

REFLECTOMETRY DIAGNOSTICS OF DIFFUSE INHOMOGENEITIES IN MULTILAYER PERIODIC STRUCTURES

Gaikovich K. P., Gaikovich P. K.¹, Sumin M. I.²

¹ Institute for Physics of Microstructures RAS, GSP-105, Nizhny Novgorod, 607680, Russia,

² Nizhny Novgorod State University, 23, Gagarina Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia
Ph.: +7(831)4179464, e-mail: gai@ipmras.ru

Abstract — A new approach in frameworks of the dual regularization method is proposed in the solution of the reflectometry inverse problem to retrieve profiles of diffuse inhomogeneities in multilayer periodic epitaxy nanostructures by multifrequency measurements of power reflection coefficient. To compensate the absence of phase information in input data, the *a priori* information about the belonging of the desired solution to a compact set of functions is involved in the proposed algorithm.

РЕФЛЕКТОМЕТРИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА ДИФФУЗИОННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В МНОГОСЛОЙНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Гайкович К. П., Гайкович П. К.¹, Сумин М. И.²

¹ Институт физики микроструктур РАН, ГСП-105, Нижний Новгород, 607680, Россия

² Нижегородский государственный университет, Н. Новгород, пр. Гагарина, 23, 603950, Россия
тел.: (831)4179464, e-mail: gai@ipmras.ru

Аннотация — Предложен новый подход в рамках метода двойственной регуляризации при его использовании для решения обратной задачи рефлектометрии с целью восстановления диффузных неоднородностей в многослойных периодических эпитаксиальных наноструктурах по данным многочастотных измерений коэффициента отражения по мощности. Для компенсации потери фазовой информации во входных данных в предложенном алгоритме используется априорная информация о принадлежности точного решения к компактному классу функций.

I. Введение

Рассматриваемая обратная задача рефлектометрической диагностики неоднородностей диэлектрических многослойных структур, таких, как многослойные зеркала рентгеновской оптики, возникающих из-за диффузии материалов в процессе их изготовления методами молекулярной эпитаксии, относится к классу одномерных некорректных нелинейных задач рассеяния. Попытки их итерационного решения на основе эквивалентного нелинейного интегрального уравнения, начиная с борновского приближения, выявили трудности, связанные с возможностью раскочки отклонений от точного решения, возникающих на первом шаге [1,2]. С целью преодоления этих трудностей были разработаны алгоритмы [3,4], основанные на методе двойственной регуляризации в лагранжевом подходе теории оптимизации [5], основной конструкцией которого служит модифицированный функционал Лагранжа в теории условной оптимизации. Результаты их применения к разным задачам рефлектометрической диагностики продемонстрировали способность таких алгоритмов восстанавливать сильные неоднородности, ранее недоступные для анализа.

Рассматриваемая в данной работе задача восстановления неоднородностей многослойных структур по многочастотным измерениям коэффициента отражения по мощности особенно актуальна для структур рентгеновской оптики, где измерения фазы отраженного сигнала затруднены [2]. Для решения этой задачи также были развиты алгоритмы метода двойственной регуляризации, решающие задачу на основе исходных интегральных уравнений Максвелла [3,4]. Результаты их исследования показали, что они способны преодолевать трудности решения на основе интегрального уравнения, но предъявляют высокие требования к точности данных, которые в

реальном эксперименте достижимы лишь путем усреднения результатов ряда последовательных измерений. Для преодоления этого ограничения в [6] был применен разработанный в [7] метод, в котором вместо многочастотных данных использовался синтезированный путем обратного фурье-преобразования комплексный псевдоимпульс. В таком импульсе вклад некоррелированных по частоте ошибок измерения смещается по временному параметру за пределы информативной для решения области. Однако, потеря фазовой информации все же существенным образом влияет на качество решения, и для получения хороших результатов при минимизации обобщенного функционала Лагранжа требовалось проводить первого приближения путем численного моделирования и корректировать его в случаях несрабатывания алгоритма.

В данной работе предлагается компенсировать потерю фазовой информации введением в алгоритм двойственной регуляризации имеющейся информации о принадлежности решения к компактному классу функций – в данном случае, к классу монотонно невозрастающих (неубывающих) функций. Как известно из теории линейных некорректных задач [8], при использовании такой информации задача минимизации функционала невязки с соответствующими ограничениями становится выпуклой, устойчивой, и может быть решена стандартным образом.

II. Основная часть

Следуя [2], рассмотрим периодическую многослойную (в z -направлении) структуру с периодом $d = d_1 + d_2$ и профилем комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z) = \varepsilon'(z) + i\varepsilon''(z)$. Полагая, что профиль неоднородностей $\varepsilon_1(z) = \varepsilon_1(z + d)$ также является периодическим, его можно представить как

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_{01}, & z < 0 \\ \varepsilon_{02} + \varepsilon_1(z), & 2id \leq z < 2id + d_1 \\ \varepsilon_{03} + \varepsilon_1(z), & (2i+1)d \leq z \leq (2i+1)d + d_2 \\ \varepsilon_{04}, & z > Nd, \end{cases} \quad (1)$$

$i = 0, 2, \dots, N/2$. Поскольку $\varepsilon_1(z)$ формируется взаимным проникновением материалов базовой меандровой структуры, его можно представить одной из формул для смеси, например как $\varepsilon_1(z) = f(z)(\varepsilon_{03} - \varepsilon_{02})$, где профиль комплексной диэлектрической проницаемости определяется реальной функцией $f(z)$.

Для диагностики используется частотная зависимость разности измеренного коэффициента отражения и вычисленного для идеальной структуры

$$\Delta r_0(\omega) = |R_m|^2 - |R_0|^2. \quad (2)$$

Тогда задача состоит в нахождении профиля $f(z)$, удовлетворяющего условию

$$\Delta r[f](\omega) = |R|^2[f] - |R_0|^2 = \Delta r_0(\omega), \quad (3)$$

где $|R|^2[f]$ – коэффициент отражения, вычисленный для профиля $f(z)$. Как отмечалось выше, переход к синтезированному псевдоимпульсу

$$\Delta r_0(z_s) = \int_0^\infty \Delta r_0(\omega) \exp(i\omega z_s/c) d\omega, \quad (4)$$

где, аналогично [6,7], с учетом скорости распространения сигнала выполнен переход от временного параметра к параметру эффективной длины рассеяния z_s , позволяет существенно уменьшить требования к уровню точности многочастотных данных.

Для решения задачи (3) в рамках предлагаемого алгоритма метода двойственной регуляризации [5] необходимо минимизировать модифицированный функционал Лагранжа

$$L_\mu(f, \lambda) = \|f\|^2 + \int_0^{z_s^{\max}} [\lambda(z_s) \operatorname{Re}(\Delta r[f](z_s) - \Delta r_0(z_s))] dz_s + \mu \left(\int_0^{z_s^{\max}} |\Delta r[f](z_s) - \Delta r_0(z_s)|^2 dz_s \right)^{1/2} + \int_0^{z_s^{\max}} |\Delta r[f](z_s) - \Delta r_0(z_s)|^2 dz_s, \quad (5)$$

по переменной $f(z)$ на классе монотонных ограниченных функций $0 \leq f \leq 1$. В силу компактности в L_2 класса ограниченных монотонных функций, минимум (5) заведомо достигается для $\mu > 0$ при любом значении $\lambda(z_s)$. Соответствующая регуляризованная двойственная задача состоит в параллельной максимизации выпуклого функционала

$$V_\mu^\alpha(\lambda) \equiv V_\mu(\lambda) - \alpha \|\lambda\|^2 \equiv \min_{f \in D} L_\mu(f, \lambda) - \alpha \|\lambda\|^2 \rightarrow \max, \quad (6)$$

по коэффициенту Лагранжа $\lambda(z_s)$ на гильбертовом пространстве $L_2^2(z_{s1}, z_{s2}) = L_2(z_{s1}, z_{s2}) \times L_2(z_{s1}, z_{s2})$ с регуляризацией по Тихонову (α – параметр регуляризации). Седловая точка, достигаемая при параллельном решении задач (5) и (6) дает искомое решение.

Такое построение алгоритма находится в полном соответствии с условиями рассматриваемой задачи. Действительно, по самой природе процесса диффузии функция $f(z)$, описывающая плавный переход между значениями диэлектрических проницаемостей двух веществ периодической структуры, является монотонной, что и является естественной априорной информацией, которую можно использовать в данном алгоритме для компенсации потери фазовой информации.

Результаты численного моделирования на основе предложенного алгоритма метода двойственной регуляризации на компактных множествах показали его устойчивую сходимость, хотя в данном случае, как и во всех нелинейных задачах такого типа, при минимизации функционала Лагранжа имеется возможность попадания в один из локальных минимумов, что необходимо проверять, варьируя начальное приближение.

III. Заключение

В работе предложен новый алгоритм в рамках метода двойственной регуляризации для решения обратной задачи рефлектометрии диффузных неоднородностей в периодических эпитаксиальных структурах, основанный на использовании априорной информации о принадлежности решения к компактному классу монотонных функций.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты. №13-07-97028_p_Поволжье и №13-02-12155_офи_м, а также программы Российской Академии Наук

IV. References

- [1] Gaikovich K.P. Ultra low frequency sounding and tomography of earth crust. *Third International Conference "Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals (UWBUSIS-2006)*, Sevastopol, 2006, pp. 294-296.
- [2] Barisheva M.M., Gaikovich K.P., Gaikovich P.K., et al, Reflectometry sounding of inhomogeneities in periodic multi-layer structures. *12th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON-2010)* Munich, Germany, 2010, pp. Tu.P5.
- [3] Gaikovich K.P., Gaikovich P.K., Galkin O.E., Sumin M.I. Dual regularization in one-dimensional inverse scattering problem. *5th International Conference "Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals" (UWBUSIS-2010)*, Sevastopol, 2010, 90-92.
- [4] Gaikovich P.K., Sumin M.I., Gaikovich K.P. One-dimensional inverse scattering problem. *13th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON-2011)*, Stockholm, Sweden, 2011, pp. We.A2.4.
- [5] Sumin M.I. 'Parametric Dual Regularization in a Nonlinear Mathematical Programming', in *Advances in Mathematics Research, Volume 11, Chapter 5*, New-York, Nova Science Publishers Inc., 2010. pp. 103-134.
- [6] Gaikovich K.P., Gaikovich P.K., Sumin M.I. Inverse scattering problem in pseudopulse diagnostics of periodic structures. *4th Int. Conf. on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET-2012)* Kharkiv, Ukraine, 2012, pp. 390-393.
- [7] Gaikovich K.P., Gaikovich P.K., Maksimovitch Ye.S., Badeev V.A. Pseudopulse near-field subsurface tomography, *Physical Review Letters*, 2012, vol. 108, No. 16, pp. 163902.
- [8] Tikhonov A. N., *Solution of ill-posed problems*, New York, Winston, 1977.