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;

Исходные данные	φ_{0j}	$\tilde{\Delta}_j$	$\tilde{\Psi}_j$
$d_1 = 350,\ n_1 = 1{,}7$	50	109,62	40,62
	55	96,17	39,40
$d_2 = 400,\ n_2 = 1{,}9$	60	82,25	38,37
$N_s = 3{,}865 - i0{,}023$	65	68,20	38,26
$\lambda = 6328$	70	53,68	38,44

Таблица 1

N_s — комплексный показатель преломления подложки; λ — длина волны в ангстремах; φ_{0i}, Δ_j, Ψ_j, $\delta\Delta_j$, $\delta\Psi_j$ — угол падения, эллипсометрические углы и их невязки (в градусах); $\Phi(a)$ — безразмерная величина; средние величины и их отклонения имеют размерность соответствующего параметра.

Дисперсия шума может быть задана постоянной $\sigma^2_{\Psi j} = C_1$, $\sigma^2_{\Delta j} = C_2$ либо в виде функции любого из параметров системы. В нашем примере задан линейный закон

$$\sigma^2_{\Psi j} = C_\sigma - \frac{\varphi_{0j} - \alpha}{\varphi_Б - \alpha}, \quad \alpha = \begin{cases} \pi/2, & \varphi_{0j} < \varphi_Б, \\ 0, & \varphi_{0j} = \varphi_Б, \\ \pi, & \varphi_{0j} > \varphi_Б, \end{cases} \tag{1}$$

$$\sigma^2_{\Delta j} = 2\sigma^2_{\Psi j}, \quad 1 \le j \le K, \tag{2}$$

где C_σ — константа эксперимента; $\varphi_Б$ — угол псевдо-Брюстера, для которого $\Psi(\varphi_Б) = \min\limits_j \Psi_j$. Заведомо неверно заданные C_σ и закон распределения $\eta_{\Psi j}$, $\eta_{\Delta j}$ могут существенно повлиять на точность решения задачи.

В табл. 2 приведены: граничные точки в 4-мерном пространстве, определяющие множество A^* [соотношение (7), ч. I]; начальные точки из этого множества, заданные случайным образом ($M = 5$); граничное значение Φ_0 функционала $\Phi(a)$ вида [соотношение (3), ч. I]; M_0 найденных минимальных значений функционала и соответствующие им $4M_0$ значений искомых параметров a_i. Табл. 2 заканчивается вычислением средних значений соответствующих параметров и их отклонений.

Таблица 2

Границы A^*	M	Начальная точка/решение				$\Phi(a^*)$
		d_1	d_2	n_1	n_2	
$d_{1,2} \in 50$—800	1	77,2	748,9	1,252	1,603	10,21
$n_{1,2} \in 1{,}2$—$2{,}2$		276,0	477,7	1,669	1,879	
$\Phi_0 = 12$	2	106,2	711,9	1,333	1,417	14,66
		496,3	248,2	1,741	1,964	
	3	302,7	586,7	1,290	1,528	10,83
		410,1	336,0	1,715	1,926	
	4	476,2	560,7	1,217	1,659	9,96
		291,2	460,8	1,671	1,886	
	5	313,8	108,4	1,503	1,637	13,95
		153,1	608,6	1,584	1,852	
Среднее a_j^{AV}		325,4	426,2	1,676	1,902	11,92
Среднее отклонение		132,0	138,7	0,06	0,04	2,21

Таблица 3

Границы A^*	M	Начальная точка/решение				$\Phi(a^*)$
		d_1	d_2	n_1	n_2	
	1	361,3	454,7	1,625	1,915	9,81
		305,6	444,7	1,674	1,892	
	2	376,1	552,6	1,685	1,884	9,94
		292,2	460,0	1,673	1,885	
$d_1 \in 193—457$	3	253,0	358,3	1,718	1,922	9,71
$d_2 \in 287—565$		343,7	405,3	1,692	1,902	
$n \in 1,61—1,73$	4	246,0	409,8	1,683	1,879	10,19
$n_2 \in 1,86—1,95$		274,2	478,1	1,660	1,883	
$\Phi_0 = 12$	5	302,1	536,1	1,633	1,875	10,27
		282,1	472,0	1,675	1,879	
	6	254,6	507,2	1,708	1,943	10,01
		284,8	466,9	1,665	1,886	
	7	237,1	372,1	1,667	1,862	12,65
		457,4	287,5	1,730	1,946	
Среднее a_j^{AV}		320,0	430,7	1,681	1,896	10,37
Среднее отклонение		64,8	67,6	0,01	0,01	1,02

Таблица 4

Границы A^*	M	Начальная точка/решение				$\Phi(a^*)$
		d_1	d_2	n_1	n_2	
	1	371,1	402,9	1,691	1,908	9,88
$d_1 \in 255—384$		352,4	394,8	1,690	1,910	
$d_2 \in 363—498$	2	354,9	391,1	1,691	1,896	10,06
$n_1 \in 1,66—1,71$		339,5	412,0	1,700	1,894	
$n_2 \in 1,87—1,92$	3	333,8	419,3	1,696	1,902	9,88
$\Phi_0 = 12$		350,4	396,8	1,690	1,909	
	4	361,8	399,6	1,689	1,913	9,88
		358,0	389,5	1,694	1,910	
Среднее a_j^{AV}		350,1	398,3	1,693	1,905	9,92
Среднее отклонение		7,76	9,66	0,004	0,008	0,09

Для найденных средних значений параметров в табл. 2 вычислялась обусловленность задачи: при относительном увеличении функционала 1, 020 вектор приращений параметров равен

$$\delta a = |\delta d_1, \delta d_2, \delta n_1, \delta n_2| = |3,577, 3,119, 0,037, 0,007| \times 10^{-2}.$$

Таблица 5

φ_{0j}	$\delta\Psi_j$	$\delta\Delta_j$
50	0,068	−0,033
55	−0,140	0,084
60	−0,099	−0,061
65	0,193	0,111
70	0,027	−0,108

Коэффициент обусловленности составляет $K_{\text{cond}} = 473{,}36$, при этом наилучшая обусловленность задачи по параметру n_2 и наихудшая — по d_1; величина $K_V = 0{,}183 \cdot 10^{-2}$.

Таким образом, первый этап поиска завершен и, если его результаты не удовлетворительны, можно формировать новые границы в том же пространстве для множества A^*, исходя из результатов табл. 2. В табл. 3 и 4 приведены аналогичные табл. 2 результаты с последовательным уменьшением границ.

И наконец, в табл. 5 даны невязки $\delta\Psi_j = \widetilde{\Psi}_j - \Psi_j^c$, $\delta\Delta_j = \widetilde{\Delta}_j - \Delta_j^c$, вычисленные для найденных средних значений параметров из табл. 4.

Разумеется, невозможно восстановить точные параметры системы, приведенные в табл. 1, поскольку для оценки параметров используются эллипсометрические углы, искаженные шумами, согласно формулам (1), (2). Из табл. 2—4 видно, как велика зависимость величин найденных параметров от начальной точки поиска при сравнительно малом изменении минимума функционала. Следовательно, минимум $\Phi(\mathrm{a}^*)$ *не является достаточным критерием* нахождения достоверного решения плохо обусловленной задачи. Это легко понять из рис. 1—6, где изображены: *a* — изолинии функционала, являющиеся проекциями его изоповерхностей на плоскости двух параметров $a_j - a_{j+1}$, и *b* — форма поверхности функционала вблизи минимума как

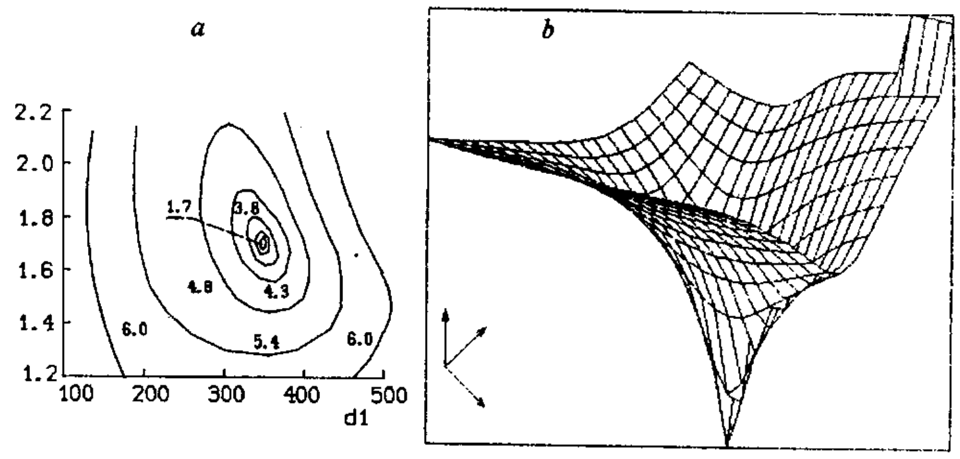

Рис. 1

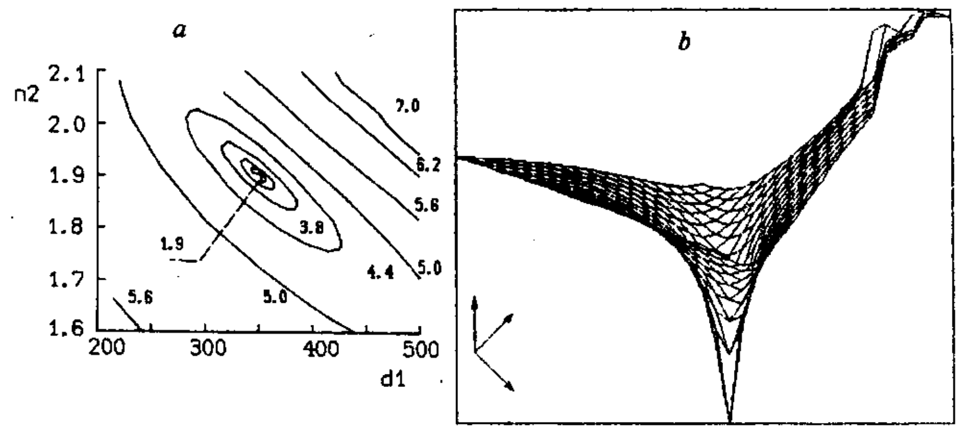

Рис. 2

функция тех же параметров. На рисунках цифры около изолиний обозначают величину логарифма функционала.

Из рис. 1—6 можно проследить взаимную зависимость для каждой пары искомых параметров, составляющих сочетание C_4^2, при фиксированных значениях остальных параметров системы. Очевидно, если изолинии функционала центрируются относительно его минимума (см. рис. 1, 4), то при любом задании исходных точек на плоскости $a_j - a_{j+1}$ легко находится точка $\mathbf{a}^*$.

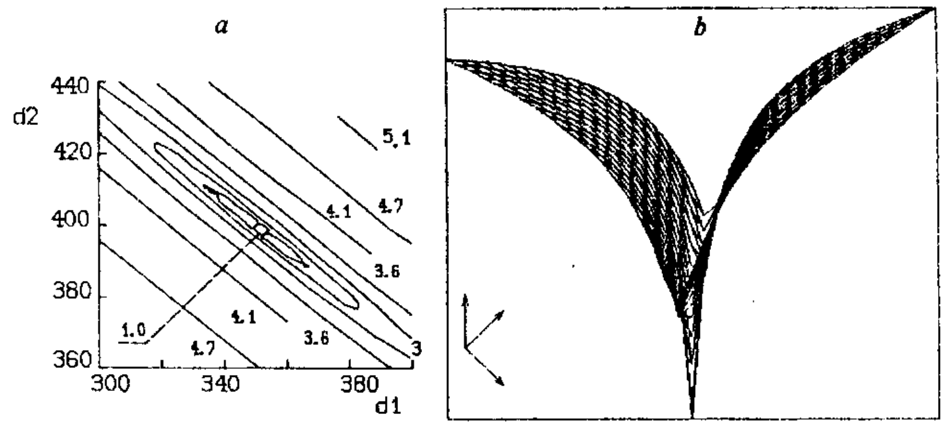

Рис. 3

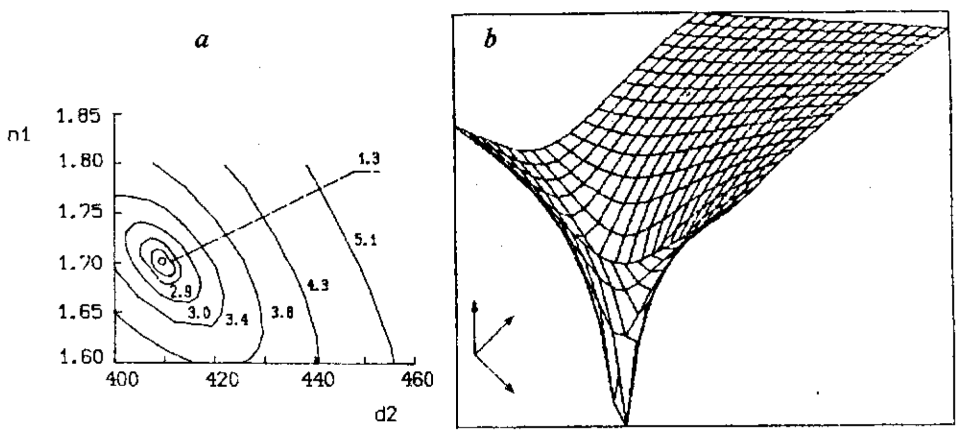

Рис. 4

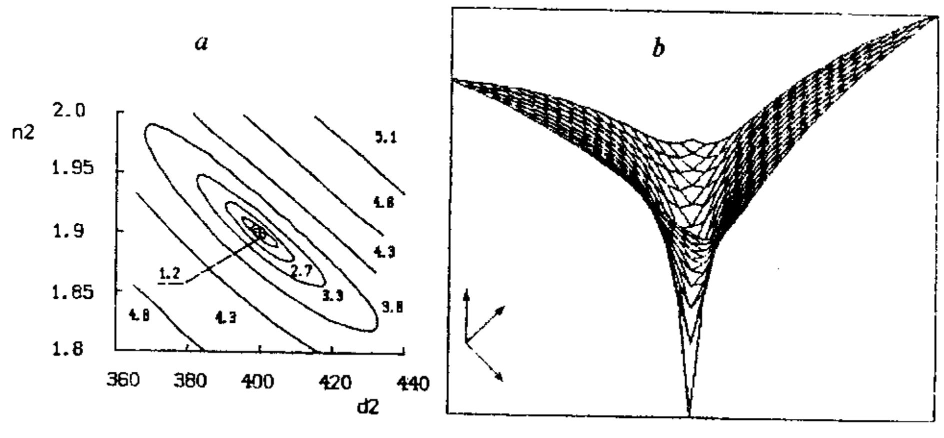

Рис. 5

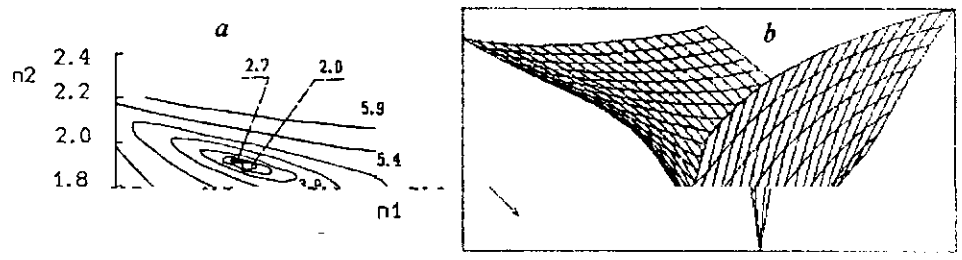

Рис. 6

Иногда изолинии функционала могут иметь сложную форму, как на рис. 2 и 6, и несколько локальных минимумов; в таких случаях нахождение глобального минимума (минимума миниморума) затруднено. Если изолинии функционала вырождаются в прямые линии, т. е. образуется протяженный «овраг», и существует несколько локальных минимумов (см. рис. 3 и 5), а направление поиска задано параллельно изолинии, то минимум $\Phi(a^*)$ может быть не найден. В этом случае коэффициент обусловленности K_{cond} и коэффициент K_V принимают большие значения: $K_{\mathrm{cond}} \gg 1$ и $K_V \gg 0$.

Из рисунков можно оценить приращение по любому из параметров, вызывающему адекватное изменение функционала.

ВЫВОДЫ

На конкретном примере поиска четырех параметров показано преимущество предложенного авторами в ч. I настоящей статьи нового алгоритма численного решения обратной задачи эллипсометрии. К сожалению, рамки статьи не позволяют продемонстрировать *все возможности* нового алгоритма, но и приведенные результаты свидетельствуют, что в решении обратных задач эллипсометрии сделан еще один шаг вперед, позволяющий увеличить точность оценки искомых параметров.

Поступила в редакцию 17 марта 1992 г.