РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АВТОМЕТРИЯ

№ 1 1997

УДК 535.51 : 541.1

М. И. Абаев

(Санкт-Петербург)

СПОСОБ БЫСТРОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ ПРОЗРАЧНОГО ОДНОРОДНОГО СЛОЯ

Предлагается способ ускоренного решения обратной задачи эллипсометрии для прозрачного слоя, позволяющий экономить машинное время в 5—8 раз. Способ может быть полезен при контроле технологических процессов в режиме реального времени, при решении задачи об определении оптических констант подложки и т. п.

Определение показателя преломления n_1 и толщины d прозрачного слоя при известных оптических константах подложки N_0 — классическая задача эллипсометрии.

Наиболее эффективно она решается разделением переменных n_1 и d, впервые предложенным Холмсом [1]. В его основе лежит уравнение Мак-Кракена [2], которое на языке адмиттансов имеет вид, представленный в [3, с. 17]; если обозначить $x = i\mathrm{tg}\delta$, где δ — фазовая толщина слоя $2\pi\lambda^{-1}du_{1s}$, то

$$ax^2 + bx + c = 0, \tag{1}$$

где

$$\begin{aligned} a &= (N_0^2 N_2^2 - N_1^4)(\rho + 1) + (u_{0s}u_{1p}^2 u_{2s} - u_{0p}u_{1s}^2 u_{2p})(\rho - 1); \\ b &= (N_2^2 - N_1^2)(u_{0p}u_{1s} + u_{0s}u_{1p})(\rho + 1) + (N_0^2 + N_1^2)(u_{1p}u_{2s} - u_{1s}u_{2p})(\rho - 1); \\ c &= N_1^2 [(N_2^2 - N_0^2)(\rho + 1) + (u_{0p}u_{2s} - u_{0s}u_{2p})(\rho - 1)]; \\ x &= \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}; \end{aligned} \tag{2}$$

$\rho = \mathrm{tg}\Psi e^{i\Delta}$ — измеряемый на эллипсометре относительный коэффициент отражения;

$$u_{jp} = \frac{N_j^2}{\sqrt{N_j^2 - N_2^2 \sin^2\varphi_2}}, \qquad u_{js} = \sqrt{N_j^2 - N_2^2 \sin^2\varphi_2}$$

— характеристические адмиттансы соответствующих сред.

Поскольку предполагается, что n_1 — вещественная величина, то x — величина чисто мнимая, т. е. $\mathrm{Re}x$ должна быть равна нулю.

Таким образом, уравнение (2) можно рассматривать как нелинейное уравнение относительно только одной из неизвестных величин — n_1. Другая искомая величина d просто вычисляется по формуле

$$d = \frac{\lambda \operatorname{arctg}(-ix)}{2\pi u_{1s}}. \tag{3}$$

Для решения задачи (определения n_1 и d) в такой постановке необходимо решить только уравнение (2), корнем которого является одна из определяемых величин n_1, другая (d) вычисляется по простой формуле (3).

При этом возникает вопрос об однозначности решения, связанный с наличием двух знаков в выражении (2). Эта проблема решается просто: выбирается тот корень, который дает меньшее значение для $|\mathrm{Re}\,x|$.

Вместо такого подхода, составляющего суть метода Холмса, можно решать задачу на уровне соотношений (1), исходя из условия, что x есть чисто мнимая величина.

Запишем новое уравнение, комплексно-сопряженное с уравнением (1):

$$a^*(x^*)^2 + b^*x^* + c^* = 0. \tag{4}$$

Учитывая, что $\mathrm{Re}\,x = 0$, имеем $x^* = -x$; это означает:

$$a^*x^2 - b^*x + c^* = 0. \tag{5}$$

Хотя бы одно решение уравнений (1) и (5) должно совпадать. Это означает, что результант этих двух уравнений должен обращаться в нуль [4]. Этот результант, хотя и выражается через комплексные величины a, b и c, естественно, состоит только из вещественных величин $\mathrm{Re}\,a$, $\mathrm{Im}\,a$, $\mathrm{Re}\,b$, $\mathrm{Im}\,b$, $\mathrm{Re}\,c$ и $\mathrm{Im}\,c$. Он имеет вид

$$\begin{aligned} R = \alpha_1\left[\gamma_1(\alpha_2\gamma_2 + \beta_1^2) + \gamma_2(\beta_1\beta_2 - \alpha_1\gamma_2)\right] + \\ + \alpha_2\left[\gamma_1(\beta_1\beta_2 - \alpha_2\gamma_1) + \gamma_2(\alpha_1\gamma_1 + \beta_2^2)\right] = 0, \end{aligned} \tag{6}$$

где $a = \alpha_1 + i\alpha_2$, $b = \beta_1 + i\beta_2$, $c = \gamma_1 + i\gamma_2$.

Результант R, так же как величина $\mathrm{Re}\,x$, должен обращаться в нуль при истинных значениях своего аргумента n_1.

Анализ модельных расчетов на различных системах показывает, что в зависимости от значения n_1 функция $\mathrm{Re}\,x$ обращается в нуль трижды: при $n_1 = (1{,}0 \div 1{,}2)$; $n_1 = n_{1\text{ист}}$ и $n_1 \simeq 3{,}0$.

Левые и правые значения являются, как показывает анализ прямой задачи, ложными решениями, возникающими, по-видимому, из-за ограничения только одной из компонент комплексной величины x: $\mathrm{Re}\,x = 0$.

Кроме того, поведение функции R резко отличается от $\mathrm{Re}\,x$. Функция R обращается в нуль дважды: касаясь оси абсцисс при $n_1 = n_2$ (при значении коэффициента преломления внешней среды, что может быть использовано для его численного определения) или пересекая ось абсцисс при истинном значении n_1, затем функция R асимптотически приближается к нулю.

Вблизи истинного значения n_1 функция R по абсолютному значению вначале резко падает, затем медленно возрастает, что позволяет провести аппроксимацию ее поведения в этой области гиперболой.

Таким образом, новый подход к решению обратной задачи эллипсометрии для прозрачного слоя состоит в следующем: как только задается численное значение коэффициента преломления слоя n_1, производится вычисление коэффициентов квадратного уравнения (1), а затем и результанта R (6). Далее с неким шагом начинается движение вдоль оси n_1 до тех пор, пока величина R не поменяет знак. Это означает, что в области последнего шага находится искомый корень переменной n_1.

Затем производится гиперболическая интерполяция для определения ее уточненного значения. Если обозначить значения функции R и ее аргумента соответственно на левой R_1, n_{11} и правой R_2, n_{12} границах этого промежутка, то уточненное значение $\widetilde{n}_1$ можно вычислить по простой формуле:

$$\widetilde{n}_1 = \frac{n_{11}n_{12}(R_1 - R_2)}{R_1 n_{11} - R_2 n_{12}}. \tag{7}$$

Естественно, что если двигаться вдоль оси n_1 с большим шагом, то можно быстро обнаружить промежуток, содержащий решение, но потребуется многократное вычисление функции R для установления истинного значения корня n_1 с заданной точностью, используя гиперболическую интерполяцию (7). Если же двигаться с малым шагом, ситуация становится обратной — медленное движение к промежутку, содержащему корень, но быстрое уточнение его значения.

Исходя из таких соображений был проведен в модельном расчете смешанный вариант: от заданного слева начального значения n_1 движение осуществляется с большим шагом $\delta_1 n_1$. После определения промежутка, содержащего корень, начиная с его левой границы, вновь осуществляется пошаговый поиск с малым шагом $\delta_2 n_1$. И только после определения искомого промежутка с таким малым шагом начинается процедура гиперболической интерполяции до достижения заданной точности в значении n_1.

Многочисленные расчеты на моделях, близких к реальным, позволили выработать рекомендации для практического варианта предлагаемой вычислительной процедуры:

1. Если значение n_1 неизвестно, то вычислительный процесс следует начинать с начального значения $n_1 = 1{,}15$. Случаи такого малого значения показателя преломления имеют место или из-за сильного влияния экспериментальных ошибок в Δ и Ψ для очень тонких слоев, или тогда, когда слой является сильно неоднородным, не говоря уже о наличии в нем поглощения.

2. Если значение n_1 известно предположительно с некоторой неопределенностью, начальное значение n_1 следует задавать, отступив влево от предположительного на величину двух-трех мер неопределенности.

3. Наиболее эффективными значениями шагов для большинства практических случаев оказались $\delta_1 n_1 = 0{,}1$, $\delta_2 n_1 = 0{,}01$. При этом количество вычислений функции R до начала гиперболической интерполяции и после ее проведения до точности 10^{-6} примерно равно.

4. В процедуре гиперболической интерполяции проверяется длина трех промежутков: а) от левой границы до $\widetilde{n}_1$; б) от правой границы до $\widetilde{n}_1$; в) от предыдущего значения $\widetilde{n}_1$ до нового. Если любой из этих промежутков становится меньше заданного значения (в разработанной программе это 10^{-6}), вычислительный процесс определения n_1 останавливается и вычисляется толщина слоя

$$d = \frac{\lambda \operatorname{arctg} \operatorname{Im} x}{2\pi u_{1s}}$$

и период толщины $d_0 = \lambda / 2u_{1s}$.

Сравнение двух способов решения поставленной задачи на различных моделях показало, что предлагаемый вариант решения требует затрат машинного времени в 5—8 раз меньше, чем его прототип. Это объясняется тем, что достаточно вычислить только коэффициенты уравнения (1), не решая его; для реализации заданной точности определения n_1 используется двухшаговый поиск и высокоэффективная процедура гиперболической интерполяции.

Предложен новый подход решения обратной задачи эллипсометрии для нахождения показателя преломления и толщины прозрачного слоя на известной подложке и даны рекомендации для его практической реализации. Величина абсолютного значения функции R при $n_1 = n_2$ может служить независимым критерием для оценки применимости рассматриваемой модели к реальной отражающей системе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Holmes D. A.** On the calculation of thin films refractive index and thickness by ellipsometry // Appl. Opt. 1967. **6**, N 1. P. 168.
2. **McCrakin F. L.** Measurement of the thickness and refractive indexes of the very thin films and the optical properties of surfaces by ellipsometry // J. Res. NBS. 1964. P. 242.
3. **Пшеницын В. И., Абаев М. И., Лызлов Н. Ю.** Эллипсометрия в физико-химических исследованиях. Л.: Химия, 1986.
4. **Курош А. Г.** Курс высшей алгебры. М., 1968.

Поступила в редакцию 26 ноября 1996 г.