

УДК 535.5.511:531.7

© А. В. Ковальчук, А. А. Митина, Е. А. Полушкин, Э. И. Гальперин,
Т. Г. Дюжева, И. А. Семенов, А. И. Семенов, С. Ю. Шаповал

О ВОЗМОЖНОСТЯХ И ОСОБЕННОСТЯХ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКОСТЕЙ

В работе рассмотрена процедура решения обратной задачи эллипсометрии относительно всех параметров поверхностной структуры и объема жидкостей. Из-за слабого оптического контраста между поверхностью и объемом жидкости обратная задача математически некорректна. Для ее решения введена пробная функция. Получено наиболее общее выражение для этой функции. По особенностям пробной функции, которые проявляются вдоль траектории движения функционала обратной задачи к точке абсолютного (наиболее глубокого) минимума, находится оптимальное решение обратной задачи. Особое внимание уделено выбору начальной точки на траектории движения функционала, обеспечивающему устойчивость траектории. Общие закономерности в поведении пробной функции установлены на примере идеальной ситуации, а также в численном эксперименте, имитирующем реальную ситуацию. Показано, что оптимальное решение, полученное с использованием пробной функции, отличается высокой точностью.

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

ВВЕДЕНИЕ

Исследование поверхности жидкостей представляет большой практический интерес для целого ряда научных областей. Наиболее естественным для этих целей является использование метода эллипсометрии. Например, в медицине весьма перспективными являются исследования методом эллипсометрии жидкой фазы плазмы крови, не связанные с использованием какой-либо твердой подложки. Жидкая плазма, как и любая жидкость, обладает поверхностной структурой в виде некоторого поверхностного слоя. Толщина и оптические параметры этого слоя, как и оптические свойства объема, зависят от выраженности заболевания. Метод эллипсометрии, обладающий сверхчувствительностью к изменению состояния поверхности, реагирует на это заметным изменением измеряемых поляризационных углов Ψ и Δ . Это хорошо продемонстрировано в работе [1], посвященной выявлению реальных возможностей спектральной эллипсометрии для исследования жидкой фазы плазмы крови в целях диагностики хронического панкреатита. В этой работе сделан важный вывод, касающийся разброса углов Δ и Ψ по образцам плазмы. Показано, что наблюдающийся при заданной длине волны λ заметный разброс поляризационных углов по образцам объясняется прежде всего наличием поверхностного

слоя и изменением его параметров при переходе от образца к образцу. Это нетрудно понять, если учесть, что при отсутствии поверхностного слоя разброс углов Δ и Ψ совершенно не проявляется при некотором изменении показателя преломления однородного объема плазмы и весьма слабо обусловлен изменением коэффициента поглощения однородной плазмы. Данный вывод не вызывает сомнений еще и потому, что измерения проводились на угле падения $\varphi_0 = 70^\circ$, далеко отстоящем от угла Брюстера. Параметры (толщина и оптические константы) поверхностного слоя на плазме крови неодинаковы для разных больных. Это позволяет при соответствующем анализе дифференцировать больных по степени выраженности заболевания.

Метод эллипсометрии может быть успешно использован и при решении ряда задач гидрофизики. Это связано с тем, что плотность морской воды, являющаяся фундаментальным параметром уравнения состояния морской воды, может быть определена через показатель преломления света в воде. А для достаточно точного определения показателя преломления необходимо учитывать состояние поверхности воды, непосредственно связанное с толщиной и оптическими свойствами поверхностного слоя.

Таким образом, при исследовании методом эллипсометрии жидкостей независимо от характера

задачи характеристики поверхностного слоя подлежат обязательному определению. Особо отметим, что речь идет прежде всего о естественной структуре поверхности жидкостей, связанной с их общими свойствами и изменяющейся при добавках различных веществ. При этом имеется в виду, что добавленные вещества распределяются по всему объему жидкости.

Во многих случаях обратная задача эллипсометрии является математически некорректной. Математическая некорректность проявляется в том, что даже относительно слабые экспериментальные ошибки заметно искажают истинные значения параметров, характеризующих поверхностную структуру. Очень часто эти искажения приобретают абсурдный характер. Однако надо иметь в виду, что такое проявление математической некорректности непосредственно связано с использованием классического подхода к решению обратной задачи. В этом случае в качестве решения выбираются параметры, определяющие точку абсолютного (наиболее глубокого) минимума функционала обратной задачи. При наличии экспериментальных ошибок причины, приводящие к математической некорректности, могут быть самыми разными. Если для естественных окислов на поверхности твердых тел выраженная некорректность обратной задачи обусловлена их сверхмалой (порядка нескольких нанометров) толщиной, то для жидкостей толщина поверхностного слоя не играет особой роли, и основной причиной заметного проявления некорректности является слабое отличие оптических параметров таких слоев от их объемных значений, т. е. слабый оптический контраст между поверхностью и объемом. Слабый оптический контраст между поверхностью и объемом очень часто имеет место и тогда, когда добавленное в жидкость вещество практически полностью сосредотачивается на поверхности, образуя пленку с оптическими свойствами этого вещества. Очевидно, этот случай не требует отдельного рассмотрения.

Необходимо отметить, что математическая некорректность обратной задачи эллипсометрии обусловлена не только экспериментальными ошибками в определении поляризационных углов, но также и неточным выбором модели отражающей системы и ошибками в задании тех параметров, которые считаются известными.

Основной целью данной работы является разработка метода решения математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для жидкостей. При этом будут использованы общие соображения, на основании которых в работе [2] решена математически некорректная обратная задача для случая прозрачных сверхтонких пленок на полупроводниковых подложках. В связи с этим

будут сделаны существенные уточнения, касающиеся случая сверхтонких пленок.

ОБЩИЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ МАТЕМАТИЧЕСКИ НЕКОРРЕКТНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ ЖИДКОСТЕЙ

Обратную задачу по-прежнему будем решать, рассматривая в качестве функционала (иначе, целевой функции) S_0 среднеквадратичную невязку следующего вида

$$S_0 = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N [(\Delta_t[i] - \Delta_e[i])^2 + (\Psi_t[i] - \Psi_e[i])^2]. \quad (1)$$

Суммирование в выражении (1) производится по набору измерительных ситуаций. Если N измерительных ситуаций определяются углами падения φ_0 светового пучка на образец, то величины $\Delta_t[i]$, $\Psi_t[i]$ и $\Delta_e[i]$, $\Psi_e[i]$ из данного выражения — это соответственно теоретические и экспериментальные значения поляризационных углов, отвечающие i -му углу падения $\varphi_0[i]$. Это — случай многоугловых измерений. Но измерительные ситуации можно определять и длинами волн светового пучка при заданном угле падения. Это — случай спектральных измерений, к которым целесообразно прибегать, если в достаточно широком спектральном интервале отсутствует или наблюдается достаточно слабая дисперсия оптических постоянных.

Как и в предыдущих работах, для решения обратной задачи используем комплексный метод Бокса [3], основанный на статистическом подходе. В работе [4] данный метод в целях повышения точности вычислительного процесса и обеспечения устойчивости решения обратной задачи существенно модифицирован. Этот метод должен обеспечивать процесс пошаговой минимизации вдоль траектории спуска к точке абсолютного минимума функционала S_0 . Траектория спуска начинается в некоторой начальной точке, которая в принципе может располагаться на любом расстоянии от точки, образованной точными значениями неизвестных параметров. В то же время выбор начальной точки должен подчиняться определенным правилам (см. ниже). В математической программе, разработанной на основе метода Бокса, поиск минимума на первом этапе осуществляется в пределах сферы сравнительно небольшого радиуса с центром в начальной точке. Найденная точка промежуточного минимума затем становится центром новой сферы и т. д. В пределах каждой сферы используется метод Бокса, причем точки комплекса Бокса задаются случайным образом.

Мы будем рассматривать прозрачные жидкости. Достаточно протяженный поверхностный слой жидкости неоднороден, и, очевидно, эта неоднородность проявляется относительно показателя преломления. Однако в силу слабого оптического контраста с однородным объемом неоднородность поверхности проявляется слабо, т. е. характеризуется слабым градиентом. Это означает, что структуру поверхности жидкости можно моделировать однородным слоем. В этом случае математическая некорректность обратной задачи для жидкости проявляется прежде всего относительно толщины и показателя преломления поверхностного слоя. Что касается объема жидкости, т. е. подложки для поверхностного слоя, то для реальных исследуемых объектов показатель преломления подложки не может быть задан точно. Это обусловлено двумя причинами. Во-первых, неоднородный слой непрерывно переходит в объем, и его нижняя часть в эксперименте воспринимается как часть подложки. Данный фактор является причиной того, что подложка характеризуется уже некоторым эффективным значением показателя преломления, отличающимся от объемного значения. Кроме того, особый интерес представляют жидкости с растворенными в ней веществами, а в этом случае показатель преломления подложки (объема) может быть указан лишь приближенно. Математическая некорректность обратной задачи значительно усиливается из-за неточного задания оптических параметров подложки. Это наблюдается даже тогда, когда неточность в задании показателя преломления подложки проявляется в четвертом или даже пятом знаке после запятой. Поэтому речь может идти только об одновременном определении всех параметров однослойной системы: как поверхностной пленки, так и подложки.

В работе [2] предложен новый подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для случая прозрачной сверхтонкой пленки на полупроводниковой подложке, основанный на правилах отбора оптимального решения. При этом в данной работе функционал S_0 построен на наборе углов падения светового луча на образец. Для использования правил отбора очень важно, чтобы был реализован процесс пошаговой минимизации функционала S_0 обратной задачи, обеспечивающий движение к точке абсолютного минимума данного функционала. Правила отбора используют некоторый параметр-критерий C , который последовательно определяется на траектории движения функционала, ведущей к точке его абсолютного минимума. При этом речь идет о траектории в пространстве, образованном параметрами пленки. Очевидно, это предполагает фиксирование оптических параметров подложки. В идеальном случае, когда отсутствуют

экспериментальные ошибки, а параметры подложки заданы точно, точка абсолютного минимума функционала S_0 определяет точное решение обратной задачи. И в этой конечной точке указанной выше траектории параметр-критерий C имеет выраженный по глубине минимум. Можно также сказать, что в идеальном случае точка минимума параметра C определяет точное решение обратной задачи. Положение меняется, когда появляются экспериментальные ошибки, а также неточно заданы параметры подложки. В реальной ситуации траектория движения к точке абсолютного минимума несколько сдвигается в сторону от своего идеального положения, как сдвигается, причем, заметно, и сама точка абсолютного минимума. Точка минимума параметра C , совпадающая на исходной траектории (траектории идеального случая) с точкой абсолютного минимума функционала S_0 и определяющая точное решение обратной задачи, при переходе к реальному случаю не может резко изменить свои свойства. Естественно предположить, что и на реальной траектории, не совпадая с конечной точкой этой траектории, она представляет оптимальное решение обратной задачи, наиболее близкое к точному решению. Можно сказать, что в точке минимума параметра-критерия C (в точке оптимального решения) реальная траектория наиболее близко подходит к конечной точке идеальной траектории.

Отмеченные выше общие свойства параметр-критерия сохраняются и при решении математически некорректной обратной задачи для жидкостей. Однако параметр-критерий C , использованный в работе [2] для определения параметров сверхтонкой пленки на полупроводниках, практически не работает при исследовании жидкостей. Чтобы понять причину, проведем более конкретное, нежели это сделано в работе [2], рассмотрение способа построения параметр-критерия C . Для этого введем вектор \mathbf{P} с компонентами

$$P[i], \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

где N — число измерительных ситуаций, определяющих (см. (1)) функционал S_0 обратной задачи. В качестве измерительных ситуаций используется набор углов падения $\{\varphi_0[i]\}$.

Компоненты $P[i]$ зависят от параметров пленки (толщины d и показателя преломления n) и угла падения $\varphi_0[i]$

$$P[i] = P_i(d, n; \varphi_0[i]). \quad (3)$$

Точнее, в работе [2] они определяются показателем экспоненты из основного уравнения эллипсометрии.

Перемещение вдоль траектории спуска к точке абсолютного минимума функционала идет пошагово. Каждый шаг реализуется в пределах соответствующей элементарной сферы. Начинается он в центре сферы, а оканчивается в точке минимума функционала S_0 . Найдем разницу компонент (3), отвечающих начальной и конечной точкам шага перемещения:

$$\delta P[i] = P_i(d_m, n_m; \varphi_0[i]) - P_i(d_b, n_b; \varphi_0[i]). \quad (4)$$

В выражении (4) индексы b и m указывают на то, что соответствующие величины отвечают началу и концу шага. Начальным и конечным значениям параметров (d, n) при угле падения $\varphi_0[i]$ отвечают поляризационные углы

$$\Psi_b[i], \Delta_b[i] \text{ и } \Psi_m[i], \Delta_m[i]. \quad (5)$$

Определим через величины (5) для угла падения $\varphi_0[i]$ длину шага перемещения (i -го перемещения) в координатной плоскости (Ψ, Δ) :

$$\delta L[i] = \sqrt{(\delta \Psi[i])^2 + (\delta \Delta[i])^2}, \quad (6)$$

$$\delta \Psi[i] = \Psi_m[i] - \Psi_b[i], \quad \delta \Delta[i] = \Delta_m[i] - \Delta_b[i]. \quad (7)$$

Теперь можно найти, используя (4) и (6), (7), производную от компоненты $P[i]$ по длине i -го перемещения в плоскости (Ψ, Δ) :

$$\text{Pr}[i] = \frac{\delta P[i]}{\delta L[i]}. \quad (8)$$

Наконец, определив среднеквадратичный разброс производных $\text{Pr}[i]$ относительно их среднего значения, находим параметр-критерий C :

$$C = \langle \text{Pr} \rangle_{\text{sqr}}. \quad (9)$$

Траектория движения функционала S_0 к точке абсолютного минимума (при фиксированных оптических параметрах подложки) определяется основным уравнением, причем не только экспонентой из этого уравнения, зависящей от параметров пленки, но и показателем преломления пленки, фигурирующим вне экспоненты. Роль этого показателя зависит от выраженности оптического контраста между пленкой и подложкой. Для сверхтонкой пленки на полупроводниках его роль незначительна, и траектория определяется в первую очередь экспонентой. По этой причине параметр-критерий C дает хорошие результаты при исследовании сверхтонких пленок. Для жидкостей он практически не работает из-за слабого оптического

контраста между поверхностным слоем и подложкой (объемом). В этом случае показатель преломления поверхностного слоя, находящийся вне экспоненты, из-за его близости к показателю подложки играет существенную роль. Изменяясь весьма незначительно вдоль траектории, он оказывает большое влияние на эту траекторию. В пределе, когда показатели преломления поверхностного слоя и подложки сравниваются, траектория сворачивается в точку. В данном процессе роль самой экспоненты незначительна, а в пределе она сводится к нулю.

Для жидкостей необходим параметр-критерий общего типа, не связанный с использованием явных зависимостей от параметров (d, n) поверхностного слоя. Для таких объектов параметр-критерий назовем пробной функцией F и дадим общую характеристику этой функции. Рассмотрим некоторый вектор \mathbf{K} с компонентами

$$K[i], \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (10)$$

Компоненты $K[i]$ зависят от поляризационных углов $\Psi[i], \Delta[i]$ и их экспериментальных значений $\Psi_e[i], \Delta_e[i]$, отвечающих i -й измерительной ситуации:

$$K[i] = K_i(\Psi[i], \Delta[i]; \Psi_e[i], \Delta_e[i]; \varphi_0[i]). \quad (11)$$

В выражении (11) измерительная ситуация представлена углом падения $\varphi_0[i]$, но она может быть представлена и длиной волны $\lambda[i]$. Для дальнейшего понадобятся компоненты (11), отвечающие начальной (b) и конечной (m) точкам текущего шага перемещения по траектории

$$\begin{cases} K_b[i] = K_i(\Psi_b[i], \Delta_b[i]; \Psi_{e,b}[i], \Delta_{e,b}[i]; \varphi_0[i]), \\ K_m[i] = K_i(\Psi_m[i], \Delta_m[i]; \Psi_{e,m}[i], \Delta_{e,m}[i]; \varphi_0[i]). \end{cases} \quad (12)$$

Пробную функцию F определим наиболее общим выражением

$$F = \frac{\langle K_m \rangle_{\text{sqr}} - \langle K_b \rangle_{\text{sqr}}}{\langle K_m \rangle - \langle K_b \rangle}, \quad (13)$$

где $\langle K_b \rangle_{\text{sqr}}$ и $\langle K_m \rangle_{\text{sqr}}$ — среднеквадратичные отклонения компонент $K_b[i]$ и $K_m[i]$ от их средних значений $\langle K_b \rangle$ и $\langle K_m \rangle$.

Компоненты вектора \mathbf{K} можно выбрать, используя разные способы. Но основное значение при этом имеет выражение (13) для пробной функции.

О ВЫБОРЕ НАЧАЛЬНОЙ ТОЧКИ НА ТРАЕКТОРИИ ДВИЖЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ К АБСОЛЮТНОМУ МИНИМУМУ

Траектория движения функционала S_0 ввиду ее важности для определения оптимального решения должна отличаться устойчивостью. Уточним это понятие применительно к траектории. Положение траектории на плоскости (d, n) в общем случае зависит от выбора начальной точки v_0 . Устойчивость должна проявляться относительно способа выбора начальной точки. Если выбирается новая точка, то исходная и новая траектории должны содержать общую часть. И эта общая часть должна совпадать или с исходной, или же с новой траекторией. Иначе говоря, любая начальная точка должна выбираться таким способом, при котором соответствующая траектория располагается на однозначно фиксированной в плоскости (d, n) кривой. Траектория может сокращаться, может удлиняться, но она не должна сходить с этой кривой. Это означает также, что все начальные точки должны располагаться на этой кривой. Только в этом случае можно говорить об устойчивой траектории.

Понятие устойчивой траектории имеет простой геометрический смысл. Введем функцию

$$S_0 = S_0(d, n), \quad (14)$$

определяющую зависимость функционала S_0 от параметров поверхностной пленки при фиксированных оптических параметрах подложки. Геометрически это — некоторая поверхность. Начальную точку v_0 определим, выбрав для толщины d некоторое значение

$$d = d_0. \quad (15)$$

Что касается показателя преломления n для начальной точки, то этот параметр находим, решая при условии (15) обратную задачу относительно одного параметра. Найденная начальная точка лежит в плоскости (d, n) , а на поверхности (14) ей отвечает значение S_0 . Совокупность начальных точек, найденных таким способом, определяет некоторую кривую (L_0) в плоскости (d, n) . Понятно, что на поверхности (14) ей отвечает кривая (L) , проходящая по наиболее глубокой части поверхности. Иначе говоря, кривая (L) проходит по дну оврага, образованного поверхностью (14). Совершенно очевидно, что при таком способе выбора начальной точки любая траектория движения к точке абсолютного минимума функционала S_0

совпадает в плоскости (d, n) с кривой (L_0) (с кривой (L) на поверхности (14)). А это и означает устойчивость данной траектории.

Движение вдоль траектории идет пошагово. Поэтому о точном совпадении траектории с кривой (L_0) можно говорить лишь приближенно. Уменьшая шаг, мы увеличиваем степень совпадения, как увеличиваем и точность определения пробной функции F на траектории. Однако данная функция представляет собой отношение малых величин, по этой причине уменьшение шага траектории целесообразно лишь до определенного предела.

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЖИДКОСТЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОБНОЙ ФУНКЦИИ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ИДЕАЛЬНОЙ СИТУАЦИИ

Пробная функция F изменяется вдоль траектории движения функционала S_0 , ведущей к точке абсолютного минимума функционала. При этом рассматривается совокупность таких траекторий для набора значений показателя преломления подложки (объема жидкости). Любому значению показателя преломления из этого набора соответствует своя траектория. По точкам минимума пробной функции, проявляющимся на таких траекториях, находится совокупность решений обратной задачи. Естественно, только одно из этих решений является оптимальным. И необходимо сформулировать правила, по которым из совокупности решений отбирается оптимальное решение.

В идеальной ситуации оптические параметры подложки известны точно, поэтому рассматривается только одна устойчивая траектория. С приближением вдоль этой траектории к точке абсолютного минимума, определяющей в данном случае точное решение обратной задачи, среднеквадратичные отклонения $\langle K_b \rangle_{\text{sq}}$ и $\langle K_m \rangle_{\text{sq}}$ сближаются между собой с большей скоростью, чем средние значения $\langle K_b \rangle$ и $\langle K_m \rangle$ (см. формулу (13) для пробной функции). Это обеспечивает минимальное значение пробной функции F в точке абсолютного минимума. В реальной ситуации, когда проявляются экспериментальные ошибки и неизвестны с достаточной точностью оптические параметры подложки (объема жидкости), пробную функцию можно использовать для нахождения оптимального решения обратной задачи. Это решение включает в себя как толщину и показатель преломления поверхностного слоя, так и показатель преломления объема жидкости.

Чтобы сформулировать правила отбора оптимального решения из некоторой совокупности решений, определяемых поведением пробной функции на наборе траекторий, рассмотрим следующий идеальный случай. Все параметры поверхностного слоя (d, n) и объема жидкости (n_0, κ_0) (κ_0 — коэффициент поглощения жидкости) известны точно и определяются значениями

$$\begin{aligned} d &= 25.0 \text{ нм}, & n &= 1.34; \\ n_0 &= 1.33, & \kappa_0 &= 0.0. \end{aligned} \quad (16)$$

Показатели преломления n и n_0 различаются лишь на величину 0.01, т. е. имеет место слабый оптический контраст между поверхностью и подложкой. Длина световой волны определяется значением $\lambda = 632.8$ нм, а углы падения φ_0 светового пучка изменяются от 45° до 47° с шагом 0.5° и от 47° до 51° с шагом 0.4° . Этот набор углов падения (всего 15 углов) используется для определения функционала S_0 обратной задачи. Поляризационные углы Ψ и Δ рассчитаны для указанных параметров, причем ошибки в этих углах не моделируются.

В данном идеальном случае, исходя из точных значений поляризационных углов, а также из указанных значений длины световой волны и углов падения, необходимо найти все параметры жидкости. Они должны совпасть со значениями (16). Их можно найти очень просто, решая обратную задачу относительно двух параметров поверхностного слоя при фиксированном значении показателя преломления n_0 подложки из некоторого набора этих значений. Решение, совпадающее с (16), легко находится по наиболее выраженному (в прин-

ципе нулевому) минимуму функционала S_0 на наборе значений параметра n_0 . Иначе говоря, точное решение определяется (на множестве предельных точек) той предельной точкой, в которой функционал S_0 имеет наименьшее значение. Однако нас интересует не это самое простое решение, а формулировка правил отбора оптимального решения с использованием пробной функции F . Для этой цели как раз лучше всего и подходит рассматриваемая идеальная ситуация. Тем более что в реальной ситуации выбор оптимального решения по минимальному значению величины S_0 в общем случае оказывается невозможным.

Процедура выбора оптимального решения обратной задачи продемонстрирована на рис. 1. На этом рисунке в координатной плоскости (d, n) изображена сплошная кривая $f^{(0)}$, образованная точками абсолютного минимума, иначе, предельными точками функционала S_0

$$(D_{\text{abs}}, N_{\text{abs}}), \quad (17)$$

где D_{abs} и N_{abs} — это толщина и показатель преломления поверхностного слоя в предельной точке функционала, соответствующей определенному значению показателя преломления n_0 подложки. К каждой из этих точек подходят две траектории движения функционала, изображенные на рисунке пунктирными кривыми. Причем одна из этих траекторий подходит к предельной точке слева, а другая — справа, т. е. для их начальных точек выполняются соответственно условия

$$d_0 < D_{\text{abs}}, \quad d_0 > D_{\text{abs}}. \quad (18)$$

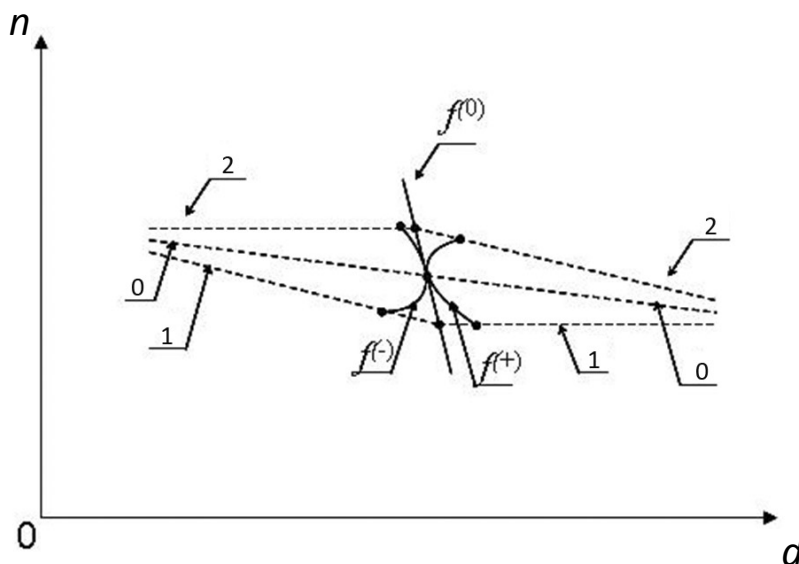


Рис. 1. Иллюстрация процедуры решения обратной задачи для идеальной ситуации с использованием пробной функции F

Для простоты на рисунке слева и справа от предельных точек изображены по три траектории, пронумерованные цифрами 0, 1 и 2. Центральным траекториям 0 отвечает точное значение показателя преломления n_0 подложки. Крайним же траекториям 1 и 2 отвечают соответственно меньшее и большее (по сравнению с точным значением) значения параметра n_0 .

В идеальной ситуации пробная функция имеет минимум в общей предельной точке центральных траекторий. Обобщая, можно сказать, что в идеальной ситуации пробная функция F имеет минимум в одной из предельных точек, которая и определяет точное решение. Что касается крайних траекторий и отвечающих им предельных точек, то здесь ситуация другая. На любой крайней траектории пробная функция F имеет минимум. При этом точка минимума функции F не совпадает с соответствующей предельной точкой, она располагается и на левой, и на правой траектории на некотором расстоянии от предельной точки. Как видно из рисунка, точки минимума функции F располагаются на двух кривых $f^{(-)}$ и $f^{(+)}$, одна из них лежит слева ($f^{(-)}$), а другая справа ($f^{(+)}$) от предельных точек (от кривой $f^{(0)}$). Каждая из этих кривых имеет геометрический минимум относительно кривой $f^{(0)}$, образованной предельными точками. Кривые $f^{(-)}$ и $f^{(+)}$ соприкасаются в их общей точке минимума, совпадающей с предельной точкой. Эта предельная точка и определяет решение обратной задачи.

Поведение пробной функции в идеальной ситуации является некоторым ориентиром (предельным случаем), позволяющим разобраться и в реальной ситуации.

О ПОВЕДЕНИИ ПРОБНОЙ ФУНКЦИИ В РЕАЛЬНОЙ СИТУАЦИИ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ С МОДЕЛИРОВАНИЕМ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОШИБОК В ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ УГЛАХ

Реальная ситуация может очень слабо отличаться от идеальной. В этом случае и само решение можно еще находить по минимуму функционала S_0 на наборе значений n_0 . Но такая возможность в принципе не указывает на идеальный характер как образца, так и самого эксперимента. И не гарантирует точность решения. В этом случае понять, насколько реальная ситуация отличается от идеальной, можно, только изучив, насколько пробная функция отстает от описанных в предыдущем разделе свойств. Однако в общем случае

выбор оптимального решения по минимуму величины S_0 на наборе значений n_0 оказывается невозможным. И тогда необходимо знать, как трансформируется поведение пробной функции при отступлении от идеальной ситуации.

Сначала изложим общие соображения, касающиеся этого вопроса. Для этого снова обратимся к идеальному случаю, проиллюстрированному на рис. 1. На этом рисунке слева и справа от кривой $f^{(0)}$ изображены кривые $f^{(-)}$ и $f^{(+)}$, образованные точками минимума функции F . При отступлении от идеальной ситуации эти кривые расходятся от их общей точки геометрического минимума, иначе говоря, отходят от кривой $f^{(0)}$. Это является следствием того, что в данном случае уже ни одна точка минимума пробной функции F не совпадает с соответствующей предельной точкой величины S_0 , т. е. не располагается на кривой $f^{(0)}$. При этом естественным является предположение, что кривые $f^{(-)}$ и $f^{(+)}$ не ведут себя симметрично относительно кривой $f^{(0)}$, иначе это противоречило бы возможности однозначного выбора оптимального решения. Аналогичная ситуация возникает и при рассмотрении сверхтонких пленок на полупроводниковых подложках. Для более точного анализа проведем численный эксперимент с моделированием ошибок в поляризационных углах.

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

$$\Psi_e[i] = \Psi_0[i] + \delta \Psi[i], \quad \Delta_e[i] = \Delta_0[i] + \delta \Delta[i], \quad (19)$$

где $\Psi_0[i]$ и $\Delta_0[i]$ — точные значения поляризационных углов для i -го угла падения, отвечающие заданным значениям параметров отражающей системы; $\delta \Psi[i]$ и $\delta \Delta[i]$ — ошибки в поляризационных углах.

Ошибки $\delta \Psi[i]$ и $\delta \Delta[i]$ определены на наборе углов падения выражениями

$$\delta \Psi[i] = \xi_0(2r[i] - 1), \quad \delta \Delta[i] = \eta_0(2r[i] - 1) \quad (20)$$

и носят случайный характер. В этих выражениях $r[i]$ — случайное целое число в диапазоне от 0 до 1, активируемое (при выполнении математической программы) для каждого угла падения путем обращения к генератору псевдослучайных чисел Random; ξ_0 и η_0 — величины, определяющие максимальные отклонения (в ту или другую сторону) "экспериментальных" значений поляризации

онных углов $\Psi_e[i]$ и $\Delta_e[i]$ от их точных значений $\Psi_0[i]$ и $\Delta_0[i]$.

Как следует из формул (20), ошибки для углов Ψ и Δ распределены случайным образом в интервалах

$$(-\xi_0, \xi_0) \text{ и } (-\eta_0, \eta_0). \quad (21)$$

В численном эксперименте жидкость по-прежнему будем описывать однослойной системой с параметрами (16). Для решения поставленной задачи достаточно рассмотреть всего лишь один вариант ошибок, представленный соотношением

$$\xi_0 = \eta_0 = 5'. \quad (22)$$

Соответствующие "экспериментальные" значения поляризационных углов определим формулами (19) и (20). Как и в предыдущем случае, проанализируем поведение пробной функции F и установим правила, позволяющие выбирать оптимальное решение обратной задачи в реальной ситуации. Для анализа воспользуемся рис. 2, который по своему характеру и пояснениям ко всем кривым полностью совпадает с рис. 1, если на этих рисунках пока не рассматривать поведение функции F . Перейдем теперь к изучению пробной функции F , иллюстрируя результаты на рис. 2.

Полученные результаты полностью подтверждают изложенные выше общие соображения. Как и следовало ожидать, кривые $f^{(-)}$ и $f^{(+)}$ расходятся от точки соприкосновения (от кривой

$f^{(0)}$). При этом кривая $f^{(-)}$ не только удаляется, причем существенно, но она теряет и свой геометрический минимум. Что касается кривой $f^{(+)}$, то ее геометрический минимум сдвигается относительно слабо, но он делается гораздо более выраженным (острым). Через этот новый минимум и проходит новая центральная траектория, определяющая соответствующую (также новую) предельную точку (см. рис. 2). Эта новая центральная предельная точка и определяет оптимальное решение обратной задачи в рассматриваемом численном эксперименте

$$\begin{aligned} d = 25.098 \text{ нм}, & \quad n = 1.34004; \\ n_0 = 1.33001, & \quad \kappa_0 = 0.0. \end{aligned} \quad (23)$$

Решение можно было бы определить и по точке минимума кривой $f^{(+)}$, но в этом случае параметры решения оказываются не совсем согласованными между собой.

Таким образом, как следует из (23), полученное оптимальное решение отличается высокой точностью. Чтобы оценить этот результат, достаточно найти параметры поверхностного слоя, приняв для показателя преломления подложки значения с ошибками 0.0001, 0.0005 и 0.001:

$$n_0 = 1.3301, \quad n_0 = 1.3305 \text{ и } n_0 = 1.331. \quad (24)$$

В этом случае параметры поверхностного слоя, определенные по соответствующей предельной точке, запишутся:

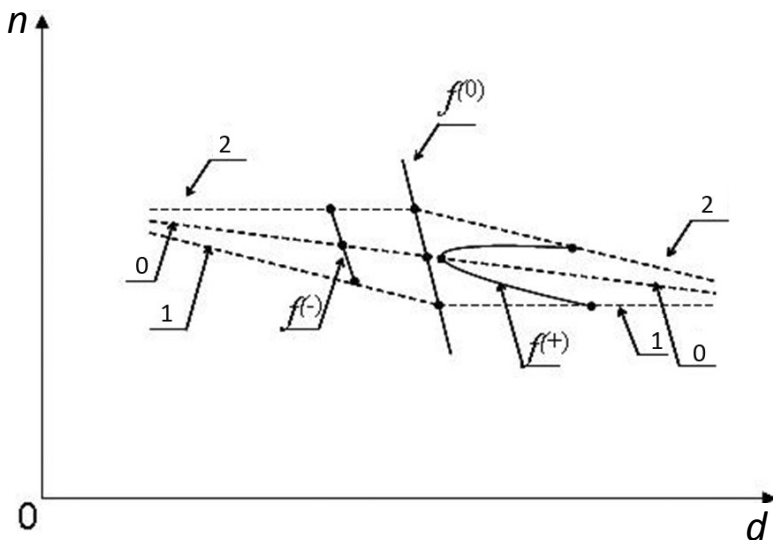


Рис. 2. Иллюстрация процедуры решения обратной задачи с использованием пробной функции F в численном эксперименте, имитирующем реальную ситуацию

$$d = 23.68 \text{ нм}, \quad n = 1.34065, \quad (25)$$

$$d = 17.25 \text{ нм}, \quad n = 1.34465, \quad (26)$$

$$d = 8.99 \text{ нм}, \quad n = 1.35680. \quad (27)$$

Если указанные выше ошибки взять со знаком минус, то параметры d и n определяются почти с такими же отклонениями, но в противоположную сторону. В этом случае, по сравнению с точными значениями, толщина d увеличивается, а показатель n уменьшается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использованный в настоящей работе подход к решению математически некорректной обратной задачи эллипсометрии для жидкостей позволяет находить оптимальное решение относительно всех параметров поверхности и объема жидкости. Показано, что это решение отличается высокой точностью. При этом рассмотрение велось на основе использования в качестве измерительных ситуаций набора углов падения светового пучка на образец. Однако обратная задача для жидкостей может решаться не только путем использования набора углов падения. Измерительные ситуации можно определять и длинами волн светового пучка при заданном угле падения. Это случай спектральных измерений, к которым целесообразно прибегать, если в достаточно широком спектральном интервале отсутствует или наблюдается достаточно слабая дисперсия оптических постоянных. В следующих работах будут приведены результаты обработки реального эксперимента, проведенного на физиологическом растворе и плазме крови на основе спектральных измерений. Большой интерес представляет также исследование морской воды, взятой на разных глубинах и в разных местах. Поверхностный слой на жидкостях может иметь большую протяженность, включая в себя несколько периодов по толщине. В этом случае число периодов является дополнительным параметром, подлежащим определению. Данный фактор будет учитываться при исследовании реальных жидкостей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ковальчук А.В., Митина А.А., Полушкин Е.А., Гальперин Э.И., Дюжева Т.Г., Семенов И.А., Семенов А.И., Шаповал С.Ю. О возможностях спектральной эллипсометрии для исследования параметров плазмы крови больных хроническим панкреатитом. Полный факторный эксперимент // Научное приборостроение. 2014. Т. 24, № 2. С. 104–117. URL: <http://213.170.69.26/mag/2014/full2/Art14.pdf>.
2. Семенов И.А., Семенов И.А. О новых возможностях метода эллипсометрии, обусловленных "нулевой" оптической схемой. Эллипсометрия реальных поверхностных структур. 19. О выборе оптимального решения обратной задачи при исследовании сверхтонких поверхностных пленок // Научное приборостроение. 2010. Т. 20, № 4. С. 132–142. URL: <http://213.170.69.26/mag/2010/full4/Art16.pdf>.
3. Box M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. Vol. 8, no. 1. P. 42–51. doi: 10.1093/comjnl/8.1.42.
4. Семенов И.А., Семенов И.А. Исследование поверхностной структуры твердых тел и жидкостей методом эллипсометрии с учетом математической некорректности обратной задачи. 6. Об устойчивости решения обратной задачи. Модификация метода Бокса // Научное приборостроение. 2012. Т. 22, № 3. С. 69–77. URL: <http://213.170.69.26/mag/2012/full3/Art11.pdf>.

Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Московская обл., г. Черноголовка (Ковальчук А.В., Митина А.А., Полушкин Е.А., Семенов И.А., Шаповал С.Ю.)

Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова (Гальперин Э.И., Дюжева Т.Г., Семенов И.А.)

Контакты: Семенов Альберт Иванович, sem199@mail.ru

Материал поступил в редакцию: 5.08.2016

POTENTIALITY AND PECULIARITY OF ELLIPSOMETRY IN THE SURFACE STUDIES OF LIQUIDS

A. V. Kovalchuk¹, A. A. Mitina¹, E. A. Polushkin¹, E. I. Galperin²,
T. G. Dyuzheva², I. A. Semenenko², A. I. Semenenko¹, S. Yu. Shapoval¹

¹*Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials RAS, Chernogolovka, Moscow Reg., Russia*

²*I.M. Sechenov First Moscow State Medical University, Russia*

This paper is reported on the procedure of solving the inverse problem of ellipsometry respectively to all the parameters of the surface structure and volume of liquids. The inverse problem is mathematically incorrect due to a weak optical contrast between surface and volume of a liquid. In order to solve the problem, a trial function is introduced. The most general expression for the function is obtained. The optimal solution of the inverse problem is found through an analysis of the trial function peculiarities appearing along the trajectory of the movement of the functional of the inverse problem to the point of the absolute (the deepest) minimum. The stability of the functional movement trajectory is achieved by a specific selection of the starting point on the trajectory. General patterns of the trial function's behavior are found for an ideal situation, as well as for a real situation through a numerical simulation. It is shown that the optimal solution obtained with the trial function is highly accurate.

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

REFERENCES

1. Kovalchuk A.V., Mitina A.A., Polushkin E.A., Galperin E.I., Dyuzheva T.G., Semenenko I.A., Semenenko A.I., Shapoval S.Yu. [Potential of spectral ellipsometry in studying the blood serum of chronic pancreatitis patients. Full factorial experiment]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2014, vol. 24, no. 2, pp. 104–117. URL: <http://213.170.69.26/en/mag/2014/full2/Art14.pdf>. (In Russ.).
2. Semenenko A.I., Semenenko I.A. [On the new potentials of ellipsometry arising from the null optical circuit. Ellipsometry of real surface structures. 19. Optimal solution choice of inverse problem in studying of ultra thin superficial films]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2010, vol. 20, no. 4, pp. 132–142. URL: <http://213.170.69.26/en/mag/2010/full4/Art16.pdf>. (In Russ.).
3. Box M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods. *Comp. Journ.*, 1965, vol. 8, no. 1, pp. 42–51. Doi: 10.1093/comjnl/8.1.42.
4. Semenenko A.I., Semenenko I.A. [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]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2012, vol. 22, no. 3, pp. 69–77. URL: <http://213.170.69.26/en/mag/2012/full3/Art11.pdf>. (In Russ.).

Contacts: *Semenenko Al'bert Ivanovich*,
sem199@mail.ru

Article received in edition: 5.08.2016