

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. 6. ОБ УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ. МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА БОКСА

Работа посвящена анализу устойчивости решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии, полученного на основе предложенного ранее метода последовательных приближений. Показано, что одной из главных причин появления неустойчивости решения является использование в вычислительном процессе традиционной схемы применения метода Бокса. При этом определены основные признаки, указывающие на неустойчивость решения обратной задачи. В целях повышения точности вычислительного процесса и обеспечения устойчивости решения обратной задачи существенно модифицирован комплексный метод Бокса.

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

### ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе [1] предложен новый подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для однослойной системы, основанный на правилах отбора оптимального решения. Использование данных правил позволяет с высокой точностью найти решение обратной задачи относительно толщины и показателя преломления пленки при известных значениях оптических постоянных подложки. В последующих работах для решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии в ее общей постановке, предполагающей определение всех параметров однослойной системы, предложен метод последовательных приближений. Основу этого метода также составляют правила отбора оптимального решения для параметров сверхтонкой пленки или нарушенного слоя при фиксированных, на каждом этапе решения, оптических параметрах подложки. Окончательный вариант метода последовательных приближений подробно описан в работе [2]. При этом особое внимание уделено установлению признака, по которому определяется оптимальное значение коэффициента поглощения подложки.

Правила отбора оптимального решения в общих чертах описаны в работе [1]. Для использования этих правил очень важно, чтобы был реализован процесс пошаговой минимизации функционала  $S_0$  обратной задачи, обеспечивающий движе-

ние к точке абсолютного минимума данного функционала вдоль траектории наиболее крутого спуска. Правила отбора используют некоторый набор параметров-критериев, из которых хорошо работающими оказались 5 параметров

$$C[i], \quad i = 1, \dots, 5. \quad (1)$$

Выбор параметра существенного значения не имеет, можно использовать любой из этих параметров. Параметр-критерий  $C[i]$  последовательно определяется на траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ . При этом речь идет о траектории в пространстве, образованном параметрами пленки. Очевидно, это предполагает фиксирование оптических параметров подложки. В идеальной ситуации, когда отсутствуют экспериментальные ошибки, а известные параметры отражающей системы заданы точно, точка абсолютного минимума функционала  $S_0$  определяет точное решение обратной задачи. И в этой конечной точке указанной выше траектории параметр  $C[i]$  имеет выраженный по глубине минимум. Положение меняется, когда появляются экспериментальные ошибки, а также неточно заданы считающиеся известными параметры отражающей системы. В реальной ситуации указанная выше траектория движения к точке абсолютного минимума несколько сдвигается в сторону от своего идеального положения, как сдвигается и сама точ-

ка абсолютного минимума. Причем в случае сверхтонкой пленки точка абсолютного минимума может сдвигаться в сторону совершенно неправдоподобных значений параметров пленки. Измененная траектория, отвечающая реальной ситуации, не может резко (скачком) изменить свои свойства по сравнению с исходной траекторией (траекторией идеального случая). Единственная выраженная (по глубине) точка минимума параметра  $C[i]$  на исходной траектории, совпадающая с идеальной точкой абсолютного минимума функционала  $S_0$  и определяющая точное решение обратной задачи, обязательно имеет свой образ на реальной (измененной) траектории. Естественно предположить, что этот образ представляет оптимальное решение обратной задачи. В точке оптимального решения параметр-критерий  $C[i]$  также имеет минимум, причем этот минимум по-прежнему заметно выражен по глубине. Второй выраженный по глубине минимум на реальной траектории, как можно вполне обоснованно предположить, приходится на точку абсолютного минимума функционала  $S_0$  в конце этой траектории. Таким образом, на реальной траектории есть только два выраженных по глубине минимума параметра  $C[i]$ .

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

Параметр-критерий  $C[i]$  определяется на каждом конечном шаге траектории. В принципе, чем меньше используемый шаг траектории, тем точнее должен определяться параметр  $C[i]$ . Однако данный параметр представляет собой отношение малых величин. По этой причине при уменьшении шага траектории ошибки в определении параметра  $C[i]$  могут не уменьшиться, а даже увеличиться. В результате может возникнуть неустойчивость оптимального решения обратной задачи. Но такая неустойчивость связана не только с выбором шага на траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ . Она связана также и с точностью вычислительного алгоритма, положенного в основу обратной задачи. Во всех работах,

посвященных решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии, в качестве вычислительного алгоритма мы используем комплексный метод Бокса [3]. Это очень хороший метод, но в целях обеспечения необходимой устойчивости решения обратной задачи он нуждается в некоторой модификации, повышающей точность вычислительного процесса.

В связи с изложенными соображениями основная задача настоящей работы сводится к следующему.

1. Установление основных признаков, указывающих на неустойчивость решения обратной задачи.

2. Модификация комплексного метода Бокса [3] в целях повышения точности вычислительного процесса. Обеспечение устойчивости решения обратной задачи.

В следующем разделе мы дадим краткое описание процесса пошаговой минимизации функционала обратной задачи, включая основные положения комплексного метода Бокса. Будет показано, что одной из главных причин появления неустойчивости решения обратной задачи является использование традиционной схемы применения метода Бокса. Кроме того, будут определены основные признаки, указывающие на неустойчивость решения обратной задачи.

### ПРОЦЕСС ПОШАГОВОЙ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСНОГО МЕТОДА БОКСА. ОСНОВНЫЕ ПРИЗНАКИ НЕУСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Обратную задачу эллипсометрии решаем на основе многоугловых измерений, рассматривая в качестве функционала  $S_0$  среднеквадратичную невязку следующего вида:

$$S_0 = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \left[ (\Delta_i[i] - \Delta_e[i])^2 + (\Psi_i[i] - \Psi_e[i])^2 \right]. \quad (2)$$

Суммирование в выражении (2) производится по набору углов падения  $\varphi_0$  светового пучка, т. е. величины  $\Delta_i[i]$ ,  $\Psi_i[i]$  и  $\Delta_e[i]$ ,  $\Psi_e[i]$  из данного выражения — это соответственно теоретические и экспериментальные значения поляризационных углов, отвечающие  $i$ -му углу падения. Набор углов падения должен удовлетворять определенным требованиям. Данному набору должно соответствовать тщательное экспериментальное описание тех участков кривых  $\Psi(\varphi_0)$  и  $\Delta(\varphi_0)$ , которым соответствуют достаточно широкий интервал вокруг

острия для угла  $\Psi$  и вся размытая ступенька для угла  $\Delta$ . Это условие связано с тем, что указанные участки наиболее чувствительны к изменению параметров поверхностных структур. Во всех предыдущих работах для решения обратной задачи используется комплексный метод Бокса [3]. Для удобства изложения основных принципов данного метода введем некоторые новые величины.

В настоящей работе рассматривается однослойная отражающая система типа "подложка—прозрачная пленка", причем имеется в виду прежде всего свертонкая пленка. Полный набор параметров такого объекта определяется 4 величинами:

$$d, n \text{ и } n_0, \kappa_0, \quad (3)$$

где  $d$  и  $n$  — это толщина и показатель преломления пленки;  $n_0$  и  $\kappa_0$  — показатель преломления и коэффициент поглощения подложки.

Для параметров из набора (3) введем соответствующие им условные единицы:

$$Q_0[1], H_0[1] \text{ и } H_0[0], K_0[0]. \quad (4)$$

Используя эти условные единицы, перейдем от величин (3) к относительным параметрам отражающей системы. В дальнейшем нам понадобится 4-мерный вектор, компоненты которого определяются этими относительными параметрами. Введя для данного вектора обозначение  $x$ , запишем его компоненты:

$$\begin{aligned} x[1] &= d/Q_0[1], & x[2] &= n_0/H_0[0], \\ x[3] &= n/H_0[1], & x[4] &= \kappa_0/K_0[0]. \end{aligned} \quad (5)$$

От компонент вектора  $x$  легко перейти к параметрам (3) отражающей системы. Поэтому можно говорить, что вектор  $x$  определяет поляризационные углы  $\Delta_i[i]$ ,  $\Psi_i[i]$ , а значит, и функционал  $S_0$  обратной задачи (см. (2)).

В математической программе, разработанной нами на основе метода Бокса, не предусмотрено специальное сужение основной области ограничений для неизвестных параметров. Эта область выбирается таким образом, чтобы учесть любые возможности в поведении неизвестных параметров, которые могут возникнуть в процессе решения математически некорректной обратной задачи. Метод Бокса должен обеспечивать процесс пошаговой минимизации вдоль траектории наиболее крутого спуска к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ . При этом важным является установление начальной точки такой траектории. Выбор начальной точки в пределах основной области ограничений определяется особенностями метода последовательных приближений, предназначенного для нахождения оптимального решения обрат-

ной задачи [2]. Не вдаваясь в подробности, отметим только, что движение вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума, осуществляется при заданных значениях оптических параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  подложки, или, как можно еще сказать, при заданных значениях компонент  $x[2]$  и  $x[4]$  любого вектора  $x$ , используемого в процедуре Бокса.

Процесс пошаговой минимизации вдоль траектории наиболее крутого спуска к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$  происходит следующим образом. Первый шаг на указанной траектории реализуется в пределах сферы сравнительно небольшого радиуса с центром в начальной точке траектории. Найденная в пределах начальной сферы точка промежуточного минимума затем становится центром новой сферы и т. д. В пределах каждой сферы используется метод Бокса, причем точки комплекса Бокса задаются случайным образом. Дадим краткое описание комплексного метода Бокса применительно к рассматриваемой обратной задаче эллипсометрии.

Метод Бокса будем рассматривать в 4-мерном пространстве, образованном относительными параметрами отражающей системы, т. е. в пространстве с координатными осями

$$x[1], x[2], x[3], x[4]. \quad (6)$$

Любая точка в этом пространстве определяется концом вектора с компонентами (6) (см. (5)). Как следует из сделанного выше замечания относительно поведения оптических параметров  $n_0$  и  $\kappa_0$  подложки и соответствующих им компонент  $x[2]$  и  $x[4]$ , траектория, ведущая к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ , лежит в плоскости, параллельной координатной плоскости  $(x[1], x[3])$ . Очевидно, в той же плоскости в пределах текущей сферы, точнее, в пределах соответствующего круга, задаются и точки комплекса Бокса. Точки данного комплекса определим массивом значений

$$x_0[j, k], \quad (7)$$

где первый индекс  $j$  нумерует точку комплекса, пробегая значения от 1 до максимального значения  $m_0$ , определяющего полное число точек комплекса Бокса

$$j = 1, 2, \dots, m_0, \quad (8)$$

а индекс  $k$ , принимая значения

$$k = 1, 2, 3, 4, \quad (9)$$

нумерует координату  $j$ -й точки или компоненту соответствующего вектора  $x_0[j]$ . Полный массив

значений (7) обозначим как  $x_0$ .

Множество точек  $x_0[j]$ , как и соответствующих векторов  $x_0[j]$ , перенумеруем таким образом, чтобы отвечающие им значения функционала  $S_0$  образовали возрастающую последовательность

$$S_0[1] < S_0[2] < \dots < S_0[m_0]. \quad (10)$$

Для этого в программе предусмотрена специальная процедура. Для удобства изложения кратко опишем используемые в программе еще одну процедуру

$$centre0(x_c, x_0, k) \quad (11)$$

и функцию

$$omega(x_0, k). \quad (12)$$

Процедура (11) определяет центр тяжести  $x_c$  некоторого множества точек Бокса из их полного набора  $x_0$ . А функция (12) определяет максимальное расстояние между точками этого множества и их центром тяжести  $x_c$ . Характер данного множества связан с целым числом  $k$ . При  $k=0$  в (11) и (12) в качестве такого множества рассматривается полный набор  $x_0$ , а при

$$0 < k \leq (m_0 - 2) \quad (13)$$

из полного набора  $x_0$  исключаются  $k$  точек с наибольшими значениями функционала  $S_0$ , т. е. точки

$$x_0[m_0], x_0[m_0 - 1], \dots, x_0[m_0 - (k - 1)]. \quad (14)$$

В соответствие с этим уточняется обозначение центра тяжести, определяемого процедурой (11), и вводится величина, определяемая функцией (12),

$$x_c(k), \quad z(k) = omega(x_0, k). \quad (15)$$

В дальнейшем величину  $z(k)$  будем использовать для характеристики разброса точек указанного множества, для которого введем обозначение

$$M(k), \quad k = 0, 1, \dots, (m_0 - 2). \quad (16)$$

Рассмотрим теперь процесс минимизации функционала  $S_0$  в пределах текущей сферы (круга), используя принятый подход к методу Бокса. Из полного набора  $x_0$  выделим точку  $x_0[m_0]$  с наибольшим значением функционала  $S_0$  и определим, используя процедуру

$$centre0(x_c, x_0, 1), \quad (17)$$

центр тяжести  $x_c(1)$  оставшегося множества  $M(1)$

точек Бокса. Затем найдем вектор

$$w_0 = x_c(1) - x_0[m_0], \quad (18)$$

определяющий своим модулем расстояние между точками  $x_c(1)$  и  $x_0[m_0]$ . Вектор  $w_0$  задает также направление движения от точки  $x_0[m_0]$  к центру тяжести  $x_c(1)$ , т. е. в сторону точек с меньшими значениями функционала  $S_0$ . Условимся считать это направление положительным. Задача состоит в том, чтобы на прямой линии, проходящей через точки  $x_c(1)$  и  $x_0[m_0]$  найти точку  $v$ , которой соответствует значение функционала, удовлетворяющее условию

$$S_0(v) < S_0[m_0 - 1]. \quad (19)$$

В общем случае ее надо искать как с одной, так и с другой стороны от центра тяжести. Точнее, ее надо искать как в положительном, так и в отрицательном направлении от центра тяжести. Для поиска точки  $v$ , лежащей на положительном направлении от центра тяжести и обеспечивающей выполнение условия (19), рассмотрим вектор  $v$  следующего вида:

$$v = x_c(1) + w, \quad w = a_1 w_0. \quad (20)$$

Вектору  $v$  соответствует точка  $v$ , лежащая с положительной стороны от центра тяжести на расстоянии  $|w|$  от этого центра

$$|w| = a_1 |w_0|. \quad (21)$$

Точка  $v$  не должна выходить как за пределы текущей сферы (круга), так и за пределы основной области ограничений в пространстве относительных параметров. С этой целью с помощью определенной процедуры делается проверка. Если наблюдается отмеченный выход точки  $v$ , то величина  $a_1$ , для которой обычно принимается начальное значение

$$a_1 = 2.00, \quad (22)$$

последовательно уменьшается, пока точка не займет нормальное положение, оставаясь вблизи соответствующей границы. Значение величины  $a_1$ , при котором достигается нормальное положение точки  $v$ , фиксируется. Затем на том же направлении, начиная от точки (20), последовательно рассматриваются точки  $v$ , приближающиеся к центру тяжести  $x_c(1)$ . Отвечающие им векторы определяются выражением

$$v = x_c(1) + w_0 a_1 / r^m, \quad m = 0, 1, \dots, P_s, \quad (23)$$

где для величин  $r$  и  $P_s$  обычно принимаются значения

$$r = 1.5; \quad P_s = 10. \quad (24)$$

Для каждой точки  $v$ , приближающейся (с увеличением, начиная от 0, числа  $m$ ) к центру тяжести, находится значение функционала  $S_0(v)$ . Проверка точек заканчивается на той точке  $v$ , которой отвечает функционал  $S_0(v)$ , первый раз удовлетворяющий условию (19). Если проверка точек на положительном направлении от центра тяжести  $x_c(1)$  не заканчивается выполнением условия (19), то проверяются точки в отрицательном направлении. Этим точкам отвечают векторы

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_c(1) - \mathbf{w}_0 a_2 / r^m, \quad m = 0, 1, \dots, P_s, \quad (25)$$

где для величины  $a_2$  принимается значение

$$a_2 = 0.8, \quad (26)$$

а параметры  $r$  и  $P_s$ , по-прежнему определяются значениями (24).

Значение (26) для величины  $a_2$  обусловлено тем, что точка  $v$  на отрицательном направлении от центра тяжести не должна слишком приближаться к точке  $x_0[m_0]$ , а тем более переходить за эту точку. По этой причине здесь не возникает проблемы выхода точки  $v$  за пределы определенных границ. Процесс передвижения и проверки точки  $v$  на предмет выполнения условия (19) на отрицательном направлении точно такой же, как и в предыдущем случае.

Описанная процедура позволяет найти точку  $v$ , которой соответствует значение функционала  $S_0(v)$ , удовлетворяющее условию (19). Эта точка внедряется в массив точек Бокса, из которого исключается первоначальная точка с наибольшим значением функционала. Преобразованный таким образом полный комплекс точек Бокса подвергается дополнительному упорядочению (см. (10)). Данная процедура повторяется многократно, причем каждый раз она применяется к преобразованному на предыдущем шаге множеству  $M(0)$ . Основным результатом здесь является последовательное сужение комплекса  $M(0)$  и передвижение его центра тяжести  $x_c(0)$  в сторону точки минимума функционала  $S_0$ . Сужение комплекса характеризуется уменьшением величины  $z(0)$ . Многократное повторение основной процедуры Бокса прекращается, когда величина  $z(0)$  первый раз удовлетворит условию

$$z(0) < \omega_0, \quad (27)$$

где  $\omega_0$  — некоторая малая величина, определяемая требуемой точностью решения задачи.

Что касается точки промежуточного минимума  $x_{\min}$  функционала  $S_0$ , достигаемой в пределах текущей сферы (круга), то она определяется по точке  $x_0[1]$  конечного комплекса  $M(0)$ , которой соответствует наименьшее значение  $S_0[1]$  функционала. В векторной форме это условие запишется:

$$\mathbf{x}_{\min} = \mathbf{x}_0[1]. \quad (28)$$

Нас интересует метод Бокса применительно к математически некорректной обратной задаче эллипсоидометрии. Определим основные параметры метода. Прежде всего зададим условные единицы, позволяющие перейти к относительным параметрам однослойной отражающей системы:

$$\begin{aligned} Q_0[1] &= 50.00 \text{ нм}, & H_0[1] &= 0.30, \\ H_0[0] &= 0.30, & K_0[0] &= 0.30. \end{aligned} \quad (29)$$

Исходя из (29), для радиуса каждой элементарной сферы примем значение

$$R_0 = 1.00 \cdot 10^{-3}. \quad (30)$$

В этом случае на шаге, равном радиусу сферы (круга), приращения толщины и показателя преломления поверхностной пленки отражающего объекта составят

$$\delta d = 0.05 \text{ нм}, \quad \delta n = 0.0003, \quad (31)$$

что вполне соответствует понятию элементарной сферы. Для величины  $m_0$ , определяющей число точек в комплексе Бокса, с учетом того, что каждый раз находятся два параметра, достаточно задать значение

$$m_0 = 15. \quad (32)$$

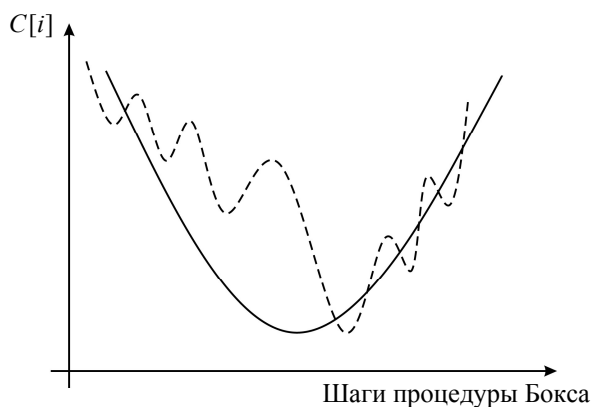
При значениях  $m_0$ , превышающих (32), резко уменьшается скорость вычислительного процесса, и задача становится громоздкой.

К числу основных параметров относятся и величины  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $r$  и  $P_s$ . Они определены выше выражениями (22), (24) и (26). Большую роль играет параметр  $\omega_0$  (см. (27)), останавливающий поиск промежуточной точки минимума в пределах текущей элементарной сферы. Для него можно было бы задать значение

$$\omega_0 = 10^{-4} \cdot R_0. \quad (33)$$

Учитывая (29) и (30), можно легко увидеть, что на разбросе точек конечного комплекса Бокса, определяемом величиной (33), параметры поверхностной пленки испытывают исключительно малые

изменения. Казалось бы, это является гарантией устойчивости решения математически некорректной обратной задачи. В то же время анализ показывает, что это не совсем так. Параметры критерии  $C[i]$  находятся для каждого шага, связанного с перемещением точки промежуточного минимума в пределах соответствующей элементарной сферы. При этом можно считать, что они соответствуют центру сферы. Данные параметры определяются в процессе движения вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала. В процессе такого движения они испытывают довольно существенные колебания, причем наблюдается некоторое множество точек локального минимума, между которыми, очевидно, располагаются точки локального максимума. В этих условиях основную роль играют наиболее глубокие точки локального минимума параметров критериев. По точке наиболее глубокого локального минимума устанавливаются оптимальные значения параметров пленки, соответствующие рассматриваемым оптическим параметрам подложки. Однако, повторяя процесс движения вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ , можно увидеть, что колебания параметра-критерия  $C[i]$  испытывают заметные изменения. Это относится и к положению локальных минимумов данного параметра, в том числе и к положению наиболее глубокого локального минимума. В конечном итоге это приводит к неустойчивости решения обратной задачи. Причем такую неустойчивость нельзя устранить, уменьшая параметр  $\omega_0$  (см. (33)). Признаком неустойчивости является не только заметное смещение точек локальных минимумов. Основным призна-



Схематическое изображение зависимости параметра-критерия  $C[i]$  от положения точки на траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала обратной задачи

ком неустойчивости решения обратной задачи является наличие множества локальных минимумов и изменение их числа при повторении процесса решения. Типичная картина, характерная для ситуации с неустойчивым решением, изображена на рисунке пунктирной кривой. На этом рисунке на горизонтальной оси указывается путь  $s$  вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ .

### МОДИФИКАЦИЯ КОМПЛЕКСНОГО МЕТОДА БОКСА. ОБЕСПЕЧЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Как уже отмечено, неустойчивость решения обратной задачи нельзя устранить только уменьшением разброса точек в конечном комплексе Бокса в пределах каждой элементарной сферы. Причина такой неустойчивости кроется в самой сути основной процедуры Бокса. Модуль вектора  $w_0$ , определяющий расстояние между точками  $x_c(1)$  и  $x_0[m_0]$ , из-за случайного характера точек комплекса Бокса может принимать самые разные значения. Среди этих значений могут быть и очень малые по сравнению с величиной разброса  $z(1)$  точек множества  $M(1)$ . Умножая вектор  $w_0$  на число  $a_1$  и определяя затем точку  $v$  на положительном направлении от центра тяжести  $x_c(1)$  выражением (20), мы не только можем создать ситуацию, когда точка  $v$  выходит за пределы определенных границ. Появляется также и возможность того, что точка  $v$  слишком близко располагается к центру  $x_c(1)$ . Использование выражения (23) не меняет положения, т. к. в этом случае испытываются точки  $v$ , еще ближе расположенные к центру  $x_c(1)$ . Все это обусловлено тем, что число  $a_1$  в принятой схеме метода Бокса может принимать только одно значение, например значение (22). В этих условиях, ориентируясь на модуль вектора  $w_0$ , мы не можем изменить положение. В связи с этим модифицируем метод Бокса.

По-прежнему из полного набора  $x_0$  выделяем точку  $x_0[m_0]$  с наибольшим значением функционала  $S_0$ . Но дальше ориентируемся не только на множество  $M(1)$ . Рассмотрим одно из множеств:

$$M(p), \quad p = 1, \dots, (m_0 - 2). \quad (34)$$

Используя процедуру (11) и функцию (12), определим центр тяжести  $x_c(p)$  и разброс  $z(p)$  точек этого множества:

$$\text{centre0}(x_c, x_0, p), \quad z(p) = \text{omega}(x_0, p). \quad (35)$$

Затем, обобщая формулу (18), найдем вектор

$$\mathbf{w}_0 = \mathbf{x}_c(p) - \mathbf{x}_0[m_0]. \quad (36)$$

Для нас сейчас важно только то, что данный вектор задает положительное направление движения от точки  $x_0[m_0]$  к центру тяжести  $x_c(p)$ . При этом существенно, что с увеличением числа  $p$  значение  $S_{0c}(p)$  функционала на центре тяжести  $x_c(p)$  точек множества  $M(p)$  проявляет тенденцию к уменьшению. Вдоль положительного направления введем единичный вектор

$$\mathbf{e}_0 = \mathbf{w}_0 / |\mathbf{w}_0| \quad (37)$$

и по аналогии с формулой (20) определим вектор  $\mathbf{v}$ :

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_c(p) + \mathbf{w}. \quad (38)$$

В формуле (38) вектор  $\mathbf{w}$  определяется уже не через вектор  $\mathbf{w}_0$  (см. (20)), определяющий своим модулем расстояние между точками  $x_0[m_0]$  и  $x_c(p)$ , а через величину разброса  $z(p)$  (относительно центра  $x_c(p)$ ) точек множества  $M(p)$

$$\mathbf{w} = a_1 z(p) \mathbf{e}_0. \quad (39)$$

Представление вектора  $\mathbf{w}$  формулой (39) является совершенно естественным и вполне обоснованным. В этом случае число  $a_1$  определяется главным условием

$$a_1 > 1. \quad (40)$$

Что касается конкретного значения числа  $a_1$ , то его по-прежнему можно определять соотношением (22).

Выбрав какое-то одно число  $p$  из набора (34) и определив вектор  $\mathbf{w}$  формулой (39), можно сохранить обычную схему реализации метода Бокса. В этом случае на положительном (от центра  $x_c(p)$ ) направлении, начиная от точки, заданной формулами (38) и (39), последовательно рассматриваются точки  $v$ , определяемые векторами

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_c(p) + \mathbf{e}_0 a_1 z(p) / r^m, \quad m = 0, 1, \dots, P_s. \quad (41)$$

На отрицательном же направлении формула для векторов  $\mathbf{v}$  сохраняет свою структуру

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_c(p) - \mathbf{w}_0 a_2 / r^m, \quad m = 0, 1, \dots, P_s, \quad (42)$$

где  $\mathbf{w}_0$  дается формулой (36), а число  $a_2$  имеет значение (26). Затем выполняется обычная схема метода Бокса, подробно описанная в предыдущем

разделе. На новой основе эта схема может быть реализована и при  $p=1$ . Однако при переходе к значениям  $p>1$  сходимость комплекса Бокса к предельной точке улучшается. В этом случае для отбора точки  $v$ , лежащей на прямой линии, проходящей через точки  $x_c(p)$  и  $x_0[m_0]$ , можно использовать более сильное, нежели (19), условие

$$S_0(v) < S_0[L_s], \quad L_s < m_0 - 1. \quad (43)$$

В частности, для величины  $L_s$  можно принять значение

$$L_s = m_0 - 5. \quad (44)$$

Но мы не знаем, при каком значении числа  $p$  из набора (34) будет выполнено условие (44). В связи с этим необходимо обобщить схему реализации метода Бокса. Первоначально на каждом шаге метода соответствующая процедура выполняется при  $p=1$ . Если при этом условие (44) при отборе точки  $v$  не достигается, то последовательно используются другие значения числа  $p$  из набора (34). Процесс прекращается, когда первый раз выполнится условие (44).

Описанное обобщение метода Бокса заметно улучшает сходимость комплекса точек Бокса к предельной точке. При этом под улучшением сходимости понимается не только ускорение процесса сужения комплекса точек, но также и повышение точности в определении положения самой предельной точки. Достижение нужного сужения множества точек не всегда приводит к необходимой точности в определении предельной точки. Точность определения предельной точки является главным признаком, характеризующим достоинства метода. В связи с этим предлагается следующая дополнительная процедура.

Пусть в пределах текущей элементарной сферы случайным образом задается комплекс  $x_0$ , играющий роль своего рода некоторой матрицы. К этому комплексу пока не применяется метод Бокса. Затем в пределах той же сферы многократно выбрасывается комплекс  $x_1$ , и каждый такой комплекс с помощью обобщенной процедуры Бокса приводится к предельной точке  $x_m$ . При поиске данной предельной точки многократное повторение процедуры Бокса прекращается, когда величина  $z(0)$ , характеризующая сужение комплекса  $x_1$ , первый раз удовлетворит условию (27). Важно отметить, что величина  $\omega_0$  из этого условия может принимать очень малые значения, что обусловлено преимуществами обобщенной процедуры Бокса. Для наших целей необходимо задать предельно малое значение для величины  $\omega_0$ :

$$\omega_0 = 1.00 \cdot 10^{-10}. \quad (45)$$

Для достижения условия (27) с таким значением  $\omega_0$  величины  $r$  и  $P_s$  из выражений (41) и (42) должны иметь значения

$$r = 1.40, \quad P_s = 16. \quad (46)$$

Если значение  $S_{0m}$  функционала, соответствующее предельной точке  $x_m$ , удовлетворяет условию

$$S_{0m} < S_0[m_0 - 1], \quad (47)$$

то точка  $x_m$  внедряется в комплекс  $x_0$  с последующим дополнительным упорядочением его точек. Величина  $S_0[m_0 - 1]$  из условия (47) — это значение функционала в точке  $x_0[m_0 - 1]$  комплекса  $x_0$  или первоначального, или же преобразованного предыдущей процедурой такого рода. Выбрасывание комплекса  $x_1$  и соответствующее преобразование комплекса  $x_0$  прекращается тогда, когда сужение комплекса  $x_0$  первый раз достигает той же величины, что и сужение каждого комплекса  $x_1$  при нахождении его предельной точки (см. (27) и (45)). Введем параметр  $J$ , дающий полное число выбросов вспомогательного комплекса  $x_1$ . Минимальное значение этого параметра определяется величиной  $m_0$

$$J = m_0. \quad (48)$$

В этом случае все точки  $x_m$  расположены около точной предельной точки рассматриваемой сферы на очень близком расстоянии от нее. Это вытекает из того, что сужение множества этих точек имеет очень малую величину, очевидно, такую же, как и для точек преобразованного множества  $x_0$ . В общем же случае параметр  $J$  превосходит величину  $m_0$

$$J > m_0. \quad (49)$$

Это указывает на то, что точка  $x_m$  может заметно отклониться от точной предельной точки. Но и в этой ситуации преобразованное множество  $x_0$  определяется только теми точками  $x_m$ , для которых выполняется условие (47) и которые обеспечивают принятый разброс для множества  $x_0$ .

После такого преобразования применим к комплексу  $x_0$  обобщенную процедуру Бокса. Это необходимо сделать, несмотря на достигнутое очень малое сужение точек данного комплекса. Поставим задачу еще больше уменьшить разброс точек комплекса  $x_0$ . Желательный разброс  $z(0)$

определим условием

$$z(0) < 1.00 \cdot 10^{-12}. \quad (50)$$

Казалось бы, это очень сильное условие, но именно оно обеспечивает устойчивость решения математически некорректной обратной задачи эллипсоидометрии. Для достижения условия (50) для величин  $r$  и  $P_s$  из выражений (41) и (42) необходимо принять следующие значения:

$$r = 1.20, \quad P_s = 28. \quad (51)$$

В итоге, мы приходим к устойчивому решению обратной задачи. Эта устойчивость проявляется не только в том, что при многократном повторении (с помощью обобщенного метода Бокса) процесса решения обратной задачи практически не меняются значения параметра-критерия  $C[i]$  вдоль траектории, ведущей к точке абсолютного минимума функционала  $S_0$ . Устойчивость проявляется прежде всего в том, что меняется характер зависимости параметра-критерия от положения точки на указанной траектории. Исчезает множество локальных минимумов на соответствующей кривой, остается только один глубокий минимум, определяющий оптимальное решение. На рисунке такая ситуация изображена сплошной кривой.

## 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. 2012. Т. 22, № 1. С. 44–51.
3. Box M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. V. 8. P. 42–51.

г. Сумы, Украина (Семененко А.И.)

*Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова (Семененко И.А.)*

Контакты: Семененко Альберт Иванович,  
sem199@mail.ru

Материал поступил в редакцию 20.04.2012.



**SOLID BODY AND LIQUID SUPERFICIAL STRUCTURE STUDY  
BY ELLIPSOMETRY CONSIDERING MATHEMATICAL  
INVERSE PROBLEM INCORRECTNESS.  
PART 6. ON STABILITY OF THE INVERSE PROBLEM SOLUTION.  
BOX METHOD MODIFICATION**

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

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

<sup>2</sup>*I.M. Sechenov First Moscow State Medical University*

The work is devoted to the analysis of the stability of mathematically incorrect ellipsometry inverse problem, obtained on the basis of the earlier suggested method of successive approximations. It was shown, that one of the main causes of instability of the solution is the use of the traditional Box scheme in the computing process. The basic signs specifying instability of the solution of the inverse problem were determined. To increase the accuracy of computing process and maintenance of stability of the solution of the inverse problem Box complex method was significantly modified.

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