

## О Т З Ы В

на диссертацию **Свиташевой С.Н.**

**“Развитие метода эллипсометрии для исследования наноразмерных пленок диэлектриков, полупроводников и металлов”,**  
представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.01 –  
“Приборы и методы экспериментальной физики”

Представленная работа посвящена проблеме исследования фундаментальных положений и развитию метода эллипсометрии, чрезвычайно актуальной в силу насущной необходимости точной диагностики, характеристики и контроля наноразмерных пленок в приборах микроэлектроники нового поколения. Рассматриваемые современные принципы и технологии измерений параметров тонкопленочных покрытий, позволяющие существенно увеличить точность и чувствительность эллипсометров, основаны на математическом моделировании физических процессов отражения, преломления и рассеяния излучения на наноразмерных объектах, статистической обработке экспериментальных результатов и решения обратных задач по идентификации параметров изучаемых сред. Результаты соответствующих исследований имеют не только огромное теоретическое значение для современного материаловедения, но уже находят многочисленные практические приложения для разработки приборов новой техники в микроэлектронике, биологии и медицине.

В основе исследований С.Н.Свиташевой лежит разработка физико-математических моделей оптических явлений на поверхностях многослойных пленок диэлектриков, полупроводников и металлов, разработка методики измерений и статистической обработки экспериментальных данных, а также создание и обоснование алгоритмов условной минимизации целевого функционала для решения формулируемых обратных задач идентификации параметров изучаемых объектов. Важно отметить, что данный класс проблем относится к некорректным и характеризуется зачастую неединственностью, а также случайным характером решений при наличии зашумленных исходных данных.

Основа предлагаемой методики решения обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ) заключается в замене реальных шероховатых поверхностей эквивалентными пленками, определение оптических свойств которых требует решения трансцендентных уравнений с тригонометрическими и экспоненциальными функциями. Определение искомых параметров такой постановки, при заданных ограничениях на допустимые интервалы их изменений, осуществляются путем минимизации различных норм для отклонений расчетных и измеряемых величин эллипсометрических углов.

Используемый автором подход разрабатывается с учетом углубленного анализа специфики рассматриваемого класса задач и сводится к

линеаризации функционала и применении симплекс-метода, а составленная из производных матрица Гессе вычисляется только с целью определения свойств существования и единственности решений в соответствующей окрестности изменения искомых параметров. В диссертации показано, что успех или неуспех конечного решения зависит от искусства определения целевого функционала и допустимых интервалов изменения параметров, а также от способов обработки и фильтрации промежуточных численных результатов. При этом активно применяются такие приемы повышения устойчивости и точности вычислений, как динамическое уменьшение границ априорной информации, определение величины обусловленности обратной задачи, подбор начального приближения в итерационном процессе и модификация критериев его останова. Эффективность разработанных подходов многократно иллюстрируется для различных типов эллипсометрических измерений: многоугольных, одноволновых, модуляционных, иммерсионных, кинетических и спектральных.

Помимо этого, С.Н.Свиташевой применяются аналитические методы и активно используются номограммы. В частности, одно из оригинальных решений основного уравнения эллипсометрии для поглощающих сред представляется пространственной кривой, одна из проекций которой является логарифмической спиралью с переменным коэффициентом роста. На основе цикла авторских методических и теоретических исследований получен ряд значимых результатов физического характера: показаны возможности многозначности решения задачи эллипсометрии как для поглощающих, так и для прозрачных пленок, найдены подходы для устранения неопределенности, предложены способы проверки адекватности исследуемой системы и выбранной модели расчета, введено понятие дефекта соответствующего измерения, которое можно эффективно использовать для планирование схемы эллипсометрических измерений.

На основе проведенного автором широкого круга работ по проведению компьютерных и натурных экспериментов в диссертации получен ряд серьезных физических результатов практического значения: сравнение поляризационных характеристик различных диэлектриков с вытравленным рельефом, анализ края поглощения пленок в зависимости от состава слоев гетерогенных структур, установление корреляции между оптическими свойствами пленок, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией, и морфологией их поверхности, исследование сложного фазового состава термически окисленных на воздухе пленок титана, интерпретация аномального кажущегося поглощения и отрицательного показателя преломления в области относительной прозрачности кремния и др. Показано, что модель эквивалентной пленки неприменима для расчета кремниевых наноструктур. Объяснено изменение толщин пленок двуокиси титана во время отжига, а также сдвиг края поглощения и смещение критических точек. Определено влияние легирующей примеси на комплексный показатель преломления различных типов пленок. Разработаны методы эллипсометрии для измерения кинетических параметров роста наноразмерных окислов.

Установлены корреляционные зависимости поляризационных свойств наноразмерных пленок от их состава, гоногенности и морфологии.

По характеру представленных исследований можно сделать следующие замечания. Во-первых, современный уровень суперкомпьютеров с десятками тысяч вычислительных ядер и развитие параллельных алгоритмов позволяют ставить задачи математического моделирования на качественно новый уровень с нахождением реальной геометрии шероховатых поверхностей на основе решения трехмерного комплексного уравнения Гельмгольца для электромагнитного поля. Такой подход позволил бы, во-первых, обосновать численно используемый традиционный принцип построения эквивалентных пленок, а во-вторых, – строить иерархию математических моделей различного уровня сложности. Следует сказать, что используемый в диссертации традиционный подход базируется на исследовании так называемого основного уравнения эллипсометрии, содержащего в качестве параметров среды коэффициенты Френеля и представляющего собой не что иное, как решение достаточно идеализированной модельной краевой задачи. Переход же к реальной трехмерной постановке позволит значительно повысить разрешение моделей и алгоритмов, но приведет к существенному росту вычислительной ресурсоемкости расчетов, невозможных без применения современных существующих алгоритмов, масштабируемого параллелизма и новых технологий математического моделирования на многопроцессорных суперкомпьютерных системах, что приведет к кардинальному изменению стиля работы физика, как теоретика, так и экспериментатора.

Второе замечание касается того, что эффективность решения обратных задач можно было бы существенно увеличить за счет использования активно развиваемых математиками в последние десятилетия таких оптимизационных подходов, как методы внутренних точек, последовательного квадратичного программирования и доверительных интервалов.

В целом же данная работа представляет собой законченное исследование, в котором на основе аналитических исследований и численного решения прямых и обратных задач идентификации параметров сложных оптических сред значительно продвинуты фундаментальные вопросы обоснования, обеспечения требуемой точности и надежности теоретических методов эллипсометрии, а также алгоритмов планирования, обработки и обоснования экспериментов для исследования наноразмерных пленок в широком классе современных микроэлектронных устройств. Достоверность авторских результатов многократно обоснована сопоставлением с данными натуральных измерений, а также хорошим согласованием с результатами других известных исследователей.

Результаты автора широко опубликованы в рейтинговых журналах. Отметим, в частности, что в 2011 – 2013 годах вышло 13 работ С.Н.Свиташевой, в том числе одна монография на английском языке. Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Работа,

безусловно, удовлетворяет требованиям ВАК к докторским диссертациям по специальности 01.04.01 "Приборы и методы экспериментальной физики", а С.Н.Свиташева заслуживает присуждения искомой степени.

Г.н.с. ИВМиМГ СО РАН,  
д.ф.-м.н., профессор

/В.П.Ильин /

Почтовый адрес: 630090, г.Новосибирск,  
пр. Лаврентьева, 6, ИВМиМГ СО РАН,  
e-mail: ilin@sscc.ru



Подпись В.П.Ильина  
заверяю, ученый секретарь ИВМиМГ СО РАН  
к.ф.-м.н.

/М.А.Марченко /