ЖЭТФ/JETP, 2027, том 171, вып. 1, стр. 5–17 © 2027

ОБ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ТЕОРИИ ОТРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПЯТИСЛОЙНЫХ СИММЕТРИЧНЫХ СТРУКТУР

Л. А. Федюхин [a*], ***Е. А. Колосовский*** [a], ***А. В. Горчаков*** [b]

[a] *Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук*
630090, Новосибирск, Россия

[b] *Новосибирский государственный университет*
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 18 июня 2026 г.,
после переработки 20 сентября 2026 г.
Принята к публикации 12 октября 2026 г.

Приведены результаты численного эксперимента обратной задачи теории отражения в модели пятислойной симметричной структуры. Предложен набор наблюдаемых параметров, необходимых и достаточных для формирования единственного решения, определяющего оптические параметры и толщину всех слоев структуры. Предложена целевая функция оптимизационной методики, снимающая проблему плохой обусловленности обратной задачи теории отражения. Предложена оригинальная целевая функция по параметру, не являющемуся наблюдаемым, позволяющая существенно сократить время расчета.

Ключевые слова: обратная задача теории отражения, пятислойная симметричная структура, интерференционные минимумы, метод инвариантов, целевая функция, плохая обусловленность

DOI: 10.31857/S0044451027010011

1. ВВЕДЕНИЕ

Численным экспериментам, связанным с решением обратной задачи теории отражения, посвящено большое количество работ [1–10], что вызвано необходимостью иметь надежный инструмент восстановления параметров структуры по ограниченному числу наблюдаемых параметров (НП). Создан класс приборов — эллипсометров, прекрасно зарекомендовавших себя в том числе для оперативного контроля параметров пленок (толщины, показателя преломления) при их росте в установках молекулярно-лучевой эпитаксии. Основными НП являются измеренные в различных геометриях эллипсометрические параметры Ψ и Δ. Большое внимание уделено анализу моделей и разработке на их основе методов, позволяющих восстановить параметры тонких пленок. Наиболее известным является метод Люси, подробное изложение которого дано в монографии [11]. Математические модели, позволяющие восстановить параметры пленок произвольной толщины, представлены в работах [12–15]. В работе [1] предложена математическая модель, основанная на одновременном использовании отраженного и прошедшего через образец терагерцевых сигналов, что позволило определить комплексный показатель преломления субволновых тонких пленок. В работе [2] предложена методика определения показателя преломления, коэффициента экстинкции и толщины тонких пленок методом возбуждения волноводных мод. В работе [3] для высокочувствительного мониторинга свойств переходных слоев и тонких пленок предложено использовать затухающие перпендикулярно поверхности эванесцентные волны. В работе [16] отмечено, что целевая функция обратной задачи эллипсометрии имеет множество локальных минимумов, причем в случае слабо поглощающих пленок эти минимумы практически неразличимы, а в случае сильно поглощающих — размыты настолько, что идентификация решения становится невозможной. В работе [17] изучен характер математической некорректности обратной задачи эллипсометрии для сверхтонких (менее 10 нм) прозрачных пленок на однородной подложке. Сделан вывод о математической некорректности обратной задачи эллипсометрии по определению параметров

* E-mail: leogal2007@mail.ru

сверхтонких пленок. Отметим обстоятельную работу [6], в которой приведен обзор по методам решения обратной задачи эллипсометрии, обсуждается выбор функционала как критерия точности интерпретации измерений. В работе [6] указана основная причина неудач решения обратной задачи эллипсометрии, а именно существование направлений в фазовом пространстве параметров, вдоль которых выбранная целевая функция остается практически неизменной.

Вопрос о причинах плохой обусловленности, а также корректной постановке обратных задач теории отражения остался открытым и в известных авторам публикациях более не поднимался. Поскольку на сегодняшний день используемые алгоритмы не гарантируют однозначности восстановления параметров структуры только по измеренным значениям Ψ и Δ, расчет проводится с привлечением априорных данных. Можно констатировать, что к настоящему времени нет надежного алгоритма для решения обратной задачи теории отражения: не определен необходимый и достаточный набор наблюдаемых параметров, нет приоритета в выборе минимизирующего функционала.

Цель работы — сформулировать необходимые и достаточные условия корректной постановки обратной задачи теории отражения для структур в области прозрачности. Показать, что решение задачи существует, оно единственное и устойчиво по отношению к малым изменениям входных параметров. Поставленная цель явилась основной мотивацией к постановке предлагаемого численного эксперимента.

В настоящей работе получил развитие предложенный авторами метод инвариантов [12]. Выбор модели обусловлен тем обстоятельством, что симметричная пятислойная структура — следующая по рангу сложности модель, позволившая получить простые аналитические выражения для углового положения интерференционных минимумов для структур с переходными слоями произвольной толщины. Это, в свою очередь, позволило весьма рельефно указать на узловые точки построения корректного подхода к решению обратной задачи теории отражения.

2. НАБЛЮДАЕМЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Выбор НП — один из ключевых этапов решения обратной задачи теории отражения. С одной стороны, экспериментальное измерение НП должно быть достаточно простым, не допускающим многозначной трактовки. С другой стороны, их совокупность в сочетании с выбранным алгоритмом расчета должна обеспечить единственность полученного решения. Возможными кандидатами являются коэффициенты отражения в особых точках углового распределения. Выберем в качестве модели плоскопараллельную пластину, которая по факту является интерферометром Фабри – Перо. На рис. 1 *a* показаны пять слоев, поясняющие расположение сред в модели пятислойной симметричной структуры. Слои плоские, расположены вертикально и образуют плоскопараллельный сэндвич. Это и есть интерферометр. Свет падает на границу с номером 0. Многочисленные отражения от границ раздела создают контрастную интерференционную картину (см. рис. 1 *b*). Это позволяет с высокой точностью измерить угловые положения интерференционных минимумов (ИМ).

Другим важным НП служит толщина структуры, измерение которой также может быть проведено весьма точно. Для краткости структуру с фиксированными параметрами, указанными в табл. 1, будем называть тестовой (далее тест). В отличие от нее параметры структуры (далее проба), характеристики

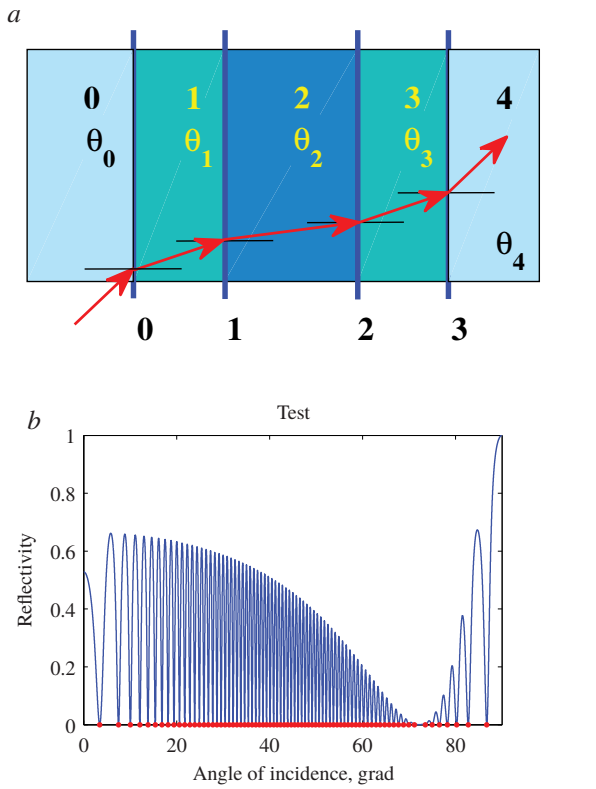

Рис. 1. *a* — Схема, поясняющая расположение сред в модели пятислойной симметричной структуры; *b* — коэффициент отражения при параметрах теста. Красным указано угловое положение ИМ

которой будем сравнивать с аналогичными характеристиками теста, не фиксированы и могут принимать значения по нашему выбору в соответствии с целями численного эксперимента.

В рамках метода инвариантов симметричной пятислойки связь структурных параметров с угловым положением q-го ИМ определяет единственная формула [14]

$$\phi_2^q - \frac{1}{\pi}\psi_2^q = m^q, \qquad (1)$$

где

$$\phi_i^q = \frac{2}{\lambda} d_i n_i \cos(\theta_i^q)$$

— фазовая длина q-го ИМ для среды с номером i,

$$\psi_2^q = \operatorname{arctg}\left(\frac{b^q}{a^q}\right)$$

— добавка к интерференционной части фазовой длины q-го ИМ. Здесь θ_i^q — угол падения q-го ИМ на границу с номером i,

$$a^q = r_{12}^q\left[1+(r_{01}^q)^2\right] + r_{01}^q\left[1+(r_{12}^q)^2\right]\cos(\phi_1^q),$$
$$b^q = r_{01}^q\left[1-(r_{12}^q)^2\right]\sin(\phi_1^q),$$
$$r_{01}^q = (g_0^q - g_1^q)/(g_0^q + g_1^q),$$
$$r_{12}^q = (g_1^q - g_2^q)/(g_1^q + g_2^q)$$

— классические коэффициенты Френеля,

$$g_i^q = \begin{cases} \dfrac{\cos\theta_i^q}{n_i} & \text{для волны } p\text{-поляризации}, \\ n_i\cos\theta_i^q & \text{для волны } s\text{-поляризации}, \end{cases}$$

d_i, n_i — толщина и показатель преломления среды с номером i, m^q — абсолютный номер q-го ИМ, q — порядковый (от нормали) номер ИМ m^q. Нижний индекс параметра обозначает номер границы, верхний — порядковый номер ИМ.

Углы падения θ_i^q для разных границ связаны уравнениями Снеллиуса и могут быть выражены через угол падения θ_0^q на границу с номером 0:

$$\cos\theta_1^q = \cos\theta_3^q = \sqrt{1 - \frac{n_0^2}{n_1^2}\sin^2\theta_0^q},$$
$$\cos\theta_2^q = \sqrt{1 - \frac{n_0^2}{n_2^2}\sin^2\theta_0^q}.$$

В соответствии с (1) каждый ИМ формируется при угле падения θ_i^q, когда на фазовой длине структуры $\beta_2^q = \phi_2^q - \frac{1}{\pi}\psi_2^q$ укладывается целое число длин волн m^q падающего излучения. При известных значениях параметров структуры — показателях преломления и толщине сред (прямая задача) — формула (1) позволяет рассчитать характеристики ИМ — их угловое положение θ_i^q и абсолютные номера m^q (см. рис. 2 *b*). Отметим, что в предлагаемом алгоритме расчета нет необходимости знать характеристики отраженной/прошедшей волн при произвольных углах падения. Достаточно рассчитать эти характеристики при углах падения, определяющих положение ИМ, что существенно сокращает время расчета.

Как было показано ранее [14], для симметричной пятислойной структуры величина

$$\operatorname{Inv} d_2 = -\frac{m^q + \frac{1}{\pi}\psi_2^q}{2n_2\cos\theta_2^q} = \frac{d_2}{\lambda} \qquad (2)$$

инвариантна по отношению к номеру m^q ИМ и численно равна нормированной на длину волны излучения толщине подложки d_2. Кроме того, $\operatorname{Inv} d_2$ однозначно связан с угловым положением двух соседних ИМ:

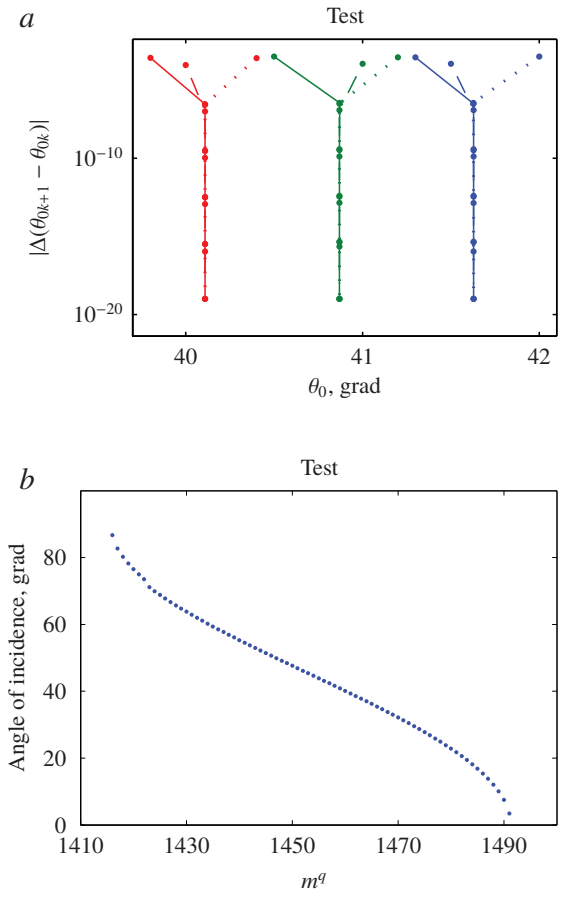

Рис. 2. *a* — Сходимость итерационной процедуры для трех групп начального приближения: $\theta_2^q|_0 = 39.8^\circ$, 40.0°, 40.4° — красный; $\theta_2^q|_0 = 40.5^\circ$, 41.0°, 41.2° — зеленый; $\theta_2^q|_0 = 41.3^\circ$, 41.5°, 42.0° — синий; *b* — угловое положение ИМ θ_0^q с указанием абсолютных номеров ИМ

$$\frac{d_2}{\lambda} = \frac{1 + \frac{1}{\pi}\psi_2^q - \frac{1}{\pi}\psi_2^{q+1}}{2n_2\left[\cos\left(\theta_2^q\right) - \cos\left(\theta_2^{q+1}\right)\right]}. \qquad (3)$$

При этом абсолютный номер ИМ равен

$$m^q = \frac{\frac{1}{\pi}\psi_2^q \cos\theta_2^{q+1} + \left(1 - \frac{1}{\pi}\psi_2^{q+1}\right)\cos\theta_2^q}{\cos\theta_2^{q+1} - \cos\theta_2^q}.$$

Численный эксперимент в настоящем сообщении проведен в рамках модели симметричной пятислойной структуры (см. рис. 1 *a*). Все представленные далее расчеты проведены для теста с параметрами, приведенными в табл. 1. Оптические параметры и толщины слоев теста выбраны случайным образом с учетом ожидаемой точности интерференционной методики определения оптических параметров и толщины каждого слоя структуры (не менее восьми значащих цифр). Угловое положение ИМ теста рассчитано методом итераций [18]. Вид уравнения (1) позволяет проводить итерационную процедуру для расчета ряда важных параметров как прямой, так и обратной задач. Для понимания работы запишем (1) в виде

$$\cos\theta_2^q = \frac{\lambda}{2d_2n_2}\left(m^q + \frac{1}{\pi}\psi_2^q\right). \qquad (4)$$

И левая, и правая части (4) включают угол падения, при котором формируется q-ой ИМ на границе с номером 2 — θ_2^q. Он входит в ψ_2^q через соответствующие коэффициенты Френеля. Поскольку угловая компонента $\cos\theta_2^q$ присутствует в обеих частях (4), напрашивается циклический итерационный процесс вида

$$\left[\cos\theta_2^q\right]_{k+1} \leftarrow \left[\frac{\lambda}{2d_2n_2}\left(m^q + \frac{1}{\pi}\psi_2^q\right)\right]_k. \qquad (5)$$

Индекс k — номер итерации. Процедура «подстраивает» значение косинуса угла падения $\cos\theta_2^q$, приводя рекуррентную формулу (5) к тождеству для каждого целого m^q. Вычисления с разными m^q выполняются параллельно и реализуются векторно.

Результат расчета углового положения ИМ для теста представлен на рис. 2 *b*. В зависимости от начального приближения процедура определяет ближайший ИМ (см. рис. 2 *a*). Приведены результаты для трех групп начального приближения:

$$\theta_2^q|_0 = 39.8^\circ,\ 40.0^\circ,\ 40.4^\circ \text{ (красный)},$$
$$\theta_2^q|_0 = 40.5^\circ,\ 41.0^\circ,\ 41.2^\circ \text{ (зеленый)},$$
$$\theta_2^q|_0 = 41.3^\circ,\ 41.5^\circ,\ 42.0^\circ \text{ (синий)}.$$

Таблица 1. Значение параметров теста для численного эксперимента

Параметр	Значение
λ, нм	1549.244
$n_0^t = n_4^t$	1
$n_1^t = n_3^t$	3.1177849
$d_1^t = d_3^t$, нм	200.4688151
n_2^t	3.1645750
d_2^t, нм	365125.286
θ_1, град	3.45654521831997
θ_2, град	7.50082575514575
θ_3, град	10.0474515846124
θ_4, град	12.0839782945211

Видно, что достаточно нескольких итераций (в данном случае шести), чтобы угловые положения ИМ определились с заранее заданной точностью $1.0 \cdot 10^{-17}$. При решении обратной задачи описанная процедура используется для расчета интерференционной картины пробы. Угловое положение всех ИМ представлено на рис. 2 *b*. Численные значения углового положения первых четырех ИМ теста приведены в табл. 1.

3. ПОВЕРХНОСТЬ НУЛЕВОЙ НЕВЯЗКИ ТОЛЩИНЫ

Оптимизационный метод является наиболее востребованным инструментом решения обратной задачи теории отражения [6]. После определения того или иного набора НП выбирается математическая модель структуры и определяется вид целевой функции. Как правило, это сумма квадратов отклонений наблюдаемых параметров от их значений, полученных при решении прямой задачи для пробы. Минимальное значение целевой функции, если оно существует и единственное, определит параметры структуры. В качестве примера приведем вид целевой функции в модели симметричной пятислойной структуры для набора НП: толщины структуры, углового положения ИМ (см. рис. 3),

$$F = F_D\, F_\theta,$$
$$F_\theta = \sqrt{\sum_q \left(\theta_0^{t,q} - \theta_0^{p,q}\right)^2},$$
$$F_D = \sqrt{\sum_q \left(D^t - d_2^{p,q} - 2d_1^{p,q}\right)^2}.$$

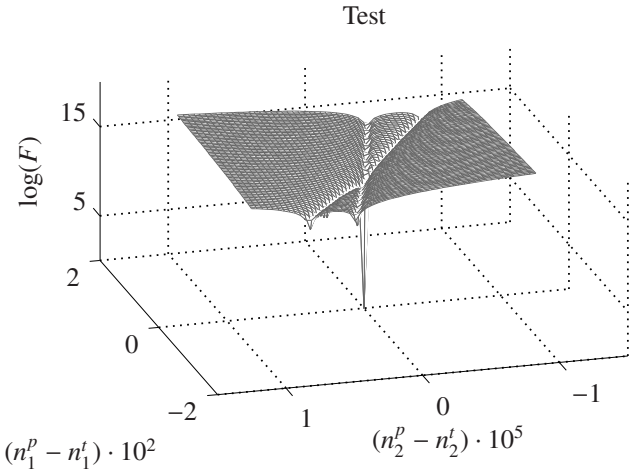

Рис. 3. Графический результат расчета F методом циклической перестановки параметров вблизи глобального минимума

Здесь F_θ — невязка углового положения ИМ, F_D — невязка толщины структуры, F — целевая функция пересечения невязок F_D и F_θ. Суммирование идет по принятым во внимание порядковым номерам ИМ теста q.

Расчет F проведен при учете первых трех ИМ в достаточно узких диапазонах варьируемых параметров пробной структуры $[n_1^p, n_2^p, d_1^p]$ вблизи глобального минимума методом циклической перестановки параметров. Здесь верхние индексы (t, p) обозначают принадлежность параметра к пробе (p) либо тесту (t).

Результат ожидаемый: как только параметры пробы сравниваются с параметрами теста, мы имеем глубокий, со значением, в пределе равным нулю, минимум. При этом выбор между НП углового положения ИМ $\theta_0^{t,q}$ или толщины структуры D^t не имеет значения. Все три целевые функции сходятся к одному глобальному минимуму. В то же время приведенный расчет оставляет открытым вопрос единственности полученного решения, а также вопрос о необходимом для этого количестве учитываемых ИМ. Кроме того, нет ясности в построении алгоритма, позволяющего ограничить фазовое пространство параметров пробы для получения результата за разумное время.

В общем случае решение обратной задачи симметричной пятислойной структуры состоит в расчете четырех параметров $[n_1^p, n_2^p, d_1^p, d_2^p]$ по выбранному набору НП. Существование инварианта толщины подложки пробы d_2^p сокращает число параметров до трех $[n_1^p, n_2^p, d_1^p]$.

Обсудим роль НП толщины структуры $D^t = d_2^t + 2d_1^t$. Его значение является константой по определению, поскольку задано параметрами теста. При решении обратной задачи из всей совокупности пробных структур с параметрами $[n_1^p, n_2^p, d_1^p, d_2^p]$ необходимо отобрать лишь те, для которых сумма толщины слоев пробы также сохраняется и соответствует толщине теста D^t:

$$D^p = d_2^p + 2d_1^p = D^t. \tag{6}$$

Это позволяет выразить толщину слоя пробы d_1^p через НП D^t и толщину подложки пробы d_2^p:

$$d_1^p = (D^t - d_2^p)/2.$$

Совместно с инвариантом толщины подложки, взятым для пробы (3), уравнение (6) сокращает число независимых переменных обратной задачи до двух: $[n_1^p, n_2^p]$.

Насколько существенным является условие (6) при решении обратной задачи, иллюстрирует рис. 4. Угловое смещение первого ИМ пробы относительно его положения для теста при выполнении условия (6) помечено красным. При невыполнении (6) — зеленым. Синим помечено положение ИМ теста. Видно, что угловое смещение (в градусах) первого от нормали ИМ при изменении толщины слоев пробы, в данном примере на 10 нм, меняет направление смещения ИМ на противоположное, а его величина на порядок меньше по сравнению со смещением, когда условие (6) не выполняется. Такое поведение ИМ пробы относительно ИМ теста существенным образом сказывается на целевой функции. Неисполнение (6) приводит к плохой обусловленности решения, что является признаком некорректно поставленной задачи.

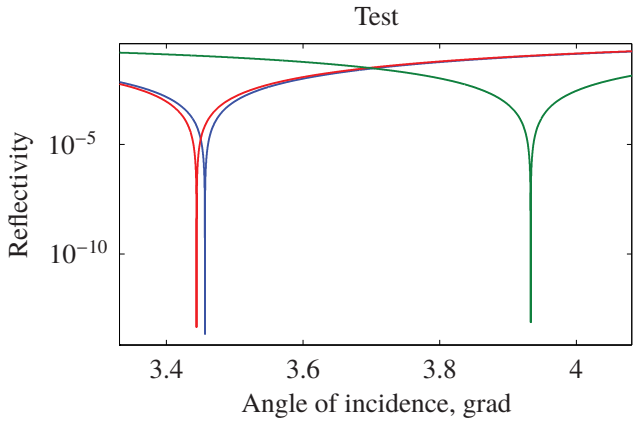

Рис. 4. Угловое смещение первого ИМ при выполнении условия (6) помечено красным, в противном случае — зеленым, синим помечено положение ИМ теста

В том случае, когда в качестве НП выбираются угловое положение ИМ θ_0^q и толщина структуры D^t, уравнения (3), (6) сокращают число подлежащих расчету параметров до двух, определяя неявную связь параметров пробы $[n_1^p,\, n_2^p,\, d_1^p]$ через угловое положение двух ИМ теста $[\theta_0^{t,q},\, \theta_0^{t,q+1}]$:

$$n_2^{p,q} = f_D\left(n_1^p,\ d_1^p\right). \tag{7}$$

В этой записи показатель преломления подложки пробы снабжен верхним индексом номера ИМ q. Важно, что этот номер соответствует угловому положению ИМ теста, который является НП. Эту связь мы находим итерационной процедурой для уравнения (8), непосредственно следующего из (5):

$$[n_2^{p,q}]_{k+1} \leftarrow \left[\frac{\lambda}{2d_2^{p,q}}\,\frac{1+\psi_2^{t,q}/\pi-\psi_2^{t,q+1}/\pi}{\cos\left(\theta_2^{t,q+1}\right)-\cos\left(\theta_2^{t,q}\right)}\right]_k. \tag{8}$$

Индекс k — номер итерации. Значения $\cos(\theta_2^{t,q+1})$, $\cos(\theta_2^{t,q})$, $\psi_2^{t,q+1}$ и $\psi_2^{t,q}$ рассчитываются в точках углового положения ИМ теста (не пробы).

Расчет (8) при учете первых двух ИМ теста при выполнении условия (6) формирует поверхность нулевой невязки толщины (ПННТ), изображенную на рис. 5 *a*. Для каждой пары значений $[n_1^p,\, d_1^p]$ процедура определяет значение $n_2^{p,q}$, превращающее уравнение (8) в тождество. Подчеркнем, что $n_2^{p,q}$ зависит от принятых к расчету порядковых номеров ИМ теста. Сходимость итерационной процедуры для трех групп значений $[n_1^p,\, d_1^p]$ приведена на рис. 6. Для первой группы $[n_1^p,\, d_1^p] = [n_1^t,\, d_1^t]$ — помечено синим. Для второй группы $[n_1^p,\, d_1^p] = [1,\, d_1^t]$ — красным. Для третьей группы $[n_1^p,\, d_1^p] = [1.8,\, 180]$ — зеленым. В каждой группе по три значения начального приближения: $n_2|_0 = 3.15$ — сплошная, $n_2|_0 = 3.16$ — штриховая, $n_2|_0 = 3.20$ — штрихпунктирная линии. Видно, что достаточно нескольких итераций, чтобы показатель преломления пробы определился с заранее заданной точностью 10^{-17}. Независимо от начального приближения финальные значения $n_2^{p,q}$ в каждой группе совпадают.

Таким образом, поиск решения обратной задачи теории отражения симметричной пятислойной структуры смещается в область оптимизации невязки углового положения ИМ F_θ на ПННТ (8) для разных значений порядковых номеров q ИМ теста. Однако, несмотря на существенный прогресс в сокращении числа неизвестных параметров обратной задачи теории отражения для симметричной пятислойной структуры с четырех до двух, провести минимизацию целевой функции F_θ на ПННТ при фиксированном q не удается за разумное время.

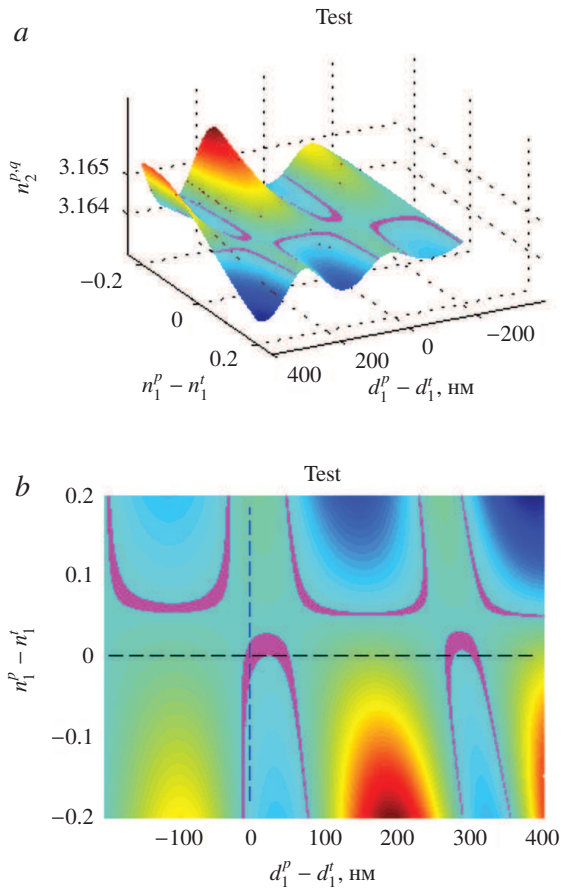

Рис. 5. *a* — Поверхность нулевой невязки толщины. Розовым отмечена линия пересечения с плоскостью значений $n_2^p = n_2^t$, *b* — изолинии ПННТ. Штриховые линии отмечают точку глобального минимума

Ситуацию осложняет плохая обусловленность целевой функции F_θ (см. рис. 7). Расчет на этих графиках проведен для ИМ с порядковым номером $q = 20$. Видно, что зависимость целевой функции $F_\theta = F_\theta(n_2^{p,q} - n_2^{t,q})$ формирует достаточно глубокий минимум вблизи тестового значения n_2^t (см. рис. 7 *a*). Минимальное значение F_θ на двух других графиках (см. рис. 7 *b*, *c*) тонет в облаке близких по значениям F_θ точек. Это не позволяет ограничить фазовое пространство параметров пробы, что могло бы выделить глобальный минимум. Расчет коррелирует с результатами работы [6], в которой сделан вывод о плохой обусловленности целевых функций, когда в качестве НП выбраны эллипсометрические параметры Ψ и Δ.

Уравнение (8) формирует ПННТ, на которой значение толщины структуры $D^t = D^p$ сохраняется, а невязка $F_D = 0$. Для наглядности на рис. 5 *a* розовым цветом помечена линия пересечения плоскости $n_2^{p,q} = n_2^t$ с ПННТ. Ее истинное положение еще

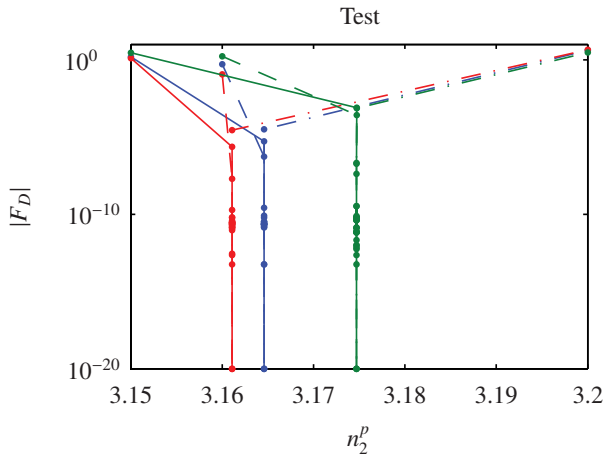

Рис. 6. Сходимость итерационной процедуры при расчете ПННТ (8). Приведены результаты для трех групп значений $[n_1^p, d_1^p]$. Для первой группы $[n_1^p, d_1^p] = [n_1^t, d_1^t]$ — помечено синим. Для второй группы $[n_1^p, d_1^p] = [1, d_1^t]$ — красным. Для третьей группы $[n_1^p, d_1^p] = [1.8, 180]$ — зеленым. В каждой группе по три значения начального приближения: $n_2|_0 = 3.15$ — сплошная, $n_2|_0 = 3.16$ — штриховая, $n_2|_0 = 3.20$ — штрихпунктирная линии

предстоит определить. Одна из точек линии является глобальным минимумом. Ожидаемое положение этой точки находится в пересечении штриховых линий на рис. 5 *b*. Подчеркнем, что полученное итерационной процедурой значение показателя преломления подложки пробы при заданных значениях n_1^p, d_1^p зависит от порядкового номера q теста, что отражено в его записи — $n_2^{p,q}$. Соответственно изменяется и вид поверхности для разных значений q теста, а в обозначение целевой функции с необходимостью включаем верхний индекс — F_θ^q. Рисунок 8 *a* иллюстрирует пересечение ПННТ для трех значений порядкового номера q теста. След целевых функций F_θ^q по плоскости их возможного пересечения показан на рис. 8 *b*. В расчет приняты три пары ИМ с $q = [1, 30, 50]$. Очевидно, что четыре последовательно расположенных ИМ составляют то минимальное количество, которое необходимо принять во внимание при поиске глобального минимума.

Вывод: глобальный минимум необходимо искать в области пересечения ПННТ для разных значений порядкового номера q. Целевая функция в этом случае есть пересечение целевых функций невязки углового положения ИМ F_θ^q по соответствующим ПННТ:

$$G_q = \bigcap_q^N F_\theta^q. \tag{9}$$

Здесь N — количество принятых к расчету пар ИМ.

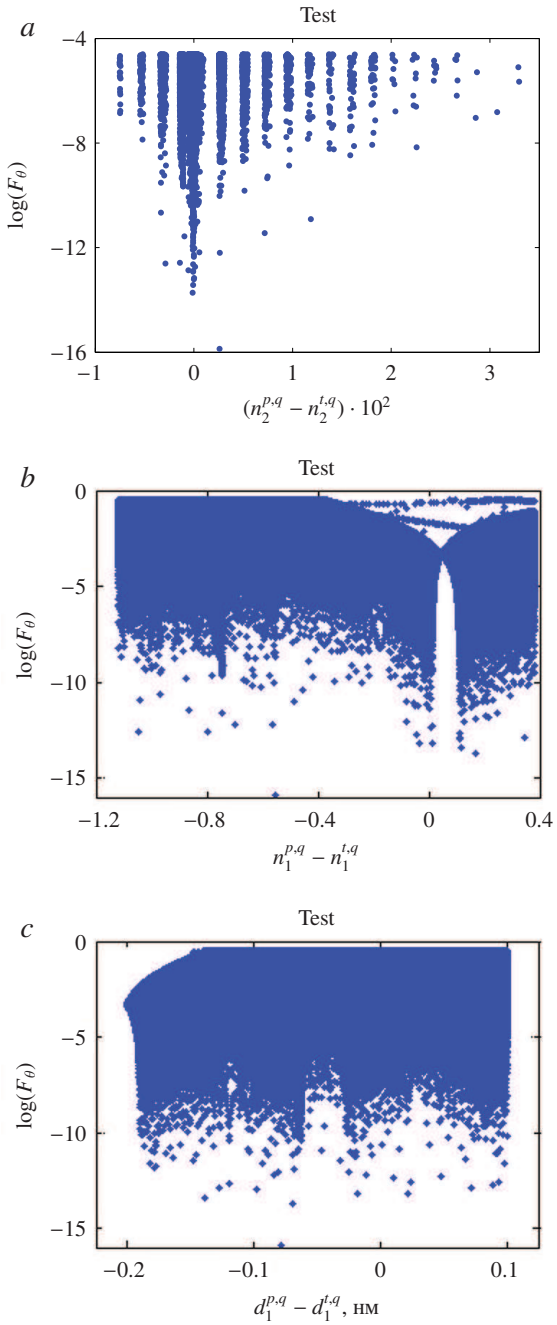

Рис. 7. Целевая функция углового положения ИМ F_θ как функция отклонения параметров пробы от параметров теста. *a* — $F_\theta(n_2^{p,q} - n_2^{t,q})$, *b* — $F_\theta(n_1^{p,q} - n_1^{t,q})$, *c* — $F_\theta(d_1^{p,q} - d_1^{t,q})$

На рис. 9 показан вид целевой функции G_q при учете углового положения шести пар ИМ теста $q = [1, 10, 20, 30, 40, 50]$. Расчет уверенно определяет положение глобального минимума. Отклонение значений параметров пробы в минимуме от тестовых составило

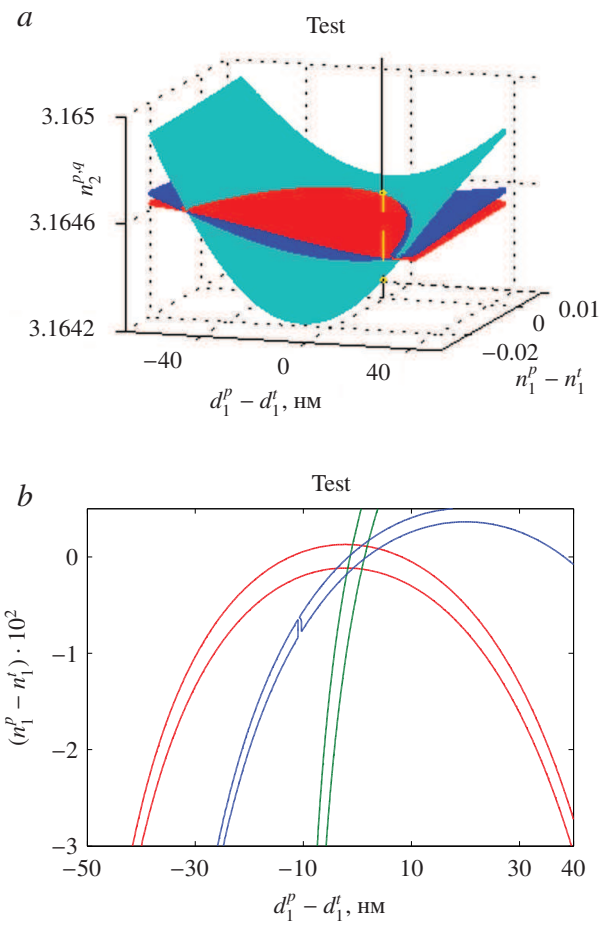

Рис. 8. a — Пересечение ПННТ для трех значений порядковых значений углового положения ИМ q. Поверхность с $q = 1$ обозначена красным цветом, с $q = 30$ — синим, с $q = 50$ — зеленым. Желтым обозначена точка пересечения поверхностей, b — след (проекция на плоскость $F_\theta^q = 0$) целевых функций F_θ^q для трех порядковых значений углового положения ИМ. След при $q = 1$ обозначен красным цветом, с $q = 30$ — синим, с $q = 50$ — зеленым

$$\Delta n_1 = 6.14 \cdot 10^{-7}, \quad \Delta n_2 = 7.70 \cdot 10^{-9},$$
$$\Delta d_1 = 2.15 \cdot 10^{-3} \text{ нм}, \quad \Delta d_2 = 4.29 \cdot 10^{-1} \text{ нм}.$$

Видно, что по всем искомым параметрам обратной задачи алгоритм определил значения, весьма близкие к тестовым.

Детальное поведение целевой функции пересечения на ПННТ для этого примера приведено на рис. 10. Сравнивая с распределением целевой функции отдельных ИМ на ПННТ (см. рис. 7), можем заключить, что функция пересечения G_q снимает плохую обусловленность, свойственную функции F_θ, в которой минимизация идет по сумме квадратов отклонений угловых положений ИМ теста и пробы. Для выбранного набора НП G_q формирует

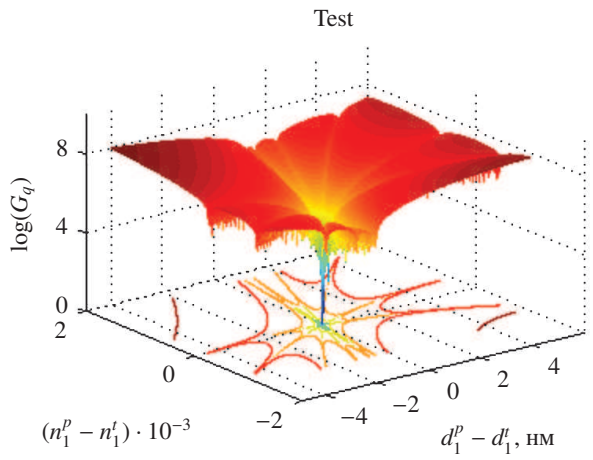

Рис. 9. Целевая функция невязки углового положения ИМ G_q по ПННТ F_D^q при учете углового положения двенадцати ИМ теста

единственный, со значением, в пределе равным нулю, минимум, позволяя с высокой точностью рассчитать оптические параметры и толщину тестовой структуры, решая, таким образом, обратную задачу теории отражения для прозрачных симметричных структур. Успешное решение требует расчета целевой функции G_q по области пересечения как минимум трех ПННТ. Важно отметить, что рассматриваемая модель не ограничивает рассмотрение структур с тонкими слоями, а применима в том числе для структур с толщинами слоев, сравнимыми с толщинами подложки.

Наряду с глобальным минимумом G_q формирует целый ряд весьма глубоких локальных минимумов, локализованных в «карманах» [14]. Они отвечают «подобным» структурам, угловые положения ИМ в которых весьма близки. Можно выделить две группы минимумов G_q. Для одной из них показатель преломления слоя меньше показателя преломления подложки, $n_1^p < n_2^t$. Для другой — больше, $n_1^p > n_2^t$. Группы на рис. 10 *a* разделены горизонтальной пунктирной линией желтого цвета. Пунктирные линии черного цвета показывают положение глобального минимума теста. В каждой группе формируются локальные минимумы, отвечающие различным значениям толщины слоя. Число карманов невелико. Кроме того, они разделены весьма большими интервалами по значению параметров. Это важно при практической реализации метода инвариантов. Даже скупые сведения о толщине слоя либо его показателе преломления (больше либо меньше показателя преломления подложки) помогут определить карман и получить значения параметров с высокой точностью.

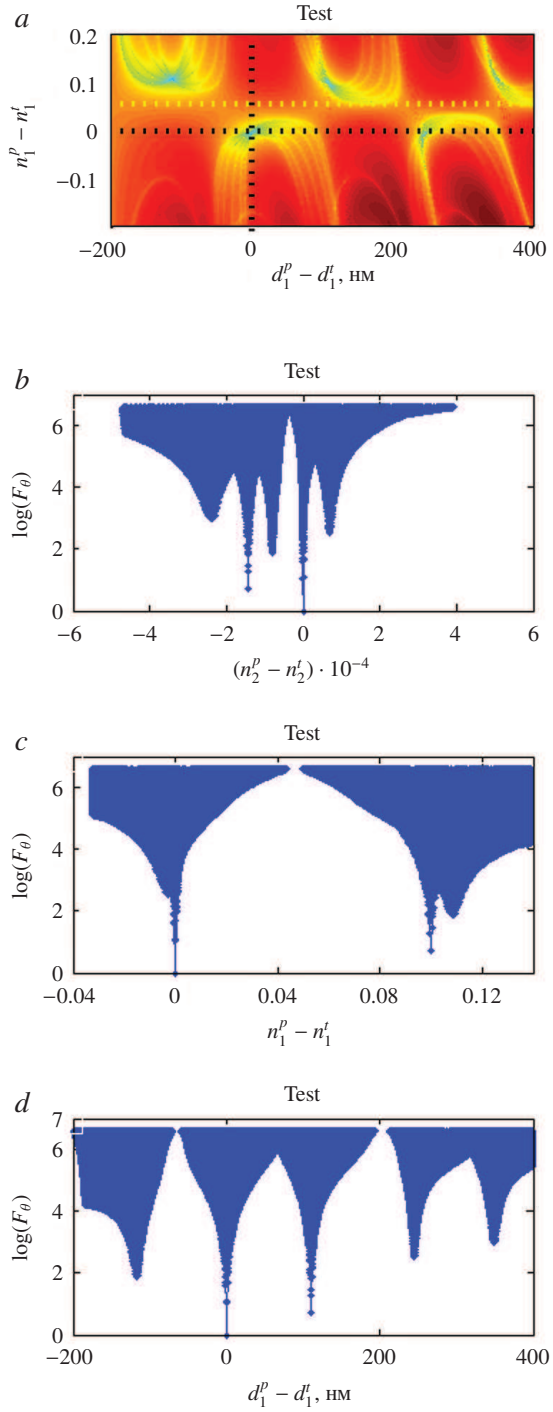

Рис. 10. Пересечение G_q по шести парам ИМ. a — След G_q по плоскости параметров d_1^p, n_1^p, b–d — G_q в координатах отклонений от тестовых значений

Отметим, что изложенный алгоритм находит решение за приемлемое для такого рода задач время. Полный расчет в фазовом пространстве $[n_1^p,\ d_1^p] = [1000,\ 1000]$ значений параметров составил около 5 часов на бытовом компьютере.

4. ОРИГИНАЛЬНАЯ ЦЕЛЕВАЯ ФУНКЦИЯ

Существенным недостатком изложенного алгоритма является длительность расчета. Следует учитывать, что при практическом применении алгоритма необходимо дополнительно проводить минимизацию по угловому положению нормали, чтобы исключить систематическую ошибку экспериментального измерения углового положения ИМ. Ошибки в измерении толщины структуры также потребуют дополнительных расчетов. Это приводит к увеличению времени работы алгоритма в разы.

Авторы нашли оригинальное решение, заметив, что при фиксированных произвольных значениях пары $[n_1^p,\ d_1^p]$ полученное итерационной процедурой решение $n_2^{p,q}$ зависит только от порядкового номера углового положения ИМ q (см. рис. 8), образуя, таким образом, вектор $(n_2^{p,q})$ с числом компонент, равным числу ИМ теста. Разброс значений компонент $(n_2^{p,q})$ от номера q будем характеризовать стандартным отклонением. Когда параметры пары $[n_1^p,\ d_1^p]$ сравняются с соответствующими параметрами теста, значения компонент вектора $(n_2^{p,q})$ перестанут зависеть от номера q, а стандартное отклонение обратится в нуль. При этом значении пары все ПННТ пересекаются в одной точке. Выбрать нужное значение пары позволяет оптимизационная процедура с целевой функцией

$$S = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{q=1}^{N}\left(\overline{n_2^{p,q}} - n_2^{p,q}\right)^2},$$

которая и есть стандартное отклонение компонент вектора $(n_2^{p,q})$. Здесь N — количество принятых к расчету ИМ,

$$\overline{n_2^{p,q}} = \frac{1}{N}\sum_{q=1}^{N} n_2^{p,q}$$

— среднее значение по принятым к расчету ИМ.

Фактически минимальное значение функции S определяют только те компоненты $(n_2^{p,q})$, которые являются пересечением ПННТ для разных значений порядкового номера q. Подчеркнем, что оптимизация идет по параметру $n_2^{p,q}$, который не является наблюдаемым. В доступной литературе подобный прием при решении обратной задачи теории отражения авторам неизвестен.

Итог оптимизации целевой функции S при учете 60 ИМ приведен на рис. 11 и в табл. 2. В отличие от целевой функции G_q функция S дает готовый ответ — положение как глобального, так и ло-

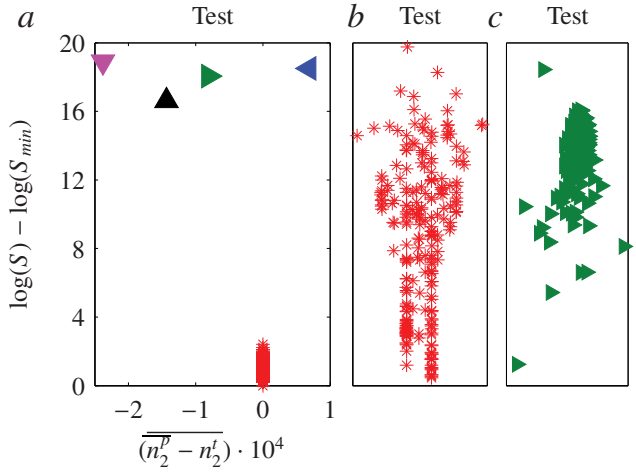

Рис. 11. *a* — Итог оптимизации целевой функции S. Цвета розовый, черный, зеленый, синий обозначают положение локальных минимумов. Красным цветом обозначено положение глобального минимума, *b*, *c* — укрупненные фрагменты глобального (красный) и третьего локального (зеленый) минимумов

Таблица 2. Восстановленные значения параметров структуры

Параметр	Значение	Ст. откл.
$n_1^p = n_3^p$	3.1177849	$4.6 \cdot 10^{-11}$
$d_1^p = d_3^p$, нм	200.4688154	$8.2 \cdot 10^{-8}$
n_2^p	3.1645750	$2.2 \cdot 10^{-14}$
d_2^p, нм	365125.2859994	$1.6 \cdot 10^{-7}$

кальных минимумов, а также дисперсию для искомых параметров структуры. Каждое значение пары $[n_1^p,\ d_1^p]$ «скатывается» к одному из пяти минимумов (см. рис. 11 *a*–*c*). Глобальный минимум более чем на семь порядков глубже ближайшего локального минимума. Существенным преимуществом предложенной оригинальной целевой функции S является сокращение времени расчета более чем на два порядка и практически предельная точность определения параметров структуры (табл. 2).

Представляет интерес анализ зависимости результатов расчета S от количества принятых к расчету ИМ. На рис. 12 *a* приведена зависимость отклонения расчетного показателя преломления пробы $n_{2\,\min}^p$ от его значения для теста при учете разного количества ИМ. Видно, что дисперсия расчетных значений показателя преломления подложки $n_{2\,\min}^p$ при переходе учетного количества ИМ от трех к четырем изменяется на 10 порядков. Эти точки на графике не обозначены. Такое поведение полностью согласуется с предыдущим выводом о том, что как минимум четыре последовательно расположенных ИМ составляют то минимальное количество, которое необходимо принять во внимание для формирования глобального минимума. Функция S, как и функция G_q, снимает плохую обусловленность, свойственную функции F_θ. С увеличением числа учитываемых ИМ отклонение расчетных значений $n_{2\,\min}^p$ от тестовых становится пренебрежимо малым. Можно заключить, что для получения единственного решения обратной задачи теории отражения для симметричных пятислойных структур необходимо и достаточно в НП учесть как минимум четыре ИМ, общую толщину структуры и принять выполнение условия (6).

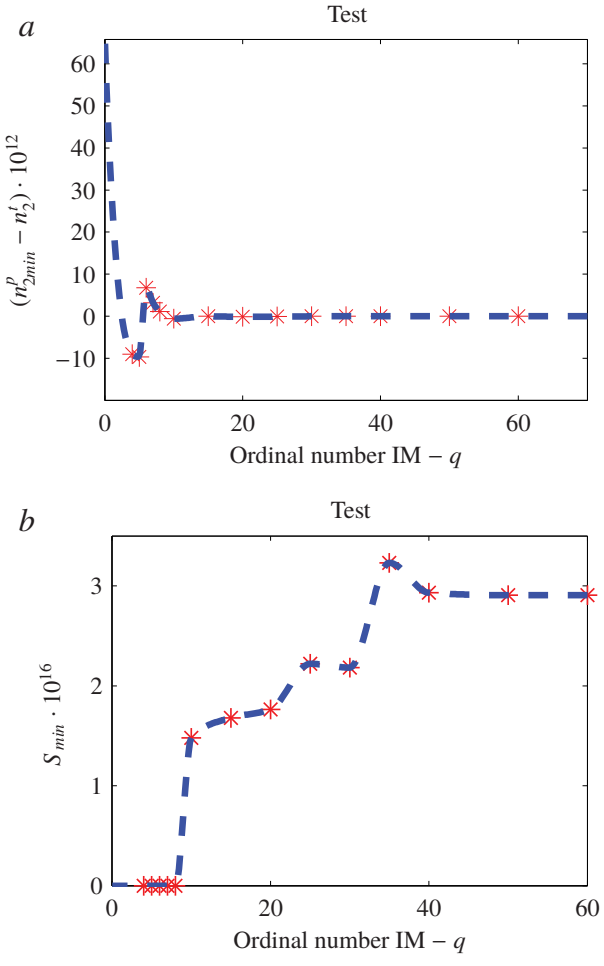

Рис. 12. *a* — Отклонение расчетного показателя преломления пробы $n_{2\,\min}^p$ от его значения для теста при учете разного количества ИМ, *b* — минимальное значение $S_{\min}$ как функция числа учетных ИМ

Парадоксальный результат содержит анализ минимального значения $S_{\min}$ как функции числа учетных ИМ (рис. 12 *b*). Видно, что $S_{\min} = 0$ вплоть до значения $q = 8$ и далее растет. Вывод: минимальное значение целевой функции не является определяющим при расчете параметров структуры при решении обратной задачи теории отражения для симметричных пятислойных структур. Определяющей является минимальная дисперсия расчетного значения $n^p_{2\,\min}$. Окончательный результат восстановления параметров симметричной пятислойной структуры приведен в табл. 2.

5. ОПТИМИЗАЦИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ШУМОВ

Вопрос о влиянии шумовой добавки к НП на способность алгоритма восстановить параметры структуры важен с практической точки зрения. На рис. 13 приведены результаты оптимизации с «подпорченными» НП: угловое положение — нормально распределенной шумовой добавкой с амплитудой $\pm 1''$, а толщина структуры варьировалась на фоне тестового значения с амплитудой $\delta = \pm 50$ нм.

Несмотря на значительную амплитуду поправок к НП, восстановление параметров структуры прошло успешно (табл. 3). На рис. 13 приведен результат для минимального значения стандартного отклонения $S_{\min}$ показателя преломления подложки. По оси абсцисс отложена добавка δ (в нм) к толщине структуры D^t. Видно, что минимальное значение $S_{\min}$ уверенно сходится к нулевому значению δ. Отклонение параметров от тестовых значений достаточно велико, что связано со значительной амплитудой нормально распределенной шумовой добавки к угловому положению ИМ ($\pm 1''$). Для современных цифровых гониометров (например, СГ 1Ц) угловое разрешение составляет менее $0.05''$. Использование такого гониометра, безусловно, повысит точность определения параметров структуры.

Таблица 3. Восстановленные значения параметров структуры при наличии шумовой добавки к НП

Параметр	Значение
$n^p_1 = n^p_3$	$3.1178927 \pm 1 \cdot 10^{-4}$
$d^p_1 = d^p_3$, нм	199.7 ± 0.8
n^p_2	$3.16457 \pm 9 \cdot 10^{-6}$
d^p_2, нм	365128 ± 3

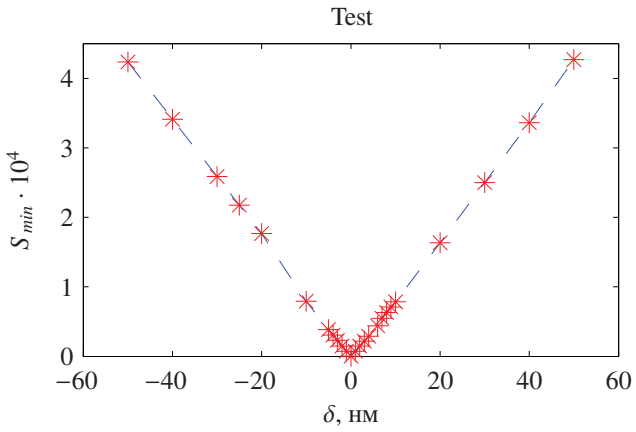

Рис. 13. Результат оптимизации стандартного отклонения компонент вектора $(\overline{n^{p,q}_2})$ при наличии шумовых добавок к угловому положению ИМ для разных значений δ

6. ВЫВОДЫ

Определены необходимые и достаточные условия корректной формулировки обратной задачи теории отражения для симметричных пятислойных структур в области прозрачности:

1) наблюдаемые параметры включают угловое положение не менее четырех интерференционных минимумов и толщину структуры,

2) целевая функция задачи — пересечение целевых функций невязки углового положения ИМ по соответствующим ПННТ,

3) предложена оригинальная целевая функция невязки показателя преломления подложки, позволяющая кардинально сократить время расчета при повышении точности расчета параметров структуры.

Благодарности. Авторы выражают благодарность А. М. Гилинскому за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена на оборудовании инжинирингового центра «Центр компетенций по гетероэпитаксиальным полупроводниковым структурам и электронной компонентной базе для СВЧ-электроники, фотоники и радиофотоники» Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (соглашение № 075-15-2025-632).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. R. Konnikova, A. K. Tretyakov, Yu. A. Akimov, I. A. Ozheredov, Yu. V. Kistenev, and A. P. Shkurinov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **169** (2026) [М. Р. Конникова, А. К. Третьяков, Ю. А. Акимов, И. А. Ожередов, Ю. В. Кистенев, А. П. Шкуринов, ЖЭТФ **169**, 499 (2026)], DOI: 10.31857/S0044451026050011.

2. V. I. Sokolov, N. V. Marusin, V. Ya. Panchenko, A. G. Savelyev, V. N. Seminogov, and E. V. Khaydukov, Quantum Electron. **43**, 1149 (2013) [В. И. Соколов, Н. В. Марусин, В. Я. Панченко, А. Г. Савельев, В. Н. Семиногов, Е. В. Хайдуков, Квант. электрон. **43**, 1149 (2013)], DOI: 10.1070/QE2013v043n12ABEH015272.

3. W. Knoll, MRS Bull. **16**, 29 (1991), DOI: 10.1557/S0883769400056517.

4. S. Krishnamurthy, M. T. Reiten, S. A. Harmon, and R. A. Cheville, Appl. Phys. Lett. **79**, 875 (2001), DOI: 10.1063/1.1389823.

5. S. N. Svitasheva, *Ellipsometry Method for the Investigation of Nanoscale Films of Dielectrics, Semiconductors, and Metals*, SB RAS Publishing House, Novosibirsk (2019) [С. Н. Свиташева, *Метод эллипсометрии для исследования наноразмерных пленок диэлектриков, полупроводников и металлов*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2019)].

6. S. N. Svitasheva, in: *Marchuk Scientific Readings – 2017*, Novosibirsk, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (2017), p. 783 [С. Н. Свиташева, в сб. *Марчуковские научные чтения – 2017*, Ин-т вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск (2017), с. 783].

7. S. N. Svitasheva, Sov. Phys. Dokl. **36**, 365 (1991) [С. Н. Свиташева, ДАН СССР **318**, 1154 (1991)].

8. A. I. Semenenko and I. A. Semenenko, Scientific Instrument Engineering **23**, 47 (2013) [А. И. Семененко, И. А. Семененко, Научное приборостроение **23**, 47 (2013)].

9. L. A. Fedyukhin and A. V. Gorchakov, J. Exp. Theor. Phys. **131**, 689 (2020) [Л. А. Федюхин, А. В. Горчаков, ЖЭТФ **158**, 792 (2020)], DOI: 10.31857/S0044451020110036.

10. L. A. Fedyukhin, A. V. Gorchakov, and E. A. Kolosovsky, Opt. Spectrosc. **128**, 257 (2020) [Л. А. Федюхин, А. В. Горчаков, Е. А. Колосовский, Опт. и спектр. **128**, 266 (2020)], DOI: 10.21883/OS.2020.02.48975.219-19.

11. V. K. Gromov, *Introduction to Ellipsometry*, Leningrad Univ. Press, Leningrad (1986) [В. К. Громов, *Введение в эллипсометрию*, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1986)].

12. L. A. Fedyukhin, E. A. Kolosovskii, and A. V. Gorchakov, JETP Lett. **116**, 281 (2022) [Л. А. Федюхин, Е. А. Колосовский, А. В. Горчаков, Письма в ЖЭТФ **116**, 275 (2022)], DOI: 10.31857/S1234567822170025.

13. L. A. Fedyukhin, A. V. Gorchakov, N. G. Korobeishchikov, and I. V. Nikolaev, JETP Lett. **114**, 256 (2021) [Л. А. Федюхин, А. В. Горчаков, Н. Г. Коробейщиков, И. В. Николаев, Письма в ЖЭТФ **114**, 304 (2021)], DOI: 10.31857/S1234567821170031.

14. L. A. Fedyukhin, E. A. Kolosovsky, and A. V. Gorchakov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **168** (2025) [Л. А. Федюхин, Е. А. Колосовский, А. В. Горчаков, ЖЭТФ **168**, 143 (2025)], DOI: 10.31857/S0044451025080012.

15. L. A. Fedyukhin, E. A. Kolosovsky, and A. V. Gorchakov, Opt. Spectrosc. **132**, 1290 (2024) [Л. А. Федюхин, Е. А. Колосовский, А. В. Горчаков, Опт. и спектр. **132**, 1290 (2024)], DOI: 10.61011/OS.2024.12.59808.6765-24.

16. V. E. Chernyakov, Yu. V. Tekhtelev, S. V. Kara-Murza, and A. A. Tikhy, Bull. Lugansk State Pedagogical University, Series 5, № 2(83), 95 (2022) [В. Е. Черняков, Ю. В. Техтелев, С. В. Кара-Мурза, А. А. Тихий, Вестник Луганского государственного педагогического университета, сер. 5, № 2(83), 95 (2022)].

17. V. V. Bobro and A. I. Semenenko, Scientific Instrument Engineering **10**, 31 (2000) [В. В. Бобро, А. И. Семененко, Научное приборостроение **10**, 31 (2000)].

18. N. S. Bakhvalov, N. P. Zhidkov, and G. M Kobelkov, *Numerical Methods*, 7th ed. Moscow (2011) [Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков, *Численные методы*, 7-е изд., Москва (2011)].

On the Inverse Problem of the Reflection Theory for Five-Layer Symmetric Structures

L. A. Fedyukhin [a*], ***E. A. Kolosovsky*** [a], ***A. V. Gorchakov*** [b]

[a] Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
630090, Novosibirsk, Russia

[b] Novosibirsk State University
630090, Novosibirsk, Russia

*E-mail: leogal2007@mail.ru

Received June 18, 2026
Revised September 20, 2026
Accepted October 12, 2026

Abstract

The results of a numerical experiment on the inverse problem of the reflection theory in the model of a five-layer symmetric structure are presented. A set of observable parameters necessary and sufficient to obtaine a unique solution that determines the optical parameters and thicknesses of all layers of the structure is proposed. An objective function of the optimization technique that removes the ill-conditioning of the inverse problem of the reflection theory is proposed. An original objective function with respect to a non-observable parameter is proposed to significantly reduce the computation time.

Keywords: inverse problem of the reflection theory, five-layer symmetric structure, interference minima, method of invariants, objective function, ill-conditioning

Acknowledgements. The authors are grateful to A. M. Gilinsky for useful discussions.

Funding. This work was carried out using the equipment of the engineering center "Center of Excellence for Heteroepitaxial Semiconductor Structures and Electronic Component Base for Microwave Electronics, Photonics, and Radiophotonics" of the A. V. Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (agreement No. 075–15-2025-632).

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflict of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.