РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АВТОМЕТРИЯ

№ 1 1998

УДК 535.5 : 518.1

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

(Сумы, Украина — Новосибирск, Россия)

О НЕКОТОРЫХ КРИТЕРИЯХ ВЫБОРА ОПТИМАЛЬНОЙ ТОЧКИ ПРИ РЕШЕНИИ НЕКОРРЕКТНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

Проводится анализ некорректной обратной задачи эллипсометрии. Описаны проявления некорректности обратной задачи при исследовании сверхтонких поверхностных пленок. Особое внимание уделено критериям выбора оптимальной точки. Показано, что очевидный и часто используемый критерий, связанный с условием на функционал невязки $S_0 \leq \delta^2$, где δ — средняя ошибка в измерении поляризационных углов, для рассматриваемой модели в области некорректности практически не пригоден. В связи с этим предложены новые критерии выбора оптимальной точки. В результате получено устойчивое решение обратной задачи эллипсометрии, что позволяет успешно исследовать поверхностные пленки толщиной от 2 до 10 нм.

Классический подход к исследованию многослойных поверхностных структур, связанный с проведением многоугловых измерений, несмотря на его очевидные недостатки, может получить существенное развитие в связи с привлечением методов решения некорректных математических задач, к числу которых относится и обратная задача эллипсометрии.

Некорректность обратной задачи эллипсометрии проявляется прежде всего при исследовании сверхтонких (менее 10 нм) поверхностных пленок. Решения для параметров таких пленок исключительно неустойчивы относительно экспериментальных ошибок поляризационных углов Ψ и Δ. Даже небольшие ошибки (порядка 1 мин) в измерении этих углов при обычном подходе к решению обратной задачи приводят к совершенно нереальным значениям параметров пленки.

Это хорошо видно из номограммы для системы подложка—прозрачная однородная пленка, построенной на координатной плоскости (Ψ, Δ). Каждому циклу номограммы отвечает конкретное значение показателя преломления пленки, толщина же пленки изменяется вдоль цикла. Для определенности рассмотрим номограмму для случая, когда подложкой является кремний (см., например, [1]). Циклы номограммы сходятся в начальной точке O, и их расположение относительно осей Ψ и Δ таково, что наблюдается сверхчувствительность показателя преломления пленки n относительно очень слабого изменения поляризационного угла Ψ. Если экспериментальная ошибка уменьшает Ψ (сдвиг влево на номограмме), то это резко увеличивает значение n. Например, для сверхтонкой пленки SiO_2 показатель преломления может достигать совершенно нереального значения (~3,2 и даже больше), в то время как толщина d относительно стабильна. Если экспериментальная ошибка сдвигает Ψ в сторону больших значений (вправо на номограмме), то в этом случае ситуация более сложная. Показатель преломления по-прежнему резко изменяется, но к значению $n = 1$, достигая также совершенно нереальной величины (~1,01). Что касается толщины пленки, то ее поведение определяется следующим обстоятельством. Для прозрачной пленки наблюдается периодичность циклов по толщине с величиной периода [1]

$$d_0 = \frac{\lambda}{2\sqrt{n^2 - n_0^2 \sin^2 \varphi_0}}, \tag{1}$$

где λ — длина световой волны; n_0 — показатель преломления внешней среды; φ_0 — угол падения светового пучка.

При $n \to 1$ изменение периода d_0 не носит принципиального характера, но сам цикл в этом случае в пределе стягивается к начальной точке O, т. е. при $n \to 1$ интервал толщин $(0, d_0)$ распределяется по циклу с возрастающей плотностью. Иначе говоря, линии равной толщины на номограмме, отвечающие значениям $d = 5, 10, 15, 20, 25$ нм и более, в местах их пересечения с циклами, которым соответствуют n, близкие к единице, приближаются к начальной точке O. Это означает, что при сдвиге Ψ вправо не только показатель преломления $n \to 1$, но и толщина d сверхтонкой пленки ($d < 5$ нм) увеличивается во много раз, достигая значений 20—30 нм.

Таким образом, пытаясь определить параметры d и n сверхтонкой прозрачной пленки с использованием классического подхода, мы попадаем в область абсолютной нефизичности. Это и есть проявление истинной некорректности. Возможна также ситуация, когда задача по определению двух параметров на одном угле падения, несмотря на полную определенность математической проблемы (число неизвестных равно числу уравнений), вследствие экспериментальных ошибок не имеет решения. Это тоже проявление истинной некорректности.

Использование многоугловых измерений, когда число уравнений значительно превышает число неизвестных параметров, практически само по себе не приводит к уходу от некорректности. Здесь сказывается еще и фактор плохой обусловленности системы основных уравнений эллипсометрии, отвечающих набору углов падения светового пучка.

К некорректности для сверхтонких пленок может приводить и неточный выбор модели отражающей системы, проявляющийся в неточном задании известных параметров подложки (n_g, k_g) и в пренебрежении даже очень тонким (порядка 0,1 нм) переходным слоем на границе подложка—пленка. В этом случае экспериментальная точка (Ψ, Δ) заметно сдвигается (влево или вправо) относительно начальной части номограммы.

Используя методы решения некорректных задач (методы регуляризации), можно существенно расширить рамки устойчивых моделей. Регуляризирующий функционал S для некорректной задачи представляет собой сумму функционала невязки и стабилизирующего функционала с неизвестным параметром α [2]:

$$S = S_0 + \alpha R. \tag{2}$$

Функционал невязки S_0 определяется стандартным выражением

$$S_0 = \frac{1}{2N_\varphi} \sum_{i=1}^{N_\varphi} \left[(\Delta_i^{(t)} - \Delta_i^{(e)})^2 + (\Psi_i^{(t)} - \Psi_i^{(e)})^2 \right], \tag{3}$$

где суммирование идет 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. Зависимость от неизвестных параметров определяется теоретическими значениями Δ_i, Ψ_i.

Стабилизирующий функционал R представляет собой квадрат нормы вектора

$$R = |x - x_0|^2, \tag{4}$$

где x — точка из m-мерного пространства с координатами $x_1, x_2, ..., x_m$, совпадающими с неизвестными параметрами; 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. Существующие методы в принципе дают возможность оценить то значение α, которому отвечает наиболее близкая к реальной точка (оптимальная точка) [2].

Существенным моментом является то, что данная процедура минимизации функционала S_0, как нетрудно показать, равнозначна пошаговой минимизации S_0, осуществляемой обычными методами без привлечения регуляризирующей добавки R. Стабилизирующий функционал R важен на стадии доказательства существования оптимальной точки x_{opt}. Однако на стадии практической реализации подхода задача сводится к пошаговой минимизации функционала S_0 с остановкой на том шаге, которому отвечает оптимальная точка. Поэтому важнейшей проблемой при решении некорректных задач является выбор соответствующего критерия остановки [2]. Наиболее часто используется очевидный критерий

$$S_0 \le \delta^2, \tag{5}$$

где δ — средняя ошибка в измерении Ψ и Δ.

Кроме описанного выше вариационного (по А. Н. Тихонову) подхода, существует еще и статистический подход, использующий методы математической статистики и реализованный для обратной задачи эллипсометрии в [3]. Оба подхода в конечном итоге сводятся к пошаговой минимизации функционала S_0 и при использовании критерия остановки (5) приводят к одинаковым результатам.

Рассмотрим простейшую модель отражающей системы подложка—сверхтонкая однородная прозрачная пленка с неизвестными параметрами пленки d (толщина) и n (показатель преломления). Параметры d и n очень просто определяются по измерениям на одном угле падения, однако получаемые результаты для рассматриваемой области толщин ($d < 10$ нм) вследствие экспериментальных ошибок совершенно нереальны (находятся в области абсолютной нефизичности). Большой численный эксперимент и обработка данных реального эксперимента показали, что критерий остановки (5) для сверхтонких пленок (в области истинной некорректности), даже при использовании в одном функционале невязки (см. (3)) данных многоугловых измерений, переопределяющих задачу, практически не пригоден. В связи с этим возникает необходимость обоснования и использования новых критериев остановки. Для этого превратим задачу в многомерную (такой подход предложен в [4]). С этой целью рассмотрим достаточно большой набор углов падения, приписав каждому углу φ_{0i} из этого набора пару (n_i, d_i). Вследствие экспериментальных ошибок эти пары заметно различаются между собой. Соответственно в выражении для функционала невязки S_0 каждая пара теоретических значений поляризационных углов (Δ_i, Ψ_i) теперь зависит от (n_i, d_i). Размерность m многомерного пространства, образованного неизвестными параметрами (n_i, d_i), очевидно, составляет $m = 2N_\varphi$.

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

На основе комплексного метода Бокса [5] (модифицированного метода Нелдера — Мида [6]) для указанной модели разработана математическая программа, позволившая провести большой численный эксперимент, обработать экспериментальные данные и сделать важные выводы относительно выбранных критериев остановки. При этом существенно, что начальная точка $(d_1, n_1, d_2, n_2, ..., d_{N\varphi}, n_{N\varphi})$ выбирается в области основных ограничений по n и

d случайным образом. Для реализации процедуры пошаговой минимизации функционала S_0, проводимой без учета стабилизирующей добавки R, поиск минимума на первом этапе осуществляется в пределах сферы сравнительно небольшого радиуса с центром в начальной точке. Найденная точка промежуточного минимума $X_{\min}$ затем становится центром новой сферы и т. д. Радиус сферы в процессе приближения к точке абсолютного минимума регулируется. В пределах каждой сферы используется метод Бокса, причем точки комплекса Бокса задаются случайным образом, а их общее число m_0 определяется размерностью пространства и составляет $m_0 = 2m = 4N_\varphi$.

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.

Таким образом, в качестве критерия остановки в данном случае можно использовать минимальное значение среднеквадратичного разброса n и d. Испытывались и другие критерии остановки, связанные с минимальными значениями производных от среднеквадратичного разброса n и d и функционала S_0 по перемещению вдоль траектории спуска к точке абсолютного минимума функционала S_0. При этом само перемещение разбивается на две составляющие, по каждой из которых также находятся производные от указанных величин с целью определения их минимальных значений. Общее число рассмотренных критериев равно семи. В случае слабой некорректности, когда определенные классическим путем пары (d_i, n_i) довольно случайно группируются вокруг истинной точки, критерий, связанный с минимизацией среднеквадратичного разброса, как и критерии, связанные с соответствующими производными, приводит к практически одинаковому, близкому к реальному результату. Однако в случае истинной некорректности хорошо работают только критерии, связанные с производными. Их нужно использовать во взаимодействии. Ограниченный набор углов падения (5—6), а следовательно, и не слишком большой набор неизвестных параметров (10—12) не позволяют в полной мере проявиться законам математической статистики. Это заставляет в общем случае несколько раз отрабатывать на компьютере один и тот же образец, выбирая тот результат, к которому (с небольшим разбросом) приводят все шесть критериев, связанных с производными.

В работе [4] рассмотренная методика применена для расчета параметров сверхтонких пленок двуокиси кремния на кремнии. Измерения на каждом из пяти образцов данного типа проведены для пяти углов падения. Остановимся подробнее на характере некорректности, проявляющейся на реальных образцах.

Классический подход к решению обратной задачи показал, что параметры всех пленок SiO_2, исследованных в [4], для каждого угла падения становятся нереальными. При этом показатель преломления $n \to 1$, а толщина d достигает значений 30—35 нм. Особенно резко это проявляется для предельно тонких пленок ($d \approx 1{,}6$—3 нм). С увеличением толщины эффект такого рода уменьшается, сохраняясь до толщин ~17 нм. Экспериментальные ошибки в поляризационных углах Ψ и Δ приводят лишь к дополнительному разбросу параметров по углам падения, не нарушая отмеченной тенденции. Использование разработанной методики привело к устойчивому решению некорректной обратной задачи для всех образцов данной группы [4]. Некоторое уменьшение значений показателя преломления пленок по сравнению с ожидаемыми ($n = 1{,}46$) естественно для такого характера некорректности, но в общем незначительно.

Для уточнения картины был исследован еще один набор из четырех образцов, также представляющих собой сверхтонкие пленки двуокиси кремния на кремнии. Характер некорректности на этих образцах оказался другим. В данном случае для каждого угла падения $n \to 3$, а толщина d изменяется относительно мало. Этот эффект также особенно отчетливо проявляется для предельно тонких пленок, сохраняясь до толщин ≈ 17 нм. Наблюдаемый разброс параметров пленок по углам падения объясняется прежде всего экспериментальными ошибками в Ψ и Δ. В противоположность образцам первой группы решение некорректной обратной задачи по предложенной методике привело к некоторому увеличению показателя преломления ($n \approx 1{,}48$) сверхтонких пленок на образцах второго набора по сравнению с ожидаемым значением.

Такое различие в характере некорректности между двумя наборами образцов, скорее всего, связано с тем, что эти группы образцов различаются по структуре границ раздела между подложкой и пленкой. На это указывает систематичность бросков в значениях параметров. И естественно, что пренебрежение реальной структурой границы раздела проявляется прежде всего на сверхтонких пленках.

На следующем этапе исследование сверхтонких пленок на образцах обеих групп будет проведено с учетом структуры границы раздела. В этом случае критерий выбора оптимальной точки станет несколько другим, видоизменившись в сторону упрощения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ржанов А. В., Свиташев К. К., Семененко А. И. и др.** Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1979.
2. **Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.** Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
3. **Дагман Э. Е., Свиташев К. К., Семененко А. И. и др.** Определение параметров поглощающих пленок с помощью метода эллипсометрии // Оптика и спектроскопия. 1979. 46, вып. 3. С. 559.
4. **Бобро В. В., Мардежов А. С., Семененко А. И.** Обратная задача эллипсометрии для сверхтонких поверхностных пленок // Автометрия. 1997. № 1. С. 50.
5. **Box M. J.** A new method of constrained optimization and a comparison with other methods // The Comput. Journ. 1965. 8. P. 42.
6. **Nelder J. A., Mead R.** A simplex method for function minimization // Ibid. 7. P. 308.

Поступила в редакцию 10 октября 1997 г.