

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  $\rho$  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  $\rho$  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:

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

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  $\Psi$  и  $\Delta$ . Показано существование областей значений углов  $\Psi$  и  $\Delta$  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  $\Psi$  и  $\Delta$ . 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  $\lambda$  - 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  $\operatorname{Re}(N_1) - \operatorname{Im}(N_1)$ , 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  $\varphi_0 = 70^\circ$ . 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, а, отобразится криволинейной сеткой на плоскость  $\Psi - \Delta$  (рис. 1, б). Если точка А на рис. 1, а попадает в одну из этих ячеек, то соответствующая ей точка на плоскости  $\Psi - \Delta$  будет принадлежать соответствующей ячейке сетки на рис. 1, б и наоборот. Таким образом, каждой точке внутри контура 1-2-3-4-1 на рис. 1,

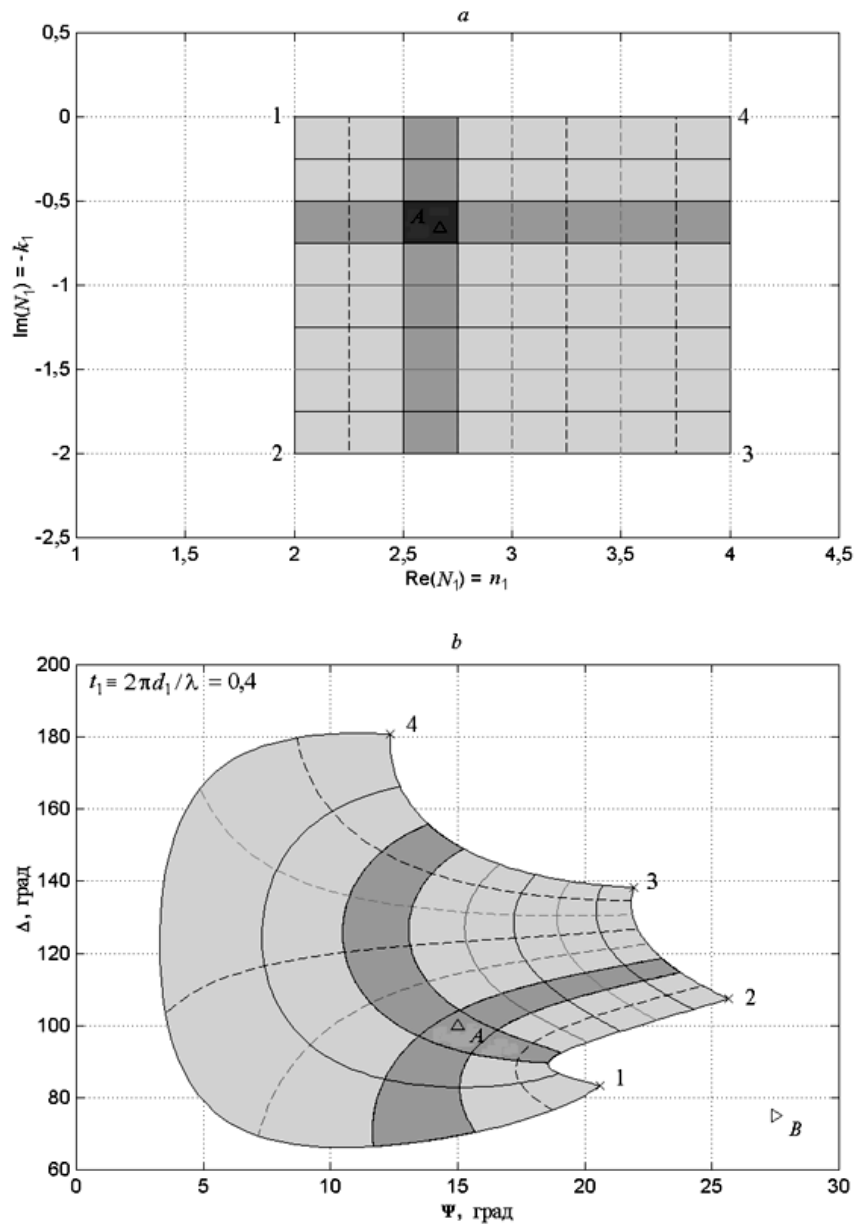


Рис. 1

$b$  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  $n_1 = \text{const}$  и  $k_1 = \text{const}$ . Это означает, что каждой точке  $A$  внутри контура 5–1–5 на плоскости  $\Psi - \Delta$  соответствуют две точки  $A$  и  $A'$  на плоскости  $\text{Re}(N_1) - \text{Im}(N_1)$  в обла-

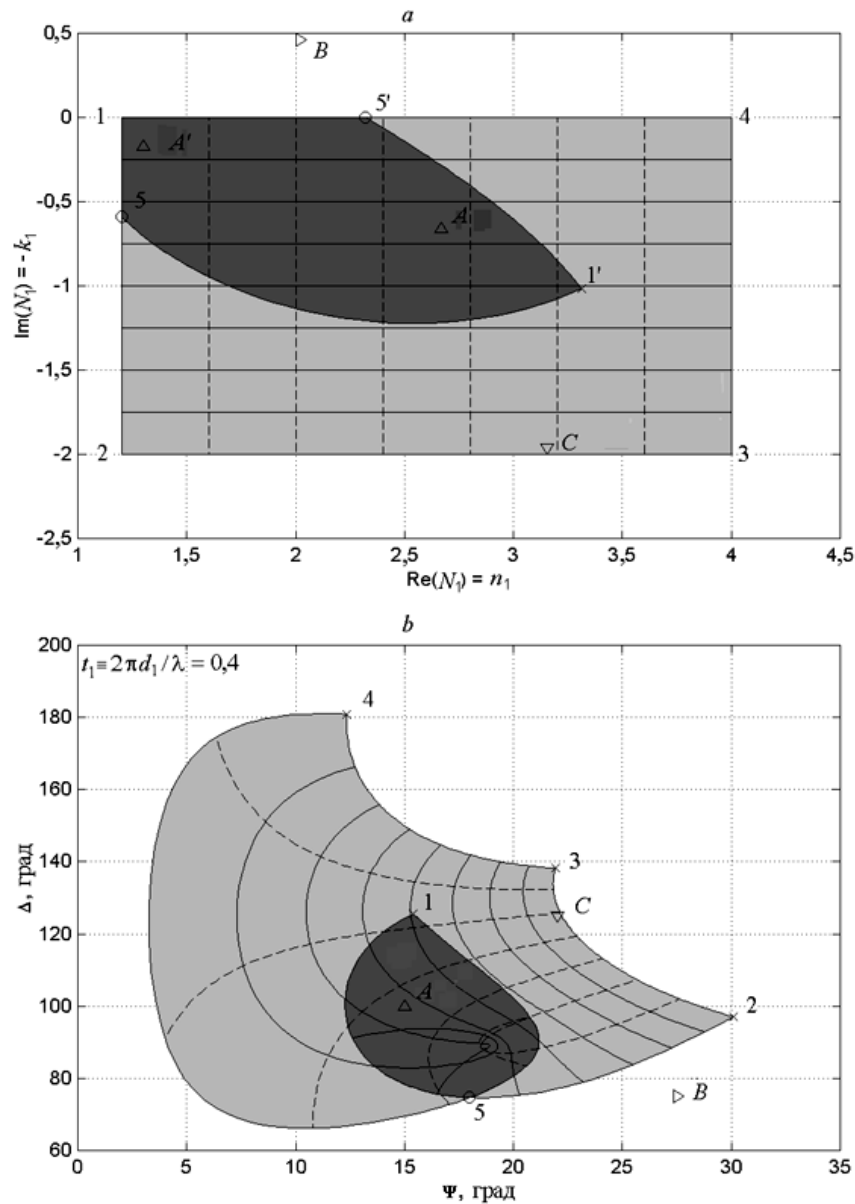


Рис. 2

сти, ограниченной контуром 1-5-1'-5' (см. рис. 2, а). 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  $\text{Re}(N_1)-\text{Im}(N_1)$ .

Для пленок с большей толщиной ( $t_1 = 1$ ) карта углов  $\Psi$  и  $\Delta$  становится более сложной. Из рис. 3, а и б видно, что область, ограниченная прямоугольным контуром 1-2-3-4 на плоскости  $\text{Re}(N_1)-\text{Im}(N_1)$ , отображается в область, ограниченную криволинейным контуром 1-5-5'-6-4-3-7-1 на плоскости  $\Psi-\Delta$  и содержа-

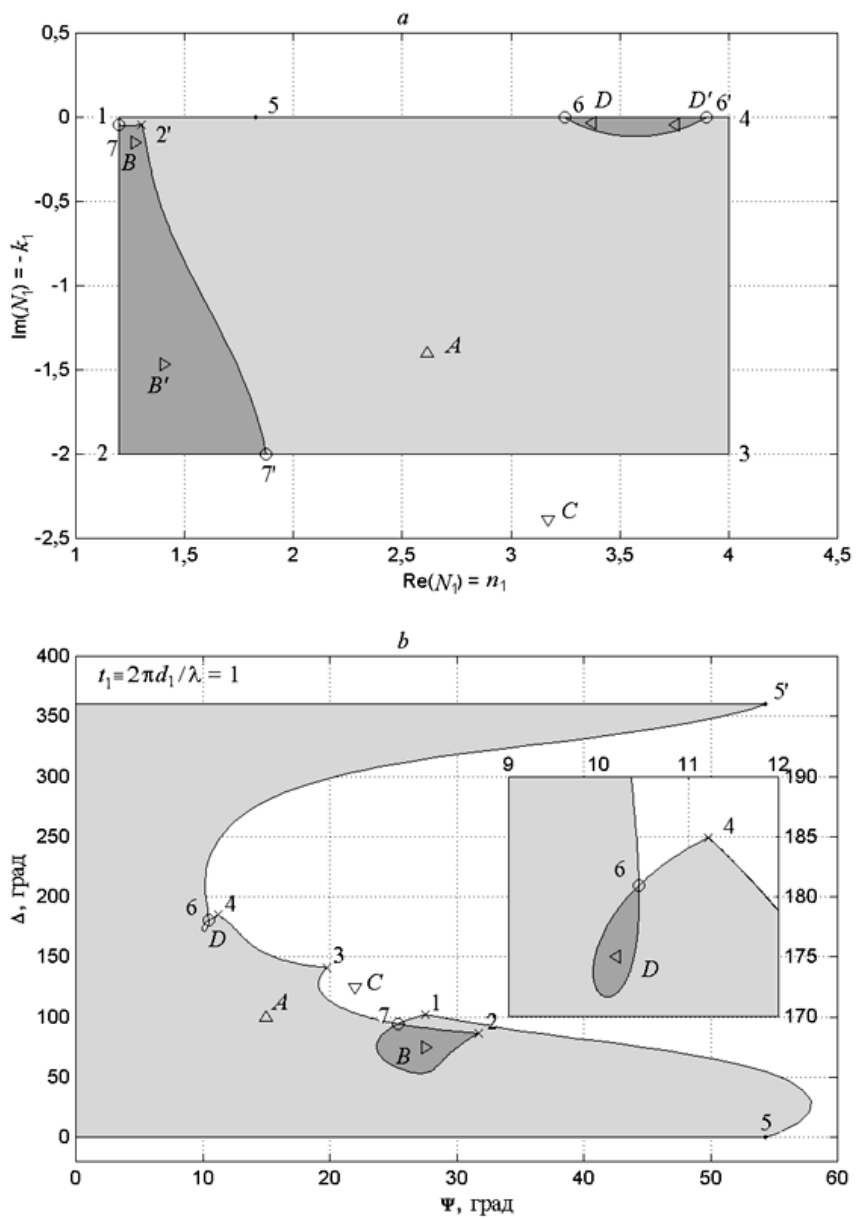


Рис. 3

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

Использование эллипсометрических координат  $\Psi$  и  $\Delta$  имеет определенное неудобство, связанное с наличием «искусственного»

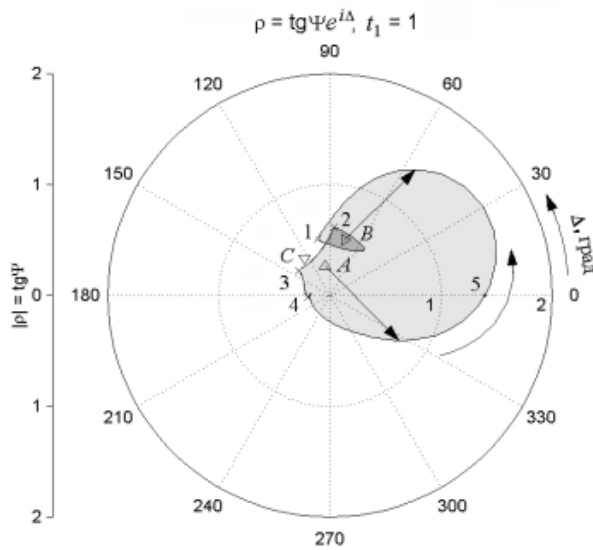


Рис. 4

разрыва в точке, где фаза относительного коэффициента отражения  $\rho$  проходит через 0 или  $2\pi$ , т. е.  $\Delta = 0^\circ$  или  $\Delta = 360^\circ$  (точки 5 и 5' на рис. 3, б). Этот разрыв исчезает, если использовать полярные координаты:  $\rho = \text{tg}\Psi e^{i\Delta}$ . На рис. 4 показана в таких координатах та же самая карта эллипсометрических углов, что и на рис. 3, б. Хорошо видно, что при обходе контура 1–2–3–4–1 функция  $\text{tg}\Psi e^{i\Delta}$  отображается также замкнутым контуром, внутренняя область которого соответствует внутренней области прямоугольника на  $\text{Re}(N_1) - \text{Im}(N_1)$  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  $\rho$ .

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

$$\rho = \rho(N_1) \equiv \rho(n_1 - ik_1). \quad (2)$$

Очевидно, что эта функция определена и является аналитической на всей комплексной плоскости  $N_1$  за исключением отдельных точек, где она имеет полюсы ( $\rho \rightarrow \infty$ ,  $\Psi \rightarrow 90^\circ$ ). 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 тео-

ремы, известной как принцип аргумента [11, § 7.6–9], согласно которой число нулей  $N_C$  и число полюсов  $P_C$  функции  $f(z)$  удовлетворяют соотношению

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

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  $\rho_0 = \operatorname{tg} \Psi_0 \exp(i\Delta_0)$  – значение функции  $\rho$  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  $\rho$  не имеет полюсов в заданной области (т. е.  $P_C = 0$ ), иными словами, не содержит точку  $\Psi = 90^\circ$ , для которой  $\operatorname{tg} \Psi = \infty$ . Если же функция  $\rho$  имеет полюсы ( $P_C \neq 0$ ), то, согласно формуле (3), нужно прибавить число полюсов к числу оборотов вектора, чтобы определить полное число решений:

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

На рис. 5 приведен пример отображения контура, показанного ранее на рис. 3, а, при толщине пленки  $t_1 = 1,6$ , когда функция  $\rho$  имеет полюс. Для удобства отображения здесь использованы другие координаты:  $\Psi e^{i\Delta} \equiv (\Psi \cos \Delta + i\Psi \sin \Delta)$ . В этих координатах вся

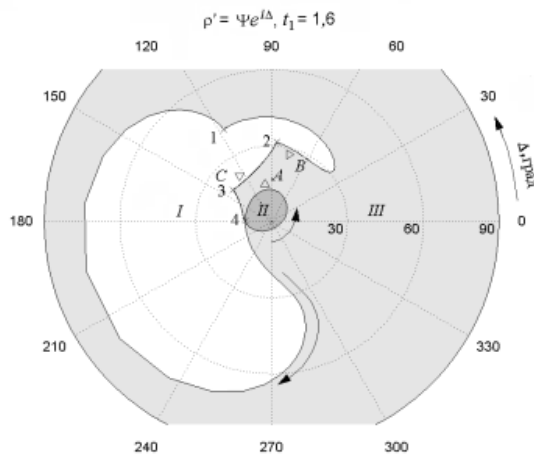


Рис. 5

комплексная плоскость отображается на круг радиусом  $90^\circ$  с примерным сохранением масштаба в центре ( $\Psi \leq 45^\circ$ ).

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  $\rho_0$  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  $\rho$  в виде отношения двух целых (т. е. не имеющих полюсов) функций:  $\rho = N/D$ . Известно, что такое представление существует для любой мероморфной функции [12, § 7.6–7]. Очевидно, что полюсы функции  $\rho$  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  $\rho$ . 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  $\Psi$  и  $\Delta$  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

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

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  $\Phi$ . В этом случае нет необходимости находить отдельно число полюсов.

Достоинство первого способа состоит в том, что отображение контура  $S$  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 ( $\Psi_0, \Delta_0$ ). Недостаток – для каждой точки  $\rho_0$  необходимо вычисление функции  $\Phi$  на всем контуре.

В случае однослойной системы представление  $\rho$  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



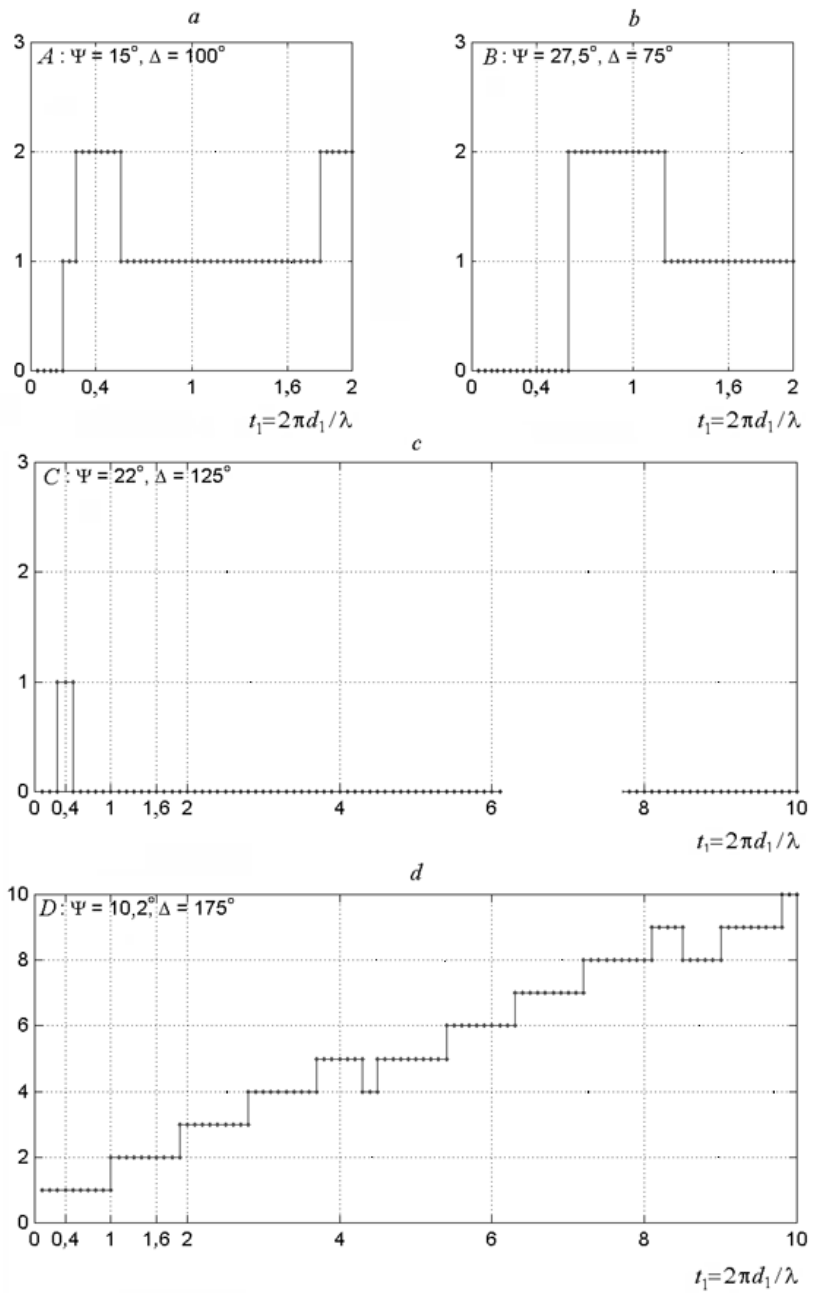


Рис. 6

имели полюсов только в рассматриваемой области искомых параметров.

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

$$\text{Im}(\epsilon_0), \text{Im}(\epsilon_1), \text{Im}(\epsilon_s) \leq 0, \quad (6)$$

то по определению коэффициентов отражения  $|R_p, s| \leq 1$ . 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  $\Phi$  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 не монотонно 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 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., Svitashева 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.*

---