РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
АВТОМЕТРИЯ
№ 4 1999

УДК 535.39

В. Г. Половинкин, С. Н. Свиташева

(Новосибирск)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА РЕШЕНИЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ В ЗАДАННОЙ ОБЛАСТИ ПАРАМЕТРОВ

Предложен метод, позволяющий, не решая основного уравнения эллипсометрии, определить общее число решений обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ) для конкретной точки $\Psi-\Delta$ плоскости для однослойной системы среда–поглощающая пленка–поглощающая подложка в заданной области искомых параметров. Метод основан на использовании свойств относительного коэффициента отражения ρ как аналитической функции комплексного переменного. При решении ОЗЭ применение метода позволяет контролировать полноту найденных решений в заданной области.

Введение. Эллипсометрический метод интенсивно развивается, особенно в последнее десятилетие, и, прежде всего, как неразрушающий метод контроля в самых различных отраслях знаний. Например, спектральная эллипсометрия широко используется для контроля и анализа состава материалов, синтезируемых методом молекулярно-лучевой эпитаксии [1], разностно-анизотропная эллипсометрия (RDS или RAS) – для анализа реконструкции атомарно-чистой поверхности [2], отображающая эллипсометрия – для визуализации взаимодействия белковых объектов [3] и т. д.

Вопрос однозначности интерпретации эллипсометрических измерений остается одним из важнейших вопросов, определяющим не только точность и достоверность полученной информации, но и в итоге дальнейшее распространение метода.

Известно, что прямая задача всегда однозначна: данному набору параметров исследуемой системы соответствует единственное значение относительного коэффициента отражения ρ и, следовательно, единственная точка на плоскости $\Psi-\Delta$.

Для обратной задачи ситуация значительно сложнее. Ранее [4–10] было показано, что даже для простой однослойной системы среда–пленка–подложка существует неоднозначность решения обратной задачи эллипсометрии. Для каждой точки плоскости $\Psi-\Delta$ в пространстве параметров пленки (n_1, k_1, d_1) существуют семейства кривых, каждая точка которых является точным решением основного уравнения эллипсометрии:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} \equiv \mathrm{tg}\Psi\exp(i\Delta). \tag{1}$$

Решая ОЗЭ, исследователь обычно имеет априорную информацию о допустимой области значений параметров. В эту область из всего множества возможных решений может попасть только конечное их число (в том числе и нулевое). Не зная количества решений в заданной области, исследователь может ограничиться анализом только некоторых из них и сделать неверные выводы.

Целью данной работы является поиск метода определения числа решений в заданной области параметров пленки.

В первой части работы на примере однослойной системы воздух–пленка–подложка рассмотрено отображение заданной области параметров пленки ($n_1 - k_1$) на плоскость эллипсометрических углов Ψ и Δ. Показано существование областей значений углов Ψ и Δ с различным числом решений.

Во второй части работы предложен метод определения числа решений основного уравнения эллипсометрии в заданной области параметров пленки при помощи таких отображений.

1. **Отображение области параметров пленки на плоскость эллипсометрических углов.** Одним из первых для решения ОЗЭ применялся графоаналитический метод или метод номограмм, предложенный Арчером [11]. В этом методе заданная область $d_1 - n_1$ плоскости параметров прозрачной пленки ($k_1 = 0$) отображается на плоскость эллипсометрических углов Ψ и Δ. Прямые линии равного показателя преломления n_1 отображаются на $\Psi - \Delta$ плоскость в виде замкнутых криволинейных контуров, а линии равной толщины пленки d_1 – в виде семейства кривых, пересекающих эти контуры.

Для поглощающих пленок можно получить аналогичные номограммы, зафиксировав значение одного из трех параметров пленки (n_1, k_1 или d_1) и изменяя значения двух других параметров. В данной работе мы предлагаем фиксировать значение нормализованной толщины пленки: $t_1 = 2\pi d_1/\lambda$, где λ – длина волны падающего излучения. При $\lambda = 632{,}8$ нм и толщине $d_1 = 100$ нм получим $t_1 = 0{,}993 \approx 1$.

Рассмотрим несколько примеров отображения области, заданной на плоскости $\mathrm{Re}(N_1)$–$\mathrm{Im}(N_1)$, на плоскость $\Psi - \Delta$ для однослойной системы воздух ($N_0 = 1$) – поглощающая пленка (d_1, $N_1 = n_1 - ik_1$) – поглощающая подложка ($N_S = N_{Si} = 3{,}865 - i0{,}023$). Угол падения света $\varphi_0 = 70°$. При $t_1 = 0{,}4$ сетка ортогональных линий равного показателя преломления ($n_1 \in 2{,}0 - 4{,}0$) и равного коэффициента экстинкции ($k_1 \in 0 - 2{,}0$), показанная на рис. 1, *a*, отобразится криволинейной сеткой на плоскость $\Psi - \Delta$ (рис. 1, *b*). Если точка A на рис. 1, *a* попадает в одну из этих ячеек, то соответствующая ей точка на плоскости $\Psi - \Delta$ будет принадлежать соответствующей ячейке сетки на рис. 1, *b* и наоборот. Таким образом, каждой точке внутри контура 1–2–3–4–1 на рис. 1, *b* соответствует единственное решение в прямоугольнике 1–2–3–4 на рис. 1, *a*.

Если область значений n_1 и k_1 увеличить как показано на рис. 2, *a*, то на ее отображении на плоскость $\Psi - \Delta$ (рис. 2, *b*) появится область 5–1–5 с двойной сеткой линий $n_1 = \mathrm{const}$ и $k_1 = \mathrm{const}$. Это означает, что каждой точке A внутри контура 5–1–5 на плоскости $\Psi - \Delta$ соответствуют две точки A и A' на плоскости $\mathrm{Re}(N_1)$–$\mathrm{Im}(N_1)$ в области, ограниченной контуром 1–5–1′–5′ (см. рис. 2, *a*). Для точек вне контура 5–2–3–4–5 на плоскости $\Psi - \Delta$ нет решений в заданной области 1–2–3–4–1 на плоскости $\mathrm{Re}(N_1)$–$\mathrm{Im}(N_1)$.

Для пленок с большей толщиной ($t_1 = 1$) карта углов Ψ и Δ становится более сложной. Из рис. 3, *a* и *b* видно, что область, ограниченная прямоуголь-

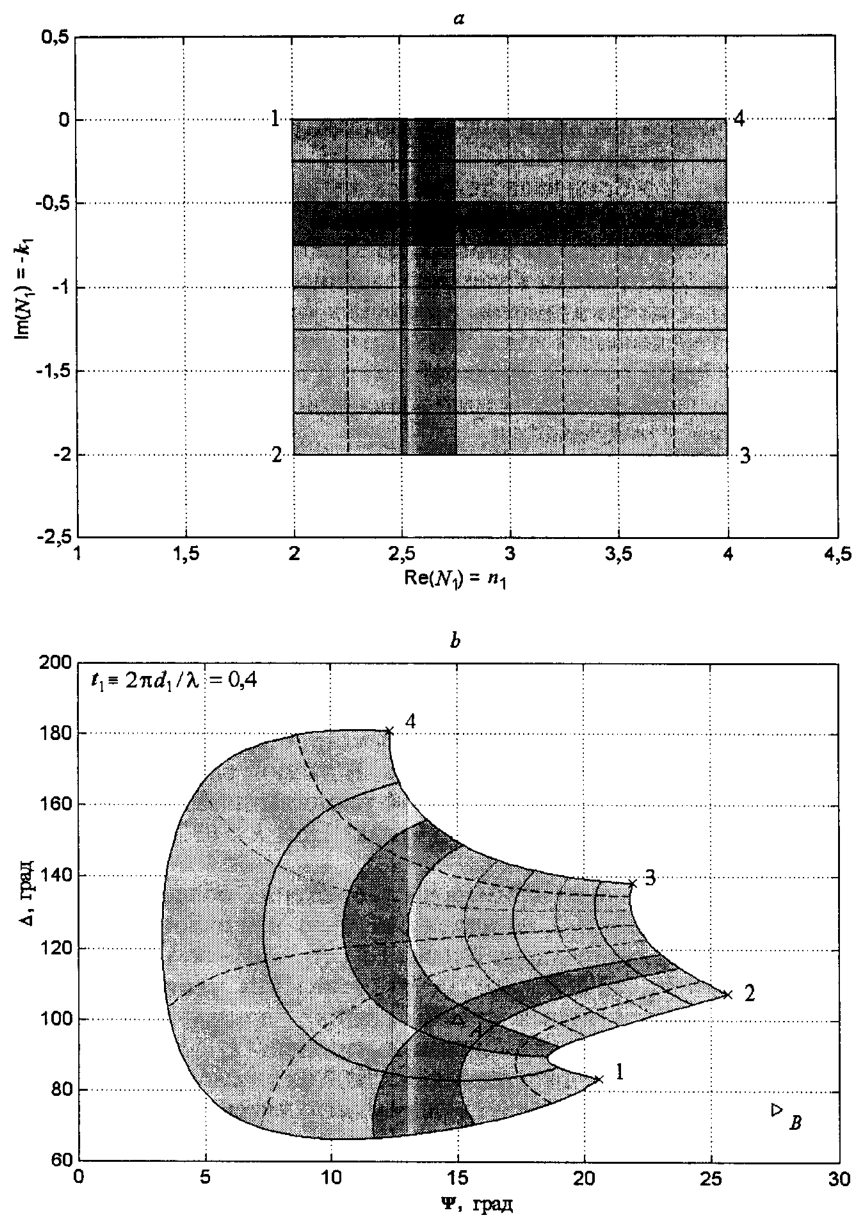

Рис. 1

ным контуром 1–2–3–4 на плоскости $\mathrm{Re}(N_1)-\mathrm{Im}(N_1)$, отображается в область, ограниченную криволинейным контуром 1–5–5′–6–4–3–7–1 на плоскости $\Psi-\Delta$ и содержащую две внутренние области: 6–6 (в увеличенном масштабе показана на вставке) и 7–2–7. Для точек D и B этих внутренних областей существует по два прообраза (точки D, D' и B, B') в областях, ограниченных контурами 6–6′–6 и 7–2–7′–2′–7 соответственно. Для точки A на плоскости $\Psi-\Delta$ существует только одно решение, а для точки C нет ни

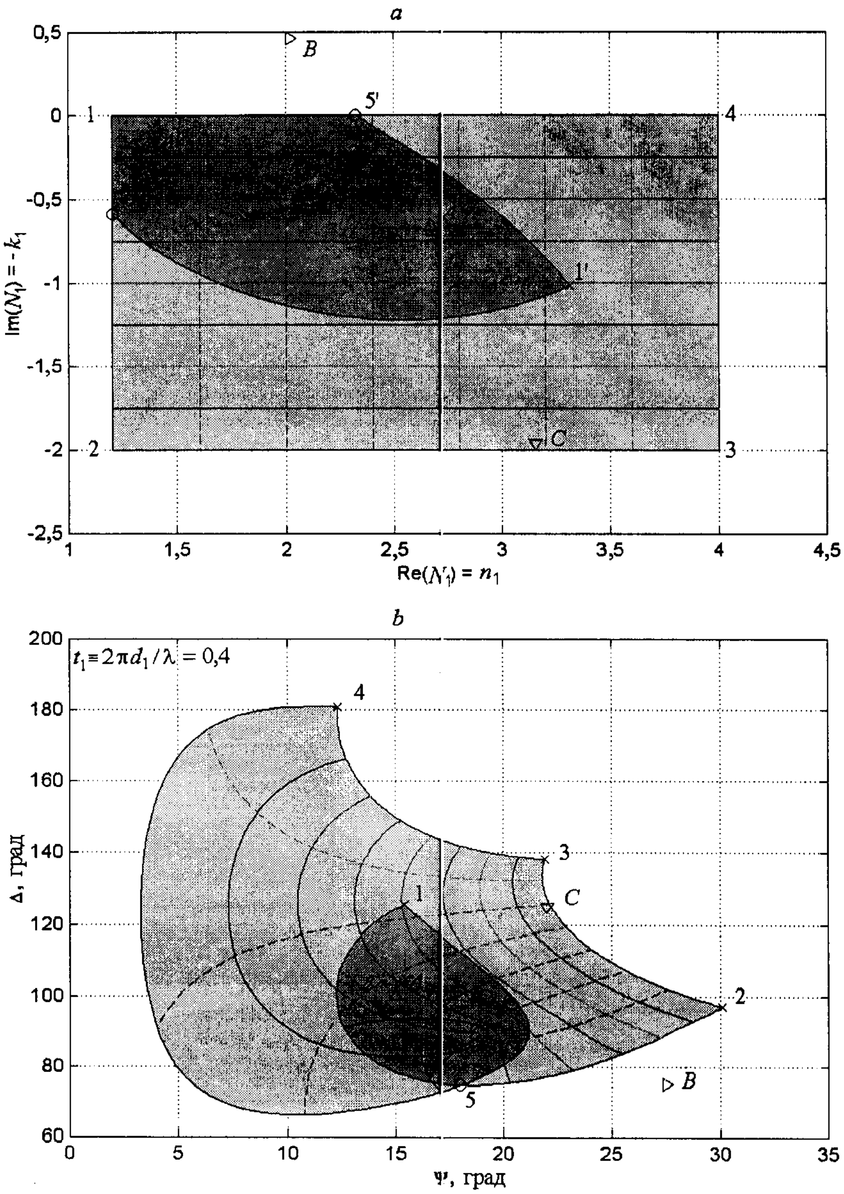

Рис. 2

одного решения в заданной области на плоскости $\mathrm{Re}(N_1)-\mathrm{Im}(N_1)$, как видно из рис. 3, *a*.

Использование эллипсометрических координат Ψ и Δ имеет определенное неудобство, связанное с наличием «искусственного» разрыва в точке, где фаза относительного коэффициента отражения ρ проходит через 0 или 2π, т. е. $\Delta = 0°$ или $\Delta = 360°$ (точки 5 и 5′ на рис. 3, *b*). Этот разрыв исчезает, если использовать полярные координаты: $\rho = \mathrm{tg}\Psi e^{i\Delta}$. На рис. 4 показана в таких координатах та же самая карта эллипсометрических углов, что и на рис. 3, *b*.

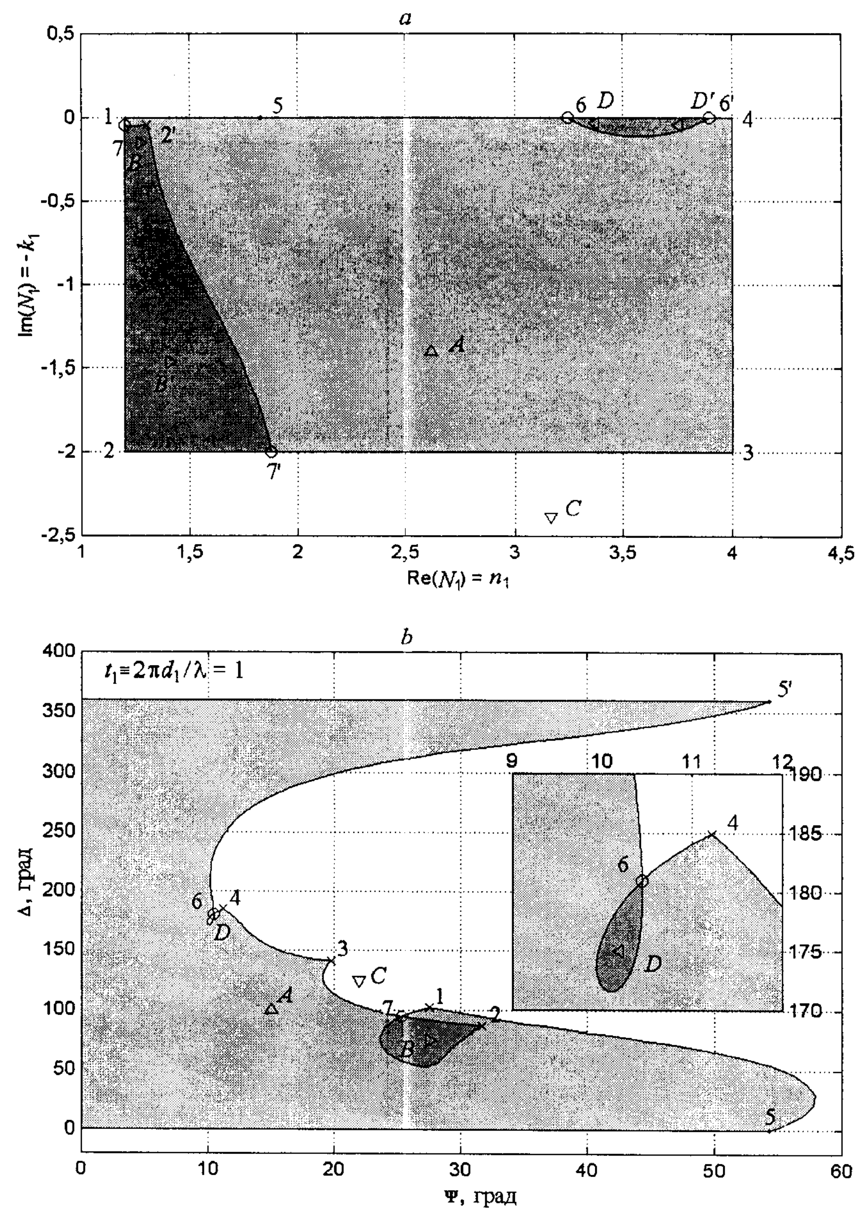

Рис. 3

Хорошо видно, что при обходе контура 1–2–3–4–1 функция $\mathrm{tg}\Psi e^{i\Delta}$ отображается также замкнутым контуром, внутренняя область которого соответствует внутренней области прямоугольника на $\mathrm{Re}(N_1)-\mathrm{Im}(N_1)$ плоскости.

Итак, видно, что при отображении границы области, заданной на комплексной плоскости N_1, на плоскость $\Psi-\Delta$ получается замкнутый контур, который делит плоскость $\Psi-\Delta$ на области с различным числом решений. Для более строгого анализа вопроса о количестве решений рассмотрим аналитические свойства функции ρ.

$\rho = \mathrm{tg}\Psi e^{i\Delta}$, $t_1 = 1$

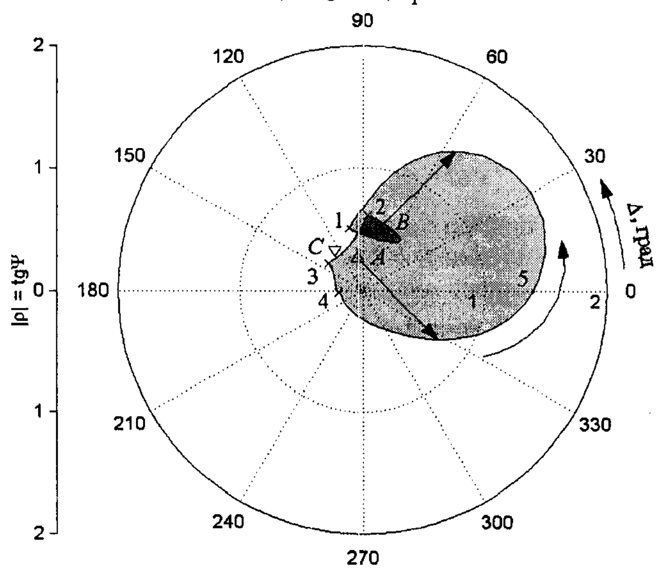

Рис. 4

2. **Свойства ρ как функции комплексного переменного.** В данной работе будем рассматривать ρ как функцию только комплексного показателя преломления N_1 пленки при фиксированных значениях остальных параметров системы:

$$\rho = \rho(N_1) \equiv \rho(n_1 - ik_1). \tag{2}$$

Очевидно, что эта функция определена и является аналитической на всей комплексной плоскости N_1 за исключением отдельных точек, где она имеет полюсы ($\rho \to \infty$, $\Psi \to 90°$). Такие функции по определению называются мероморфными (или дробными) [12, § 7.6–7].

Вопрос нахождения всех корней функции $f(z)$ в ограниченной контуром C области значений аргумента z решается с помощью теоремы, известной как принцип аргумента [11, § 7.6–9], согласно которой число нулей N_C и число полюсов P_C функции $f(z)$ удовлетворяют соотношению

$$N_C - P_C = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{f'(\zeta)}{f(\zeta)}d\zeta = \frac{\Delta_C \arg f(z)}{2\pi} \equiv R_C(f(z)), \tag{3}$$

где $\Delta_C \arg f(z)$ означает изменение аргумента $f(z)$ при обходе точкой z контура C в положительном направлении, а $R_C(f(z))$ – число полных оборотов вектора при обходе его концом замкнутого контура C с учетом направления обхода. Положительным считается направление, приводящее к увеличению аргумента, т. е. обход против часовой стрелки.

Применив эту теорему к функции $\rho - \rho_0$, где $\rho_0 = \mathrm{tg}\Psi_0 \exp(i\Delta_0)$ – значение функции ρ в точке, для которой необходимо найти решения, покажем, что число корней легко определить для любой точки на плоскости $\Psi - \Delta$. Для этого необходимо провести из искомой точки (например, A или B на рис. 4) вектор и сосчитать R_C – число оборотов вектора при обходе его концом замкнутого контура 1–2–3–4–1. Определение числа оборотов R_C достаточно, если функция ρ не имеет полюсов в заданной области (т. е. $P_C = 0$), иными словами, не содержит точку $\Psi = 90°$, для которой $\operatorname{tg}\Psi = \infty$. Если же функция ρ имеет полюсы ($P_C \neq 0$), то, согласно формуле (3), нужно прибавить число полюсов к числу оборотов вектора, чтобы определить полное число решений:

$$N_C(\rho - \rho_0) = R_C(\rho - \rho_0) + P_C(\rho - \rho_0). \qquad (4)$$

На рис. 5 приведен пример отображения контура, показанного ранее на рис. 3, *а*, при толщине пленки $t_1 = 1{,}6$, когда функция ρ имеет полюс. Для удобства отображения здесь использованы другие координаты: $\Psi e^{i\Delta} \equiv \equiv (\Psi\cos\Delta + i\Psi\sin\Delta)$. В этих координатах вся комплексная плоскость отображается на круг радиусом 90° с примерным сохранением масштаба в центре ($\Psi \leq 45°$).

Для всех точек в области *I* на рис. 5 обход контура происходит по часовой стрелке ($R_C = -1$), а для точек в области *II* – против часовой стрелки ($R_C = 1$), для всех точек в области *III* не совершается ни одного полного оборота ($R_C = 0$). Так как $N_C(\rho - \rho_0) \geq 0$, то из уравнения (4) вытекает, что $P_C \geq -R_C$, и, следовательно, наличие областей с $R_C < 0$ однозначно указывает на существование полюса.

Для определения числа решений в областях *I–III* следует знать число полюсов P_C. Очевидно, что число полюсов $P_C(\rho - \rho_0)$ не зависит от ρ_0 и определяется только областью искомых параметров. Следовательно, число оборотов R_C вокруг данной точки определяет число решений N_C с точностью до константы $P_C(\rho)$. Для определения этой константы можно предложить способ, основанный на представлении ρ в виде отношения двух целых (т. е. не имеющих полюсов) функций: $\rho = N/D$. Известно, что такое

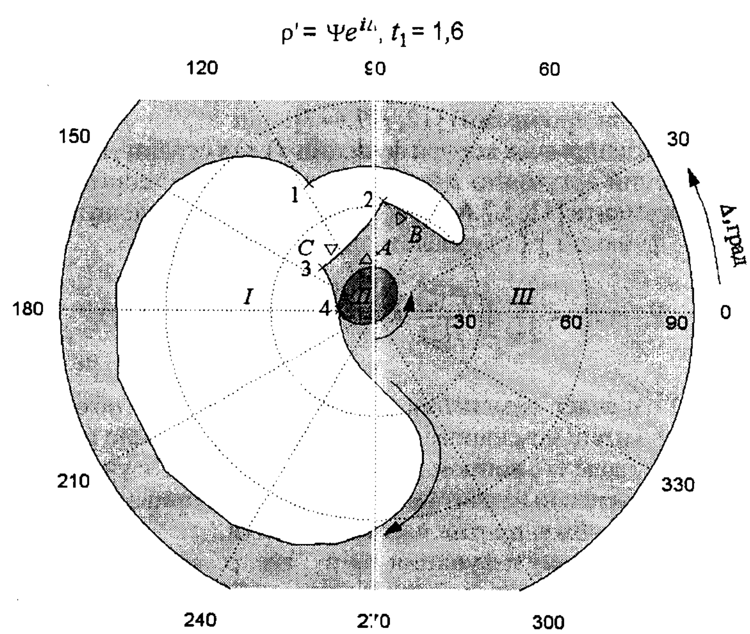

Рис. 5

представление существует для любой мероморфной функции [12, § 7.6–7]. Очевидно, что полюсы функции ρ совпадают с полюсами функции $1/D$, т. е. с нулями функции D: $P_C(\rho) = N_C(D)$. Применяя к функции D принцип аргумента, определим число ее нулей и, следовательно, искомое число полюсов P_C функции ρ. Таким образом, для определения числа решений для всех точек на плоскости $\Psi-\Delta$ достаточно построить два отображения границы заданной на комплексной плоскости N_1 области: 1) на плоскость $\Psi-\Delta$ (в декартовых или полярных координатах) и 2) на плоскость D. С помощью первого отображения для любой точки $\Psi-\Delta$ определим соответствующее ей число оборотов $R_C(\Psi, \Delta)$, а с помощью второго – общее для всех Ψ и Δ число полюсов $P_C(\rho)$, которое, согласно (4), следует добавить к $R_C(\Psi, \Delta)$.

Возможен другой способ определения числа решений. Используя представление $\rho = N/D$, запишем

$$\rho - \rho_0 = N/D - \rho_0 = (N - \rho_0 D)/D \equiv \Phi/D. \qquad (5)$$

Функция $\Phi = N - \rho_0 D$ как линейная комбинация целых функций не имеет полюсов, а ее нули совпадают с нулями функции $\rho - \rho_0$, т. е. с искомыми решениями. Число решений можно определить, применяя принцип аргумента к функции Φ. В этом случае нет необходимости находить отдельно число полюсов.

Достоинство первого способа состоит в том, что отображение контура C на плоскость $\Psi-\Delta$ (или на плоскость $\Psi e^{i\Delta}$) сразу определяет области с различным числом решений. Недостаток – необходимость отдельного определения числа полюсов. Этот способ удобен при графическом контроле решений задачи. Достоинство второго способа – непосредственное определение числа решений в данной точке (Ψ_0, Δ_0). Недостаток – для каждой точки ρ_0 необходимо вычисление функции Φ на всем контуре.

В случае однослойной системы представление ρ в виде отношения двух целых функций N и D легко получить из хорошо известных выражений (см., например, [13, гл. 4]). Однако в данной работе мы пошли более простым путем. Заметим, что для применимости и первого, и второго способов достаточно, чтобы функции N и D не имели полюсов только в рассматриваемой области искомых параметров.

Если ни среда, ни пленка, ни подложка не являются усиливающими, т. е.

$$\mathrm{Im}(\varepsilon_0), \mathrm{Im}(\varepsilon_1), \mathrm{Im}(\varepsilon_s) \le 0, \qquad (6)$$

то по определению коэффициентов отражения $|Rp, s| \le 1$. Следовательно, при выполнении условия (6) функции $R_p(N_1)$ и $R_s(N_1)$ не имеют полюсов и могут использоваться в качестве функций N и D. Таким образом, число полюсов $P_C(\rho)$ равно числу нулей $R_s(N_1)$, а вспомогательная функция Φ в этом случае имеет вид: $\Phi(N_1) = R_p(N_1) - \rho_0 R_s(N_1)$.

Рис. 6, *a* и *b* иллюстрируют число решений для точек A и B, показанных на рис. 2, *b*; 3, *b* и 5, при изменении нормализованной толщины пленки t_1 от 0,1 до 2,0. Как видно из этих рисунков, число решений немонотонно зависит от толщины и принимает значения от 0 до 2. Для значений нормализованных толщин пленок t_1 = 0,4, 1,0 и 1,6 число решений для обеих точек A и B согласуется с данными на рис. 2, *b*; 3, *b* и 5. На рис. 6, *c* и *d* для точек C и D показана зависимость числа решений от нормализованной толщины пленки t_1 в большем диапазоне изменения: от 0,2 до 10,0. Для этих точек следует

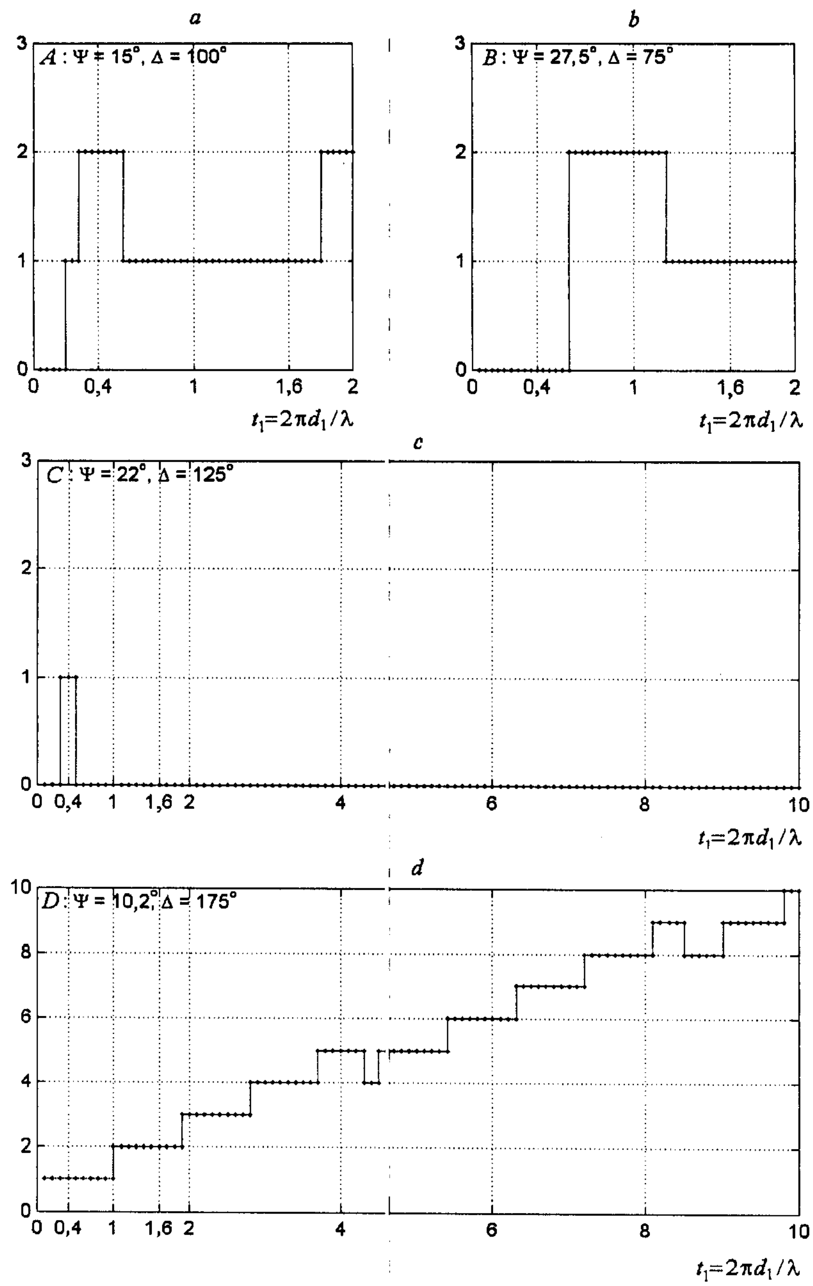

Рис. 6

отметить существенное различие в зависимостях количества решений от толщины. Более подробный анализ этих зависимостей и их различий выходит за рамки данной работы.

Заключение. Применение теории функций комплексного переменного для анализа основного уравнения эллипсометрии позволило предложить метод для определения общего числа решений ОЗЭ в заданном объеме искомых параметров пленки. Очевидно, что этот метод полезен на начальных этапах решения конкретных обратных задач эллипсометрии.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-01-00965).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Spectroscopic** Ellipsometry /Eds. A. C. Boccara, C. Pickering, J. Rivory. 1993. P. 244.
2. **Kamiya I., Aspnes D. E., Tanaka H. et al.** Surface science at atmospheric pressure: reconstructions on (001) GaAs in organometallic chemical vapor deposition // Phys. Rev. Lett. 1992. **68**, N 5.
3. **Martensson J., Arwin H.** Interpretation of spectroscopic ellipsometry data on protein layers on gold including substrate-layer interaction // Langmuir. 1995. **11**, N 3. P. 963.
4. **Свиташева С. Н.** Точное решение обратной задачи эллипсометрии для поглощающих пленок // ДАН СССР. 1991. **318**, № 5. С. 1154.
5. **Polovinkin V. G., Svitasheva S. N.** The analysis of general ambiguities of the inverse ellipsometric problem // Thin Solid Films. 1998. **313–314**. P. 128.
6. **Urban III F. K.** Ellipsometry algorithm for absorbing films // Appl. Opt. 1993. **32**, N 13. P. 2339.
7. **Urban III F. K., Comfort J. C.** Numerical ellipsometry: enhancement of new algorithm for real-time, in situ film growth monitoring // Thin Solid Films. 1994. **253**. P. 262.
8. **Comfort J. C., Urban III F. K.** Numerical techniques useful in the practice of ellipsometry // Thin Solid Films. 1995. **270**. P. 78.
9. **Barton D., Comfort J. C., Urban III F. K.** Numerical ellipsometry: Real-time solution using mapping onto the complex index plane // J. Vac. Sci. Technol. 1996. **A14(3)**. P. 786.
10. **Lekner J.** Inversion of reflection ellipsometric data // Appl. Opt. 1994. **33**, N 22. P. 5159.
11. **Archer R. J.** Determination of the properties of films on silicon by the method of ellipsometry // JOSA. 1962. **52**, N 9. P. 970.
12. **Корн Г., Корн Т.** Справочник по математике. М.: Наука, 1973.
13. **Аззам Р., Башара Н.** Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981.

Поступила в редакцию 1 декабря 1998 г.