8. Thylen L., Granestraund P. Integrated optics electrooptic device electrode analysis: The influence of buffer layers // J. Opt. Commun.—1986.—7, N 1.—P. 11.
9. Marcuse D. Electrostatic field of coplanar lines computed with the point matching method // IEEE J. Quant. Electron.—1989.—25, N 5.—P. 939.
10. Budd H. F. Dynamic theory of thermoplastic deformation // J. Appl. Phys.—1965.—36, N 5.—P. 1613.
11. Hussain M. A., Pu S. L. Dynamic stress intensity factors for an unbounded plate having collinear cracks.—1972.—46, N 4.—P. 865.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.—М.: Наука, 1982.
13. Pat. 3517126 USA. Light valve image projection system with deformable membrane and thin film target electrode /T. Yamada.—Publ. 23.06.70.
14. А. с. 1457654 СССР. Мишень деформографической проекционной электронно-лучевой трубки /Н. Б. Кулешов, М. К. Новоселец.—Заявл. 28.04.88, Бюл. № 28.
15. Kuleshov N. B., Sarkisov S. S., Tarasov V. A. The analysis of viscoelastic spatial light modulators with electron beam registration at substrate side // Proc. Intern. Conf. on Opto-Electronic Science and Engineering'90, Aug. 1990: Suppl. Papers.—Beijing, China, 1990.—P. 13.
16. Martin G. C., Su T. T., Loh I. H. et al. The metallization of silicone polymers in the rubbery and the glassy state // J. Appl. Phys.—1982.—53, N 1.—P. 797.
17. Hoshino Y., Shiwa S. Light modulation by transverse electric field induced oil surface deformation // Appl. Phys. Lett.—1989.—55, N 11.—P. 1056.

Поступила в редакцию 10 января 1992 г.

УДК 535.39

Ю. Е. Воскобойников, С. Н. Свиташева

(Новосибирск)

ТОЧНОСТЬ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПЛЕНОЧНОЙ СИСТЕМЫ И ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ. Ч. I

Предложен новый алгоритм численного решения обратной задачи эллипсометрии, относящейся к типу некорректных многопараметрических обратных задач. Новый алгоритм для улучшения качества оценки искомых параметров использует статистическую обработку найденных решений и поэтапное изменение границ множества, задающего объем пространства искомых величин, при его минимизации. Введены числовые характеристики обусловленности обратной задачи, определяющие реально достижимую точность оценки каждого из параметров.

Введение. Эллипсометрическая методика, благодаря своим преимуществам (простота измерений, невозмущающее воздействие на исследуемую структуру, возможность измерений *in situ*, высокая чувствительность к наличию пленок, начиная с субмонослойных покрытий; возможность работы как с оптически прозрачными диэлектриками, так и с сильно поглощающими металлами), получила широкое распространение в различных областях физики, химии и биологии. Расширение круга задач эллипсометрии привлекло более пристальное внимание к анализу возможностей решения обратной задачи эллипсометрии — восстановлению параметров исследуемой системы по измеренным эллипсометрическим углам. Достаточно подробный обзор проблем обратных задач эллипсометрии был приведен в [1]. В настоящее время он мог бы быть дополнен целым рядом работ, где, например, предложено аналитическое решение с использованием иммерсии на угле Брюстера [2], оценена точность численного решения для двухслойной прозрачной пленки [3], предложен алгоритм численного решения однослойной системы с вариацией толщины пленки и угла падения [4], исследован вид множества решений обратной задачи для трех параметров поглощающей пленки, существенно упрощающий алгоритм [5], проведен сравнительный анализ ошибок фотометрических и эллипсометрических измерений [6] и т. д.

В данной работе рассматривается несколько вопросов, касающихся точности численного решения обратной задачи эллипсометрии.

1. Влияние формы функционала на итерационный процесс.

2. Зависимость найденного решения от положения начальной точки итерационного процесса условной минимизации в m-мерном пространстве искомых параметров.

3. Статистическая обработка полученных решений и формирование новых границ допустимого множества.

4. Числовые характеристики обусловленности обратной задачи.

5. Связь формы изолиний минимизируемого функционала с линейной взаимной зависимостью параметров.

Численный алгоритм решения обратной задачи эллипсометрии. Обратная задача эллипсометрии допускает аналитическое решение только в некоторых частных случаях, например при определении толщины пленки d_1, если все остальные параметры однопленочной системы известны [1]. В общем случае она относится к типу некорректных обратных многопараметрических задач. Измеренные эллипсометрические углы Ψ и Δ являются функциями каждого a_i параметра из общего их числа m, описывающего данную систему:

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi(a_1, a_2, \ldots, a_i), \quad i = 1, 2, \ldots, m, \\ \Delta &= \Delta(a_1, a_2, \ldots, a_i), \quad a_i \in \{N_k, d_k, \lambda, \varphi_0\}, \end{aligned} \tag{1}$$

где N_k, d_k — комплексный показатель преломления и толщина k-среды исследуемой системы; λ и φ_0 — длина волны и угол падения света.

Одно измерение дает пару эллипсометрических углов Ψ и Δ и соответственно уравнений. Если число параметров больше двух, то необходимо $K > 1$ измерений при варьировании одного или нескольких параметров a_i.

Традиционным подходом к решению параметрических обратных задач является нахождение точек минимума функционала от нормированных невязок e_j:

$$e_{\Psi j}(\mathrm{a}) = \frac{\widetilde{\Psi}_j - \Psi_j^c(\mathrm{a})}{\sigma_{\Psi j}}; \qquad e_{\Delta j}(\mathrm{a}) = \frac{\widetilde{\Delta}_j - \Delta_j^c(\mathrm{a})}{\sigma_{\Psi j}}, \tag{2}$$

где $\widetilde{\Psi}_j$, $\widetilde{\Delta}_j$ — измеренные с погрешностями $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$ значения поляризационных углов; $\sigma^2_{\Psi j}$, $\sigma^2_{\Delta j}$ — дисперсии погрешностей $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$; $\Psi_j^c(\mathrm{a})$, $\Delta_j^c(\mathrm{a})$ — вычисленные значения углов при решении прямой задачи с заданным вектором **a** искомых параметров размерностью m. Например, если оценивается толщина пленки d_1 и коэффициент преломления $N_1 = n_1 - iK_1$, то $\mathbf{a} = |d_1, n_1, K_1|^T$, $m = 3$.

Рассмотрим два функционала

$$\Phi(\mathrm{a}) = \sum_{j=1}^{K} e^2_{\Psi j}(\mathrm{a}) + \sum_{j=1}^{K} e^2_{\Delta j}(\mathrm{a}), \tag{3}$$

$$\Phi(\mathrm{a}) = \sum_{j=1}^{K} |e_{\Psi j}(\mathrm{a})| + \sum_{j=1}^{K} |e_{\Delta j}(\mathrm{a})| \tag{4}$$

и в качестве оценок искомых параметров примем проекции вектора $\mathbf{a}^*$, доставляющего минимум функционалу $\Phi(\mathrm{a})$. Сравнивая (3) и (4), заметим, что минимизация первого функционала приводит к оценке метода наименьших квадратов. Если погрешности измерения $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$ подчиняются нормальному распределению, то вектор $\mathbf{a}^*$ соответствует оценкам максимального правдоподобия. Поэтому функционал (3) целесообразно использовать в случае нормального или близкого к нормальному распределению $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$.

В случае искажения измеренных значений Ψ и Δ шумами, не подчиняющимися нормальному распределению (например, смесь нормального шума и импульсного или шум с «тяжелыми хвостами»), следует обратиться к функционалу (4), минимизация которого приводит к нелинейному уравнению

$$\sum_{j=1}^{K} \operatorname{sing} | e_{\Psi j}(\mathrm{a}) | + \sum_{j=1}^{K} \operatorname{sing} | e_{\Delta j}(\mathrm{a}) | = 0. \tag{5}$$

Из этого уравнения видно, что для вектора a^* количество невязок со знаком плюс и минус одинаково. В уравнение (5) входят не величины невязок, как в методе наименьших квадратов, а их знаки. Поэтому решение с использованием (4), (5) обладает высокой устойчивостью к аномальным погрешностям измерений, появление которых возможно в эллипсометрии.

Таким образом, обратная задача эллипсометрии сводится к условной минимизации функционала $\Phi(\mathrm{a})$, т. е.

$$\min \Phi(\mathrm{a}), \quad \mathrm{a} \in \mathrm{A}^*, \tag{6}$$

где A^* — допустимое множество в m-мерном пространстве, формируемое на основе априорной достоверной информации о возможных значениях искомых параметров a_i, которую целесообразно задать системой неравенств типа

$$a_{\min i} \le a_i \le a_{\max i}, \quad i = 1, 2, ..., m. \tag{7}$$

К сожалению, для минимизации функционала $\Phi(\mathrm{a})$ в эллипсометрических задачах невозможно использовать итерационные методы высокого порядка, поскольку $\Psi = \Psi(\mathrm{a})$ и $\Delta = \Delta(\mathrm{a})$ не являются математически гладкими функциями и это обстоятельство заставляет обратиться к методам нулевого порядка, не требующим вычисления частных производных первого или второго порядка $\partial\Psi/\partial a_i$, $\partial^2\Psi/\partial a_i^2$, $\partial\Delta/\partial a_i$ и $\partial^2\Delta/\partial a_i^2$ и базирующимся только на вычислении $\Phi(\mathrm{a})$.

Наиболее предпочтительным является метод Нелдера — Мида [7, 8], который достаточно надежно работает при размерности $m < 6$ и «сложных» конфигурациях изолиний функционала $\Phi(\mathrm{a})$, что характерно для эллипсометрических задач. Модификация этого метода к задаче (6) достаточно проста и связана с проверкой принадлежности новых вершин симплекса допустимому множеству A^*. Если точка не удовлетворяет ограничениям (7), то в качестве вершины принимается ближайшая граничная точка множества A^*.

Для функционала $\Phi(\mathrm{a})$ характерна резкая «овражность» изолиний (особенно при нахождении трех и более параметров), т. е. существование в пространстве параметров направлений, вдоль которых функционал $\Phi(\mathrm{a})$ остается практически неизменным. Очевидно, что чем больше «длина оврага», тем хуже точность оценивания соответствующего параметра. Отсюда возникает проблема неустойчивости при минимизации $\Phi(\mathrm{a})$, что характеризует плохую обусловленность обратной параметрической задачи, а при бесконечной «длине оврага» — ее вырожденность. Повышение устойчивости достигается двумя приемами: либо уменьшением границ априорной информации (7), либо введением нового критерия останова итерационной процедуры:

$$\Phi(\mathrm{a}^*) \le \chi^2_{2K-m}, \tag{8}$$

где χ^2_{2K-m} — квантиль χ^2-распределения с $2K - m$ степенями свободы. Критерий (8) означает, что в качестве решения берется точка, значение функционала в которой согласуется с погрешностями $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$ измеренных значений поляризационных углов [9, 10] и является статистическим обобщением принципа невязки, используемого для выбора параметров регуляризации [11] в методах решения некорректных задач.

Обусловленность обратной задачи. Перейдем к рассмотрению числовых характеристик, позволяющих сравнить устойчивость обратной задачи эллипсометрии по отношению к каждому из искомых параметров.

По аналогии с числом обусловленности матрицы [12], под которым понимается отношение максимального собственного числа к минимальному, введем коэффициент обусловленности обратной задачи эллипсометрии — K_{cond}, характеризующий форму изоповерхностей функционала или их «вытянутость» («овражность») в направлении параметра a_i вблизи точки найденного минимума функционала Φ_{min}, определяемого вектором a^*. Определим новое значение функционала вблизи минимума

$$\Phi_\delta = (1 + \delta)\Phi_{min}, \quad \delta > 0, \tag{9}$$

и введем величину

$$\delta a_i = \min\{\Delta a_i : \Phi(a_i^* + \Delta a_i) = \Phi_\delta\}, \quad i = 1, 2, ..., m, \tag{10}$$

обусловленности матрицы, так как связан не только с математической моделью исследуемой структуры, но и с видом используемого функционала. Однако K_{cond} зависит от δ и в случае шаровых изоповерхностей равняется 1 (наименьшему значению) даже для очень больших радиусов δa_i.

Поэтому в качестве дополнительной числовой характеристики введем коэффициент K_v, представляющий собой нормированный «объем» функционала в точке a^*:

$$K_v = \left(\frac{1}{\delta\Phi_{min}}\right)^m \prod_{i=1}^{m} \delta a_i. \tag{12}$$

Величины K_{cond} и K_v количественно определяют обусловленность обратной задачи эллипсометрии в целом. Их значения можно использовать как для планирования эксперимента, так и для выбора типа функционала $\Phi(\mathrm{a})$. Наименьшие значения K_{cond} и K_v соответствуют *оптимальным* плану эксперимента и алгоритму обработки полученных результатов.

Можно показать, что линейная форма изолиний функционала на плоскости $a_i - a_{i+1}$ соответствует линейной зависимости между искомыми параметрами a_i, a_{i+1} и характеризует вырожденность обратной задачи. Ниже это положение иллюстрируется результатами вычислительного эксперимента.

Статистическая обработка решений. Плохая обусловленность обратной задачи порождает одно важное обстоятельство: вычисленная точка экстремума $\Phi(\mathrm{a}^*)$ является вершиной случайного вектора в m-мерном пространстве параметров, по крайней мере, по двум причинам. Во-первых, каждой реализации поляризационных углов Ψ_j, Δ_j ($2K$-мерный случайный вектор) из-за наличия шумов соответствует также случайная точка $\bar{\mathrm{a}}^*$ точного минимума $\Phi(\mathrm{a})$. Во-вторых, останов процедуры минимизации *равновероятно* может произойти в любой точке «дна оврага», удовлетворяющей критериям останова (в том числе (8)) и зависящей только от выбора начальной точки итерационного процесса.

Чтобы избежать зависимости от начальной точки, формируется выборка из M векторов a^*. Для этого вместо начальной точки $\mathrm{a}^{(0)}$ берется M *случайных* точек внутри допустимого множества A^* (7). При отсутствии априорной информации целесообразно принять для $\mathrm{a}^{(0)}$ закон равномерного распределения, приписывая равную вероятность $1/M$ каждой начальной точке из A^*. Для каждой точки $a_i^{(0,l)}$, $1 \le l \le M$, находится точка минимума $a_i^{(*,l)}$, последовательность которых составляет выборку в пространстве оцениваемых параметров, необходимую для построения статистической оценки искомых параметров a_i. Из выборки удаляются «аномальные» решения $a^{(*,l)}$, не удовлетворяющие условию (8) и не адекватные исходным данным $\left\{\widetilde{\Psi}_j, \widetilde{\Delta}_j, \sigma^2_{\Psi_j}, \sigma^2_{\Delta_j}\right\}$.

Из оставшихся M_0 элементов выборки необходимо найти наиболее достоверную оценку неизвестных параметров a_i. Следует учесть, что оценка по арифметическому среднему

$$\widehat{a}_i^{\mathscr{N}} = \frac{1}{M_0}\sum_{l=1}^{M_0} a_i^{(*,l)} \tag{13}$$

может иметь существенное смещение от точного положения минимума a^*. Этого можно избежать, используя нелинейный метод оценки по медиане соответствующей выборки:

$$\widehat{a}_i^{\text{med}} = \text{med}\left\{a_i^{(*,l)}\right\}. \tag{14}$$

По определению

$$\widehat{a}_i^{\text{med}} = a_i^{(M_0/2+1)}, \quad M_0 \text{ нечетное}, \tag{15}$$

$$\widehat{a}_i^{\text{med}} = \frac{1}{2}\left(a_i^{(M_0/2)} + a_i^{(1+M_0/2)}\right), \quad M_0 \text{ четное}, \tag{16}$$

где $a_j^{(m)}$ — m-й элемент вариационного ряда, полученного упорядочением значений $a_i^{(*,l)}$ по возрастанию.

Последний подход позволяет найти также дисперсию ошибки оценивания a_i, вызванную различным положением начальной точки:

$$\widehat{\sigma}^2_{a_i} = \left(\text{med}\left\{\left| a_i^{(*,l)} - \widehat{a}_i^{\text{med}}\right|\right\}1{,}545\right)^2. \tag{17}$$

Разумеется, можно использовать не только более эффективные, но и более сложные нелинейные алгоритмы, представляющие комбинацию медианного фильтра с другими нелинейными алгоритмами [13].

Статистическая обработка решений плохо обусловленной задачи предоставляет еще одну возможность — поэтапное формирование новых границ поиска, что особенно важно при отсутствии достоверной априорной информации об одном или нескольких искомых параметрах. Для этого вместо условия (7) запишем с учетом (17)

$$\widehat{a}_i - C\widehat{\sigma}_{a_i} \le a_i \le \widehat{a}_i + C\widehat{\sigma}_{a_i}, \quad C > 0. \tag{18}$$

Таким образом, на первом этапе в пространстве искомых параметров задается заведомо большой «объем» допустимого множества A^*, т. е. выполняется неравенство $a_{\min i} \ll a_{\max i}$. Объем поиска в пространстве параметров можно значительно уменьшить согласно (18) после предварительной минимизации функционала $\Phi(a)$ и статистической обработки (14)—(17) выборки $\left\{a^{(*,l)}\right\}$, что позволяет увеличить точность оценивания параметров.

ВЫВОДЫ

Анализ причин, мешающих достижению точного решения обратной задачи эллипсометрии, когда число искомых параметров больше двух, показал необходимость *статистической обработки* результатов поиска параметров и несомненную эффективность предложенного *нового численного алгоритма*. Авторы надеются, что основные результаты этой работы могут быть использованы при решении некорректных многопараметрических задач в любой другой области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет.—М.: Мир, 1980.

2. Azzam R. M. A. Analytical determination of the complex dielectric function of an absorbing medium from two angles of incidence of minimum parallel reflectance // JOSA.—1989.—6, N 8.—P. 1213.
3. Zhang R., Luo J., Chen M. A method for multiple angle of incidence ellipsometric analysis in determination of double-layer thin film parameters // Acta Opt. Sin.—1989.—9, N 1.—P. 75.
4. Дагман Э. Е. Полное решение обратной задачи эллипсометрии для однослойной системы при вариации толщины и угла падения света // Оптика и спектроскопия.—1988.—65, № 5.
5. Свиташева С. Н. Точное решение обратной задачи эллипсометрии для поглощающих пленок // ДАН СССР.—1991.—318, № 5.
6. Ward L. The accuracies of photometric, polarimetric and ellipsometric methods for the optical constants of thin films // Opt. and Laser Technol.—1985.—17, N 5.—P. 263.
7. Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization // Comp. J.—1965.—7.—P. 308.
8. Банди Б. Методы оптимизации.—М.: Радио и связь, 1988.
9. Воскобойников Ю. Е., Преображенский Н. Г., Седельников А. И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике.—Новосибирск: Наука, 1984.
10. Воскобойников Ю. Е. Выбор размерности функциональных приближений экспериментальных данных // Автометрия.—1985.—№ 4.
11. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач.—М.: Наука, 1983.
12. Форсайт Дж., Макольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений.—М.: Мир, 1980.
13. Бронников А. В., Воскобойников Ю. Е. Комбинированные алгоритмы нелинейной фильтрации зашумленных сигналов и изображений // Автометрия.—1990.—№ 1.

Поступила в редакцию 17 марта 1992 г.

УДК 535.39

Ю. Е. Воскобойников, С. Н. Свиташева

(Новосибирск)

ТОЧНОСТЬ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПЛЕНОЧНОЙ СИСТЕМЫ И ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ. Ч. II

Приведены результаты вычислительного эксперимента для поиска четырех неизвестных параметров по многоугловым эллипсометрическим измерениям. Таблицы и рисунки демонстрируют случайный характер найденных решений для плохо обусловленных задач, форму поверхности минимизируемого функционала, возможности статистической обработки найденных решений, высокую эффективность предложенного численного алгоритма решения обратной задачи эллипсометрии для увеличения точности, которая ограничивается реальными погрешностями измерений.

Результаты решения обратной задачи эллипсометрии. После рассмотрения в ч. I настоящей статьи основных проблем, влияющих на точность решения обратной задачи эллипсометрии, приведем результаты машинного эксперимента по определению четырех параметров для системы подложка — двухслойный диэлектрик, используя разработанную авторами программу.

Одновременное определение четырех неизвестных параметров, т. е. $a = (n_1, n_2, d_1, d_2)$, $m = 4$, — достаточно сложная задача, и именно по этой причине она выбрана в качестве примера для иллюстрации возможностей разработанного нами алгоритма решения обратной задачи эллипсометрии.

В табл. 1 приведены исходные параметры системы и рассчитанные значения поляризационных углов Ψ и Δ, искаженные (шумами) погрешностями измерений $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$. В качестве варьируемого параметра выбран угол падения света φ_{0j}, $j = 1, 2, ..., K$, $K = 5$, т. е. рассмотрено решение обратной задачи многоугловой эллипсометрии.

В приведенных ниже таблицах используются следующие обозначения: d_i — толщина i-й пленки в ангстремах; n_i — показатель преломления i-й пленки;