В процесі роботи були розв'язані деякі проблеми, що зустрілися, наприклад, негативний вплив крайніх точок в поліномі Лагранжа, фіксування та виключення порахованих довжин хвиль.

Апробація комп'ютерної програми на наявність смуги комплексу з переносом заряду в оптичному спектрі поглинання полімерного розчину солі ртуті, який був опромінений рентгенівськими променями і проявлений в парах аміаку, показала її дієздатність.

## ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ В ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

*Сиротенко М.И., Швец У.С., СумГУ, Сумы*

В настоящее время большое внимание уделяется получению материалов с наперед заданными свойствами. В связи с этим немаловажное значение имеет определение оптических параметров исследуемых образцов. Среди многих существующих методик можно выделить эллипсометрические методы. Под эллипсометрией понимают оптический метод, который позволяет измерять и интерпретировать изменения в состоянии поляризованного света в результате отражения его от поверхности.

Функциональная связь эллипсометрических параметров с параметрами оптической системы выражается основным уравнением эллипсометрии (1):

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = tg\psi e^{i\Delta}, \qquad (1)$$

где $\Delta$ – сдвиг фаз между ортогональными компонентами вектора поляризации;

$\Psi$ – азимут обновленной линейной поляризации;

$R_p$, $R_s$ – комплексные коэффициенты отражения *p*-, *s*- компонент поляризованного света соответственно.

В эллипсометрических исследованиях возникает два рода задач: прямая и обратная задачи эллипсометрии. Прямая задача состоит в нахождении выходных данных по известным входным параметрам. Суть обратной задачи сводится к восстановлению входных параметров, описывающих исследуемую оптическую систему, по известным выходным данным. Первый тип задач достаточно прост и не представляет сложностей в своей реализации. Второй же тип задач относится к классу некорректно поставленных, что и является их математической особенностью.

Как известно, до настоящего момента не существует универсальной и надежной методики решения обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ). Во-первых, в отличие от прямой задачи даже для простейших отражающих систем она не имеет аналитического решения и требует использования различных численных методов оптимизации, во-вторых, при количестве неизвестных больше двух ОЗЭ становится плохо обусловленной. Поэтому, в связи с неоднозначностью решений обратной задачи, необходима априорная информация о допустимой области значений параметров, которая бы позволяла сузить область возможных решений. Все это стимулирует развитие новых подходов и методик к решению данного рода задач.

В настоящей работе для оптической системы была решена ОЗЭ для модели “однородная пленка – однородная подложка”, в результате чего были найдены оптические характеристики (толщина приповерхностного слоя, показатели преломления пленки и подложки, показатели поглощения пленки и подложки).

В рамках однослойной модели основное уравнение (1) представляется уравнением Друде (2):

$$\rho = tg\psi e^{i\Delta} = \frac{r_{01P} + r_{12P}e^{-2i\beta}}{1 + r_{01P}r_{12P}e^{-2i\beta}} \times \frac{1 + r_{01S}r_{12S}e^{-2i\beta}}{r_{01S} + r_{12S}e^{-2i\beta}}, \qquad (2)$$

где $\beta$ – фазовая толщина пленки,

$r_{01S}$, $r_{01P}$, $r_{12S}$, $r_{12P}$ – френелевские коэффициенты отражения для границы раздела "окружающая среда – приповерхностный слой", "приповерхностный слой – подложка".

В работе были комплексно применены два метода минимизации.

С одной стороны, для решения данной задачи был выбран способ подбора, который состоял в том, что для элементов некоторого заранее задаваемого подкласса возможных решений вычислялась прямая задача. В качестве приближенного решения брался такой элемент из этого множества, на котором невязка функции цели (3) достигала минимума.

$$F = \sum_{i=1}^{N}\left(\left(\Delta_i^c - \Delta_i^m\right)^2 + \left(\Psi_i^c - \Psi_i^m\right)^2\right), \qquad (3)$$

где $\Delta_i^m$, $\Psi_i^m$ - измеренные значения эллипсометрических углов;

$\Delta_i^c$, $\Psi_i^c$ - рассчитанные значения эллипсометрических углов.

С другой стороны, методом Нелдера-Мида (поиск по деформируемому многограннику) было найдено оптимальное решение ОЗЭ. Идея метода состояла в сравнении значений функции в $(n+1)$ вершинах симплекса и перемещении в направлении оптимальной точки с помощью итерационной процедуры. Как известно, метод Нелдера-Мида является надежным методом прямого поиска и считается достаточно эффективным при числе неизвестных $n \leq 6$. Следует отметить, что в качестве начального приближения был выбран элемент, полученный в результате минимума выражения (3).