффициента поглощения подложки для первого шага метода последовательных приближений в решении обратной задачи. Эти начальные значения благодаря надежности разработанной процедуры минимизации функционала естественно теперь устанавливать по точке абсолютного минимума функционала в полном пространстве параметров отражающей системы. Это обеспечивает согласованность начальных значений с реальными параметрами d_{\min} и n_{\min} , определяемыми в процессе нахождения абсолютного минимума функционала. В то же время это означает и полную согласованность с типами экспериментальных ошибок. Определение типов ошибок в данной работе дополнено новыми условиями на значения параметров в точке абсолютного минимума функционала. Это позволило более точно классифицировать типы экспериментальных ошибок. В связи с этим появляется возможность определять степень выраженности математической некорректности обратной задачи в зависимости от величины и типа экспериментальных ошибок.

Полученные здесь результаты будут использованы в следующей работе при обработке экспериментальных данных.

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.
4. Семененко А.И., Семененко И.А. // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 3. С. 42–51.
5. Fox M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. V. 8, N 1. P. 42–52.

2. 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 19.10.2011.

**SOLID BODY AND LIQUID SUPERFICIAL STRUCTURE STUDY
BY ELLIPSOMETRY CONSIDERING MATHEMATICAL
INVERSE PROBLEM INCORRECTNESS.
PART 4. SPECIAL FEATURES OF THE PROCESS OF MINIMIZATION
OF THE FUNCTIONAL OF REVERSE TASK FOR SEMICONDUCTORS
WITH TRANSPARENT ULTRA THIN FILMS**

A. I. Semenenko¹, I. A. Semenenko²

¹*Sumy, Ukraine*

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

Minimization functional procedure of the reverse task in the space of all parameters of the reflecting system (the semi-conductor substrate-transparent ultra-thin film) was developed. This allows to solve a number of problems. Rules of choice of initial significances of refractive index and quotient of absorption of the substrate for the first step of a method of consecutive approaching in the decision of an inverse problem become physically substantiated. Now due to the reliability of the developed procedure these initial values are naturally set on the point of the absolute minimum of the functional in complete space of parameters of the reflecting system. This ensures coordination of the initial values with the parameters of the film defined in the course of finding of an absolute minimum of the functional. At the same time it also means a complete coordination with the types of experimental errors. Definition of types of errors was added by new conditions on parameters value in the point of an absolute minimum functional. This allowed more precise classification of experimental errors. In this connection there is a possibility to define a degree of manifestation of mathematical incorrectness of reverse task depending on the size and type of experimental errors.

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