

УДК 535.39

Ю. Е. Воскобойников, Е. В. Лантюхова, С. Н. Свиташева

(Новосибирск)

ОДНОЗНАЧНОСТЬ, УСТОЙЧИВОСТЬ И НЕЗАВИСИМОСТЬ
РЕШЕНИЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ*

Рассматриваются вопросы однозначности, устойчивости и независимости решений задачи оценивания параметров многослойных пленочных систем по данным эллипсометрических измерений. Результаты работы являются теоретической основой для построения численных алгоритмов решения обратной задачи эллипсометрии.

Введение. Преимущества эллипсометрической методики хорошо известны, и в сочетании с другими современными методами исследования, такими как дифракция электронов, оже-спектроскопия, спектроскопия вторичных ионов и т. п., она используется для изучения свойств тонких пленок, синтезируемых различными технологиями для разработки новых и совершенствования выпускаемых промышленностью микроэлектронных приборов и устройств, где требуются сверхпрецизионные измерения свойств рабочих слоев [1]. Особое внимание должно быть уделено различным аспектам решения обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ), прежде всего таким, как количество одновременно восстанавливаемых параметров и точность их восстановления. Такая попытка была ранее сделана авторами в [2, 3], где предложен численный алгоритм решения ОЗЭ и исследована обусловленность задачи для частного случая одновременного определения четырех параметров. Однако в общем случае вопросы, связанные с однозначностью, устойчивостью и независимостью решений ОЗЭ, остались не рассмотренными.

В данной работе приводятся результаты, дающие ответ на эти вопросы и являющиеся полезными при построении новых численных алгоритмов решения ОЗЭ.

Математическая модель эллипсометрических измерений. В общем случае измеряемые эллипсометрические углы Ψ и Δ являются функциями M неизвестных параметров системы и связаны с этими параметрами через элементы $S_{(j-1)(p,s)}$ матрицы рассеяния S для p -, s -поляризованного света следующими соотношениями [1]:

$$\operatorname{tg} \Psi e^{i\Delta} \equiv \rho \equiv \frac{R_p}{R_s} = \frac{S_{j(j-1)p}}{S_{(j-1)(j-1)p}} \frac{S_{(j-1)(j-1)s}}{S_{j(j-1)s}}, \quad (1)$$

$$S = \begin{bmatrix} S_{(j-1)(j-1)} & S_{(j-1)j} \\ S_{j(j-1)} & S_{jj} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

С другой стороны, матрица S для слоистой системы может быть представлена в виде произведения матриц J и L для каждого из слоев:

* Исследования данной публикации выполнены при поддержке гранта RC0000 Международного научного фонда.

$$S = J_{01}L_1J_{12}L_2 \dots J_{(j-1)j}L_j. \quad (3)$$

Матрицы J и L через коэффициенты Френеля $r_{(j-1)j}$ и фазовый множитель $\beta_j = 2\pi d_j \lambda^{-1} g_j$ связаны с параметрами каждого j -го слоя системы:

$$J_{(j-1)j} = \frac{1}{1 - r_{(j-1)j}} \begin{bmatrix} 1 & r_{(j-1)j} \\ r_{(j-1)j} & 1 \end{bmatrix}, \quad L_j = \begin{bmatrix} e^{i\beta_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta_j} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$r_{(j-1)j_s} = \frac{g_{(j-1)} - g_j}{g_{(j-1)} + g_j}, \quad r_{(j-1)j_p} = \frac{g_{(j-1)}/N_{(j-1)}^2 - g_j/N_j^2}{g_{(j-1)}/N_{(j-1)}^2 + g_j/N_j^2}, \quad (5)$$

$$g_j = (N_j^2 - N_{(j-1)}^2 \sin^2 \varphi_{(j-1)})^{1/2},$$

где индексы $(j-1)_s$ и $(j-1)_p$ относятся к границе двух сред $(j-1)$ и j для s - и p -поляризованного света соответственно; $N_j = n_j - ik_j$ и d_j — комплексный показатель преломления и толщина j -среды, λ и φ — длина волны и угол падения света, $j = 1, 2, \dots, m$. Таким образом, поляризационные углы Ψ и Δ связаны с параметрами системы соотношениями

$$\Psi = \arctg |\rho(N_j, d_j, \varphi_0, \lambda)|, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (6)$$

$$\Delta = \arg [\rho(N_j, d_j, \varphi_0, \lambda)],$$

где индекс m соответствует подложке, 0 — окружающей среде, $(m-1)$ — количество слоев в исследуемой системе.

Единственность и устойчивость решения. Приведенное математическое описание (1)–(6) эллипсометрических измерений выражает сложную нелинейную связь углов Ψ и Δ с параметрами системы, при этом число искомых параметров может быть больше числа измерений. Поэтому для оценивания M параметров a_1, \dots, a_M обратимся к вариационным методам, основанным на минимизации некоторого функционала:

$$\Phi(a_1, \dots, a_M) = \sum_{i=1}^K \omega \left(\frac{\Psi_i - \Psi_i^c}{S_{\Psi_i}} \right) + \sum_{i=1}^K \omega \left(\frac{\Delta_i - \Delta_i^c}{S_{\Delta_i}} \right), \quad \begin{matrix} \Psi = \bar{\Psi} \pm \eta_{\Psi}, \\ \Delta = \bar{\Delta} \pm \eta_{\Delta}, \end{matrix} \quad (7)$$

где $\Psi, \bar{\Psi}, \Psi^c$ и $\Delta, \bar{\Delta}, \Delta^c$ — измеренные, точные и вычисленные согласно (6) значения эллипсометрических измерений, соответствующие заданным значениям a_1, a_2, \dots, a_M искомых параметров; η_{Ψ} и η_{Δ} — погрешности измерений; S_{Ψ_i} и S_{Δ_i} — масштабирующие коэффициенты, зависящие от дисперсий погрешности измерения. Функция $\omega(z)$ является неотрицательной, и $\omega(0) = 0$. Приняв $\omega(z) = z^2$, приходим к методу наименьших квадратов [4]. Для удобства дальнейшего изложения обозначим:

$$x_i = \Psi_i, \quad x_{i+K} = \Delta_i, \quad 1 \leq i \leq K,$$

$$S_i = S_{\Psi_i}, \quad S_{i+K} = S_{\Delta_i},$$

и тогда функционал (7) можно представить в виде

$$\Phi(a_1, \dots, a_M) = \sum_{i=1}^N \omega \left(\frac{x_i - x_i^c}{S_i} \right), \quad (8)$$

где $N = 2K$ и K — число пар измеренных поляризационных углов. Необходимые условия минимума функционала (8) имеют вид:

$$\partial\Phi/\partial a_1 = 0; \partial\Phi/\partial a_2 = 0; \dots \partial\Phi/\partial a_M = 0.$$

Из этих условий следует система из M неявных уравнений относительно $N + M$ переменных:

$$\begin{aligned} F_1(x_1, \dots, x_N, a_1, a_2, \dots, a_M) &= 0, \\ F_2(x_1, \dots, x_N, a_1, a_2, \dots, a_M) &= 0, \\ &\dots \\ F_M(x_1, \dots, x_N, a_1, a_2, \dots, a_M) &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Необходимо определить из этой системы M искомым параметров a_1, \dots, a_M .

Предположим, что выполняются следующие условия [5, с. 455]:

1) все функции F_1, \dots, F_M определены и непрерывны в $(N + M)$ -мерном объеме пространства (симплексе)

$$\begin{aligned} D = [x_1^* - \xi_1, x_1^* + \xi_1; x_2^* - \xi_2, x_2^* + \xi_2; \dots x_N^* - \xi_N, x_N^* + \xi_N; \\ a_1^* - \eta_1, a_1^* + \eta_1; a_2^* - \eta_2, a_2^* + \eta_2; \dots a_M^* - \eta_M, a_M^* + \eta_M] \end{aligned}$$

с центром в точке $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_N^*, a_1^*, a_2^*, \dots, a_M^*)$;

2) точка (x_1^*, \dots, a_M^*) удовлетворяет системе (9);

3) существуют и непрерывны в D частные производные от F_1, \dots, F_M по всем аргументам;

4) якобиан

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial a_1} & \frac{\partial F_1}{\partial a_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial a_M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_M}{\partial a_1} & \frac{\partial F_M}{\partial a_2} & \dots & \frac{\partial F_M}{\partial a_M} \end{vmatrix} \quad (10)$$

в точке (x_1^*, \dots, a_M^*) отличен от нуля. Тогда:

а) в точке (x_1^*, \dots, a_M^*) существуют однозначные функции

$$\begin{aligned} a_1 &= a_1(x_1, \dots, x_N), \\ &\dots \\ a_M &= a_M(x_1, \dots, x_N); \end{aligned} \quad (11)$$

б) эти функции непрерывны и имеют непрерывные частные производные по всем аргументам.

Таким образом, существует непрерывный нелинейный оператор, отображающий пространство эллипсометрических измерений в M -мерное пространство искомым параметров, и малым погрешностям исходных поляризационных углов соответствуют малые погрешности решений (из-за непрерывности частных производных). Однако это все имеет место, если якобиан (10) отличен от нуля.

Якобиан (10) является определителем матрицы Гессе H [4] размером $M \times M$. Элементы этой матрицы определяются как $h_{ij} = \partial^2\Phi/\partial a_i \partial a_j$ и зависят от вида функции $\omega(z)$, входящей в функционал (8). Если обозначить

$x_i^c = x_i(a_1, a_2, \dots, a_M)$, где $1 \ll i \ll N$, то для $\omega(z) = z^2$ элементы матрицы H имеют вид

$$h_{kl} = 2 \sum_{i=1}^N \frac{\partial x_i^c}{\partial a_k} \frac{\partial x_i^c}{\partial a_l} - 2 \sum_{i=1}^N (x_i - x_i^c) \frac{\partial^2 x_i^c}{\partial a_k \partial a_l}$$

и зависят от вектора искомых параметров. Матрица H входит в разложение, которое описывает поведение функционала $\Phi(a)$ в окрестности точки a^* :

$$\Phi(a) = \Phi(a^*) + \nabla\Phi(a^*)(a - a^*) + (a - a^*)^T H(a^*)(a - a^*)/2 + 0(\|a - a^*\|^2), \quad (12)$$

где $\nabla\Phi(a^*)$ — градиент функционала $\Phi(a)$, $0(\|z\|^2)$ — бесконечно малая (по сравнению с $\|z\|^2$) величина.

Непосредственным следствием соотношений (11), (12) является следующее утверждение: если в точке $a^* = |a_1, \dots, a_M|$ градиент $\nabla\Phi(a^*) = 0$ и матрица Гессе H положительно определена, то обратная задача эллипсометрии в окрестности точки a^* имеет единственное решение, непрерывно зависящее от измеренных поляризационных углов $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_K, \Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_K$. Другими словами, решение ОЗЭ при этих условиях устойчиво относительно погрешностей η_Ψ, η_Δ регистрации соответствующих углов.

Следовательно, проверка вышеприведенного условия в численных алгоритмах минимизации функционала (8) дает ответ об устойчивости построенного решения ОЗЭ.

Независимость решений ОЗЭ. Заметим, что матрица H может быть положительно определенной и при $N = 2$ (т. е. $K = 1$). Возникает вопрос о выборе числа измерений при решении ОЗЭ. Дадим ответ на этот вопрос, исходя из независимости искомых параметров a_j .

Будем считать, что параметр a_j зависит от остальных параметров, если его можно определить однозначно функциональной зависимостью:

$$a_j = f_j(a_1, a_2, \dots, a_{j-1}, a_{j+1}, \dots, a_M). \quad (13)$$

Введем матрицу Якоби с элементами

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial a_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial a_1}{\partial x_N} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial a_M}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial a_M}{\partial x_N} \end{vmatrix} \quad (14)$$

размером $M \times N$. Считают, что ранг матрицы (14) равен $\mu \geq 1$, если существует хотя бы один определитель μ -го порядка этой матрицы, не равный тождественно нулю в области D , в то время как все определители порядка выше μ равны нулю.

Имеет место следующее утверждение [5, с. 478]: пусть ранг матрицы (14) в точке $x_0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)$ равен $\mu \geq 1$. Тогда в некоторой окрестности этой точки μ параметров будут независимы (именно те, производные которых входят в определитель), а остальные могут быть выражены соотношениями типа (13).

Следовательно, необходимым условием независимости всех M искомых параметров при решении ОЗЭ является соотношение

$$M \leq 2K. \quad (15)$$

Проверка достаточного условия независимости связана с определенными трудностями, и на практике более предпочтительным критерием выбора числа эллипсометрических измерений является точность решения ОЗЭ.

При решении ОЗЭ возможны два следующих подхода:

1. Минимизация функционала (7) при априорных ограничениях

$$a_{j \min} \leq a_j \leq a_{j \max} \quad (16)$$

с использованием всех K измерений.

2. Для каждой j -пары эллипсометрических измерений $\{\Psi_j, \Delta_j\}$ нахождение вектора оценки $a^{(j)}$ на основе минимизации функционала

$$\Phi_j(a) = \omega \left(\frac{\Psi_j - \Psi_j^c}{S_{\Psi_j}} \right) + \omega \left(\frac{\Delta_j - \Delta_j^c}{S_{\Delta_j}} \right) \quad (17)$$

при ограничениях (16). Полученные таким образом K векторов $a^{(j)}$ для вычисления результирующей оценки a^+ подвергаются обработке:

$$a^+ = \sum_{j=1}^K a^{(j)} p_j / \sum_{j=1}^K p_j,$$

где p_j — весовой множитель. Если $p_j = 1$, то приходим к арифметическому среднему. В качестве весовых множителей можно принять

$$p_j = 1/\Phi(a^{(j)}),$$

что соответствует оценке метода Монте-Карло. Очевидно, что преимуществом второго подхода является возможность обработки эллипсометрических измерений по мере их поступления. Однако определяющим фактором является точность решения ОЗЭ.

В качестве примера использования двух подходов рассмотрим результаты следующего численного эксперимента: необходимо определить четыре параметра n_1, n_2, d_1, d_2 для двухслойной пленочной системы по двум группам измерений, содержащим по одному и шести измерениям. Подобная задача является «очень плохо обусловленной» [2]. Для корректности сравнения результатов решения сначала был создан файл, содержащий шесть пар эллипсометрических углов $\{\bar{\Psi}_j, \bar{\Delta}_j\}, j = 1, 2, \dots, 6$, соответствующих шести различным углам падения φ_0 (50; 52,5; 55; 57,5; 60; 62,5°) и «точным» значениям параметров ($d_1 = 300 \text{ \AA}, d_2 = 400 \text{ \AA}, n_1 = 1,46$ и $n_2 = 1,99$). Исходными данными для ОЗЭ явились углы $\{\Psi_j, \Delta_j\}$, полученные аддитивным искажением «точных» углов $\{\bar{\Psi}_j, \bar{\Delta}_j\}$ псевдослучайным шумом с относительным уровнем 0,1 %.

В рамках первого подхода вектор $a = |d_1, d_2, n_1, n_2|^T$ вычислялся на основе минимизации функционала (7) при $K = 6$ и ограничениях

$$\begin{aligned} 200 \text{ \AA} \leq d_1 \leq 400 \text{ \AA}, & \quad 1,4 \leq n_1 \leq 1,5, \\ 300 \text{ \AA} \leq d_2 \leq 500 \text{ \AA}, & \quad 1,9 \leq n_2 \leq 2,1. \end{aligned} \quad (18)$$

В соответствии со вторым подходом векторы $a^{(j)}, j = 1, 2, \dots, 6$, найденные из условия минимума (17) при ограничениях (18), усреднялись с весами $p_j = 1$. Как в том, так и в другом случае точки минимума функционала определялись усреднением по пяти начальным точкам $a^{(0)}$ минимизирующих пос-

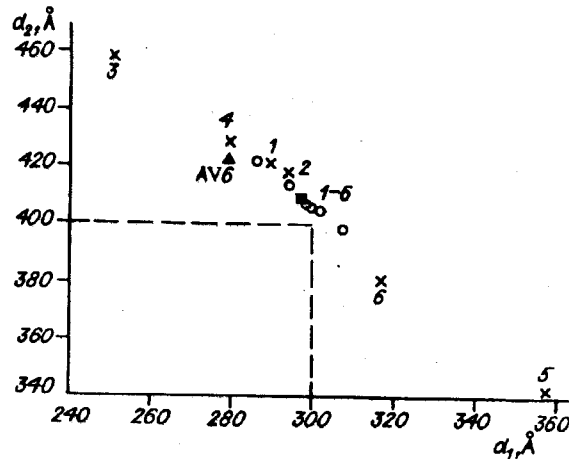


Рис. 1. Иллюстрация на плоскости d_1-d_2 решений одновременного оценивания четырех параметров d_1, d_2, n_1, n_2 с различным количеством исходных измерений: темный треугольник (AV6) — с шестью измерениями, крестики — с одним измерением, темный квадрат (1-6) — усреднение шести векторов $a^{(j)}$, кружки — усреднение по пяти из шести векторов $a^{(j)}$, точное решение $d_1 = 300 \text{ \AA}$, $d_2 = 400 \text{ \AA}$

ледовательностей (подробнее см. [1, 2]). Полученные решения ОЗЭ представлены на рис. 1, 2.

Анализ результатов позволяет сделать следующие выводы.

1. Оценивание нескольких параметров по одной паре эллипсометрических измерений приводит к большим погрешностям решения. Использование операции усреднения по K решениям уменьшает разброс оценок, но при этом возникает необходимость решать K задач условной минимизации, что существенно увеличивает затраты машинного времени. Более предпочтительным оказывается первый подход, основанный на условной минимизации функционала (7) с использованием всех имеющихся эллипсометрических измерений.
2. Оценки разных параметров имеют разную степень достоверности (разную степень разброса относительно точных значений на рис. 1, 2), что численно характеризуется их обусловленностью [1, 2], т. е. степенью влияния

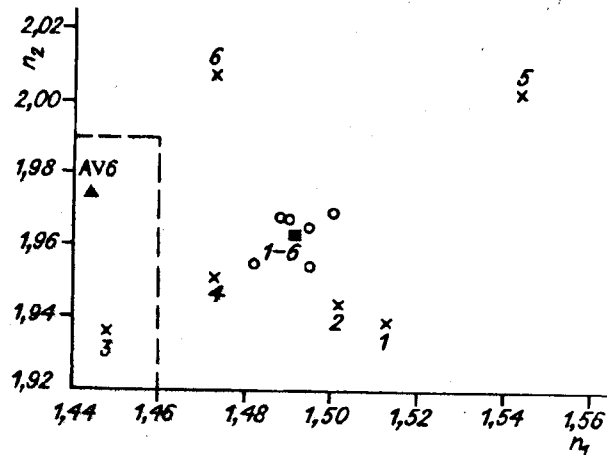


Рис. 2. Иллюстрация на плоскости n_1-n_2 решений той же самой задачи (одновременного поиска четырех параметров d_1, d_2, n_1, n_2) с различным количеством исходных измерений: темный треугольник (AV6) — с шестью измерениями, крестики — с одним измерением, темный квадрат (1-6) — усреднение шести векторов $a^{(j)}$, кружки — усреднение по пяти из шести векторов $a^{(j)}$, точное решение $n_1 = 1,46$, $n_2 = 1,99$

проекции a_j на величину минимизируемого функционала $\Phi(\mathbf{a})$. Так как матрица Гессе, входящая в разложение (12), зависит от углов падения φ и числа измерений, то выбор наилучшей схемы измерений (с точки зрения точности решения ОЗЭ) можно осуществить на основе математического планирования эксперимента. Такой подход представляется перспективным для повышения точности решения ОЗЭ и уменьшения затрат на проведение эллипсометрических измерений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Azzam R. M. A., Bashara N. M. Ellipsometry and Polarized Light. — Amsterdam: North-Holland, 1977.
2. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Ч. I // Автометрия. — 1992. — № 4.
3. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Ч. II // Там же.
4. Бард Е. Нелинейное оценивание параметров. — М.: Статистика, 1979.
5. Фихтенгольц Г. М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. — М.: Наука, 1966. — Т. 1.

Поступила в редакцию 24 декабря 1993 г.