

УДК 535.39

Ю. Е. Воскобойников, Е. В. Петухова, С. Н. Свиташева

(Новосибирск)

**ЭФФЕКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ
РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ
ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК**

Рассматриваются проблемы восстановления параметров сильно поглощающей пленки с точки зрения обратной задачи эллипсометрии с использованием регуляризованного варианта метода Гаусса, сочетающего высокую скорость сходимости с устойчивостью к погрешностям исходных данных. Особое внимание уделено численной характеристике информативности найденного параметра и входных данных (поляризационных углов ψ и Δ) относительно искомым параметров пленочной системы, последняя характеристика может быть использована для планирования оптимальных условий эксперимента. Результаты работы иллюстрируются спектральными и многоугловыми измерениями на примере структуры GaAs—CdTe—HgTe—CdTe.

Введение. Эллипсометрическая методика нашла широкое применение при изучении свойств тонких пленок, синтезируемых различными технологиями, где требуются сверхпрецизионные измерения свойств рабочих слоев пленки [1]. Благодаря простоте измерений и неразрушающему и невозмущающему воздействию на исследуемый объект, в последние годы эллипсометрия находит все большее применение в промышленности в качестве экспресс-методики для контроля технологических параметров металлов (Al, Cd, Cr, Co, Cu, Au, Ni, Pt, Ag, Ta, Ti, W, Zn), полупроводников (Si, *p*-Si, Ge, GaAs, GaAlAs, SiC, AlC, HgCdTe, InAs, InSb), диэлектриков (окислы металлов: Al, Cd, Cr, Cu, Fe, Nb, Ta, SiO₂, Si₃N₄), органических пленок (майлар, парафин, фоторезисты, полиамиды, нефтепродукты). Как следствие резко возрос спрос на компьютерные программы для эллипсометрии, которые требуются для широкого спектра задач и нуждаются в разработке новых алгоритмов решения с использованием современных программных и технических средств. Подробно математическая модель эллипсометрических измерений приводится в [1, 2]. Здесь же полагается, что измеряемые эллипсометрические углы Δ_i , ψ_i являются функциями M неизвестных параметров a_1, a_2, \dots, a_M , т. е.

$$\Delta_i = \Delta_i(a_1, a_2, \dots, a_M), \quad (1)$$

$$\psi_i = \psi_i(a_1, a_2, \dots, a_M), \quad 1 \leq i \leq K,$$

где K — число измерений.

Под обратной задачей эллипсометрии (ОЗЭ) понимается оценивание неизвестных параметров по результатам эллипсометрических измерений и формально сводится к решению системы нелинейных уравнений (1). Вопросы, связанные с устойчивостью и единственностью решения ОЗЭ, рассматривались в [2]. В работах [3, 4] была показана возможность устойчивого решения ОЗЭ методами условной минимизации нулевого порядка [5]. Однако возникли вопросы, важные в практике решения ОЗЭ. Во-первых, методы нулевого порядка обладают небольшой скоростью сходимости, что не позволяет обрабатывать большие массивы эллипсометрических измерений *in situ*. Во-вторых,

нужно не только получить устойчивое решение ОЗЭ, но и дать точностную интерпретацию этому решению, в частности охарактеризовать информативность того или иного найденного параметра. В-третьих, желательно указать поляризационные углы, содержащие максимальную информацию об измеряемых параметрах пленочной системы.

Поэтому в данной работе делается попытка решить эти вопросы путем обобщения результатов работы [6] на нелинейную модель.

Эффективный алгоритм решения ОЗЭ. Математическая модель эллипсометрических измерений [1, 2] отражает сложную нелинейную зависимость между углами ψ_i, Δ_i и параметрами a_1, a_2, \dots, a_M пленочной системы, при этом число параметров может быть меньше или больше числа измерений. Измеренные углы $\tilde{\psi}_i, \tilde{\Delta}_i$ можно представить в виде суммы $\tilde{\psi}_i = \psi_i + \eta_{\psi_i}, \tilde{\Delta}_i = \Delta_i + \eta_{\Delta_i}$ «точных» значений ψ_i, Δ_i и «шумов» измерений $\eta_{\psi_i}, \eta_{\Delta_i}$. Наличие этих шумов делает систему (1) несовместной, и поэтому в качестве решения ОЗЭ принимают векторы $\mathbf{a}^* = [a_1^*, a_2^*, \dots, a_M^*]^T$ следующей вариационной задачи:

$$\inf_{\mathbf{a} \in \Lambda_{\text{доп}}} \Phi(\mathbf{a}), \quad (2)$$

где $\Lambda_{\text{доп}}$ — допустимое множество значений искомых параметров. В данной работе допустимая область задается n -мерным параллелепипедом:

$$\Lambda_{\text{доп}} = \{\mathbf{a}: a_{\min, j} \leq a_j \leq a_{\max, j}\}, \quad (3)$$

\mathbf{a} в качестве функционала принят

$$\Phi(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^K \left(\frac{\tilde{\psi}_i - \psi_i(\mathbf{a})}{\sigma_{\psi_i}} \right)^2 + \sum_{i=1}^K \left(\frac{\tilde{\Delta}_i - \Delta_i(\mathbf{a})}{\sigma_{\Delta_i}} \right)^2, \quad (4)$$

где $\psi_i(\mathbf{a}), \Delta_i(\mathbf{a})$ — значения углов, соответствующие заданным параметрам a_1, a_2, \dots, a_M ; $\sigma_{\psi_i}^2, \sigma_{\Delta_i}^2$ — дисперсии (или их оценки) погрешностей $\eta_{\psi_i}, \eta_{\Delta_i}$ измерения поляризационных углов. Таким образом, решение ОЗЭ строится на основе метода наименьших квадратов с ограничениями. Для нахождения точки минимума \mathbf{a}^* генерируется минимизирующая последовательность $\mathbf{a}^{(n)}$ такая, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{a}^{(n)} = \mathbf{a}^*, \quad \Phi(\mathbf{a}^{(n+1)}) < \Phi(\mathbf{a}^{(n)}). \quad (5)$$

Существует набор алгоритмов вычисления элементов $\mathbf{a}^{(n)}$ (см., например, [5, 7]). В данной работе предлагается регуляризованный вариант метода Гаусса [7, с. 101], сочетающий высокую скорость сходимости с устойчивостью к погрешностям исходных данных.

Для удобства дальнейшего изложения введем вектор измерений \tilde{f} с проекциями: $\tilde{f}_i = \psi_i; \tilde{f}_{i+K} = \Delta_i, i = 1, 2, \dots, K$, и векторную функцию $f(\mathbf{a})$ с проекциями: $f_i(\mathbf{a}) = \psi_i(\mathbf{a}); f_{i+K}(\mathbf{a}) = \Delta_i(\mathbf{a}), i = 1, 2, \dots, K$.

Предположим, что построен элемент $\mathbf{a}^{(n)}$. Тогда в некоторой окрестности точки $\mathbf{a}^{(n)}$ имеет место разложение

$$f_i(\mathbf{a}) = f_i(\mathbf{a}^{(n)}) + \left. \frac{\partial f_i(\mathbf{a})}{\partial a} \right|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^{(n)}} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^{(n)}) + O(\|\mathbf{a} - \mathbf{a}^{(n)}\|), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (6)$$

где $N = 2K$, $O(Z)$ — бесконечно малая (по отношению к Z) величина. Используя вектор $\mathbf{f}^{(n)} = f(\mathbf{a}^{(n)}) = |f_1(\mathbf{a}^{(n)}), \dots, f_N(\mathbf{a}^{(n)})|^T$ и матрицу \mathbf{F}_n размером $N \times M$:

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{F}(\mathbf{a}^{(n)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{a})}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial f_1(\mathbf{a})}{\partial a_M} \\ \dots \\ \frac{\partial f_N(\mathbf{a})}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial f_N(\mathbf{a})}{\partial a_M} \end{bmatrix} \Big|_{\mathbf{a} = \mathbf{a}^{(n)}},$$

систему (6) можно записать в матричном виде:

$$f(\mathbf{a}) = f^{(n)} + \mathbf{F}_n(\mathbf{a} - \mathbf{a}^{(n)}) + O(\|\mathbf{a} - \mathbf{a}^{(n)}\|). \quad (7)$$

Введем вектор невязки $\mathbf{e}^{(n)} = \tilde{\mathbf{f}} - \mathbf{f}^{(n)}$ и вектор $\mathbf{q}^{(n)} = \mathbf{a} - \mathbf{a}^{(n)}$. Тогда из (7) следует матричное уравнение относительно вектора $\mathbf{q}^{(n)}$:

$$\mathbf{F}_n \mathbf{q}^{(n)} = \mathbf{e}^{(n)}. \quad (8)$$

Вектор $\mathbf{q}^{(n)}$ указывает направление движения (из точки $\mathbf{a}^{(n)}$), по которому уменьшается величина невязки. Поэтому следующий элемент $\mathbf{a}^{(n+1)}$ минимизирующей последовательности можно определить в виде

$$\mathbf{a}^{(n+1)} = \mathbf{a}^{(n)} + \rho_n \mathbf{q}^{(n)}, \quad (9)$$

где ρ_n — величина шага по направлению $\mathbf{q}^{(n)}$. Роль ρ_n будет пояснена позже, а сейчас остановимся на вычислении $\mathbf{q}^{(n)}$.

Чаще всего система (8) несовместна, а матрица \mathbf{F}_n прямоугольная размером $N \times M$. В этом случае вектор $\mathbf{q}^{(n)}$ определяется из условия минимума функционала:

$$\Phi_n(\mathbf{q}) = \|\mathbf{e}^{(n)} - \mathbf{F}_n \mathbf{q}\|_{\mathbf{V}_e}^{-2}, \quad (10)$$

где $\|z\|_{\mathbf{B}}^2 = z^T \mathbf{B} z$ — квадратичная форма; \mathbf{V}_e — корреляционная матрица вектора невязки $\mathbf{e}^{(n)}$. В дальнейшем будем полагать:

$$\mathbf{V}_e = \text{diag}\{\sigma_{\psi_1}^2, \dots, \sigma_{\psi_K}^2, \sigma_{\Delta_1}^2, \dots, \sigma_{\Delta_K}^2\}.$$

На практике вектор $\mathbf{q}^{(n)}$ находится как решение системы нормальных уравнений:

$$\mathbf{F}_n^T \mathbf{V}_e^{-1} \mathbf{F}_n \mathbf{q}^{(n)} = \mathbf{F}_n^T \mathbf{V}_e^{-1} \mathbf{e}^{(n)}. \quad (11)$$

Таким образом, вычисление точки минимума \mathbf{a}^* функционала (4) сводится на каждой итерации к решению задачи минимизации квадратичного функционала (10) и вычислению новой точки $\mathbf{a}^{(n+1)}$ по формуле (9). В этом заключается сущность метода Гаусса [7, с. 101].

К сожалению, матрица $\mathbf{F}_n^T \mathbf{V}_e^{-1} \mathbf{F}_n$, как правило, является плохо обусловленной (или вырожденной), что вызывает «неустойчивость» вычисления направления $\mathbf{q}^{(n)}$, т. е. вычисленный вектор $\mathbf{q}^{(n)}$ может существенно отличаться от искомого решения системы (11), а это, в свою очередь, влечет ухудшение сходимости минимизирующего алгоритма. Для устранения этой трудности в работе используются два метода:

— преобразование системы (8) в другую систему, матрица которой имеет меньшее число обусловленности;

— построение регуляризирующего алгоритма решения новой системы.

Введем диагональную матрицу \mathbf{H}_n размером $M \times M$ с диагональными элементами

$$\{\mathbf{H}_n\}_{jj} = \begin{cases} \|F_{n,j}\|^{-1}, & \text{если } \|F_{n,j}\| > 0; \\ 1, & \text{если } \|F_{n,j}\| = 0, \end{cases}$$

где $F_{n,j}$ — j -й столбец матрицы F_n . Определим неособенное преобразование матрицы F_n и вектора $\mathbf{q}^{(n)}$ как

$$\mathbf{B}_n = F_n \mathbf{H}_n, \quad \mathbf{b}^{(n)} = \mathbf{H}_n^{-1} \mathbf{q}^{(n)}.$$

Тогда систему (8) можно переписать в виде

$$\mathbf{B}_n \mathbf{b}^{(n)} = \mathbf{e}^{(n)}, \quad (12)$$

а решение $\mathbf{q}^{(n)}$ выразить через вектор решения системы (12):

$$\mathbf{q}^{(n)} = \mathbf{H}_n \mathbf{b}^{(n)}.$$

Доказано [8], что обусловленность новой матрицы \mathbf{B}_n отличается от минимального числа обусловленности, которое можно получить масштабированием столбцов матрицы F_n не более чем на множитель $N^{1/2}$. Забегая вперед, отметим, что типичное число обусловленности матрицы F_n при оценивании четырех параметров ($M = 4$) равно $10^5 - 10^6$, а число обусловленности \mathbf{B}_n уменьшается до $10^2 - 10^3$. Такое уменьшение весьма существенно, и поэтому в дальнейшем полагается, что система (8) преобразуется в систему (12), но для упрощения дальнейших обозначений вместо $\mathbf{B}_n, \mathbf{b}^{(n)}$ будем использовать $F_n, \mathbf{q}^{(n)}$.

Хотя число обусловленности матрицы системы (12) существенно уменьшилось, но все-таки остается достаточно большим, и поэтому для повышения устойчивости решения системы (12) построим регуляризующий алгоритм на основе сингулярного разложения матрицы F_n . Введем следующие обозначения:

$$\tilde{F}_n = V_n^{-1/2} F_n; \quad \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} = V_n^{-1/2} \mathbf{e}^{(n)}. \quad (13)$$

Определим сингулярное разложение матрицы \tilde{F}_n как [9]

$$\tilde{F}_n = U_n \Lambda_n V_n^T, \quad (14)$$

где U_n, V_n — ортогональные матрицы размером $N \times N, M \times M$ соответственно; Λ_n — $(N \times M)$ -матрица с элементами

$$\{\Lambda_n\}_{ij} = \begin{cases} \lambda_{n,j}, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Величины $\lambda_{n,j} \geq 0, j = 1, 2, \dots, M$, называются сингулярными числами матрицы F_n , и в дальнейшем предполагается, что $\lambda_{n,1} \geq \lambda_{n,2} \geq \dots \geq \lambda_{n,M} \geq 0$. Если ранг матрицы \tilde{F}_n равен $P < M$, то $\lambda_{n,P+1} = \lambda_{n,P+2} = \dots = \lambda_{n,M} \equiv 0$, т. е. вырожденность матрицы влечет нулевые сингулярные числа.

Введя векторы

$$\mathbf{p}^{(n)} = V_n^T \mathbf{q}^{(n)}; \quad \theta^{(n)} = U_n^T \mathbf{e}^{(n)}$$

и используя разложение (14), систему уравнений (8) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned}\lambda_{n,j} p_j^{(n)} &= \theta_j^{(n)}, & \text{если } \lambda_j \neq 0; \\ 0 p_j^{(n)} &= \theta_j^{(n)}, & \text{если } \lambda_j = 0; \\ 0 &= \theta_j^{(n)}, & M + 1 \leq j \leq N.\end{aligned}\tag{15}$$

Если: 1) система (8) совместна, то $\theta_j^{(n)} \equiv 0$, $M + 1 \leq j \leq N$ и $\theta_j^{(n)} = 0$ для $\lambda_j = 0$, $1 \leq j \leq M$; 2) система (8) имеет единственное решение, при этом все сингулярные числа $\lambda_j > 0$, т. е. ранг \tilde{F}_n равен M .

Когда система (8) несовместна и (или) имеет не единственное решение, в качестве решения принимается нормальное псевдорешение, т. е. вектор $\mathbf{q}_H^{(n)}$, имеющий минимальную норму среди всех векторов $\mathbf{q}^{(n)}$, доставляющих минимум функционалу (10). Используя запись (15), вектор $\mathbf{q}_H^{(n)}$ можно представить как

$$\mathbf{q}_H^{(n)} = \mathbf{V}_H \mathbf{p}_H^{(n)},$$

где

$$p_{H,j}^{(n)} = \begin{cases} \theta_j^{(n)} / \lambda_{n,j}, & \text{если } \lambda_{n,j} \neq 0; \\ 0, & \text{если } \lambda_{n,j} = 0. \end{cases}$$

Опираясь на свойства ортогональности матриц \mathbf{V}_n , \mathbf{U}_n , можно показать, что вектор $\mathbf{p}_H^{(n)}$ доставляет минимум функционалу

$$\tilde{\Phi}_n(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^M (\lambda_{n,j} p_j - \theta_j^{(n)})^2 + \sum_{j=M+1}^N (\theta_j^{(n)})^2\tag{16}$$

и имеет место

$$\tilde{\Phi}_n(\mathbf{p}_H^{(n)}) = \Phi_n(\mathbf{q}_H^{(n)}).\tag{17}$$

Возвращаясь к решению ОЗЭ, следует заметить, что маленькие значения сингулярного числа $\lambda_{n,j}$ соответствуют направлению $\mathbf{p}_j^{(n)}$, движение по которому мало изменит величину функционала $\Phi_n(\mathbf{q})$. Этим объясняется неустойчивость нормального решения $\mathbf{q}_H^{(n)}$ к погрешности вектора невязки. Действительно, пусть $\lambda_{n,j} = 0$, но в результате численной реализации сингулярного разложения матрицы \tilde{F}_n получено значение $\tilde{\lambda}_{n,j} = \varepsilon > 0$, где ε — сколь угодно малое значение. Тогда проекция $\tilde{\mathbf{p}}_j^{(n)} = \theta_j^{(n)} / \tilde{\lambda}_{n,j}$ полностью определяется погрешностью вектора невязки, может принимать сколь угодно большие значения и это практически не скажется на величине функционала $\tilde{\Phi}_n(\mathbf{p})$, а следовательно, и $\Phi_n(\mathbf{q})$. Регуляризирующий (устойчивый) алгоритм вычисления направления $\mathbf{q}^{(n)}$ имеет вид [6]:

$$\mathbf{q}_a^{(n)} = \mathbf{V}_n \mathbf{p}_a^{(n)},\tag{18}$$

где $p_{a,j}^{(n)} = \frac{\theta_j^{(n)}}{\lambda_{n,j} + \alpha m(\lambda_{n,j})}$, $1 \leq j \leq M$, $\alpha \geq 0$ — параметр регуляризации; $m(\lambda)$ — стабилизирующий множитель (принимаемый в дальнейшем равным $m(\lambda) = 1/(\lambda + 10^{-10})$). Если $\lambda_j \ll \alpha$, то происходит уменьшение (по сравнению с нормальным решением $\mathbf{p}_H^{(n)}$) влияния $\theta_j^{(n)}$ на $\mathbf{p}_j^{(n)}$ в α / λ_j раз. В литературе (например, [6, 10, 11]) приводятся различные (как детерминированные, так

и статистические) алгоритмы выбора α , поэтому здесь этот вопрос не рассматривается.

Заметим, что устойчивый алгоритм вычисления $\mathbf{q}^{(n)}$ можно было построить регуляризацией алгоритма решения системы (11). Однако число обусловленности матрицы $\tilde{\mathbf{F}}_n$ системы (8) равно $\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$, а число обусловленности матрицы $\tilde{\mathbf{F}}_n^T \tilde{\mathbf{F}}_n = \mathbf{F}_n^T \mathbf{V}_e^{-1} \mathbf{F}_n$ системы (11) равно $(\lambda_{\max}/\lambda_{\min})^2$, где $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ — максимальное и минимальное сингулярные числа матрицы $\tilde{\mathbf{F}}_n$, что делает предлагаемый подход предпочтительным.

Вернемся к выбору величины шага ρ_n , входящей в (9). Очевидно, что величина ρ_n должна удовлетворять условию

$$\Phi(\mathbf{a}^{(n)}) > \Phi(\mathbf{a}^{(n)} + \rho_n \mathbf{q}^{(n)}),$$

которое определяет допустимые значения шага ρ_n . Если бы отсутствовали ограничения (3), то «хорошим» допустимым значением было $\rho_n = 1$. Однако их наличие ограничивает ρ_n значением ρ_{\max} как наибольшим значением шага, при котором точка $\mathbf{a}^{(n)} + \rho_{\max} \mathbf{q}^{(n)}$ еще удовлетворяет (3). Поэтому ρ_n определяется соотношением

$$\rho_n = \begin{cases} 1, & \text{если } \rho_{\max} > 1; \\ \rho_{\max}, & \text{если } \rho_{\max} \leq 1. \end{cases} \quad (19)$$

Момент останова n_0 процедуры (9) определяется выполнением хотя бы одного из двух следующих условий:

$$\Phi(\mathbf{a}^{(n_0)}) \leq \chi_{2K}^2(0,9); \quad (20)$$

$$|a_i^{(n_0)} - a_i^{(n_0-1)}| \leq \varepsilon_i, \quad 1 < i < M, \quad (21)$$

где $\varepsilon_i = 10^{-4}(a_i^{(n_0-1)} + 10^{-3})$; $\chi_{2K}^2(0,9)$ — квантиль χ^2 -распределения с $2K$ степенями свободы уровня 0,9. Условие (20) обеспечивает адекватность найденного решения $\mathbf{a}^{(n_0)}$ заданным поляризационным углам и их дисперсиям $\sigma_{\Delta_i}^2, \sigma_{\psi_i}^2$, и это является наилучшим вариантом завершения процедуры минимизации функционала $\Phi(\mathbf{a})$.

Однако возможен случай, когда точка минимума \mathbf{a}^* существует, но даже в данной точке $\Phi(\mathbf{a}^*) > \chi_{2K}^2(0,9)$. Это имеет место, если значения $\sigma_{\Delta_i}^2, \sigma_{\psi_i}^2$, используемые в (4), занижены по сравнению с истинными значениями. В этом случае условие (21) останавливает процедуру минимизации по достижении (с заданной точностью ε_i) стационарной точки \mathbf{a}^* .

Дефект решения ОЗЭ. Каждая проекция a_i^* найденного решения \mathbf{a}^* в различной степени «обеспечена» экспериментальной информацией, т. е. имеет различное информационное обеспечение. Определим это понятие.

Обратимся к разложению (7) в окрестности точки \mathbf{a}^* . Ограничиваясь только двумя первыми его членами, запишем это разложение в виде

$$\mathbf{F}_* \mathbf{q} = \mathbf{e}, \quad (22)$$

где $\mathbf{F}_* = \mathbf{F}(\mathbf{a}^*)$ — матрица размером $N \times M$, $\mathbf{q} = \mathbf{a} - \mathbf{a}^*$, $\mathbf{e} = \tilde{\mathbf{f}} - \mathbf{f}(\mathbf{a}^*)$. Вектор \mathbf{e} можно трактовать как приращение вектора измерения при изменении параметров пленочной системы.

Введем сингулярное разложение

$$\mathbf{F}_* = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}_* \mathbf{V}^T$$

и векторы

$$p = V^T q; \quad \theta = U^T e.$$

Тогда систему (22) можно записать в виде

$$\lambda_{*,j} p_j = \theta_j, \quad 1 \leq j \leq M, \quad (23)$$

где $\lambda_{*,j} \geq 0$ — сингулярные числа матрицы F_* . Эти сингулярные числа можно трактовать как «коэффициенты чувствительности» измерений к параметрам системы. Векторы p_j , соответствующие малым значениям $\lambda_{*,j}$, характеризуют направления, перемещение по которым практически не меняет вектор эллипсометрических измерений.

Обозначим через J_0 индексы j сингулярных чисел $\lambda_{*,j}$, удовлетворяющих хотя бы одному из двух следующих условий:

$$\lambda_{*,j} \leq \varepsilon_0, \quad (24)$$

$$\alpha m(\lambda_{*,j}) / (\lambda_{*,j} + \alpha m(\lambda_{*,j})) \geq 0,9, \quad (25)$$

где ε_0 — достаточно малая величина (например, 10^{-5} — 10^{-4}). Условие (25) свидетельствует о том, что проекция p_j почти полностью определяется параметрами регуляризующего алгоритма α , $m(\lambda)$, а не экспериментальной информацией (более подробно см. [6]). Количество индексов в множестве J_0 назовем дефектом ОЗЭ и обозначим через M_0 .

По аналогии с работой [6] введем величины

$$d_i = \sum_{j \in J_0} v_{ij}^2, \quad 1 \leq i \leq M, \quad (26)$$

где v_{ij} — элементы матрицы V . Из ортогональности матрицы V следуют свойства

$$\sum_{i=1}^M d_i = M_0, \quad 0 \leq d_i \leq 1. \quad (27)$$

Величины d_i можно рассматривать как разложение дефекта M_0 ОЗЭ по проекциям a_i^* . Поэтому d_i назовем дефектом оценки a_i^* . Если $d_i \approx 0$, то параметр a_i^* полностью определяется экспериментальной информацией (хорошее информационное обеспечение); если $d_i \approx 1$, то доля экспериментальной информации в оценке a_i^* близка к нулю, т. е. определение a_i^* происходило за счет привлекаемой априорной информации (в частности, ограничений $a \in A_{\text{доп}}$). Поэтому желательно, чтобы все $d_i \approx 0$, что эквивалентно требованию $M_0 = 0$. На практике при $M \geq 3$ и плохой обусловленности ОЗЭ это требование, как правило, не выполняется.

Информативность эллипсометрических измерений. Введем величины:

$$g_i = \sum_{j \in J_0} u_{ij}^2, \quad 1 \leq i \leq N, \quad \text{для которых имеет место } \sum_{i=1}^N g_i = M_0, \quad 0 \leq g_i \leq 1. \quad \text{Величины } g_i$$

можно интерпретировать как разложение дефекта M_0 ОЗЭ по проекциям \tilde{f}_i вектора измерений, и поэтому g_i можно назвать дефектом соответствующего измерения. Измерение \tilde{f}_i , для которого $g_i \approx 1$, содержит мало информации об оцениваемых параметрах, и этот факт можно использовать для планирования схемы эллипсометрических измерений.

Результаты вычислительного эксперимента. Эффективность предложенного алгоритма проиллюстрируем результатами решения ОЗЭ для спектраль-

ных многоугловых измерений на трехслойной структуре GaAs (подложка) — CdTe—HgTe—CdTe со следующими параметрами:

$\lambda, \text{Å}$	9500	9600
$n_3 - ik_3$	3,564—i0,130	3,566—i0,1099
$n_1 - ik_1$	2,913—i0,084	2,910—i0,0735
$d_1, \text{Å}$	10000	10000
$n_2 - ik_2$	3,474—i1,042	3,531—i0,854
$d_2, \text{Å}$	1800	1800
$n_3 - ik_3$? — ?	? — ?
$d_3, \text{Å}$?	?

Количество углов падения $K = 5$, а сами углы равны 50, 55, 60, 65, 70°.

Обратная задача заключалась в оценивании по поляризационным углам трех параметров системы: d_3, n_3, k_3 , т. е. $M = 3, N = 10$. Остановимся на некоторых моментах решения этой обратной задачи.

1. Число обусловленности матрицы F_n системы (8) колеблется в пределах $0,5 \times 10^6 - 3,2 \times 10^6$, а число обусловленности матрицы B_n в (12) — в пределах $0,22 \times 10^3 - 2,1 \times 10^3$. Следовательно, введенная нормировка матрицы F_n существенно улучшает обусловленность решаемых на каждой итерации систем алгебраических уравнений.

2. Предложенный алгоритм имеет высокую скорость сходимости последовательности $a^{(n)}$ к точке минимума a^* . Это иллюстрируется данными, приведенными в табл. 1. Так как квантиль $\chi_{10}^2(0,9) = 15,99$, то процедуру минимизации можно уже остановить на второй итерации (см. условие (20)). Как правило, достаточно выполнить три—четыре итерации. Для сравнения укажем, что методы нулевого порядка (например, метод Нелдера — Мида [5]) требуют ~40—60 итераций.

3. Дефект M_0 одного измерения на длине волны 0,95 мкм при $\varphi_0 = 70^\circ$ равен 1, а дефекты параметров приведены в табл. 2. Здесь же приведены начальная точка $a^{(0)}$, точные и вычисленные значения параметров. Видно, что параметры d_3, n_3 имеют дефект ~0,5 (т. е. «удовлетворительно обеспечены» экспериментальной информацией) и это отразилось на точности оценок данных параметров. Дефекты поляризационных углов Δ_i, ψ_i приведены в табл. 3 для четырех вариантов измерений на одном угле падения и одной длине волны на вышеприведенной структуре. Наименьшим дефектом обладают измерения при $\lambda = 0,96, \varphi = 65^\circ$.

4. Дефект M_0 многоугловых измерений $\varphi = 50, 55, 60, 65, 70^\circ$ на длинах волн $\lambda = 0,95$ и $0,96$ мкм на вышеприведенной структуре равен нулю, и дефекты g_i поляризационных углов Δ_i, ψ_i также равны нулю, следовательно,

Таблица 1

Номер итерации	$\Phi(a^{(n)})$	ρ_{\max}	ρ_n
0	28097,02	1,12	1,0
1	98,43	9,27	1,0
2	7,7E-02	191,78	1,0
3	1,5E-06	253,17	1,0

Таблица 2

Параметр	$d_3, \text{мкм}$	n_3	k_3
Точный параметр	0,34	2,91	0,0840
Начальное значение	0,3539	2,980	0,732
Вычисленный параметр	0,3431	2,886	0,0842
Дефект параметра	0,482	0,517	0,00181

Таблица 3

Длина волны, А	Угол падения φ_i	Дефект g_i поляризационных углов	
		для Δ_i	для ψ_i
		9500	65° 70°
9600	65° 70°	0,192E-04 0,5	0,131E-15 0,11E-14

Таблица 4

Угол падения φ_i	Дефект g_i поляризационных углов	
	для Δ_i	для ψ_i
	50°	0,431
55°	0,034	0,0062
60°	0,032	0,0029
65°	0,179	0,0014
70°	0,293	0,0012

параметры a_i^* полностью определяются экспериментальной информацией (хорошее информационное обеспечение данной измерительной ситуации для решаемой задачи).

5. Другой пример оценки дефектов поляризационных углов Δ_i, ψ_i приведен в табл. 4 как иллюстрация предложенного алгоритма решения ОЗЭ для двух-пленочной системы со следующими параметрами:

слой 1: $d_1 = 350, n_1 = 1,7, k_1 = 0$;

слой 2: $d_2 = 400, n_2 = 1,9, k_2 = 0$;

подложка: $n_s = 3,865, k_s = 0,023$.

Количество углов падения $K = 5$, а сами углы были равны 50, 55, 60, 65, 70°. По этим данным вычислялись «точные» значения поляризационных углов, которые затем искажались псевдослучайным шумом, не превосходящим 0,5°. Видно, что меньше всего содержат информации об оцениваемых параметрах поляризационные углы, соответствующие углу падения $\varphi_0 = 50^\circ$. Поэтому в дальнейшем этот угол можно исключить из схемы измерения.

Таким образом, оценка g_i позволяет планировать эксперимент.

В заключение заметим, что предложенный в работе алгоритм может успешно использоваться не только для решения обратных задач эллипсометрии, но и для оценивания параметров разложения нелинейных моделей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Azzam R. M. A., Bashara N. M. Ellipsometry and Polarized Ligth. Amsterdam: North-Holland, 1977.
2. Воскобойников Ю. Е., Лантюхова Е. В., Свиташева С. Н. Однозначность, устойчивость и независимость решений обратной задачи эллипсометрии // Автометрия. 1994. № 4.
3. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Ч. I. // Автометрия. 1992. № 4.
4. Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н. Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии. Ч. II. // Там же.
5. Базара М., Шетти К. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. М.: Мир, 1982.
6. Воскобойников Ю. Е. Эффективный алгоритм решения плохо обусловленных систем уравнений при интерпретации экспериментальных данных // Автометрия. 1988. № 5.
7. Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. М.: Статистика, 1979.
8. Van der Sluis. Stability of solution of linear algebraic systems // Numerische. Math. 1970. 14. S. 246.
9. Форсайт Дж., Макольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
10. Воскобойников Ю. Е., Преображенский Н. Г., Седельников А. И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984.
11. Воскобойников Ю. Е. Критерий и алгоритм оценивания оптимального параметра регуляризирующих алгоритмов восстановления изображений // Автометрия. 1995. № 3.

Поступила в редакцию 25 апреля 1996 г.