

учета этого фактора при расчетах электродинамических систем, содержащих диэлектрические структуры, и анализе процессов возбуждения и распространения ДЧИ.

## SUMMARY

*The reserch results in the subject of excitation of the electromaquetic feilds in the open electrodynamic system, including the metal-dielectric periodical structures, are under review. Calculation the loss in the dielectric and theirs influence on the diffractons and Cherenkovs radiation took place in thes paper.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Николаенко Л.И., Цвык А.И. Влияние диэлектрического слоя на возбуждаемое излучение в периодической структуре с потерями // Радиотехника.-1971.-Вып.19.-С.101-107.
2. Генераторы дифракционного излучения /Под ред. Шестопалова В.П.;АН УССР. Ин-т радиофизики и электрон.-Киев:Наук. думка.-1991.-320с.
3. Исследование возможности повышения эффективности взаимодействия электронов с СВЧ- полями в резонансных приборах О- типа / Г.С.Воробьев, А.В.Нестеренко, К.А.Пушкарев, А.И.Цвык // Современные проблемы прикладной физики. Сборник научных трудов / Под ред. Кулиша В.В. -Киев: УНК ВО, 1992.

*Поступила в редколлегию 23 ноября 1995 г.*

УДК 621.382.2, 517.958

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В МЕТОДЕ МНОГОУГЛОВОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

*Забашта Л.А., асп., Забашта О.И., ст. научн. сотр.\*  
(\*Институт прикладной физики НАН Украины, г.Сумы,)*

### ВВЕДЕНИЕ

При использовании метода многоугловых измерений для анализа многослойных структур связь между измеренными в эксперименте углами  $\Psi_i'$ ,  $\Delta_i'$  и параметрами анализируемого образца  $(b_1, b_2, \dots, b_k)$ , можно записать как

$$\begin{aligned} \Psi_i(\mathbf{B}, \varphi_i) &= \Psi_i' \\ \Delta_i(\mathbf{B}, \varphi_i) &= \Delta_i' \\ i &= 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{B} = (b_1, b_2, \dots, b_k)$  - параметрический вектор, характеризующий исследуемую структуру,  $\Psi_i(\mathbf{B}, \varphi_i)$  и  $\Delta_i(\mathbf{B}, \varphi_i)$ -эллипсометрические углы, рассчитанные для данного вектора  $\mathbf{B}$  и фиксированной длины волны  $\lambda_0$  при  $i$ -ом угле падения  $\varphi_i$ .

Если предположить, что погрешности в экспериментально измеренных углах  $\Psi_i'$  и  $\Delta_i'$  независимы и подчинены нормальному распределению, в качестве решения системы (1) естественно принять среднеквадратичное приближение к нему. То есть необходимо минимизировать функционал

$$S = \sum_{i=1}^M [(\Delta_i(\mathbf{B}, \varphi_i) - \Delta_i')^2 + (\Psi_i(\mathbf{B}, \varphi_i) - \Psi_i')^2]. \quad (2)$$

Однако наличие погрешностей в  $\Psi_i'$  и  $\Delta_i'$  приводит к существованию множества векторов  $\mathbf{B}$ , удовлетворяющих условию  $S < \delta^2$ , где  $\delta$  - уровень погрешности в исходных данных, и при этом среди них могут присутствовать

такие, которые сколь угодно сильно отличаются от точного решения. Это обстоятельство обуславливает некорректность задачи минимизации функционала (2). В настоящей работе исходная некорректная задача минимизации функционала (2) была заменена близкой к ней, но устойчивой задачей минимизации т.н. параметрического функционала А.Н.Тихонова [1]:

$$T[\mathbf{B}] = \sum_{i=1}^M [\{\Delta_i(\mathbf{B}, \varphi_i) - \Delta_i'\}^2 + \{\Psi_i(\mathbf{B}, \varphi_i) - \Psi_i'\}^2] + \alpha (\mathbf{B} - \mathbf{B}_0)^2, \quad \alpha = \alpha(\delta) \quad (3)$$

при условии  $b_{j \min} < b_j < b_{j \max}$ ,  $j=1, \dots, k$

Существуют различные способы поиска минимума функционала (3). В настоящей работе используются комплексный метод [5] и регуляризирующий итерационный метод. Поскольку при практической реализации этих алгоритмов часто требуется вмешательство оператора, был создан интерактивный графический интерфейс, облегчающий управление всем процессом обработки.

### ОПИСАНИЕ ПАКЕТА ПРОГРАММ

Интегрированный пакет программ "ELLA" включает в себя четыре выполняемые программы:

- *управляющую программу создания меню - состояний "ella.exe"*, предназначенную для работы с файловой системой DOS, выбора метода решения обратной задачи и задания его параметров, редактирования исходных данных. Под контролем этой программы осуществляется весь процесс обработки;
- *прикладную программу "model.exe"*, предназначенную для решения прямой задачи эллипсометрии. Программа содержит обширный набор графических процедур, обеспечивающих, кроме вывода на экран в удобном виде графической информации, также и возможность графического ввода;
- *прикладные программы решения обратной задачи эллипсометрии "komplex.exe" и "regular.exe"*, реализующих соответственно модификацию симплексного метода при наличии ограничений и специально разработанный для этой задачи регуляризирующий итерационный метод решения систем нелинейных уравнений. Работа каждой из этих программ сопровождается выводом результатов промежуточных вычислений в текстовом и графическом видах. Опишем более подробно работу каждой программы пакета.

#### 1. ПРОГРАММА СОЗДАНИЯ МЕНЮ-СОСТОЯНИЙ "ELLA.EXE"

Задачей программы является создание графа состояний системы и инициализация графического режима. В каждом состоянии предоставлена возможность выбора одной из набора альтернатив. После запуска программы на экране появляется главное меню и результат предыдущего сеанса интерпретации (рис.1). Опция главного меню "Load file" позволяет выбрать файл, содержащий данные измерений. Для каждого набора экспериментальных данных  $\Psi_i'$  и  $\Delta_i'$  файл содержит соответствующую информацию о длине волны  $\lambda_0$  и угле падения света  $\varphi_i$ . Опция меню "Method" предназначена для выбора метода решения обратной задачи: модифицированного симплексного метода при наличии ограничений или регуляризирующего итерационного метода. Следующая опция - "Options", позволяет выбрать одно из двух состояний - "Fixed..." или "Constrained". В состоянии "Fixed..." можно задать список оптических параметров

исследуемой системы, поиск которых будет осуществляться при решении обратной задачи. Это могут быть показатели преломления и отражения

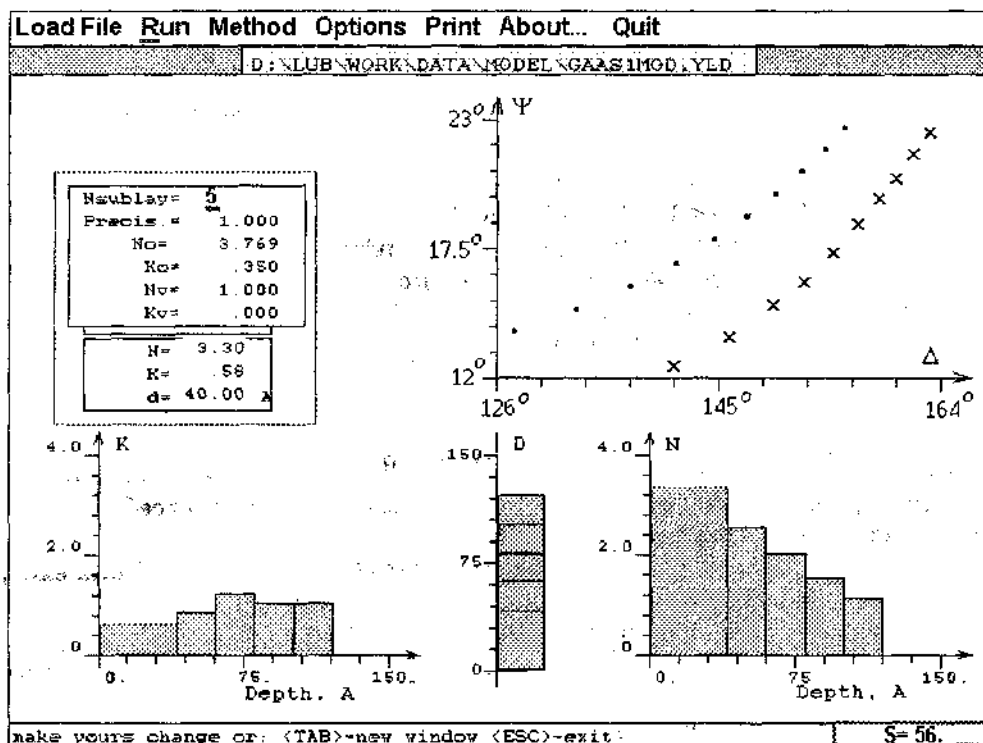


Рис. 1

подложки или, например, соответствующие параметры пленки и ее толщина. В состоянии "Constrained" можно задать ограничения на искомые параметры, другие величины: начальное значение параметра регуляризации  $\alpha_0$ , максимальное число вычислений минимизируемого функционала и т.д.

Опция "About..." осуществляет вывод на экран информации о номере версии пакета и номерах контактных телефонов.

Опция "Print" предназначена для вывода на печатающее устройство протокола работы с пакетом программ и результатов обработки экспериментальных данных.

Опция "Run" служит для запуска программы "model.exe". Одновременно с запуском этой программы создается файл "option.clc", содержащий информацию обо всех сделанных пользователем в главном меню установках.

## 2. ПРОГРАММА РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ "MODEL.EXE"

Программа "model.exe" служит для решения прямой задачи. Под решением прямой задачи здесь подразумевается расчет углов  $\Psi_1$  и  $\Delta_1$  матричным методом [2] для отражающей структуры с задаваемыми пользователем оптическими параметрами и сравнение их с экспериментально измеренными значениями. Содержащийся в программе набор графических процедур позволяет осуществлять ввод как текстовой, так и графической информации. При изменении любого из параметров автоматически осуществляется перерасчет модельных углов  $\Psi_1$  и  $\Delta_1$ . После

нажатия клавиши "Enter" осуществляется запуск одной из программ решения обратной задачи в соответствии со сделанным в главном меню выбором.

### 3. ПРОГРАММЫ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ "KOMPLEX.EXE" И "REGULAR.EXE"

Программы "komplex.exe" и "regular.exe" предназначены для решения обратной задачи эллипсометрии. Программа "komplex.exe" использует для решения симплексный алгоритм при наличии ограничений на искомые параметры [5]. Программа "regular.exe" реализует регуляризирующий итерационный метод при наличии ограничений на искомое решение и заключается в следующем.

Функционал (3) минимизируется на элементах геометрической прогрессии

$$\alpha_{p+1} = \alpha_p / 2, \quad p = 0, 1, 2, \dots$$

Следуя [3], поиск минимума функционала (3) при фиксированном параметре регуляризации  $\alpha_p$  осуществляется путем решения системы линейных алгебраических уравнений

$$[F''(V_l) F'(V_l) + \alpha_p E] V_{l+1} = -F''(V_l) F(V_l) + F''(V_l) F'(V_l) V_l + \alpha_p V_0.$$

Здесь  $F$  - вектор-функция системы (1);  $F'$  - матрица Якоби для вектор-функции;  $F''$  - транспонированная матрица Якоби;  $V_l$  -  $l$ -е приближение вектора-решения  $V$ ;  $E$  - единичная матрица. Полагая  $l = 0, 1, 2, \dots$  образуем итерационную цепочку нахождения элемента  $V^a$ , критерием окончания для которой служит выражение

$$\max |b_{l+1j} - b_{lj}| < \varepsilon, \quad j = 1, \dots, k,$$

где  $\varepsilon$  - некоторая заданная наперед величина. Затем осуществляется проверка выполнения условия  $S < \delta^2$ . Выбор параметра регуляризации  $\alpha_p$ , при котором выполняется поиск регуляризованного приближения, осуществляется согласно обобщенному критерию невязки [4].

Ввод и запоминание информации в системе "ELLA" осуществляется с помощью специализированной базы данных, обеспечивающей многосеансный режим работы системы. Структура базы данных рассчитана на хранение измеренных данных, результатов интерпретации. Для экспериментальных данных, интерпретация которых завершена, сохраняется окончательный вариант решения обратной задачи. Кроме того, здесь запоминаются значения некоторых параметров, вычисленных в процессе интерпретации. В базу данных заносится также информация о прохождении системы через контрольные точки, что дает возможность при следующем сеансе работы начать процесс интерпретации с последнего контрольного состояния.

Подсказки-рекомендации при выборе параметров доступны интерпретатору во всех состояниях.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Устойчивость получаемого с помощью программ "komplex.exe" и "regular.exe" решения к погрешности в исходных данных и к выбору начального приближения исследовалась на примере различных модельных и экспериментальных систем. Программа "komplex.exe" использовалась для восстановления оптических параметров многослойной системы с числом

слоев  $N=10$  в рамках многотолщинной эллипсометрии [5]. Применение регуляризирующего итерационного метода, реализованного в программе "regular.exe", к системе стекло - тонкая пленка Au, описано в работе [6]. Для изучения возможностей интегрированного пакета "ELLA" при определении оптических параметров системы полупроводник - пленка был проведен следующий численный эксперимент. Исходными данными для решения обратной задачи служили результаты решения прямой задачи, т.е. рассчитанные для модельной отражающей системы с известными оптическими параметрами эллипсометрические углы  $\Delta_1'$  и  $\Psi_1'$ . В качестве такой системы рассматривалась трехслойная модель воздух - прозрачная пленка - GaAs при длине волны падающего света  $\lambda=546.1$  нм. Оптические параметры модели принимались следующими: для пленки -  $n_1 = 2,03$ ,  $k_1 = 0.$ ,  $d_1 = 20.0$  нм, для подложки -  $n_0 = 3.92$ ,  $k_0 = 0.30$ . Расчет модельных значений  $\Delta_1'$  и  $\Psi_1'$  выполнялся для 10-и углов падения, от  $\varphi_{\min}=61^\circ$  до  $\varphi_{\max}=70^\circ$  с шагом  $1^\circ$ . Наличие погрешностей в величинах  $\Delta_1'$  и  $\Psi_1'$  моделировалось путем добавления случайных величин  $\delta\Delta_1$  и  $\delta\Psi_1$ , распределенных по нормальному закону с дисперсией 0.01. В таблице приведены результаты решения обратной задачи при достаточно "мягких" ограничениях на ожидаемое решение:  $n_{\min}=1$ ,  $n_{\max}=5$ ,  $k_{\min}=0$ ,  $k_{\max}=0.5$ ,  $d_{\min}=0.$ ,  $d_{\max}=200$ .

Таблица

Результаты определения оптических параметров\*

$n_{0i}$	3.92	1.0	3.92	3.92	4.0	4.0	4.0
$n_{0res}$	3.92 <sup>0)</sup>	3.92	3.92 <sup>0)</sup>	3.92 <sup>0)</sup>	3.95	3.86	3.96
$k_{0i}$	0.30	0.35	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30
$k_{0res}$	0.30 <sup>0)</sup>	0.30	0.30 <sup>0)</sup>	0.30 <sup>0)</sup>	0.30 <sup>0)</sup>	0.33	0.27
$n_{1i}$	4.0	2.03	2.29	1.16	1.0	1.0	1.0
$n_{1res}$	2.03	2.03 <sup>0)</sup>	1.95	2.05	1.39	1.41	2.24
$k_{1i}$	0.	0.	0.	0.02	0.	0.	0.
$k_{1res}$	0. <sup>0)</sup>	0. <sup>0)</sup>	0.04	0.	0.05	0. <sup>0)</sup>	0. <sup>0)</sup>
$d_{1i}$	200.	75.	43.	100.	100.	100.	10.
$d_{1res}$	75.	75. <sup>0)</sup>	76.	75.	100.	93.	80.
$S_1$	447	8990	32.1	31.6	180	180.	182
$S_{res}$	$1 \times 10^{-5}$	$1 \times 10^{-5}$	$8 \times 10^{-6}$	$1 \times 10^{-5}$	$1 \times 10^{-5}$	$1 \times 10^{-5}$	$1 \times 10^{-4}$

\*Начальные приближения (<sub>i</sub>), результаты (<sub>res</sub>) и невязки S. <sup>0)</sup> этот параметр фиксирован и равен своему точному значению.

Как видно из таблицы, результат решения зависит от числа неизвестных параметров и их комбинации. Так, при поиске оптических констант только подложки либо только пленки (при известном  $n_1$  или  $d_1$ ), получаемое решение однозначно и устойчиво к погрешности в исходных данных. При восстановлении большего числа параметров, в силу существующей корреляции между ними, могут появиться решения, отличающиеся от точного и, вместе с тем, удовлетворяющие неравенству  $S < \delta^2$ . К аналогичному выводу пришли и авторы работы [7], исследуя систему Si - SiO<sub>2</sub>. В этом случае необходимо привлечение дополнительной априорной информации об исследуемой структуре. Точное решение может быть получено только при очень "жестких" ограничениях и правильном выборе начального приближения.

## SUMMARY

Interactive graphic system "ELLA" is described which is an integrated program packet for reverse problem solution in ellipsometry. The solutions stable to experimental errors are by two algorithms: a simplex method under constrains and a regularizing iteration method. Developed graphic procedure kit includes displaying of graphic surface layers their optical parameters and all main results of intermediate calculations. Specialized graphic input functions allow us to change the parameters of chosen solution method, the basic data, to enter a new additional information, etc. On the examples of model and real structures of GaAs - oxide MAI capabilities in ellipsometry for determination of multilayer structure optical parameters are studied.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гласко В.Б., Гущин Г.В., Старостенко В.И. О применении метода регуляризации по Тихонову к решению нелинейных систем уравнений// ЖВМ и МФ.-1976.- Т.16, N2.- С.283-292.
2. Ржанов А.В., Святашев К.К., Семенов А.И. и др. Основы эллипсометрии. -Новосибирск, Наука, 1978.- 424с.
3. Старостенко В.И. Устойчивые численные методы в задачах гравиметрии.-Киев,1978.- 228с.
4. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач.-М,1990.-232с.
5. Zabashita L.A., Zabashita O.I. Solution of the inverse problem in the reconstruction of the optical characteristics using ellipsometry//Proceedings 3-rd Russian-Ukrainian-German Analytical Symposium, Sumy. -1994.
6. Zabashita L.A., Zabashita O.I. A solution of the inverse problem in the ellipsometry //Abstracts of International Conference OPTDIM'95, Kiev.-1995.-p.40.
7. Bu-Abbud G.H., Bashara N.M. and Wooliam John A. Variable wavelength, variable angle ellipsometry including a sensitivities correlation test// Thin Solid Films,-1986, N138, p.27-41.

Поступила в редакцию 2 июня 1995 г.

УДК 517.977.57

## МОНОТОННОСТЬ ПО ПАРАМЕТРУ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ О ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТИ

Чумак Л.Ф., асп.

Рассмотрим параметрическую нелинейную задачу о дополнителности: для произвольного набора  $u=(u_1, u_2, \dots, u_m) \in R^m$  найти точку  $x \in R^n$  такую, чтобы были выполнены следующие соотношения:

$$x \geq 0, Ax + Bu + \varphi(x, u) \geq 0, \quad x^T(Ax + Bu + \varphi(x, u)) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $A$  - вещественная  $n \times n$  матрица,  $B$  - вещественная  $n \times m$  матрица,  $\varphi: R^n \times R^m \rightarrow R^n$  - нелинейная функция. Под сравнением векторов подразумевается покомпонентное сравнение:  $a \geq b$ , если  $a_i \geq b_i, i=1, \dots, n$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.** Матрица  $K$  называется  $Z$  - матрицей, если все ее внедиагональные элементы неположительны.

Матрица  $D$  называется  $P$  - матрицей, если все ее главные миноры положительны.

Матрица  $Q$  называется  $M$  - матрицей, если она является и  $Z$  - матрицей, и  $P$  - матрицей.

Матрица, обратная к  $M$ -матрице, состоит из неотрицательных элементов [2].