



Title	金属表面皮膜の偏光解析法に関する計算機処理の一方法
Author(s)	工藤, 清勝; 佐藤, 教男
Citation	北海道大學工學部研究報告, 61, 45-62
Issue Date	1971-03-20
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/41052
Type	bulletin (article)
File Information	61_45-62.pdf



[Instructions for use](#)

金属表面皮膜の偏光解析法に関する計算機処理の一方法

工 藤 清 勝 佐 藤 教 男

(昭和45年11月30日受理)

A Fortran Program for Ellipsometry of Surface Films on Metals

Kiyokatsu KUDO and Norio SATO

(Received November 29, 1970)

Abstract

A Fortran computer program for ellipsometry to analyse multiple absorbing films on metals by means of single reflection and multiple reflection methods using an ellipsometer with a quarter-wave plate on the side of the incident beam is presented. This program makes it possible to calculate not only the theoretical reflection parameters as a function of optical constants of the substrate, film thicknesses of the uppermost and inner film and the angle of incidence, but also the optical constants and thickness of the surface film within a specified experimental error by comparing calculated reflection parameters with measured polarizer and analyser settings for a given surface. The program is applicable to any surface films particularly for the purpose of oxidation study of metals.

1. ま え が き

物体の反射光の偏光状態を光学的に解析して、その物体の光学定数あるいは表面の薄膜の厚さを測定する偏光解析法¹⁾は、表面研究の有力な手段として広く利用されるようになった。その原因は単に偏光解析法の利点が再認識されたためばかりでなく、複雑で冗長な計算を電子計算機に任せることができたことにもよる。しかし、透明な薄膜の場合は問題ないとしても、吸収皮膜の場合は測定値から一義的に所望の量を定めることはできず、その解析法も確立していない状況にある。現在用いられている方法は、いろいろな条件下での測定値から試行錯誤的に未知数を決める方法であって、そのため、計算機には指定された系の理論値を計算すると共に、測定値を満足する未知数の可能な範囲を逆算し、両者を比較する解析機能を持たせる必要がある。

金属の表面皮膜は一般に不透明であり、しばしば多層構造をとる。このような系に対する解析の一例は McCrackin²⁾ らにより提案されているが、内層は透明皮膜近似をしている³⁾ほか、薄い皮膜では解が得られない場合があるなどの問題があった。われわれは今まで北大計算センター NEAC-2203G 計算機を利用して金属酸化皮膜の偏光解析を行ってきたが、この度大型計算機が利用できるようになったのを機に、数個に分けていたプログラムを一体化し、同時に全面的な書き直しを行なった。今後も種々の解析機能を附加する予定であるが、不透明多層皮膜に対する解析の一方法として報告する。なお、プログラムは FACOM 230-60 FORTRAN⁴⁾ に準拠して作製した。

2. 偏光解析法の基本式

偏光解析法の理論および測定装置については多くの著者によって述べられている^{1),5),6)}。しかし、理論を構成する基準のとり方によって、いろいろな表式が可能であり、最終結果は同じであってもお互のデータの比較を困難にしている。表現の統一化については Nebraska で開かれた偏光解析法の Symposium⁷⁾ において論じられているが、ここでは前報⁸⁾で規定した基準を用いる。

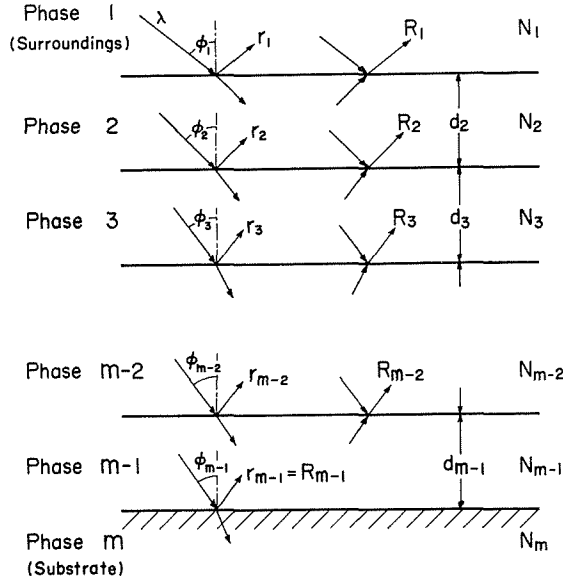


図 1 多層皮膜系の表示

金属表面は図 1 に示すように入射媒質を相 1、最上層の皮膜を相 2、…下地金属を相 m とする m 相 ($m-2$ 層皮膜) より成るとし、各相の光学定数を $N_j \equiv n_j - ik_j$ 、厚さを d_j とする。この表面に波長 λ なる平面波が入射角 ϕ_1 で入射すると、皮膜内でのくり返し反射干渉を含めた全反射光の入射面に垂直な振動成分 (s -成分) に対する入射面内の振動成分 (p -成分) の相対複素振幅比は

$$\rho = \frac{R_1^p}{R_1^s} = \frac{|R_1^p| \exp(i\Delta_p)}{|R_1^s| \exp(i\Delta_s)} = \left| \frac{R_1^p}{R_1^s} \right| e^{i(\Delta_p - \Delta_s)} = \tan \Psi \cdot \exp(i\Delta)$$

相 j と相 $j+1$ との境界 j における反射係数は

$$R_j^\nu = \frac{r_j^\nu + R_{j+1}^\nu \exp(-iD_{j+1})}{1 + r_j^\nu \cdot R_{j+1}^\nu \exp(-iD_{j+1})} \quad (\nu = p, s)$$

$$r_j^p = \frac{N_{j+1} \cos \phi_j - N_j \cos \phi_{j+1}}{N_{j+1} \cos \phi_j + N_j \cos \phi_{j+1}}$$

$$r_j^s = \frac{N_j \cos \phi_j - N_{j+1} \cos \phi_{j+1}}{N_j \cos \phi_j + N_{j+1} \cos \phi_{j+1}}$$

$$D_j = 4\pi N_j d_j \cos \phi_j / \lambda$$

$$N_1 \sin \phi_1 = N_2 \sin \phi_2 = \dots = N_m \sin \phi_m$$

で表わされる。

測定装置により得られる量は $\tan \Psi$ と Δ である。現在、最も多く用いられている偏光子—1/4

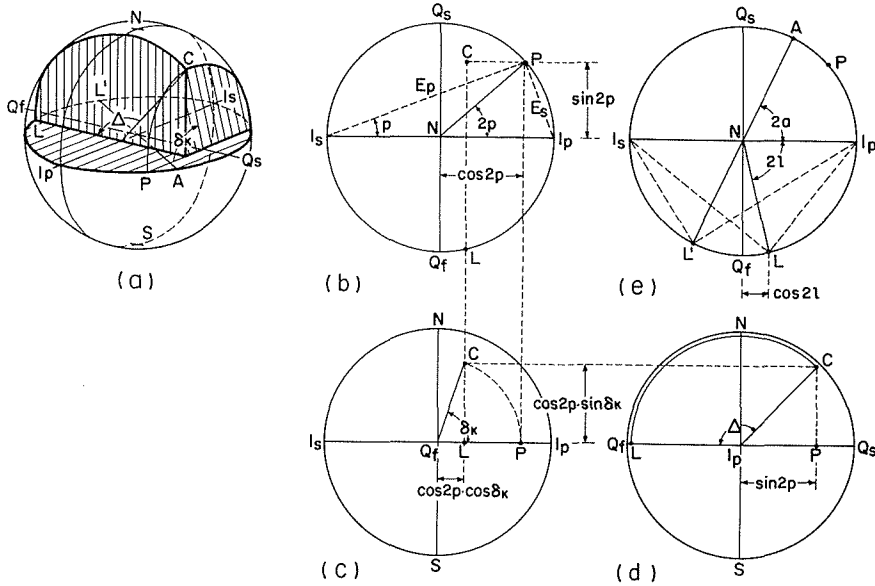


図2 エリプソメーターによる楕円偏光補償過程の Poincaré 球表示

波長板—試料—検光子からなる光学系で、1/4 波長板の進相軸 Q_f を入射面 I_p に対し -45° に固定した場合の補償過程を図2に Poincaré 球表示によって示した。(a) で赤道上的の点は直線偏光を、北(南)半球および北(南)極点はそれぞれ左(右)廻りの楕円および円偏光を表わす。方位角 p なる偏光子を出た光は赤道上的の点 P で表わされ(b)、これが位相角 δ_k なる1/4 波長板を通ると楕円偏光 C となる(c)。試料表面での反射によって光は Δ だけ進相し、直線偏光 L に戻る(d)が、同時に $\tan \Psi$ だけ振幅減衰を受けるので、反射光は点 L' に移る(e)。これを方位角 a なる検光子で消光する。

実測の p , a と $\tan \Psi$, Δ との関係は図2から明らかなように

$$\cot(\pi - \Delta) = \tan 2p / \sin \delta_k$$

$$\cos 2l = \cos 2p \cdot \cos \delta_k$$

$$\tan \Psi = \tan l \cdot \tan a_p = \cot l \cdot \tan a_s$$

ここで、 p が I_p との間の角であるか I_s との間の角であるかによって a を a_p , a_s と区別した。1/4 波長板の位相角が正しく 90° であれば

$$\Delta = 2p + 90^\circ, \quad l = 45^\circ, \quad \Psi = a_p = a_s = a$$

となる。3.3 で述べる計算は上述の関係式による。

3. プログラムの概要

入力データはカードの1~4桁に書かれた4桁の入力制御数と、6~65桁の間に書かれた10桁単位の6個の実数より成る。実数には必ず小数点を附し、値が指定されない欄は0.と入力する。角度の入出力はすべて度単位で行なう。

3.1 系の指定

制御数〔0001〕は実験条件を指定し、相1(環境)の屈折率 N_1 , 入射角 ϕ_1 , 用いた光の波長 λ , 1/4 波長板の位相角 δ_k , 反射回数 r が記憶される。計算機はあらかじめ $\delta_k = 90^\circ$, 1回反射を仮定しているので、その場合は δ_k および r を指定しなくとも良い。たとえば

	(N_1)	(φ_1)	(λ)	(δ_k)	(r)	
0001	1.33	70.	5461.	0.	0.	0.
	4	15	25	35	45	55
						65

とすれば, $N_1 = 1.33$, $\varphi_1 = 70^\circ$, $\lambda = 5461\text{\AA}$, $\delta_k = 90^\circ$, $r = 1$ と記憶される。もし, δ_k の値が不明の場合はこのカードで指定せず, $[1001]$ において実測の p , a_p , a_s の値から δ_k を算定する。

制御数 $[0002]$ は相 2 の光学定数 $N_2 = n_2 - ik_2$ を指定する。 N_2 が確定している場合, たとえば $2.5 - 0.3i$ の場合は次のようにする。

	(n_2)	(k_2)					
0002	2.5	0.3	0.	0.	0.	0.	0.
	4	15	25	35	45	55	65

もし N_2 にある範囲を与えて計算したい場合は, その初期値 $n_{2i} - ik_{2i}$, 増分 Δn_2 , Δk_2 , および最終値 $n_{2f} - ik_{2f}$ を指定する。たとえば

	(n_{2i})	(k_{2i})	(Δn_2)	(Δk_2)	(n_{2f})	(k_{2f})
0002	2.5	0.3	0.25	0.2	3.5	0.5
	4	15	25	35	45	55
						65

とすれば, これらのすべての組合せ

$$\begin{aligned} &2.5 - 0.3i, \quad 2.75 - 0.3i, \quad 3.0 - 0.3i, \quad 3.25 - 0.3i, \quad 3.5 - 0.3i \\ &2.5 - 0.5i, \quad 2.75 - 0.5i, \quad 3.0 - 0.5i, \quad 3.25 - 0.5i, \quad 3.5 - 0.5i \end{aligned}$$

について計算を行なう。ただし, $n_{2f} > n_{2i}$, $k_{2f} > k_{2i}$ でなければならない。

制御数 $[0003] \sim [0009]$ は相 3~9 の光学定数と厚さを指定する。われわれの目的とする金属酸化皮膜では実際に 3 層以上の皮膜を解析するのは稀なので, ここでは最大 8 層までの皮膜しか考えていないが, 主プログラムの型宣言文の配列を広げるだけで最大 998 層までの皮膜を解析することが可能である。これは後に不均質皮膜の解析などに利用する予定である。系が相 3 に対して $N_3 = 2.0 - 0.5i$, $d_3 = 10\text{\AA}$, 相 4 に対して $N_4 = 1.0$, $d_4 = 5\text{\AA}$ なる 5 相の場合は, $[0001]$, $[0002]$ に続いて次のカードを入力すれば良い。

	(n_j)	(k_j)	(d_j)				
0003	2.0	0.5	10.	0.	0.	0.	0.
0004	1.0	0.	5.	0.	0.	0.	0.
	4	15	25	35	45	55	65

これらのカードは制御数の順序通りに入力しなければならない。ただし, ある計算を行なわせた後, 皮膜の光学定数を変えて別の計算を進行させたい場合は最後の実数を 1. とし, 途中から入力する。たとえば前の値で

	(n_j)	(k_j)					
0003	2.5	0.2	0.	0.	0.	1.	0.
	4	15	25	35	45	55	65

とすれば, 相は 5 相のまま相 3 の定数を $N_3 = 2.5 - 0.2i$, $d_3 = 10\text{\AA}$ として計算を進行させる。相数の変更は $[1100]$ のカードによらなければならない。

制御数 $[1000]$ は下地金属の光学定数を指定する。

	(n_m)	(k_m)					
1000	3.18	3.85	0.	0.	0.	0.	0.
	4	15	25	35	45	55	65

このカードによって $N_m = 3.18 - 3.85i$ に指定され、計算機は裸の表面反射に対応する p と a の値と全体の相の数を印刷する。もし、下地金属の光学定数が未知である場合は、裸あるいは裸に近いと考えられる基準表面に対する測定値を〔1002〕において与えなければならない。

3.2 補助入力

制御数〔1001〕は1/4波長板の位相差 δ_k を実測の p , a_p , a_s の値から計算する。

	(p)	(a_p)	(a_s)						
1001	21.52	37.416	36.224	0.	0.	0.			
	4	15	25	35	45	55	65		

$\delta_k = 90^\circ$, または〔0001〕において δ_k の値が指定されている場合は、このカードは不要である。

制御数〔1002〕は〔1000〕で下地の光学定数が指定されていない際に用い、裸の表面に対する測定値 p , a よりその光学定数 N_m を計算する。測定値は p , a_p , a_s すべてを与えることが望ましいが、 $\delta_k = 90^\circ$ および a_s を測定していない場合は p と a_p のみで良い。

	(p)	(a_p)	(a_s)						
1102	21.52	37.416	0.	0.	0.	0.	0.		
	4	15	25	35	45	55	65		

また、 a_p を測定していない場合には a_p を 0. とし、 p と a_s を入力する。計算機は δ_k の値を使って p と a の理論値を求め、 N_m を印刷する。

制御数〔1103〕は次節の〔1105〕～〔1107〕で使う定数、すなわち印刷指示数 c_p , 偏光子および検光子の角度許容誤差 ε_p , ε_a , 計算繰返し回数 α , 屈折率の分割数 β , 皮膜厚の許容誤差 ξ の値を変更する際に用いる。計算機はあらかじめ $c_p = 0$ (計算過程をすべて印刷する), $\varepsilon_p = \varepsilon_a = 0.01^\circ$, $\alpha = 10$ 回, $\beta = 4$ 分割, $\xi = 5\%$ を仮定しているので、特にこのカードを入れる必要はない。しかし、条件に適合した解あるいは最終結果のみを印刷させ、 ξ も 10% としたい時には次のカードを入力する。

	(c_p)	(ε_p)	(ε_a)	(α)	(β)	(ξ)			
1103	1.	0.	0.	0.	0.	10.			
	4	15	25	35	45	55	65		

制御数〔1004〕～〔1099〕は、将来、反射強度の測定から Ψ , Δ を換算するなどのデータ変換に用いる予定であって、現在欠番である。

制御数〔1100〕は相の数を変更する際に用いる。計算途中で全相数をたとえば4相から6相系へ増したい時には、〔0004〕,〔0005〕のカード(最後の欄は1.)を入れるだけで良いが、逆に6相から4相系へ減らしたい時には

	(N_p)								
1100	4.	0.	0.	0.	0.	0.	0.		
	4	15	25	35	45	55	65		

としなければならない。このカードが与えられると、前に入力された N_p 相以上の皮膜のデータは無視される。 N_p の値が3.以下、あるいは以前の相の数より大きいときは何もしない。

3.3 計算への移行

制御数〔1101〕は皮膜のない裸の金属の光学定数に対応する p と a の理論値を計算し、印刷する。金属の光学定数の初期値を $m_{mi} - ik_{mi}$, 増分を $\Delta n_m, \Delta k_m$, 最終値を $n_{mf} - ik_{mf}$ として制御数〔0002〕の場合と同じように入力すると、計算機は $n_m = n_{mi}$ から Δn_m ずつ増して n_{mf} までと $k_m = k_{mi}$ から Δk_m ずつ増して k_{mf} までのすべての n_m と k_m の組合せについて計算を行な

う。このカードに与えた光学定数は、〔1000〕または〔1002〕で指定された N_m とは無関係である。結果は n_m, k_m につづいて反射回数の補正を行なった $\tan \Psi, \Delta$ 、さらに δ_k の補正を行なった p, a_p, a_s 、および1回反射に対応する表面の反射係数の振幅 $\text{mod}(R_1)$ 、偏角 $\arg(R_1)$ の p -および s -成分が印刷される。 $\delta_k = 90^\circ$ の場合は a_s は省略される。

制御数〔1102〕は相2の皮膜厚 d_2 の変化に伴う p, a の理論値を計算する。たとえば厚さの初期値を $d_{2i} = 10\text{\AA}$ 、増分 $\Delta d_2 = 1\text{\AA}$ 、最終値 $d_{2f} = 100\text{\AA}$ として

	(d_{2i})	(Δd_2)	(d_{2f})					
1102	10.	1.	100.	0.	0.	0.	0.	
	4	15	25	35	45	55	65	

を入力すると、〔0002〕で与えられた N_2 に対して $d_2 = 10\text{\AA}$ から 1\AA ずつ 100\AA まで91行の結果が印刷される。もし、〔0002〕にある範囲が与えられており、その組合せが10通りあれば、その各々について合計910行の結果が印刷される。計算終了時には $d_2 = d_{2i}$ が保持される。

$d_{2f} = 0$. としておくと、計算機には $d_2 = d_{2i}$ が入力されるだけで計算はしない。これは制御数〔1103〕、〔1104〕、および〔1106〕のカードを使う前に d_2 の値を指定しておく目的に使う。もし、特定の d_2 の値に対する計算値が必要な時には、 d_{2f} を d_{2i} と同じ値にしておく。

制御数〔1103〕は内層の皮膜厚の変化に伴う p, a の理論値を計算する。データは厚さの初期値、増分、最終値の他に、最後の欄に相を指定する指標 L (3以上) を与えなければならない。たとえば

	(d_i)	(Δd)	(d_f)				(L)
1103	0.	10.	100.	0.	0.	4.	
	4	15	25	35	45	55	65

とすれば、相4の厚さ d_4 が $0, 10, \dots, 100\text{\AA}$ と変ったときの p, a の値が印刷される。ただし、相4の光学定数 N_4 は〔0004〕で与えられていなければならない。さもなくばこのカードは無視される。また、最上層の光学定数は〔0002〕で与えられた $n_{2i} - ik_{2i}$ 、厚さは〔1102〕で保持された d_{2i} が用いられる。もし、 d_2 が指定されていなければ $d_2 = 0$. とみなされる。計算終了後、相4の厚さは〔0004〕で指定された値に戻る。

制御数〔1104〕は入射角の変化に伴う p, a の理論値を計算する。入力データが

	(φ_i)	$(\Delta \varphi)$	(φ_f)				
1104	60.	1.	80.	0.	0.	0.	
	4	15	25	35	45	55	65

である場合、最上層の皮膜の定数を〔1103〕同様、 $n_{2i} - ik_{2i}, d_{2i}$ として入射角が 60° から 1° 毎に 80° まで変ったときの p, a の値が印刷される。系が3相系であって、〔1102〕によって d_2 が指定されていない場合は裸の表面反射になる。計算終了後、入射角は〔0001〕に指定された入射角の値に戻る。

上述の計算はいろいろな条件下における理論曲線の作製に用いるが、以下は最上層の皮膜に注目して、実測の p, a_p, a_s の値に最も良く適合する N_2, d_2 の値を逆算するのに用いる。

制御数〔1105〕、〔1106〕および〔1107〕はそれぞれ、〔0002〕で与えられた N_2 に適合する d_2 、〔1102〕で与えられた d_2 に適合する N_2 、および〔0002〕で指定された N_2 の範囲で実験値に適合する最も確からしい N_2 と d_2 の組合わせを計算する。 p, a_p, a_s の与え方は〔1002〕の場合と同じである。また、〔1106〕のカードを用いる際は、その前に〔1102〕によって d_2 の値が指定されていなければならない。

これらのカードが与えられると、計算機はまず p , a_p , a_s の値から δ_k および反射回数の補正を行なった1回反射に対応する p , a の値 p_z , a_z と相対複素振幅比 ρ を計算し、 $N_2 = n_{2i} - ik_{2i}$ と仮定して McCrackin らにより提案された方法²⁾でみかけの皮膜厚を求める。形式的に2つの根が求まり、その値は一般に複素数であるが、実数部が正である根のみをとり、その実数部を仮の皮膜厚 d_x 、虚数部を誤差の尺度 ε_x とする。もし、2根共正の実数部をもつときは ε_x の小さい方をとる。また、2根共負である場合は“解なし”とし、その時の N_2 の値と2根の値を印刷し、 n_2 の下限を上げて再び解を探す。この過程で n_2 が n_{2f} に達したとき (計算コード MX = 5) は、 k_2 の値をかえて始めからやり直す。このようにして d_x が決まると、この d_x に対する p と a の理論値 p_x , a_x を計算し、実測値との差 $\delta_p = p_z - p_x$, $\delta_a = a_z - a_x$ を求める。

制御数 [1105] の場合は、この d_x を与えられた N_2 に対する解として N_2 , d_x , ε_x , δ_p , δ_a , p_x , a_x の値を印刷し、別の N_2 に対する計算に移るが、[1106] と [1107] の場合は

- (1) δ_p と δ_a が [1003] で指定された ε_p と ε_a (通常 0.01°) 以内にあるか、また、[1006] の場合は、さらに
- (2) d_x の値が [1102] で指定された d_2 に対して、[1003] に与えられた $\xi\%$ (通常 5%) 以内にあるか、

が判定され、この判定を通ればこの時の N_2 と d_x を“解”として印刷し、 n_2 の誤差範囲を決めるために n_2 を [0002] で指定された Δn_2 だけ増減したときの δ_p , δ_a の値を続けて印刷する。

一方、判定から外れた場合は [1003] の c_p が 0 であれば結果を印刷し、1 であれば印刷を省略して、この時の屈折率 n_{2x} に対する ε_x を ε_1 とおき、 n_2 を n_{2f} とした時の虚数部 ε_2 との符号を比較する。もし、 ε_1 と ε_2 とが異符号であれば n_{2x} と n_{2f} との間に ε_x が 0 となる n_2 がある筈であるから、その中間の n_2 の値に対する ε_x の符号を ε_1 と比較する方法で n_2 の範囲を狭め、解に近づけさせる。この計算は [1003] に指定された α 回数繰返す。もし、繰返し途中で“解”と判定されれば結果を印刷し、また、 α 回計算後も解とならなければ (MX = 4), “ α 回後解なし”と印刷して、 k_2 の値をかえて始めからやり直す。

ε_1 と ε_2 とが同符号の時は解なしと考えられるが、小玉³⁾が指摘しているように n_2 の範囲のとり方によっては解を見逃すことがあるので、[1003] に指定された β を用いて n_{2x} と n_{2f} の間を β 分割し、それぞれの n_2 に対応する ε_x の符号を ε_1 と比較し、これらがすべて同符号である (MX = 3) ときに“解なし”と判断する。もし、途中で ε_x が異符号をとる場合は、対応する n_2 の両側に解となり得る値が2つ存在することになり、それぞれの n_2 について前に述べた α 回の計算ループに移す。計算は $k_2 = k_{2i}$ から k_{2f} まで行ない、計算終了時に $N_2 = n_{2i} - ik_{2i}$ に戻して次のカードを待つ。

制御数 [1108] は計算終了を指定するカードで、これにより計算機は演算を停止する。

1108	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
4	15	25	35	45	55	65	

このカードはデータカードの最後に必ず挿入しなければならない。

制御数 [1101] から [1107] までのカードは、特に指定された場合 (たとえば [1106] の前に [1102] を入れる) を除き、任意の順序で何回でも入力できる。計算機は常に最初に指定された系の定数を保って指示された計算を行なう。また、あまり必要を認めなかったのが独立した計算径路として組込まなかったが、内層の屈折率が変化したときの反射パラメータが必要な場合は、変化させたい相番号に応じて最後の欄を 1. とした [0003]~[0009] のカードと [1103] のカード

とを交互に入れることにより計算できる。

4. 用いた関数と変数

4.1 関数およびサブルーチン

FACOM 230-60 の組込み関数および基本外部関数以外にわれわれが定義して用いた関数およびサブルーチンは次の通りである。

DEG (X): radian 単位の角度を度単位へ換算する。

RAD (X): 度単位の角度を radian 単位へ換算する。

SRC (FRP, FRS, BI2, BI1, BW2, BW1): 境界 j の Fresnel 反射係数 r_j^p, r_j^s を計算する。

$$\text{FRP} = r_j^p, \text{FRS} = r_j^s, \text{BI2} = N_{j+1}, \text{BI1} = N_j, \text{BW2} = \cos \varphi_{j+1}, \text{BW1} = \cos \varphi_j$$

TRC (ARK, RK1, RK2, PU): 境界 j の全反射係数 R_j を計算する。

$$\text{ARK} = R_j, \text{RK1} = r_j, \text{RK2} = R_{j+1}, \text{PU} = D_{j+1}$$

RCAR (TNX, DIX, R1P, R1S): 境界 1 の全反射係数から $\tan \Psi$ と Δ の値を計算する。

$$\text{TNX} = \tan \Psi, \text{DIX} = \Delta, \text{R1P} = R_1^p, \text{R1S} = R_1^s$$

4.2 変数

変数は複素数を C, 実数を R, 整数を I と区別してある。

RI (J)	C	$N_j = n_j - ik_j$	RIS	C	N_m	RIX	C	N_m の保持値
CS (J)	C	$\cos \varphi_j$	CSS	C	$\cos \varphi_m$	RP (J)	C	r_j^p
RS (J)	C	r_j^s	SX	C	$N_1 \sin \varphi_1$	CRP (J)	C	R_j^p
CRS (J)	C	R_j^s	G (J)	C	D_j	GX	C	$4\pi N_2 \cos \varphi_2 / \lambda$
RHO	C	ρ	DCX	C	d_x の計算値	DCY	C	d_x の他の根
TC (4)	C	一次的記憶数	A2	R	k_2	A2I	R	k_{2i}
A2G	R	Δk_2	A2F	R	k_{2f}	A3	R	k_m
A3I	R	k_{mi}	A3G	R	Δk_m	A3F	R	k_{mf}
APM	R	a_p の測定値	ASM	R	a_s の測定値	AP	R	a_p または a_x
AS	R	a_s	AZ	R	a_z	AD	R	$\delta_a = a_z - a_x$
CP	R	印刷制御数	D (J)	R	d_j	D2I	R	d_{2i}
D2G	R	Δd_2	D2F	R	d_{2f}	DLX	R	d_j の保持値
DLG	R	Δd	DLF	R	d_f	DX	R	d_x
DEL	R	Δ	ERP	R	ε_p	ERA	R	ε_a
ED	R	ξ	EX	R	ε_x	ECI	R	ε_1
ECF	R	ε_2	ECE	R	ε_x の保持値	ECR	R	ε_x の保持値
PHI	R	φ_1	PHG	R	$\Delta \varphi$	PHF	R	φ_f
PHX	R	φ_1 の保持値	PM	R	p の測定値	P	R	p
PX	R	p_x	PZ	R	p_z	PD	R	$\delta_p = p_z - p_x$
Q	R	δ_k (rad.)	QZ	R	δ_k (deg.)	QL	R	l
R2	R	n_2	R2I	R	n_{2i}	R2G	R	Δn_2
R2F	R	n_{2f}	R3	R	n_m	R3G	R	Δn_m
R3F	R	n_{mf}	RR	R	β	SN	R	$\sin \varphi_1$
TR	R	反射回数	TNA	R	$\tan \Psi$	THP	R	$\arg (R_1^p)$

THS	R	$\arg (\mathbf{R}_1^s)$	WL	R	λ	WR	R	$4\pi/\lambda$
XPI	R	φ_1 (rad.)	XMP	R	$\text{mod} (\mathbf{R}_1^p)$	XMS	R	$\text{mod} (\mathbf{R}_1^s)$
X1	R	n_{2t}	X2	R	n_{2x}	X3	R	$(X2 + X1)/2$
XX3	R	n_{2x} の保持値	XR	R	$(X2 - X1)/\beta$	Z1~Z6	R	一次的記憶数
INX	I	入力制御数	I, J	I	仮引数	L	I	相番号
NC	I	α	NP, NL	I	全相数	M, MQ	} I	演算制御数
NX	I	NP-4	NF	I	皮膜の層数	MR, MI		
						ML, MK		
						MJ, MX		

5. FORTRAN プログラム

```

COMPLEX CS (9), RI (9), G (9), CRP (9), CRS (9), RP (8), RS (8)
COMPLEX TC (4), CSS, DCX, DCY, RIS, RIX, RHO, SX, GX
REAL D (9)
RAD (X)=3.1415926*X/180.0
DEG (X)=57.295779*X
10 WRITE (6, 11)
11 FORMAT (1H1/1H , 36HPROGRAM. 1  MULTIPLE FILM ELLIPSOMETRY)
20 NC=10
   NP=3
   MQ=MR=1
   MI=ML=MY=0
   QZ=90.0
   ED=5.0
   RR=4.0
   TR=1.0
   ERP=ERA=0.01
   D (2)=D2I=CP=R2=A2=0.0
30 READ (5,31) INX, Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6
31 FORMAT (I4, 1X, 6F10.4)
   IF (INX-1100) 40, 160, 220
40 IF (INX-1000) 50, 140, 150
50 L=INX
   IF (L-2) 60, 100, 110
60 RI (1)=CMPLX (Z1, 0.0)
   PHI=PHX=Z2
   XPI=RAD (PHI)
   CS (1)=CMPLX (COS (XPI), 0.0)
   SN=SIN (XPI)
   SX=RI (1)*SN
   WL=Z3
   WR=12.566371/WL
   IF (Z4) 61, 70, 61
61 IF (Z4-90.0) 62, 70, 62
62 QZ=Z4
   Q=RAD (QZ)
   MQ=2
70 IF (Z5) 71, 80, 71
71 IF (Z5-1.0) 72, 80, 72
72 TR=Z5
   MR=2
80 WRITE (6, 81) TR, Z1, PHI, WL, QZ
81 FORMAT (1H0, 10HCONDITIONS, 12X, 20HNUMBER OF REFLEXION=F4.0, 6H TIMES/
11H0 10X, 14HPHASE 1. N=F8.4, 7H, PHI=F8.3, 10H DEG, WL=F8.1,
29H ANG, Q=F8.3, 4H DEG)
   GO TO 30
100 R2=R2I=Z1
   A2=A2I=-ABS (Z2)
   R2G=Z3

```

```

A2G = -ABS (Z4)
R2F = Z5
A2F = -ABS (Z6)
WRITE (6, 101) R2I, A2I, R2F, A2F, R2G, A2G
101 FORMAT (1H0 10X, 14HPHASE 2. N=2F8.4, 5H I TO2F8.4, 9H I, STEP,
1F7.3, 4H ANDF7.3, 2H I)
GO TO 30
110 RI (L)=CMPLX (Z1,-ABS (Z2))
IF (Z3) 111, 112, 111
111 D (L)=DLX=Z3
112 NP=MAX0 (L+1, NP)
IF (Z6) 130, 120, 130
120 WRITE (6, 121) L, RI (L), D (L)
121 FORMAT (1H 10X, 5HPHASEI4, 5H. N=2F8.4, 7H I, D=F8.1, 4H ANG)
GO TO 30
130 WRITE (6, 131) INX, L, RI (L), D (L)
131 FORMAT (1H0 I5, 21H CHANGE CONSTANTS OFI4, 14HTH PHASE TO N=2F8. 4,
16H I, D=F8.1, 4H ANG)
M=1
GO TO 590
140 RIS=RIX=CMPLX (Z1,-ABS (Z2))
M=1
MK=3
GO TO 550
150 M=INX-1000
GO TO (235, 240, 200), M
160 NL=IFIX (Z1)
IF (NL.LT. NP. AND. NL.GE. 3) GO TO 180
170 WRITE (6, 171) INX
171 FORMAT (1H0I5, 29H ERROR. NEGLECTED THIS CARD)
GO TO 30
180 NP=NL
NF=NP-2
WRITE (6, 181) INX, NP, NF
181 FORMAT (1H0 I5, 22H REDUCE PHASES TO NP=I4, 2H (I4, 7H FILMS))
M=1
IF (NP-3) 30, 30, 590
200 CP=Z1
202 IF (Z2) 203, 204, 203
203 ERP=Z2
204 IF (Z3) 205, 206, 205
205 ERA=Z3
206 IF (Z4) 207, 208, 207
207 NC=IFIX (ABS (Z4))
208 IF (Z5) 209, 210, 209
209 RR=Z5
210 IF (Z6) 211, 212, 211
211 ED=Z6
212 GO TO 30
220 M=INX-1100
IF (M-8) 230, 1500, 1500
230 GO TO (510, 310, 560, 340, 240, 240), M
235 IF (Z2*Z3) 240, 236, 240
236 WRITE (6, 237) INX
237 FORMAT (1H0 I5, 30H ERROR. REGARDED Q AS 90 DEG)
GO TO 30
240 PM=Z1
APM=Z2
ASM=Z3
P=RAD (PM)
AP=RAD (APM)
AS=RAD (ASM)
IF (M-1) 260, 250, 260

```

```

250 TNA=SQRT (TAN (AP)*TAN( AS))
    Q=ARCOS (COS (2.0*ATAN2 (TNA, TAN (AP)))/COS(2.0*P)
    QZ=DEG (Q)
    MQ=2
    WRITE (6, 251) QZ, PM, APM, ASM
251 FORMAT (1H0 10X, 21HQUARTER WAVE PLATE Q=F9.4, 5H DEG. 9X,
111HMEASURED P=F8.3, 5H, AP=F8.3, 5H, AS=F8.3, 4H DEG)
    GO TO 30
260 GO TO (280, 270), MQ
270 QL=ARCOS (COS (2.0*P)*COS (Q))/2.0
    P=ATAN2 (TAN (2.0*P), SIN (Q))/2.0
    IF (AP) 271, 272, 271
271 AP=ATAN (TAN (AP)*TAN (QL))
    IF (AS) 276, 280, 276
272 IF (AS) 273, 274, 273
273 AP=ATAN (TAN (AS)*COT (QL))
    GO TO 280
274 WRITE (6, 275) INX
275 FORMAT (1H0 I5, 33H ERROR. AP AND AS ARE UNDEFINED)
    GO TO 30
276 AS=ATAN (TAN (AS)*COT (QL))
    AP=(AP+AS)/2.0
280 GO TO (300, 290), MR
290 P=((2.0*P+1.5707963)/TR-1.5707963)/2.0
    AP=ATAN (TAN (ABS (AP))**(1.0/TR))
300 PZ=DEG (P)
    AZ=DEG (AP)
    DEL=2.0*P+1.5707963
    RHO=TAN (AP)*CEXP (CMPLX (0.0, DEL))
    GO TO (30, 380, 30, 30, 640, 650, 660), M
310 D (2)=D2I=Z1
    D2G=Z2
    D2F=Z3
    IF (D2F) 330, 320, 330
320 WRITE (6, 321) INX, D (2)
321 FORMAT (1H0 I5, 13H SPECIFY D2=F8.1, 4H ANG)
    GO TO 30
330 WRITE (6, 331) INX
331 FORMAT (1H0 I5, 28H CHANGE OF P AND A WITH D2,1H0 14X, 6HRE( N2) 3X,
16HIM (N2) 6X, 2HD26X, 6HTAN (A) 4X, 5HDELTA6X, 1HP7X, 2HAP7X, 2HAS8X,
26HMOD (P) 4X, 6HARG (P) 5X, 6HMOD (S) 4X, 6HARG (S))
    GO TO 710
340 PHI=Z1
    PHG=Z2
    PHF=Z3
    WRITE (6, 341) INX, NP, R2, A2, D (2)
341 FORMAT (1H0 I5, 43H CHANGE OF P AND A WITH PHI FOR SYSTEM NP=I4, 5H,
1N2=2F8.4, 7H I, D2=F8.1, 4H ANG/1H0 15X, 3HPHI7X, 6HTAN (A) 4X, 5HDELTA6X,
21HP7X, 2HAP7X, 2HAS8X, 6HMOD (P) 4X, 6HARG (P) 5X, 6HMOD (S) 4X, 6HARG (S))
350 XPI=RAD (PHI)
    CS (1)=CMPLX (COS (XPI), 0.0)
    SX=SIN (XPI)*RI (1)
    IF (NP-3) 351, 351, 590
351 IF (M-1) 370, 30, 370
370 IF (D (2)) 550, 550, 630
380 TC (1)=CSQRT (1.0-4.0*RHO*SN**2/(1.0+RHO)**2)
    RIS=RIX=TAN (XPI)*RI (1)*TC (1)
    WRITE (6, 381) RIS, PM, APM, ASM
381 FORMAT (1H0 10X, 21HINDEX OF SUBSTRATE N=2F8.4, 18H I. MEASURED P=,
1F8.3, 5H, AP=F8.3, 5H, AS=F8.3, 4H DEG)
    GO TO 470
400 GO TO (410, 420, 450), MK
410 WRITE (6, 411) RIX, TNA, DEL, PX, AP, AS, XMP, THP, XMS, THS

```

```

411 FORMAT (1H0, F20.4, F9.4, F12.6, 4F9.3, 2 (F12. 6, F9.3))
    GO TO 430
420 WRITE (6, 421) A3, TNA, DEL, PX, AP, AS, XMP, THP, XMS, THS
421 FORMAT (1H , F29.4, F12.6, 4F9.3, 2 (F12.6, F9.3))
430 IF (A3G) 431, 440, 431
431 A3=A3+A3G
    MK=2
    IF (A3F-A3) 540, 540, 440
440 IF (R3G) 30, 30, 441
441 R3=R3+R3G
    A3=A3I
    IF (R3F-R3) 30, 530, 530
450 WRITE (6, 451) RIS, PZ, AZ
451 FORMAT (1H0 10X, 14HSUBSTRATE. N=2F8.4, 25H I. SURFACE REFLEXION P=,
1F8.3, 5H, AP=F8.3, 4H DEG)
    GO TO (470, 460), MQ
460 WRITE (6, 461) QZ, PX, AP, AS
461 FORMAT (1H 45X, 6HFOR Q=F9.4, 5H P=F8.3, 5H, AP=F8.3, 5H, AS=F8.3,
14H DEG)
470 NF=NP-2
    WRITE (6, 471) NP, NF
471 FORMAT (1H0, 21H NUMBER OF PHASES NP=I5,2H (I4, 7H FILMS)/)
    IF (NP-3) 30, 30, 590
480 WRITE (6, 481) PHI, TNA, DEL, PX, AP, AS, XMP, THP, XMS, THS
481 FORMAT (1H , F20.3, F12.6, 4F9.3, 2 (F12.6, F9.3))
    IF (PHG) 500, 500, 490
490 PHI=PHI+PHG
    IF (PHF-PHI) 500, 350, 350
500 IF (PHI-PHX) 501, 30, 501
501 PHI=PHX
    M=1
    GO TO 350
510 R3=Z1
    A3=A3I=-ABS (Z2)
    R3G=Z3
    A3G=-ABS (Z4)
    R3F=Z5
    A3F=-ABS (Z6)
    WRITE (6, 511) INX
511 FORMAT (1H0 I5, 55H CHANGE OF P AND A WITH OPTICAL CONSTANT OF SUBST
1RATE./1H0 14X, 6HRE (NS) 3X, 6HIM (NS) 5X, 6HTAN (A) 4X, 5HDELTA6X, 1HP7X,
22HAP7X, 2HAS8X, 6HMOD (P) 4X, 6HARG (P) 5X, 6HMOD (S) 4X, 6HARG (S)/)
530 MK=1
540 RIX=CMPLX (R3, A3)
550 CS (3)=CSQRT(1.0-(SX/RIX)**2)
    CALL SRC (CRP (1), CRS (1), RIX, RI (1), CS (3), CS (1))
    GO TO 790
560 L=IFIX (Z6)
    IF (L. GE. NP. OR. L. LT. 3) GO TO 170
    D (L)=Z1
    DLG=Z2
    DLF=Z3
    WRITE (6, 561) INX, L, R2, A2, D (2)
561 FORMAT (1H0 I5, 24H CHANGE OF P AND A WITHI4, 24HTH PHASE THICKNESS.
1 N2=2F8.4, 7H I, D2=F8.1, 4H ANG/1H0 17X, 1HD7X, 6HTAN (A) 4X, 5HDELTA6X,
21HP7X, 2HAP7X, 2HAS8X, 6HMOD (P) 4X, 6HARG (P) 5X, 6HMOD (S) 4X, 6HARG (S)/)
590 CSS=CSQRT (1.0-(SX/RIS)**2)
    CS (NP-1)=CSQRT (1.0-(SX/RI (NP-1))**2)
    CALL SRC (CRP (NP-1), CRS (NP-1), RIS, RI (NP-1), CSS, CS (NP-1))
    IF (NP-4) 630, 630, 600
600 NX=NP-4
    I=NP-2
    DO 610 J=1, NX

```

```

CS (I)=CSQRT (1.0-(SX/RI (I))**2)
CALL SRC (RP (I), RS (I), RI (I+1), RI (I), CS (I+1), CS (I))
G (I+1)=WR*D (I+1)*RI (I+1)*CS (I+1)
CALL TRC (CRP (I), RP (I), CRP (I+1), G (I+1))
CALL TRC (CRS (I), RS (I), CRS (I+1), G (I+1))
I=I-1
610 CONTINUE
630 IF (M-3) 30, 710, 710
640 WRITE (6, 641) INX
641 FORMAT (1H0 I5, 47H CALCULATION OF MOST PROBABLE D2 FOR GIVEN N2.)
GO TO 670
650 WRITE (6, 651) INX, D (2), ERP, ERA, ED
651 FORMAT (1H0 I5, 47H CALCULATION OF MOST PROBABLE N2 FOR GIVEN D2=,
1F8.1, 18H ANG. ERROR OF P=F7.4, 4H, A=F7.4, 12H DEG AND D2=F5.1,
29H PER CENT)
IF (D (2)) 655, 655, 670
655 WRITE (6, 656) INX
656 FORMAT (1H0 I5, 30H ERROR. D2 HAS NOT SPECIFIED)
GO TO 30
660 WRITE (6, 661) INX, ERP, ERA
661 FORMAT (1H0 I5, 54H CALCULATION OF MOST PROBABLE N2 AND D2. ERROR O
1F P=F7.4, 7H AND A=F7.4, 4H DEG)
670 WRITE (6, 671) PM, APM, ASM, PZ, AZ
671 FORMAT (1H 7X, 11HMEASURED P=F8.3, 5H,AP=F8.3, 5H, AS=F8.3, 5H DEG. 3X,
110 HCORRECT P=F8.3, 4H, A=F8.3, 4H DEG/1H0 14X, 6HRE (N2) 3X, 6HIM (N2) 6X,
22HDX5X, 2HEX9X, 5HDIF-P4X, 5HDIF-A7X, 2HPX7X, 2HAX/)
700 R2=X1=R2I
X2=R2F
MX=1
710 RI (2)=CMPLX (R2, A2)
CS (2)=CSQRT (1.0-(SX/RI (2))**2)
GX=WR*RI (2)*CS (2)
CALL SRC(RP (1), RS (1), RI (2), RI (1), CS (2), CS (1))
IF (NP-3) 720, 720, 730
720 CS (3)=CSQRT (1.0-(SX/RIS)**2)
CALL SRC (CRP (2), CRS (2), RIS, RI (2), CS (3), CS (2))
GO TO 760
730 CALL SRC (RP(2), RS (2), RI (3), RI (2), CS (3), CS (2))
740 G (3)=WR*D (3)*RI (3)*CS (3)
750 CALL TRC (CRP(2), RP (2), CRP (3), G (3))
CALL TRC(CRS (2), RS (2), CRS (3), G (3))
760 IF (MY) 1065, 765, 1065
765 IF (M-4) 770, 770, 1000
770 MJ=1
780 G (2)=GX*D (2)
CALL TRC (CRP (1), RP (1), CRP (2), G (2))
CALL TRC (CRS (1), RS(1), CRS (2), G (2))
790 XMP=CABS (CRP (1))
XMS=CABS (CRS (1))
THP=DEG (ATAN2 (AIMAG (CRP(1)), REAL (CRP (1))))
THS=DEG (ATAN2 (AIMAG (CRS(1)), REAL (CRS (1))))
800 CALL RCAR (TNA, DEL, CRP (1), CRS (1))
GO TO (830, 820), MR
820 TNA=TNA**TR
DEL=DEL*TR
830 P=0.5*DEL-0.7853982
PZ=PX=DEG (P)
DEL=DEG (DEL)
AZ=AP=DEG (ATAN (TNA))
AS=0.0
GO TO (850, 840), MQ
840 P=ATAN (TAN (2.0*P)*SIN (Q))/2.0
QL=ARCOS (2.0*P)*COS (Q))/2.0

```

```

AP=DEG (ATAN (TNA*COT (QL)))
AS=DEG (ATAN (TNA*TAN (QL)))
PX=DEG (P)
850 GO TO (400, 860, 920, 480), M
860 GO TO (870, 880), MJ
870 WRITE (6, 871) RI (2), D(2), TNA, DEL, PX, AP, AS, XMP, THP, XMS, THS
871 FORMAT (1H0, F20.4, F9.4, F9.1, F12.6, 4F9.3, 2 (F12.6, F9.3))
GO TO 890
880 WRITE(6, 881)D(2), TNA, DEL, PX, AP, AS, XMP, THP, XMS, THS
881 FORMAT (1H 29X, F9.1, F12.6, 4F9.3, 2 (F12.6, F9.3))
890 IF (D2G) 1110, 1110, 900
900 D (2)=D (2)+D2G
MJ=2
IF (D2F-D (2)) 910, 780, 780
910 D (2)=D2I
GO TO 1110
920 WRITE (6, 921) D (L), TNA, DEL, PX, AP, AS, XMP, THP, XMS, THS
921 FORMAT(1H , F20.1, F12.6, 4F9.3, 2(F12.6, F9.3))
IF (DLG) 980, 980, 930
930 D (L)=D (L)+DLG
IF (DLF-D (L)) 980, 940, 940
940 IF (L-3) 950, 740, 950
950 G (L)=WR*D (L)*RI (L)*CS (L)
NX=NP-4
I=L-1
DO 960 J=1, NX
CALL TRC (CRP (I), RP (I), CRP (I+1), G (I+1))
CALL TRC (CRS (I), RS (I), CRS (I+1), G (I+1))
I=I-1
960 CONTINUE
GO TO 750
980 IF (D (L)-DLX) 981, 30, 981
981 D (L)=DLX
M=1
GO TO 590
1000 TC (1)=CRP (2)*CRS (2)*(RS (1)-RP (1)*RHO)
TC (2)=RP (1)*RS (1)*(CRS (2)-CRP (2)*RHO)+CRP (2)-CRS (2)*RHO
TC (3)=RP (1)-RS (1)*RHO
TC (4)=CSQRT (TC (2)**2-4.0*TC (1)*TC (3))
TC (3)=0.5*(-TC (2)+TC (4))/TC (1)
TC (4)=0.5*(-TC (2)-TC (4))/TC (1)
DCX=CMPLX (0.0, 1.0)*CLOG (TC (3))/GX
DCY=CMPLX (0.0, 1.0)*CLOG (TC (4))/GX
IF (REAL (DCX)) 1002, 1002, 1001
1001 IF (REAL (DCY)) 1060, 1060, 1003
1002 IF (REAL (DCY)) 1030, 1030, 1050
1003 IF (ABS (AIMAG (DCX))-ABS (AIMAG (DCY))) 1060, 1060, 1050
1030 WRITE (6, 1031) RI (2), DCX, DCY
1031 FORMAT (1H , F20.4, F9.4, 13H NO SOLUTION8X, 4HDCX=2F12.5,
112H I, AND DCY=2F12.5, 2H I)
IF (M-5) 1040, 1110, 1040
1040 IF (R2G) 1041, 1041, 1042
1041 IF (MI) 1340, 1044, 1340
1042 R2=X1=R2+R2G
1043 IF (X2-X1) 1340, 1046, 710
1044 IF (X2-X1) 1340, 1340, 1045
1045 R2=X2
1046 MI=1
MX=5
GO TO 710
1050 DCX=DCY
1060 DX=REAL (DCX)
EX=AIMAG (DCX)

```

```

1065  G (2)=GX*DX
      CALL TRC (CRP (1), RP (1), CRP (2), G (2))
      CALL TRC (CRS (1), RS (1), CRS (2), G (2))
      CALL RCAR (TNA, DEL, CRP (1), CRS (1))
      PX=0.5*DEG (DEL)-45.0
      AP=DEG (ATAN (TNA))
      PD=PZ-PX
      AD=AZ-AP
      IF (MY) 1250, 1090, 1250
1090  IF (M-5) 1150, 1100, 1150
1100  WRITE (6, 1101) RI (2), DX, EX, PD, AD, PX, AP
1101  FORMAT (1H, F20.4, F9.4, F9.1, F12.5, 2F9.3, F12.3, F9.3)
1110  IF (A2G) 1111, 1120, 1120
1111  A2=A2+A2G
      IF (A2F-A2) 710, 710, 1120
1120  IF (R2G) 1130, 1130, 1121
1121  WRITE (6, 1122)
1122  FORMAT (1H )
      R2=R2+R2G
      A2=A2I
      IF (R2F-R2) 1135, 710, 710
1130  A2=A2I
1135  R2=R2I
      D (2) =D2I
      GO TO 30
1150  IF (ABS (PD)-ABS (ERP)) 1151, 1151, 1190
1151  IF (ABS (AD)-ABS (ERA)) 1160, 1160, 1190
1160  IF (M-6) 1170, 1161, 1170
1161  IF ((1.0+0.01*ED)*D (2)-DX) 1190, 1162, 1162
1162  IF ((1.0-0.01*ED)*D (2)-DX) 1170, 1170, 1190
1170  WRITE (6,1171) A2
1171  FORMAT (1H 10X, 20HSOLUTION FOR IM(N2)=F8.4, 5H I IS)
      WRITE (6, 1101) RI (2), DX, EX, PD, AD, PX, AP
      WRITE (6, 1172)
1172  FORMAT (1H 12X, 24HDEVIATIONS OF RE (N2) ARE)
      IF (R2G) 1173, 1173, 1180
1173  WRITE (6, 1174)
1174  FORMAT (1H+, 37X, 13HNOT INDICATED)
      GO TO 1340
1180  R2=R2-R2G
      MY=1
      GO TO 710
1190  IF (CP) 1200, 1191, 1200
1191  WRITE (6, 1101) RI (2), DX, EX, PD, AD, PX, AP
1200  GO TO (1210, 1220, 1240, 1280, 1330), MX
1210  ECI=EX
      IF (X2-X1) 1330, 1330, 1211
1211  R2=X2
      MX=2
      GO TO 710
1220  ECF=EX
      IF (ECF) 1222, 1221, 1221
1221  IF (ECI) 1270, 1230, 1230
1222  IF (ECI) 1230, 1230, 1270
1230  XR=(X2-X1)/RR
      R2=X2=X2-XR
      MX=3
      GO TO 710
1240  ECE=EX
      IF (ECE) 1242, 1241, 1241
1241  IF (ECI) 1260, 1243, 1243
1242  IF (ECI) 1243, 1243, 1260
1243  R2=X2=X2-XR

```



```

      IF (X2-X1) 1330, 1330, 710
1250  WRITE (6, 1101) RI (2), DX, EX, PD, AD, PX, AP
      R2=R2+2.0*R2G
      MY=MY+1
      IF (MY-2) 710, 710, 1251
1251  MY=0
      GO TO 1340
1260  XX3=X2
      ML=1
1270  J=1
1275  R2=X3=(X1+X2)/2.0
      MX=4
      GO TO 710
1280  ECR=EX
      IF (ECR) 1282, 1281, 1281
1281  IF (ECI) 1295, 1290, 1290
1282  IF (ECI) 1290, 1290, 1295
1290  X1=X3
      ECI=ECR
      GO TO 1300
1295  X2=X3
      ECF=ECR
1300  J=J+1
      IF (NC-J) 1301, 1275, 1275
1301  WRITE (6, 1302) NC, A2
1302  FORMAT (1H 12X, 16HNO SOLUTION WITH, I4, 18H TRIES FOR IM (N2)=F8.4,
13H I.)
      IF (CP) 1303, 1310, 1303
1303  WRITE (6, 1304)
1304  FORMAT (1H+, 65X, 16HFINAL VALUES ARE)
      WRITE (6, 1101) RI(2), DX, EX, PD, AD, PX, AP
1310  IF (ML) 1320, 1340, 1320
1320  X1=XX3
      X2=R2F
      ECI=ECE
      ML=0
      GO TO 1270
1330  WRITE (6, 1331) A2, MX
1331  FORMAT (1H 12X, 34HNO SOLUTION IN REAL N2 FOR IM (N2)=, F8.4,
123H I, TERMINAL CODE MX=I3)
      IF (CP) 1332, 1340, 1332
1332  WRITE (6, 1101) RI (2), DX, EX, PD, AD, PX, AP
1340  IF (A2G) 1341, 1360, 1360
1341  WRITE (6, 1342)
1342  FORMAT (1H )
      A2=A2+A2G
      MI=0
      IF (A2F-A2) 700, 700, 1350
1350  A2=A2I
1360  R2=R2I
      GO TO 30
1500  STOP
      END

```

```

SUBROUTINE SRC (FRP, FRS, BI2, BI1, BW2, BW1)
COMPLEX FRP, FRS, BI1, BI2, BW1, BW2, UX, UY
UX=BI2*BW1
UY=BI1*BW2
FRP=(UX-UY)/(UX+UY)
UX=BI1*BW1
UY=BI2*BW2
FRS=(UX-UY)/(UX+UY)
RETURN

```

END

```
SUBROUTINE TRC (ARK, RK1, RK2, PU)
  COMPLEX ARK, RK1, RK2, PU, TX, TY
  TX=CMPLX (AIMAG (PU), -REAL (PU))
  TY=RK2*CEXP (TX)
  ARK=(RK1+TY)/(1.0+RK1*TY)
  RETURN
END
```

```
SUBROUTINE RCAR (TNX, DIX, R1P, R1S)
  COMPLEX R1P, R1S, RHX
  RHX=R1P/R1S
  IF (REAL (RHX)) 2, 1, 2
1 DIX=SIGN (1.5707963, AIMAG (RHX))
  GO TO 3
2 DIX=ATAN2 (AIMAG (RHX), REAL (RHX))
3 TNX=CABS (RHX)
  RETURN
END
```

6. む す び

偏光解析法は古典的な方法であるが、感度、精度とも非常に優れていること、電子計算機を利用することによって解析が容易になったことなどによって、改めて表面研究手段としての価値が見直され、多くの研究分野に利用されつつある。また、LEED あるいは FIM などと組み合わせることによって新しい知見が開拓されている⁷⁾。しかし、本邦においては、ようやく金属表面現象の研究に利用され始めた状態にすぎない。また、理論を構成する基準の任意性のために、これから偏光解析法を志す人に混乱を生じさせている。そのため、前報⁷⁾で定義した基準による不透明多層皮膜の解析に対するプログラムの一例を示した。この基準は前の Symposium⁷⁾で最も好ましいとされたものと一致する。このプログラムをニッケルの不働態皮膜へ適用した解析例は別に報告する。

上述の解析では、各相は均一な等方体で、その境界は平面であることを仮定しているが、金属表面皮膜では、皮膜の不均一性、Epitaxy、あるいは表面粗度などが結果に影響を与えることがある。これらの効果については未だ解析の緒についたばかりであり、二、三のモデルも提案されているが、このプログラムでは考慮されていない。この問題は今後解決すべき大きな課題と考えている。

終りに本プログラムの作製について種々御助言をいただいた北海道大学大型計算センタープログラム指導員の方々に感謝の意を表する。

文 献

- 1) Ellipsometry in the Measurement of Surfaces and Thin Films, Symposium Proceedings, 1963, Washington, NBS Misc. Publ. 256 (1964), U. S. Govern. Printing office.
- 2) McCrackin, F. L., Passaglia, E., Stromberg, R. R. and Steinberg, H. L.: J. Res. NBS, **67A** (1963), 4, p. 363.
- 3) McCrackin, F. L. and Colson, J. P.: NBS Tech. Note, 242 (1964).
- 4) 富士通編: FACOM 230-60 FORTRAN 解説編 (I), (II).
- 5) Winterbottom, A. B.: Optical Studies of Metal Surfaces, Kgl. Norske Vidensk. Selsk. Skr. 1 (1955), F. Bruns Bokhandel.
- 6) 工藤清勝, 岡本 剛: 材料, **17** (1968), 179, p. 656.

- 7) Recent Developments in Ellipsometry, Symposium Proceedings, 1968, Nebraska, (1969), North-Holland ; Surface Sci., **16** (1969).
- 8) 工藤清勝, 佐藤教男, 岡本 剛: 工学部研究報告 (1968), 47, p. 141.
- 8) 小玉俊明: 私信; 第 17 回腐食防食討論会要旨集 (1970), p. 349.