— ТЕХНОЛОГИИ —

УДК 681.785

ПРИМЕНЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ, МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНОК В ТЕХНОЛОГИИ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

© 2024 г. Р. А. Гайдукасов^{а,} *, А. В. Мяконьких^а

^аФизико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН, Москва, Россия *E-mail: gaydukasov.r@gmail.com Поступила в редакцию 07.10.2023 г. После доработки 10.11.2023 г. Принята к публикации 10.11.2023 г.

В статье рассматриваются модельные и безмодельные подходы к решению задач спектральной эллипсометрии в применении для задач микроэлектроники, связанных с измерением толщин и оптических параметров тонких слоев диэлектриков, металлов и полупроводников. В основе модельных подходов лежит использование априорной информации о виде дисперсионного соотношения Коши, Друде, Друде—Лоренца и Тауца—Лоренца. Безмодельные подходы могут использовать любую гладкую многопараметрическую функциональную зависимость, способную описать плавную спектральную кривую. Также для реализации безмодельного подхода можно использовать машинное обучение, которое хорошо подходит для определения толщины многослойных структур и их оптических характеристик и позволяет существенно повысить скорость обработки данных.

Ключевые слова: спектральная эллипсометрия, обработка данных, обратные задачи, методы оптимизации, машинное обучение, глубокое обучение

DOI: 10.31857/S0544126924010072

1. ВВЕДЕНИЕ

Основы метода эллипсометрии были разработаны П. Друде [1], а сам термин "эллипсометрия" был предложен в 1944 г. А. Ротеном [2]. Толчком для развития метода стала необходимость прецизионного контроля оптических параметров и толщин слоев в структурах микроэлектроники.

В первых работах в качестве источника монохроматического света использовалось излучение зеленой линии ртути. В дальнейшем в качестве источника монохроматического излучения применялись и лазеры, поэтому исторически одноволновую эллипсометрию называют лазерной. Одной из основных проблем лазерной эллипсометрии была неоднозначность решения задачи эллипсометрии при наличии информации о поляризационных характеристиках отражения от образца только на одной длине волны. Этого недостатка лишена спектральная эллипсометрия, использующая широкополосные источники света с непрерывным спектром, покрывающие обширный спектральный диапазон. Таким образом, стало возможно получить зависимость компонент тензора диэлектрической проницаемости от длины волны

в соответствующей спектральной области. Это позволяет измерить и ряд фундаментальных физических свойств исследуемого материала, связанных с проводимостью или электронной структурой.

В дальнейшем метод был значительно развит, в частности, были разработаны подходы для решения разнообразных задач, от определения оптических параметров и толщин отдельных слоев в многослойных структурах, до определения проводимости металлов [3], методов *in situ* измерения температуры полупроводниковых пластинных в технологических процессах, например ALD [4–6], определения параметров пористости low-k диэлектриков [7] и т.д.

Вычислительная сложность задач спектральной эллипсометрии, сводящихся, как правило, к задаче оптимизации функционала в многомерном пространстве, ограничивала возможность широкого применения эллипсометрии в технологических задачах. Определение необходимых величин с помощью полученных теоретических соотношений было возможно только для самых примитивных задач. Для упрощения анализа данных в условиях ограниченности вычислительных возможностей, как правило, применялся графоаналитический метод номограмм [8, 9], обладающий рядом достоинств. Прежде всего, он нагляден и дает информацию не только о решении, но и о его точности.

Появление достаточно производительных компьютеров, способных осуществить численное решение для обратной задачи эллипсометрии за достаточно короткое время, в том числе и *in situ*, позволило расширить возможности применения эллипсометрии, особенно в условиях технологического контроля параметров производственных процессов микроэлектроники.

Как правило, задача эллипсометрии сводится к минимизации функции ошибок:

$$argminF(p_1, p_2,...) - F(p_1^e, p_2^e,...)_2,$$
 (1)

F — целевая функция; p_i — параметры, измеряемые методом эллипсометрии, индекс e означает экспериментальные.

Основным достоинством метода является возможность учесть в форме целевой функции априорную информацию. Существует множество способов для численного решения задачи (1): метод градиентного спуска [10] и его вариации, метод деформируемого многогранника [11] и ряд других.

В настоящее время идет бурное развитие и внедрение машинного обучения в широкий круг научных и практических задач, связанных с обработкой данных, в том числе и эллипсометрии. Активно разрабатываются новые подходы к решению обратной задачи эллипсометрии, основанные на применении машинного обучения [12, 13], в том числе определения толщины пленки в процессах ALD [14] и контроля технологических процессов микроэлектроники [15]. Разработка таких методов особенно актуальна для задач *in situ*, поскольку существенное сокращение машинного времени, требуемого для расчетов, позволяет организовать обработку результатов измерений без задержки в реальном времени.

2. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

При падении на плоскость образца плоскополяризованной волны принято различать два вида поляризаций в зависимости от направления вектора *E*: вдоль плоскости падения (*p*-поляризацию) и ортогонально ей (*s*-поляризацию) [16].

В теории эллипсометрии рассматривается взаимодействие квазимонохроматического светового пучка со слоистой отражающей структурой и исследуется разность фаз $\delta_p - \delta_s$ комплексных коэффициентов отражения и отношение амплитуд коэффициентов отражения r_s, r_p для *s*- и *p*-поляризации (рис. 1):

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 1 2024



Рис. 1. Схема экспериментальных установок спектральной эллипсометрии. Линейно поляризованный свет падает на образец с углом падения ф.

$$\Delta = \boldsymbol{\delta}_p - \boldsymbol{\delta}_s, \qquad \operatorname{tg}(\boldsymbol{\Psi}) = |\boldsymbol{r}_p| / |\boldsymbol{r}_s|.$$

Отсюда удобно вывести основное эллипсометрическое соотношение:

$$\rho = tg(\psi)exp(i\Delta), \qquad (2)$$

где ρ — относительный комплексный коэффициент отражения.

Задача поиска интенсивностей отраженного и преломленного света в зависимости от состояния поляризации на границе вакуум—среда решается с помощью соотношений Френеля; в случае многослойных структур эти же соотношения определяют коэффициенты отражения на каждой из границ раздела, а общий относительный комплексный коэффициент отражения от структуры А определяется с учетом поглощения и интерференции всех волн, образовавшихся в результате множественных отражений и преломлений на границах [17].

Эллипсометрическое измерение состоит из нескольких этапов: помимо измерения эллипсометрических углов ψ и Δ необходимо выбрать модель и решить задачу (1) для определения оптических параметров и толщин слоев изучаемой системы. Существуют различные подходы к определению функции потерь для анализа данных спектральной эллипсометрии [18]. Один из них основан на использовании величины, часто называемой среднеквадратичной ошибкой (*MSE*). В эллипсометрии *MSE* определяется различием между измеренными (*Meas*) и модельными данными (*Mod*) и может быть выражена следующим образом:

$$MSE = \sqrt{\frac{1}{2N - M} \sum_{i=1}^{N} \left[\left(\Psi_i^{Mod} - \Psi_i^{Meas} \right)^2 + \right]}, \qquad (3)$$

где *N* — число пар измерений ψ и Δ ; *M* — число настраиваемых параметров модели.

Если значения разностей в скобах в формуле (3) нормировать на величину экспериментальной погрешности, то данная величина будет подчиняться закону распределения χ^2 , что может быть

использовано для статистических оценок погрешности результата эллипсометрического измерения. Достоинством метода эллипсометрии является использование только состояния поляризации, что позволяет не предъявлять высоких требований к стабильности интенсивности излучения источника.

Эллипсометрическая модель включает в себя оптические характеристики всех слоев (в том числе и подложки) и их толщины. Оптические константы (или их спектральные зависимости) материалов, из которых состоят слои структуры, могут быть взяты из литературы в табличном виде либо могут быть заданы параметрической моделью, параметры которой определяются при решении задачи (1).

3. МОДЕЛИ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЕЩЕСТВ

Каждый слой структуры описывается дисперсионным уравнением, которое определяет комплексную диэлектрическую проницаемость $\mu(\lambda) \equiv N^2(\lambda) = \varepsilon_{re} - i\varepsilon_{im}$ материала, из которого он состоит. Показатель преломления N в общем случае является комплексным: N = n - ik, где n показатель преломления; k — коэффициент поглощения. Дисперсионные уравнения описывают оптические свойства для одного материала. В случае композитных слоев, в которых в матрицу основного вещества внедрены приблизительно однородные по форме и размеру включения из одного или нескольких других материалов, используют приближение эффективной среды (EMA):

$$\frac{\varepsilon_{\text{EMA}} - \varepsilon_h}{\varepsilon_{\text{EMA}} - \gamma \varepsilon_h} = \sum_j f_j \frac{\varepsilon_j - \varepsilon_h}{\varepsilon_j - \gamma \varepsilon_h},$$
(4)

где $\varepsilon_{\text{ЕМА}}$ — диэлектрическая функция эффективной среды; ε_h — диэлектрическая функция основного вещества; γ — коэффициент, связанный с экранированием и формой включений (например, $\gamma = 2$ для трехмерных сфер); f_j — доля *j*-го компонента; ε_j — диэлектрическая проницаемость для *j*-го компонента [18].

Этот же подход применяется для пористых сред, где поры рассматриваются как включения вакуума, и задач адсорбции в порах, где адсорбированная конденсированная жидкость представляется так же, как включение.

В классическом случае, когда анализ экспериментальных данных осуществляется оператором, подбор параметров модели может быть трудоемким процессом и занимать много времени, для отдельных практически значимых случаев в литературе описаны подходы, позволяющие подобрать параметры модели в результате нескольких итераций [19]. В случае диэлектриков без поглощения модели имеют 3–4 параметра, а в случае полупроводников и металлов их может быть более 10. Наличие в модели избыточного числа параметров хоть и понижает значение *MSE*, но может приводить к физически не обоснованным результатам.

В случае отсутствия априорной информации о виде дисперсионного соотношения материалов слоев можно использовать метод подгонки поточечно (для каждой длины волны). Однако такой способ приводит к появлению дополнительной ошибки из-за большого количества оцениваемых в модели параметров.

Снижение числа параметров, описывающих в модели оптические характеристики, может быть достигнуто выбором гладкой многопараметрической функциональной зависимости, способной описать плавную спектральную кривую.

Например, таким уравнением может быть многочлен степени *m*, который может описывать любую оптическую функцию из $n,k, \varepsilon_{re}, \varepsilon_{im}$:

$$p_m(\lambda) = a_m \lambda^m + a_{m-1} \lambda^{m-1} + \dots + a_1 \lambda + a_0.$$
 (5)

Такой подход реализуется в модели B-spline. Эта модель является достаточно распространенной и в некоторых случаях может показывать хорошие результаты для органических материалов, диэлектриков, полупроводников и металлов. Для дисперсионных функций, полученных без использования априорной информации, могут не выполняться некоторые физические ограничения, например соотношения Крамерса—Кронига. Такие подходы могут быть применены для получения первичных оценок, на основе которых будет строиться модель, основанная на физических законах [19, 20].

При наличии априорной информации о материале слоя вид дисперсионных уравнений выбирается в зависимости от физических особенностей материала.

В самом простом случае зависимость показателя преломления *n* от длины волны λ падающего света описывается формулой Коши [21]:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}.$$
 (6)

Она описывает зависимость показателя преломления от длины волны в материалах без поглощения и имеет малое количество оцениваемых параметров, что значительно упрощает подгонку. Также во многих случаях коэффициент *С* можно взять равным нулю для упрощения. Существуют разновидности такой модели, учитывающие поглощение [22].

Другой зависимостью для показателя преломления *n* от длины волны λ является модель Селлмейера [23], имеющая следующий вид:

$$n^{2}(\lambda) = A + \sum_{i} \frac{B_{i}\lambda^{2}}{\lambda^{2} - C_{i}}.$$
 (7)



Рис. 2. Действительная и мнимая части осциллятора Лоренца с центром $E_0 = 3$, шириной $\Gamma = 0.5$ и силой осциллятора A = 25.

Коэффициенты *A*, *B_i* и *C_i* называются коэффициентами Селлмейера и определяются в процессе подгонки.

Известны и другие, менее распространенные модели для описания оптически прозрачных материалов: модель Германа [24], Конради [25] и Бриота [26].

Интересный подход применения физической аналогии реализован в классе моделей, феноменологически описывающих поведение оптических характеристик металлов, диэлектриков и полупроводников. Этот подход основан на представлении различных механизмов поглощения света [27] и сходстве поглощения энергии в оптических системах с механическими осцилляторами. Оказалось, что несмотря на свою простоту, данное представление довольно точно описывать оптику веществ в видимом диапазоне, при этом параметры осцилляторов не имеют наглядной физической интерпретации. Как правило, такие модели учитывают, что действительная \mathbf{E}_{re} и мнимая \mathbf{E}_{im} части диэлектрической функции взаимосвязаны через соотношение Крамерса — Кронига:

$$\varepsilon_{re}\left(E\right) = 1 + \frac{2}{\pi} vp \int_{0}^{\infty} \frac{E' \varepsilon_{im}\left(E'\right)}{E'^{2} - E^{2}} dE'.$$
(8)

Классической моделью для описания поглощения в материале стал осциллятор Лоренца [28]:

$$\varepsilon_{Lorentz}\left(E\right) = \frac{A}{E_0^2 - E^2 + i\Gamma E}.$$
(9)

Здесь A — сила осциллятора; E_0 — его центр; Γ — ширина (рис. 2).

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 1 2024

Выражение диэлектрической проницаемости для осциллятора Лоренца может быть представлено и в других формах, например:

$$\varepsilon_{Lorentz}\left(E\right) = \frac{A\Gamma E_0}{E_0^2 - E^2 + i\Gamma E}.$$
 (10)

В этом представлении A — максимальное значение ε_{im} , которое достигается при центральной энергии E_0 .

Если в формуле (9) положить E_0 равным нулю, то результат можно использовать для описания поглощения на свободных электронах. Эту модель называют моделью Друде [29]:

$$\varepsilon_{Drude}(E) = \frac{A}{E^2 + i\Gamma E}.$$
 (11)

Такая модель описывает взаимодействие изменяющихся во времени электрических полей со свободными носителями, которые свободно перемещаются в проводящих материалах. Модель хорошо описывает экспериментально наблюдаемое поглощение света на носителях заряда в металлах, сильно легированных полупроводниках и прозрачных проводящих оксидах.

Преобразование формулы (11) позволяет выразить ε_{Drude} через оптическое удельное сопротивление ρ_{opt} и среднее время рассеяния τ , а также через оптическую концентрацию электронов N_{opt} , оптическую подвижность носителей μ_{opt} и эффективную массу $m^*[30]$:

$$\varepsilon_{Drude}(E) = \frac{-\hbar^2}{\varepsilon_0 \rho_{opt} (\tau E^2 + i\hbar E)} = , \qquad (12)$$
$$= \frac{-\hbar^2 q^2 N_{opt} \mu_{opt}}{\varepsilon_0 (\mu_{opt} m_e m^* E^2 + iq\hbar E)}, \qquad (12)$$

где \hbar — приведенная постоянная Планка (\hbar = 6.582 × × 10⁻¹⁶ эВ·с); ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума (ϵ_0 = 8,854 · 10⁻¹² $\frac{\Phi}{M}$); q — элементарный заряд (q = 1.6 · 10⁻¹⁹ Кл); m_e — масса электрона (m_e = 9,1 · 10⁻³¹ кг).

Таким образом, выражение (12) позволяет измерить электрофизические характеристики материала оптическими методами.

Для оценки электрофизических характеристик полупроводников может быть применено выражение, которое предложил Я. Тауц, для мнимой части диэлектрической функции над краем запрещенной зоны E_g [31, 32]:

$$\varepsilon_{im}(E) \sim \frac{(E - E_g)}{E^2}.$$
 (13)

Из выражения (13) видно, что при энергиях менее $E_{\rm g}$ мнимая часть диэлектрической функции равна нулю. Это можно использовать при



Рис. 3. Действительная и мнимая части осциллятора Тауца — Лоренца с центром $E_0 = 3$, шириной $\Gamma = 0.5$, амплитудой A = 25 и оптической энергией запрещенной зоны $E_g = 2$.

определении оптической запрещенной зоны по коэффициентам прямой в координатах $\{(kE)^{1/2}; E\}$, где k — показатель поглощения пленки [33].

Подход Тауца был развит в работе [34], в которой были получены формулы для коэффициента преломления и поглощения таких сред. Подход в дальнейшем был применен, например, для описания аморфных алмазоподобных углеродных пленок [35]. Сложности с применением данного подхода связаны с ограниченным диапазоном применимости модели по энергиям, кроме того, части значение "оптической" ширины запрещенной зоны отличается от измеренного электрофизическими методами.

Существуют подходы, основанные на учете плотности состояний над границей запрещенной зоны (см. выражение (13)) для осциллятора Лоренца, известные как осциллятор Тауца—Лоренца [36]:

$$\varepsilon_{TLim} = \begin{cases} \frac{AE_0 C \left(E - E_g\right)^2}{\left(E^2 - E_0^2\right)^2 + C^2 E^2} \times \frac{1}{E}, E > E_g; \\ 0, E \le E_g. \end{cases}$$
(14)

Этот осциллятор имеет четыре свободных параметра: амплитуда A, резонансная энергия E_0 , ширина C, энергия запрещенной зоны E_g (рис. 3). Осциллятор Тауца—Лоренца, в отличие от осциллятора Лоренца, задает асимметричную форму для ε_{im} . Он достаточно точно описывает диэлектрическую функцию многих аморфных материалов и имеет очень низкие значения среднеквадратичных ошибок (*MSE*) (см. формулу (3)) при подгонке в сравнении с другими моделями.

Уравнение (14) описывает мнимую часть диэлектрической функции, а действительная часть ε_{TLre} через соотношение Крамерса—Кронига (см. формулу (8)) может быть получена аналитически [21].

Для реальных сред зависимость диэлектрической проницаемости от длины волны может определяться суперпозицией выражений отдельных моделей. В разных диапазонах длин волн реализуются различные механизмы поглощения. Это учитывает распространенная на практике модель Друде — Лоренца, которая записывается в общем виде следующим образом:

$$\varepsilon(E) = \varepsilon(\infty) + \varepsilon_{Drude}(E) + \sum_{i} \varepsilon_{Lorentzi}(E),$$

где $\varepsilon(\infty)$ — диэлектрическая проницаемость при бесконечной энергии; ε_{Drude} — осциллятор Друде (см. выражение (12)); $\varepsilon_{Lorentz}$ — осцилляторы Лоренца (см. формулы (9), (10)).

4. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

Обработка данных измерений методом спектральной эллипсометрии относится к тем вычислительным задачам в физике, которые либо приводят к очень ресурсозатратным расчетам, либо могут требовать участия оператора (эксперта) и с трудом поддаются автоматизации. Эти трудности определяют значительные возможности применения продвинутых технологий обработки данных, которые существуют в этой области. При этом возможно как достижение более высокой производительности расчетов, так и качественные изменения, т.е. решение задач, которые принципиально были при применении классических подходов к оптимизации. В настоящем разделе будут описаны различные подходы, объединенные идеей применения машинного обучения к плохо обусловленным и некорректно поставленным задачам обработки спектральных данных, в том числе данных спектральной эллипсометрии.

Известны подходы, основанные на корректировке и дополнении (augmentation) эллипсометрических данных с целью улучшить статистические характеристики ошибки измерений [37], основанные на различных статистических подходах. Хотя в [37] продемонстрированно снижение дисперсии оценок, однако сами значения и коэффициент детерминации R^2 остались практически неизменными. Очевидно, что одних статистических подходов для обработки данных недостаточно и нужны методы, допускающие получение дополнительной информации по результатам измерений с применением более глубокой обработки данных.

Машинное обучение (ML) — процесс внедрения алгоритмов, предназначенных для быстрого извлечения информации из данных [38]. Алгоритмы машинного обучения строят модель на основе экспериментальных данных, чтобы делать прогнозы или принимать решения без использования явно запрограммированного алгоритма. Метод становится все более распространенным в таких областях, как компьютерное зрение (CV), обработка естественного языка (NLP) и биоинформатика. Он уже был применен для анализа данных комбинационного рассеяния света [39], данных Фурье инфракрасной спектроскопии (FTIR spectroscopy) [40], дифракции рентгеновских лучей (XRD) [41], для моделирования технологических процессов, например атомно-слоевого осаждения [42].

Самые распространенные классы задач, для которых эффективно машинное обучение, — это задачи классификации и регрессии. Классификационные модели используются для разделения данных на группы или классы, а регрессионные модели — для предсказания значений переменных.

Распространены подходы машинного обучения следующих видов: статистические методы, деревья решений, нейронные сети, сверточные сети (CNN) [43], многослойные перцептроны (MLP) [44] и т.д. Известны и так называемые многослойные подходы, например глубокое обучение (DL) [45], которое использует нейронные сети для анализа больших объемов данных и принятия решений. Глубокое обучение может быть использовано для создания систем распознавания образов, таких как систем распознавания речи, компьютерного зрения и многих других приложений.

Обратная задача эллипсометрии является некорректно поставленной в смысле неоднозначности и устойчивости ее решения [7]. В настоящее время для обеспечения физически обоснованных результатов необходимо вмешательство хорошо обученного человека с большим опытом работы с моделями, описанными в предыдущем разделе, обладающего априорной информацией о структуре исследуемых образцов. Известна также проблема, связанная с выбором начальных значений (initial guess) для задач оптимизации, - в зависимости от выбранной начальной точки, а в результате оптимизации алгоритм сходится к разным, возможно неоптимальным решениям (локальные минимумы). При этом не удается гарантировать достижение глобального минимума. Применение машинного обучения могло бы значительно упростить проведение эллипсометрических измерений в многослойных структурах, метаматериалах, материалах с неизвестными дисперсионными соотношениями в рамках безмодельного подхода.

В работе [12] авторы на основе CNN и MLP разработали модель SUNDAL, предназначенную для получения оптических характеристик тонких поглощающих пленок. Она была обучена на

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 1 2024

небольшом сгенерированном наборе данных, основанном на оптических базах данных [46, 47], которые включают в себя около 200 материалов. Предложенная модель состоит из двух блоков, первый из которых решает обратную задачу эллипсометрии, а второй — прямую. В этой работе, помимо основных параметров — эллипсометрических углов Ψ и Δ , авторы дополняют данные эллипсометрии спектрами пропускания T и отражения R, чтобы получить более точные физические параметры пленки, а именно, спектры коэффициентов преломления n, поглощения k и толщину d. Измерения оптического пропускания представляют собой сложную задачу для непрозрачных подложек. Недостатком такого подхода является то, что возможность измерения коэффициентов отражения и пропускания редко реализуется в коммерчески доступных эллипсометрах и, как правило, технологически нереализуема в условиях измерений in situ. Отметим также, что в работе [12] использован диапазон длин волн от 500 до 1000 нм. Как правило, сильное поглошение происходит в коротковолновом диапазоне, поэтому применимость такого подхода для поглощающих пленок неочевидна.

Спектры показателей преломления и поглощения веществ для разных материалов микроэлектроники в видимом диапазоне характеризуются большим разнообразием, и разработка "универсальной модели" для работы с любыми материалами сопряжена со значительными методологическими трудностями. Известны примеры [48] сильной зависимости получаемых оптических характеристик от технологических условий формирования пленок, поэтому возникает необходимость разработки вычислительно эффективных подходов для моделирования неизвестных оптических спектров веществ в условиях измерений *in situ* в реальном времени.

В работе [13] авторы предложили модели глубокого обучения (DL) для определения коэффициента отражения и преломления для изотропных образцов пленок GST (Ge-Sb-Te) и для образцов дихалькогенидов переходных металлов на примере пленок MoS₂ с сильной анизотропией, вызванной их слоистой кристаллической структурой. Для обучения были смоделированы наборы данных в небольшом диапазоне толщин. Результаты [13], полученные для GST с помощью DL, сравнивали с традиционной подгонкой модели Тауца-Лоренца с одним осциллятором. Модель тестировалась на 177 образцах. Оказалось, что результат подгонки методом DL почти в 10 раз лучше по функции потерь, чем при подгонке моделью только с одним осциллятором Тауца-Лоренца. Достоинством примененного метода является экономия вычислительных ресурсов, затраты времени для анализа полного набора образцов составили менее 1 с, что примерно в 1000 раз превосходит традиционный подход по эффективности вычислений. Другая модель в этой же работе

[13] была применена для измерения двух компонент показателя преломления двумерного материала: 1) лежащей в плоскости образца n_o ; 2) компоненты по направлению нормали к плоскости n_e для пленки MoS₂. Результаты показали высокую точность для определения n_o и низкую для n_e . Поэтому в данном случае DL не дает преимущества в точности или скорости расчета.

Спектральная эллипсометрия применима для других прикладных задач, одной из которых является мониторинг is situ процессов ALD и других процессов формирования тонких пленок. Если дисперсионные соотношения n и k пленок и подложек для подгонки известны априори, то с помощью алгоритмов машинного обучения возможно прямое определение толщины пленки из данных спектральной эллипсометрии. В работе [14] авторы применили алгоритмы машинного обучения, такие как метод *k*-ближайших соседей [49], метод опорных векторов [50], метод случайного леса [51], дерево решений [52] и логистическая регрессия [53] для определения толщин пленок ZnO. Авторы применили к обучению задачу классификации для определения толщины пленки, при этом изучались только толщины, выражаемые целыми числами (в нанометрах). Современные эллипсометры обладают высокой разрешающей способностью по толщине пленки 0.1 нм, поэтому данный подход вызывает много вопросов, как и корректность метода дискретной классификации применительно к непрерывной величине.

Естественные ограничения подходов, основанных на априорном применении физической или феноменологической модели преломления и поглощения в пленке, очевидны. В случае когда физические предположения, лежащие в основе модели, не выполняются, никакой подбор коэффициентов не позволяет рассчитывать на состоятельную оценку оптических характеристик пленки. Этого недостатка лишен безмодельный подход. В частности, в работе [54] было показано, что безмодельный подход, позволяет обнаруживать отклонения от оптимального технологического процесса на всей поверхности пластины или на отдельных ее участках в задачах контроля технологических процессов. Кроме того, сочетание этого метода с алгоритмом машинного обучения, построенным в виде классификатора изображений, может позволить автоматически обнаруживать отклонения технологического процесса с очень высокой точностью. Комбинированный подход может быть применен к другим оптическим методам, традиционно используемым для контроля физических дефектов пластин.

В работе [55] исследованы возможности спектральной эллипсометрии для анализа влияния температуры и времени отжига на размер зерен меди и размер дефектов ее осаждения в задачах технологии создания вертикальных электрических соединений (through-silicon vias). Известно, что надежность таких структур в сильной степени определяется отсутствием технологических дефектов, таких как высокое остаточное механическое напряжение, выдавливание (extrusion), растрескивание (cracking), расслоение (delamination) и др. Была разработана модель DL, которая обрабатывала элементы матрицы Мюллера и позволяла находить и различать топологию дефектов с точностью 99%, а также определять положение границы материала с точностью до 1 нм.

Другим естественным ограничением классических методов оптимизации является то, что размерность пространства, на котором определена целевая функция, подлежащая минимизации, равна числу неизвестных переменных. На практике число неизвестных редко превосходит 10. В то же время существуют задачи контроля приборных структур, в которых прямой подход потребовал бы измерения десятков параметров. Такой задачей, например, является залача контроля толшин слоев в многослойной структуре устройств памяти 3D NOT-AND (3D-NAND). В отличие памяти 2D-NAND, в которой ячейки размещаются горизонтально, рядом друг с другом, в 3D-NAND ячейки располагаются вертикально, образуя стек с числом ячеек, которое может быть более 100. Такой подход позволяет значительно экономить площадь чипа и повысить компактность и надежность получаемых элементов памяти. При производстве таких приборов требуются неразрушающие методы контроля разброса толщин слоев в многослойных структурах Si/poly-Si. Препятствием к реализации такого контроля метолом эллипсометрии является отсутствие устойчивого решения задачи эллипсометрии для системы, имеющей много неизвестных параметров. Этот недостаток был преодолен в работе [56], в которой исследовались многослойные структуры, состоящие из чередующихся слоев Si₃N₄ и SiO₂. Общее количество слоев составляло приблизительно 200 при общей толщине около 5.5 мкм. Измерения каждого образца проводились на спектральном эллипсометре и спектральном рефлектометре, с применением алгоритма, основанного на линейной регрессии для определения толщины каждого слоя. При формировании обучающей выборки кроме эллипсометрических и рефлектометрических измерений для использования качестве референса толщин использовались результаты измерения, выполненные на поперечных сколах исследуемых образцов методом просвечивающей электронной микроскопии. В результате не удалось получить однозначной интерпретации данных для независимого контроля слоев с большим разбросом значений функции ошибок от слоя к слою. Это связано как с низкой точностью процесса нанесения и измерения толщин слоев, так и с ограниченным набором данных для обучения. Тем не менее в работе удалось построить надежную модель для обнаружения брака с отличающейся толщиной одного из слоев (outliers).

Машинное обучение может быть применено не только к спектральной эллипсометрии, но и к другим оптическим методам, основанным на использовании моделей в целях интерпретации измеренных данных для многослойных структур [57], в том числе рамановская спектроскопия.

В работе [58] предложена экспресс-модель для определения толщины по результатам измерения оптических измерений коэффициента отражения и прохождения в видимом и УФ-диапазоне. Модель обучения основана на применении нескольких слоев CNN и MLP. Полученные результаты имели погрешность около 10% для пленок толщиной от 10 нм до 2 мкм. Оптимизированный процесс измерения занимает около 2 с, с учетом регистрации спектра.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эллипсометрия является точным и неразрушаюшим методом характеризации структур и материалов микроэлектроники. Хотя решение прямой задачи эллипсометрии — предсказания эллипсометрических параметров по известным характеристикам структуры — не представляет вычислительных трудностей. обратная задача, особенно при многих неизвестных, не является корректно поставленной. В таком случае важным является применение физически обоснованных моделей спектров оптических констант исследуемых материалов, что позволяет свести определение оптических характеристик материала к определению нескольких констант. В обзоре были рассмотрены модельные подходы для решения задач спектральной эллипсометрии, основанные на использовании дисперсионных соотношений в моделях Коши, Лоренца, Друде и Тауца—Лоренца. Также описана основные подходы и перспективы развития безмодельного подхода, основанного на использовании машинного обучения, которое может значительно ускорить и упростить определение оптических характеристик для многослойных структур.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН по программе № FFNN-2022-0019.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Drude P. Beobachtungen über die Reflexion des Lichtes am Antimonglanz // Annalen der Physik und Chemie. Wiley. 1888. V. 270(7). P. 489–531.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 1 2024

- Rothen A. The Ellipsometer, an Apparatus to Measure Thicknesses of Thin Surface Films // Review of Scientific Instruments. AIP Publishing. 1945. V. 16(2). P. 26–30.
- Chen S. et al. On the anomalous optical conductivity dispersion of electrically conducting polymers: ultra-wide spectral range ellipsometry combined with a Drude — Lorentz model // Journal of Materials Chemistry C. Royal Society of Chemistry (RSC). 2019. V. 7(15). P. 4350–4362.
- 4. Мяконьких А.В., Смирнова Е.А., Клементе И.Э. Применение методаспектральной эллипсометрии для исследования процессов атомно-слоевого осаждения // Микроэлектроника. 2021. Т. 50. № 4. С. 264–273. [Miakonkikh A.V., Smirnova E.A., Clemente I.E. Application of the spectral ellipsometry method to study the processes of atomic layer deposition // Russian Microelectronics. 2021. V. 50(4). Р. 230–238.]
- Clemente I.E., Miakonkikh A.V. Application of spectral ellipsometry to in situ diagnostics of atomic layer deposition of dielectrics on Silicon and AlGaN // SPIE Proceedings / ed. V. F. Lukichev, K. V. Rudenko. SPIE, 2016.
- 6. *Langereis E. et al.* In situspectroscopic ellipsometry as a versatile tool for studying atomic layer deposition // Journal of Physics D: Applied Physics. IOP Publishing. 2009. V. 42(7). P. 073001.
- 7. Гайдукасов Р.А., Мяконьких А.В., Руденко К.В. Применение метода регуляризации Тихонова в задачах эллипсометической порометрии low-k диэлектриков // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 4. С. 243–254 [Gaidukasov R.A., Myakon'kikh A.V., Rudenko K.V. Application of the Tikhonov Regularization Method in Problems of Ellipsometic Porometry of Low-K Dielectrics // Russian Microelectronics. Pleiades Publishing Ltd. 2022. V. 51(4). Р. 199–209.]
- Archer R.J. Determination of the Properties of Films on Silicon by the Method of Ellipsometry // Journal of the Optical Society of America. The Optical Society. 1962. V. 52(9). C. 970.
- 9. Орликовский А.А., Руденко К.В. Диагностика in situ плазменных технологических процессов микроэлектроники: современное состояние и ближайшие перспективы. Часть III // Микроэлектроника. 2001. Т. 30. № 5. С. 275–294. [Orlikovskii А.А., Rudenko K.V. In situ diagnostics of plasma processes in microelectronics: The current status and immediate prospect. Part III // Russian Microelectron. 2001. V. 30. P. 275–294.]
- 10. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. 1983. [*Polyak B.T.* Introduction to optimization. 1983.]
- Nelder J.A., Mead R.A. Simplex Method for Function Minimization // Computer Journal. 1965. V. 7. P. 308-313.
- 12. *Liu J. et al.* Machine learning powered ellipsometry // Light Sci Appl. 2021. V. 10(1). P. 55.
- Li Y. et al. Deep Learning for Rapid Analysis of Spectroscopic Ellipsometry Data // Advanced Photonics Research. 2021. V. 2(12). P. 2100147.
- Arunachalam A. et al. Machine learning approach to thickness prediction from in situ spectroscopic ellipsometry data for atomic layer deposition processes // Journal of Vacuum Science and Technology A. 2022. V. 40(1). P. 012405.
- Alcaire T. et al. Spectroscopic Ellipsometry Imaging for Process Deviation Detection via Machine Learning Approach // 2020 31st Annual SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference (ASMC). IEEE, 2020.

- Azzam R.M.A., Bashara N.M. Ellipsometry and polarized light // North Holland Personal Library. Amsterdam. 1977.
- 17. Born M., Wolf E. Principles of Optics. 7th Edition. 1997.
- Jellison G.E., Modine F.A. Handbook of Ellipsometry ed. H.G. Tompkins and E.A. Irene // Springer. New York. 2005. Chap. 6.
- 19. *Woollam J.A.* Complete EASE Software Manual for Spectroscopic Ellipsometer ver. 6.
- 20. *Fujiwara H., Collins R.W.* Spectroscopic Ellipsometry for Photovoltaics. Volume 1. Fundamental Principles and Solar Cell Characterization-Springer.
- 21. Cauchy L. Bull. Des. Sc. Math. 1830. V. 14(9).
- Urbach F. The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids // Phys. Rev. 1953. V. 92(5). P. 1324–1324.
- 23. Sellmeier W. Ueber die durch die Aetherschwingungen erregten Mitschwingungen der Körpertheilchen und deren Rückwirkung auf die ersteren, besonders zur Erklärung der Dispersion und ihrer Anomalien // Ann. Phys. Chem. 1872. V. 223(11). P. 386–403.
- Lee H.W. The Hartmann formula for the dispersion of glass // Transactions of the Optical Society. IOP Publishing. 1926. V. 28(3). P. 161–167.
- 25. Conrady A.E. Applied Optics and Optical Design. 1985.
- Briot M. Essai sur la théorie mathématique de la lumière // Paris, Mallet-Bachelier. Harvard University. 1864.
- 27. Cardona M.P.Yu. Fundamentals of Semiconductors // Springer Berlin Heidelberg. 2005.
- Wooten F. Optical Properties of Solids // Academic Press. New York. 1972.
- Kittel C. Introduction to Solid State Physics, 5th ed. // Wiley. New York. 1976.
- Tiwald T.E. et al. Application of IR variable angle spectroscopic ellipsometry to the determination of free carrier concentration depth profiles // Thin Solid Films. 1998. V. 313–314. P. 661–666.
- Tauc J. Amorphous and Liquid Semiconductors // Plenum. New York. 1974.
- Tauc J., Grigorovici R., Vancu A. Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium // Phys. Stat. Sol. (b). 1966. V. 15(2). P. 627–637.
- 33. Швец В.А., Гриценко Д.В., Алиев В.Ш. и др. Дисперсия оптических констант тонких аморфных пленок Ta_2O_5 по данным спектроэллипсометрии // Микроэлектроника. 2004. Т. 33. № 5. С. 352 Mallet-Bachelier 358. [Shvets V.A. et al. Uniformity of Optical Constants in Amorphous Ta_2O_5 Thin Films as Measured by Spectroscopic Ellipsometry // Russian Microelectronics. 2004. V. 33. No. 5. P. 285–291.]
- Forouhi A.R., Bloomer I. Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics // Phys. Rev. B. 1986. V. 34(10). P. 7018–7026.
- 35. *McGahan W.A., Woollam J.A.* Optical Characterization and Modeling of Amorphous Hydrogenated Carbon Films // MRS Proc. 1994. V. 349.
- Jellison G.E.Jr., Modine F.A. Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 69(3). P. 371–373.
- Kim I. et al. Optical spectrum augmentation for machine learning powered spectroscopic ellipsometry // Opt. Express. 2022. V. 30(10). P. 16909.
- Sarker I.H. Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications and Research Directions // SN COMPUT. SCI. 2021. V. 2(3).
- 39. Lussier F. et al. Deep learning and artificial intelligence methods for Raman and surface-enhanced Raman

scattering // TrAC Trends in Analytical Chemistry. 2020. V. 124. P. 115796.

- Enders A.A. et al. Functional Group Identification for FTIR Spectra Using Image-Based Machine Learning Models // Anal. Chem. 2021. V. 93(28). P. 9711–9718.
- Park W.B. et al. Classification of crystal structure using a convolutional neural network // Int Union Crystallogr J. 2017. V. 4(4). P. 486–494.
- 42. Yanguas-Gil A., Elam J.W. Machine learning and atomic layer deposition: Predicting saturation times from reactor growth profiles using artificial neural networks // Journal of Vacuum Science and Technology A. 2022. V. 40(6). P. 062408.
- LeCun Y. et al. Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition // Neural Computation. MIT Press – Journals. 1989. V. 1(4). P. 541–551.
- 44. Ивахненко А.Г., Лапа В.Г. Кибернетические предсказывающие устройства. 1965. [Ivakhnenko A.G., Lapa V.G. Cybernetic predictive devices. 1965]
- 45. *Dechter R.* Learning While Searching in Constraint-Satisfaction-Problems // Proceedings of the 5th National Conference on Artificial Intelligence. Philadelphia, PA, August 11–15, 1986. Volume 1: Science.
- Palik E.D. Handbook of Optical Constants of Solids // Academic Press, San Diego. 1985.
- 47. Optical Data from Sopra SA. http://www.sspectra.com/sopra.html.
- Langereis E. et al. In situspectroscopic ellipsometry as a versatile tool for studying atomic layer deposition // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42(7). P. 073001.
- Fix E., Hodges J.L. Discriminatory Analysis. Nonparametric Discrimination: Consistency Properties International Statistical Review / Revue Internationale de Statistique. 1989. V. 57(3). P. 238.
- Cortes C., Vapnik V. Support-vector networks // Mach Learn. 1995. V. 20(3). P. 273–297.
- Tin Kam Ho. The random subspace method for constructing decision forests IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intell. 1998. V. 20(8). P. 832–844.
- Von Winterfeldt D., Edwards W. Decision Analysis and Behavioral Research // Cambridge University Press. 1986
- Tolles J., Meurer W. J. Logistic Regression // JAMA. 2016. V. 316(5). P. 533.
- Alcaire T. et al. On the Fly Ellipsometry Imaging for Process Deviation Detection // IEEE Trans. Semicond. Manufact. 2022. V. 35(3). P. 432–438.
- 55. *Sun Q. et al.* Nondestructive monitoring of annealing and chemical-mechanical planarization behavior using ellipsometry and deep learning // Microsyst Nanoeng. 2023. V. 9(1).
- 56. Kwak H. et al. Non-destructive thickness characterisation of 3D multilayer semiconductor devices using optical spectral measurements and machine learning // Light: Advanced Manufacturing. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences. 2021. V. 2(1). P. 9.
- Kwak H., Kim J. Semiconductor Multilayer Nanometrology with Machine Learning // Nanomanufacturing and Metrology. Springer Science and Business Media LLC. 2023. V. 6(1).
- Tian S.I.P. et al. Rapid and Accurate Thin Film Thickness Extraction via UV–Vis and Machine Learning // 2020 47th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). IEEE. 2020.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 1 2024

APPLICATION OF SPECTRAL ELLIPSOMETRY FOR DIELECTRIC, METAL AND SEMICONDUCTOR FILMS IN MICROELECTRONICS TECHNOLOGY

© 2024 R. A. Gaidukasov^{a,} *, A. V. Miakonkikh^a

^aValiev institute of physics and technology of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia *e-mail: gaydukasov.r@gmail.com

The article reviews model-based and model-free approaches to solving problems of spectral ellipsometry related to the measurement of thicknesses and optical parameters of thin layers of dielectrics, metals and semiconductors in microelectronics application. Model-based approaches employ a priori information about the dispersion relation in form of the Cauchy, Drude, Drude—Lorentz and Tautz—Lorentz. Model-free approaches can use any smooth multivariate functional dependence describing a smooth spectral curve. Also, machine learning can be used to implement the model-free approach, which is well suited for determining the thickness of multilayer structures and their optical characteristics and allows to significantly increase the speed of data processing.

Keywords: spectral ellipsometry, data processing, inverse problems, optimization methods, machine learning, deep learning

REFERENCES

- Drude P. Beobachtungen über die Reflexion des Lichtes am Antimonglanz // Annalen der Physik und Chemie. Wiley. 1888. V. 270(7). P. 489–531.
- Rothen A. The Ellipsometer, an Apparatus to Measure Thicknesses of Thin Surface Films // Review of Scientific Instruments. AIP Publishing. 1945. V. 16(2). P. 26–30.
- Chen S. et al. On the anomalous optical conductivity dispersion of electrically conducting polymers: ultra-wide spectral range ellipsometry combined with a Drude — Lorentz model // Journal of Materials Chemistry C. Royal Society of Chemistry (RSC). 2019. V. 7(15). P. 4350–4362.
- Miakonkikh A.V., Smirnova E.A., Clemente I.E. Application of the spectral ellipsometry method to study the processes of atomic layer deposition // Russian Microelectronics. 2021. V. 50(4). P. 230–238.
- Clemente I.E., Miakonkikh A.V. Application of spectral ellipsometry to in situ diagnostics of atomic layer deposition of dielectrics on Silicon and AlGaN // SPIE Proceedings / ed. V.F. Lukichev, K.V. Rudenko. SPIE, 2016.
- Langereis E. et al. In situspectroscopic ellipsometry as a versatile tool for studying atomic layer deposition // Journal of Physics D: Applied Physics. IOP Publishing. 2009. V. 42(7). P. 073001.
- Gaidukasov R.A., Myakon'kikh A.V., Rudenko K.V. Application of the Tikhonov Regularization Method in Problems of Ellipsometic Porometry of Low-K Dielectrics // Russian Microelectronics. Pleiades Publishing Ltd. 2022. V. 51(4). P. 199–209.
- Archer R.J. Determination of the Properties of Films on Silicon by the Method of Ellipsometry // Journal of the Optical Society of America. The Optical Society. 1962. V. 52(9). C. 970.
- 9. Orlikovskii A.A., Rudenko K.V. In situ diagnostics of plasma processes in microelectronics: The current status and

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 1 2024

immediate prospect. Part III // Russian Microelectron. 2001. V. 30. P. 275–294.

- 10. Polyak B.T. Introduction to optimization. 1983.
- Nelder J.A., Mead R.A Simplex Method for Function Minimization // Computer Journal. 1965. V. 7. P. 308-313.
- 12. *Liu J. et al.* Machine learning powered ellipsometry // Light Sci Appl. 2021. V. 10(1). P. 55.
- Li Y. et al. Deep Learning for Rapid Analysis of Spectroscopic Ellipsometry Data // Advanced Photonics Research. 2021. V. 2(12). P. 2100147.
- Arunachalam A. et al. Machine learning approach to thickness prediction from in situ spectroscopic ellipsometry data for atomic layer deposition processes // Journal of Vacuum Science and Technology A. 2022. V. 40(1). P. 012405.
- Alcaire T. et al. Spectroscopic Ellipsometry Imaging for Process Deviation Detection via Machine Learning Approach // 2020 31st Annual SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference (ASMC). IEEE.
- Azzam R.M.A., Bashara N.M. Ellipsometry and polarized light // North Holland Personal Library. Amsterdam. 1977.
- 17. Born M., Wolf E. Principles of Optics. 7th Edition. 1997.
- Jellison G.E., Modine F.A. Handbook of Ellipsometry ed. H.G. Tompkins and E.A. Irene // Springer. New York. 2005. Chap. 6.
- 19. *Woollam J.A.* Complete EASE Software Manual for Spectroscopic Ellipsometer ver. 6.
- 20. *Fujiwara H., Collins R.W.* Spectroscopic Ellipsometry for Photovoltaics. Volume 1. Fundamental Principles and Solar Cell Characterization-Springer.
- 21. Cauchy L. Bull. Des. Sc. Math. 1830. V. 14(9).
- 22. Urbach F. The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids // Phys. Rev. 1953. V. 92(5). P. 1324–1324.
- 23. Sellmeier W. Ueber die durch die Aetherschwingungen erregten Mitschwingungen der Körpertheilchen und deren

Rückwirkung auf die ersteren, besonders zur Erklärung der Dispersion und ihrer Anomalien // Ann. Phys. Chem. 1872. V. 223(11). P. 386–403.

- Lee H.W. The Hartmann formula for the dispersion of glass // Transactions of the Optical Society. IOP Publishing. 1926. V. 28(3). P. 161–167.
- 25. Conrady A.E. Applied Optics and Optical Design. 1985.
- 26. *Briot M*. Essai sur la théorie mathématique de la lumière // Paris, Mallet-Bachelier. Harvard University. 1864.
- 27. Cardona M.P.Yu. Fundamentals of Semiconductors // Springer Berlin Heidelberg. 2005.
- Wooten F. Optical Properties of Solids // Academic Press. New York. 1972.
- Kittel C. Introduction to Solid State Physics, 5th ed. // Wiley. New York. 1976.
- Tiwald T.E. et al. Application of IR variable angle spectroscopic ellipsometry to the determination of free carrier concentration depth profiles // Thin Solid Films. 1998. V. 313–314. P. 661–666.
- Tauc J. Amorphous and Liquid Semiconductors // Plenum. New York. 1974.
- Tauc J., Grigorovici R., Vancu A. Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium // Phys. Stat. Sol. (b). 1966. V. 15(2). P. 627–637.
- Shvets V.A. et al. Uniformity of Optical Constants in Amorphous Ta₂O₅Thin Films as Measured by Spectroscopic Ellipsometry // Russian Microelectronics. 2004. V. 33(5). P. 285–291.
- Forouhi A.R., Bloomer I. Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics // Phys. Rev. B. 1986. V. 34(10). P. 7018–7026.
- 35. *McGahan W.A., Woollam J.A.* Optical Characterization and Modeling of Amorphous Hydrogenated Carbon Films // MRS Proc. 1994. V. 349.
- Jellison G.E.Jr., Modine F.A. Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 69(3). P. 371–373.
- Kim I. et al. Optical spectrum augmentation for machine learning powered spectroscopic ellipsometry // Opt. Express. 2022. V. 30(10). P. 16909.
- Sarker I.H. Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications and Research Directions // SN COMPUT. SCI. 2021. V. 2(3).
- Lussier F. et al. Deep learning and artificial intelligence methods for Raman and surface-enhanced Raman scattering // TrAC Trends in Analytical Chemistry. 2020. V. 124. P. 115796.
- Enders A.A. et al. Functional Group Identification for FTIR Spectra Using Image-Based Machine Learning Models // Anal. Chem. 2021. V. 93(28). P. 9711–9718.
- Park W.B. et al. Classification of crystal structure using a convolutional neural network // Int Union Crystallogr J. 2017. V. 4(4). P. 486–494.

- Yanguas-Gil A., Elam J.W. Machine learning and atomic layer deposition: Predicting saturation times from reactor growth profiles using artificial neural networks // Journal of Vacuum Science and Technology A. 2022. V. 40(6). P. 062408.
- LeCun Y. et al. Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition // Neural Computation. MIT Press – Journals. 1989. V. 1(4). P. 541–551.
- 44. Ivakhnenko A.G., Lapa V.G. Cybernetic predictive devices. 1965.
- 45. Dechter R. Learning While Searching in Constraint-Satisfaction-Problems // Proceedings of the 5th National Conference on Artificial Intelligence. Philadelphia, PA, August 11–15, 1986. Volume 1: Science.
- 46. *Palik E.D.* Handbook of Optical Constants of Solids. Academic Press. San Diego. 1985.
- 47. Optical Data from Sopra SA. http://www.sspectra.com/ sopra.html*Langereis E. et al.* In situspectroscopic ellipsometry as a versatile tool for studying atomic layer deposition // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42(7). P. 073001.
- Fix E., Hodges J.L. Discriminatory Analysis. Nonparametric Discrimination: Consistency Properties International Statistical Review / Revue Internationale de Statistique. 1989. V. 57(3). P. 238.
- 49. Cortes C., Vapnik V. Support-vector networks // Mach Learn. 1995. V. 20(3). P. 273–297.
- 50. *Tin Kam Ho.* The random subspace method for constructing decision forests IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intell. 1998. V. 20(8). P. 832–844.
- 51. Von Winterfeldt D., Edwards W. Decision Analysis and Behavioral Research // Cambridge University Press. 1986
- Tolles J., Meurer W.J. Logistic Regression // JAMA. 2016. V. 316(5). P. 533.
- Alcaire T. et al. On the Fly Ellipsometry Imaging for Process Deviation Detection // IEEE Trans. Semicond. Manufact. 2022. V. 35(3). P. 432–438.
- Sun Q. et al. Nondestructive monitoring of annealing and chemical-mechanical planarization behavior using ellipsometry and deep learning // Microsyst Nanoeng. 2023. V. 9(1).
- 55. Kwak H. et al. Non-destructive thickness characterisation of 3D multilayer semiconductor devices using optical spectral measurements and machine learning // Light: Advanced Manufacturing. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences. 2021. V. 2(1). P. 9.
- Kwak H., Kim J. Semiconductor Multilayer Nanometrology with Machine Learning // Nanomanufacturing and Metrology. Springer Science and Business Media LLC. 2023. V. 6(1).
- 57. *Tian S.I.P. et al.* Rapid and Accurate Thin Film Thickness Extraction via UV–Vis and Machine Learning // 2020 47th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). IEEE. 2020.