РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АВТОМЕТРИЯ

№ 1 1997

УДК 535.5 : 518.1

В. В. Бобро, А. С. Мардежов, А. И. Семененко

(Новосибирск, Россия — Сумы, Украина)

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ СВЕРХТОНКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛЕНОК

Работа посвящена привлечению методов решения некорректных математических задач к исследованию поверхностных структур на основе многоугловых измерений. Проведен большой численный эксперимент и обработаны экспериментальные данные, относящиеся к сверхтонким поверхностным пленкам, параметры которых особенно чувствительны к ошибкам измерения поляризационных углов. Сделан вывод о возможности успешного использования метода регуляризации в эллипсометрии. Полученные результаты позволяют перейти к определению всех параметров прозрачных пленок в многослойной системе на основе многоугловых измерений. Созданную программу нетрудно переделать для решения данной задачи.

Решение обратной задачи эллипсометрии для случая большого числа неизвестных параметров исследуемых структур приобретает особую актуальность в связи со значительным интересом к спектральным эллипсометрическим измерениям. Но и классический подход к исследованию многослойных поверхностных структур, связанный с проведением многоугловых измерений, может получить существенное развитие в связи с привлечением методов решения некорректных математических задач, к числу которых относится и обратная задача эллипсометрии.

Для реализации нового подхода выбрана очень простая в физическом плане модель отражающей системы подложка — прозрачная пленка с двумя неизвестными параметрами пленки n и d, которые очень просто определить по измерениям на одном угле падения. В этом случае из-за экспериментальных ошибок в измерении поляризационных углов Ψ и Δ для тонких и сверхтонких поверхностных пленок (например, для естественных окисных пленок на кремнии) наблюдается большой разброс n и d. Как показал численный эксперимент, для пленки двуокиси кремния на кремнии с параметрами $n = 1{,}46$ и $d = 10$ нм случайные ошибки измерения углов Ψ и Δ, ограниченные интервалом $0 \div 10'$, приводят к разбросу значений n и d, определяемому соответственно интервалами $1{,}1 \div 2{,}2$ и $6 \div 25$ нм. Такие ошибки совершенно недопустимы, и это как раз тот случай, когда использование методов решения некорректных математических задач может существенно улучшить ситуацию. Для этого задача должна быть многомерной. С этой целью рассмотрим достаточно большой набор углов падения, приписав каждому углу φ_{0i} из данного набора пару (n_i, d_i). Вследствие экспериментальных ошибок эти пары различаются между собой.

Регуляризирующий функционал S для некорректной задачи представляет собой сумму функционала невязки и стабилизирующего функционала с неизвестным параметром α [1]:

$$S = S_0 + \alpha R. \tag{1}$$

Функционал невязки S_0 определяется стандартным выражением

$$S_0 = \frac{1}{2N_\varphi} \sum_{i=1}^{N_\varphi} \left[(\Delta_i^{(t)} - \Delta_i^{(e)})^2 + (\Psi_i^{(t)} - \Psi_i^{(e)})^2 \right], \qquad (2)$$

где суммирование осуществляется по набору углов падения; $\Delta_i^{(t)}, \Psi_i^{(t)}$ и $\Delta_i^{(e)}, \Psi_i^{(e)}$ — теоретические и экспериментальные значения поляризационных углов для i-го угла падения.

Стабилизирующий функционал R представляет собой квадрат нормы вектора

$$R = |x - x_0|^2, \qquad (3)$$

где x — точка из $2N_\varphi$-мерного пространства с координатами $d_1, n_1, ..., d_{N_\varphi}, n_{N_\varphi}$; x_0 — начальная точка.

Стабилизирующий функционал R за счет изменения α позволяет постепенно приближаться к абсолютному минимуму S_0, при этом для каждого α из набора уменьшающихся значений находится своя точка, координатами которой являются неизвестные параметры (все пары (n_i, d_i)). Существующие методы в принципе дают возможность оценить то значение α, которому отвечает наиболее близкая к реальной точка (оптимальная точка) [1].

Выбранная модель наиболее удобна для реализации такого подхода. Основное преимущество ее состоит в том, что абсолютный минимум функционала невязки равен нулю, что позволяет легко контролировать приближение к этому минимуму, избегая локальных ловушек путем подбора и совершенствования метода оптимизации.

Численный эксперимент показал, что оптимальная точка, действительно, существует. У реальной (истинной) точки все n_i и d_i одинаковы, т. е. среднеквадратичный разброс показателей преломления и толщин равен нулю. Оптимальная точка по всем координатам максимально приближается к реальной, что определяется очень малым среднеквадратичным разбросом n и d. В то же время точка абсолютного минимума по среднеквадратичному разбросу гораздо дальше отстоит от реальной. Различаются они и по средним значениям n и d. Оптимальная точка в этом смысле также существенно ближе к реальной.

На основе комплексного метода Бокса [2] (модифицированного метода Нелдера — Мида [3]) для указанной модели разработана математическая программа, позволившая провести большой численный эксперимент, обработать экспериментальные данные и сделать важные выводы для дальнейшего. Численный эксперимент проведен для однослойной системы с параметрами пленки $n = 1{,}46$, $d = 5$ и 10 нм (постоянные подложки совпадают с постоянными кремния, угол падения изменяется от 50 до 70° через 5°). Для задания ошибок в поляризационных углах использован метод случайных чисел. Выяснилось, что при $d = 10$ нм ошибки в поляризационных углах, допускающие успешное применение метода регуляризации, достигают 10 мин. При таких ошибках отклонения параметров n и d, определенных в оптимальной точке, от их истинных значений не превосходят 0,02 и 1 нм. При $d = 5$ нм область приемлемых ошибок сужается до 5 мин, но и это существенно для данной толщины, так как при обычном подходе (при использовании одного угла падения) ошибка даже в одну минуту очень сильно искажает параметры пленки. Можно говорить о сглаживании результатов и при больших ошибках, если использовать более широкий набор углов падения. Усредненные значения n и d, отвечающие точке абсолютного минимума, также представляют собой улучшенные результаты, однако в гораздо меньшей степени, чем при использовании оптимальной точки.

Рассмотренная методика была применена для исследования пяти образцов, представляющих собой сверхтонкие пленки двуокиси кремния на кремнии. Поляризационные углы Ψ и Δ, измеренные для каждого образца на пяти углах падения (от 50 до 70° через 5°), представлены в таблице.

Номер образца		$\varphi_0 = 50°$	$\varphi_0 = 55°$	$\varphi_0 = 60°$	$\varphi_0 = 65°$	$\varphi_0 = 70°$
1	Ψ	31°28′	27°50′	23°18′	17°42′	10°32′
	Δ	178°55′	178°33′	177°58′	177°02′	174°33,5′
2	Ψ	31°31,5′	27°52′	23°23′	17°48′	10°37′
	Δ	178°17′	177°52′	177°02′	175°38′	172°03′
3	Ψ	31°31′	27°52′	23°24′	17°48′	10°37′
	Δ	177°56′	177°18′	176°16′	174°20′	169°41′
4	Ψ	31°29′	27°52′	23°22′	17°46′	10°46′
	Δ	176°56′	175°28′	174°00′	171°04′	163°38′
5	Ψ	31°28′	28°00′	23°46′	18°41′	12°50′
	Δ	170°31′	167°20′	162°20′	154°26′	136°31′

Для всех пяти образцов получены следующие результаты (нм): 1) $n = 1{,}454$, $d = 1{,}67$; 2) $n = 1{,}459$, $d = 2{,}57$; 3) $n = 1{,}448$, $d = 3{,}49$; 4) $n = 1{,}451$, $d = 5{,}75$; 5) $n = 1{,}447$, $d = 17{,}2$.

Из приведенных результатов видно, что разработанная на основе метода регуляризации программа имеет определенное практическое значение для нахождения параметров пленки. Стоит отметить, что возможность успешного использования метода регуляризации никак не снимает проблему повышения точности экспериментальных измерений. Более того, для успешного использования данного метода необходимо хорошо знать характер ошибок, возникающих в эксперименте. В любом случае должна быть уверенность, что экспериментальные ошибки входят в область допустимых с точки зрения применимости метода регуляризации ошибок. Отсюда следует также необходимость тщательного описания возможностей метода для различных интервалов значений параметров пленки.

Использованный в работе комплексный метод Бокса неплохо показал себя для десяти переменных, но при большем их числе возникают определенные затруднения. В дальнейшем будет сделана попытка привлечь и другие методы оптимизации. Таким образом, методы решения некорректных математических задач довольно перспективны для применения в эллипсометрии. Класс эллипсометрических задач, которые можно успешно решать методом регуляризации, весьма широк. Полученные результаты позволяют легко перейти к определению всех параметров прозрачных пленок в многослойной системе на основе многоугловых измерений. Созданную программу нетрудно переделать для решения данной задачи. И все же наибольший практический интерес в настоящее время представляет задача по определению всех параметров однослойной модели, включая параметры подложки. Работа по привлечению методов решения некорректных математических задач будет продолжена.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.** Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
2. **Box M. J.** A new method of constrained optimisation and a comparison with other methods // Comp. Journ. 1965. 8. P. 42.
3. **Nelder J. A., Mead R.** A simplex method for function minimisation // Comp. Journ. 1965. 7. P. 308.

Поступила в редакцию 10 ноября 1996 г.