

# Ellipsometrische Untersuchung dünner Halbleiterschichten

von  
Katalin Biró

Diplomarbeit in Physik  
angefertigt im  
Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik

vorgelegt der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der  
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität  
Bonn

im September 2009



Anfertigung mit der Genehmigung  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

**Referent**                      Priv. Doz. Dr. Reiner Vianden

**Koreferent**                    Prof. Dr. Karl Maier

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt, sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, den 28. September 2009



# Inhalt

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	2
2.1	Allgemeine Grundlagen	2
2.1.1	Fresnelsche Formeln und das Brechungsgesetz	2
2.1.2	Theorie für zwei Grenzflächen	3
2.2	Ellipsometrie	5
2.2.1	Grundlagen der Ellipsometrie	5
2.2.2	Nullellipsometrie	7
2.3	Lösung der ellipsometrischen Gleichung	8
2.3.1	Warum keine iterative Lösung?	8
2.3.2	Lösungsmethode nach Drolet	8
2.4	Herleitung des Polynoms 5. Grades	9
3	Messablauf und Bedienung von Elli	17
3.1	Messablauf	17
3.2	Bedienung von Elli	18
3.2.1	Installation der „LabVIEW Runtime-Engine“	18
3.2.2	Bedienung des Programms „Elli+Save Data“	18
3.2.2.1	Datenauslese und Auswertung	18
3.2.2.2	Datenspeicherung	20
3.2.3	Das Testpanel	21
4	Messungen	22
4.1	Referenzproben	22
4.1.1	Untersuchung der $(43,1 \pm 0,5)$ nm Probe	23
4.1.2	Untersuchung der $(58,2 \pm 0,5)$ nm Probe	23
4.1.3	Untersuchung der $(107,8 \pm 0,5)$ nm Probe	24
4.1.4	Untersuchung der $(196,3 \pm 0,5)$ nm Probe	24
4.1.5	Ergebnis	25
4.2	Messung dicker Schichten	26
4.2.1	$(500 \pm 20)$ nm AlN auf Saphir	27
4.2.2	$(453 \pm 45)$ nm $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ( $x = 15,1\%$ ) auf Saphir	28
4.2.3	$(589 \pm 59)$ nm $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ( $x = 4,3\%$ ) auf Saphir	29
4.2.4	$(3000 \pm 120)$ nm AlN auf Saphir	30
4.2.5	Ergebnis	31
4.3	Messung extrem dünner Schichten	32
4.3.1	Untersuchung einer $(17 \pm 0,5)$ nm dicken $\text{HfO}_2$ -Schicht auf Silizium	32
4.3.2	Untersuchung einer $(4,9 \pm 0,5)$ nm dicken $\text{HfO}_2$ -Schicht auf Silizium	33
4.3.3	Ergebnis	33
4.4	Brechungsindizes	33
5	Zusammenfassung	35

6	Anhang	37
6.1	Quellcode	37
6.1.1	Eine kurze Einführung in Labview	37
6.1.2	Alpha-2.vi	38
6.1.3	g, f_2.vi	40
6.1.4	j neu.vi	42
6.1.5	k neu.vi	44
6.1.6	Epsilon.vi	46
6.1.7	n1+phi1.vi	48
6.1.8	Big X.vi	50
6.1.9	Dicke D.vi	51
6.1.10	Frontpanel Elli.vi	52
6.1.11	Save Data.vi	53
6.2	Reinigung der Proben	54
6.3	Spezielle Werkzeuge und Hilfsmittel	55
6.4	Geräteliste	57
6.5	Justage	60
6.6	Notwendigkeit der Brewster-Justiermethode	64
7	Literatur	65
8	Danksagung	67

# 1 Einleitung

In der Arbeitsgruppe werden dünne Halbleiterschichten mit der gestörten Winkelkorrelation (PAC) untersucht. Hierfür implantiert man radioaktive Sonden. Es ist wichtig, möglichst genau die Schichtdicke  $d$  zu kennen, da bei einer zu hohen Implantationsenergie diese Sonden auch in das Substrat gelangen und so die anschließenden Messungen verfälschen. Mit dem Ellipsometer sollen Eigenschaften wie Schichtdicke und Brechungsindex der verwendeten Proben bestimmt werden.

Der Name „Ellipsometrie“ tauchte erstmals 1945 in einem Artikel von Alexander Rother in der *Review of Scientific Instruments* auf. Die Polarisation eines Lichtstrahls wird senkrecht (s-Polarisation) beziehungsweise parallel (p-Polarisation) zur Einfallsebene betrachtet. Trifft der Strahl nun auf eine Grenzfläche, so ist die Reflexion für die s- und p- Polarisation resultierend aus den Stetigkeitsbedingungen der Maxwell'schen und der Fresnel'schen Gleichungen verschieden. Durch die Änderung des Polarisationszustandes durch die Reflexion des Messlichtes können die dielektrischen Eigenschaften einer Probe bestimmt werden. 1883 beobachtete der deutsche Physiker Paul Drude (1864-1906) eine zeitabhängige Änderung der Phasenverschiebung zwischen der senkrechten und parallelen Komponente von polarisiertem Licht. Vier Jahre nach seiner Entdeckung veröffentlichte er ein Gleichungssystem für p- und s- Polarisation, die theoretische Grundlage der Ellipsometrie. Allerdings erlangte diese Methode erst mit dem Aufkommen der ersten Computer in den 60-er Jahren eine größere Bedeutung. Da man sich dabei den veränderten Polarisationszustand einer elektromagnetischen Welle nach der Reflexion an einer Grenzfläche oder einem dünnen Film zu Nutze macht, kann man die Ellipsometrie als ein „phasenempfindliches Reflexionsexperiment mit polarisiertem Licht an einer Grenzfläche“ [Sar04] betrachten. Im allgemeinen Fall ist das reflektierte Messlicht elliptisch polarisiert, was der Methode schließlich den Namen gab. Die wichtigste Anwendung ist die Vermessung dünner Schichten. Mittels der Ellipsometrie kann man zerstörungsfrei Informationen über optischen Konstanten sowie der Schichtdicke einer Probe erhalten.

Bereits im Jahre 1996 wurde im Rahmen einer Diplomarbeit von M. Mendel ein Nullellipsometer in der Arbeitsgruppe für nukleare Festkörperphysik am Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik der Universität Bonn konstruiert. Das damalige numerische Ausleseprogramm wurde im Folgejahr verbessert und baute auf einen analytischen Lösungsweg nach dem Vorbild von Jean-Pierre Drolet [Dro94] auf.

Die Aufgabe dieser Diplomarbeit besteht darin, dieses Programm von C++ in LabVIEW umzuschreiben. Damit wird eine digitale Datenauslese mittels eines neu angeschlossenen digital-analog Wandlers (DAC) ermöglicht. Anschließend sollen Testmessungen vorgenommen werden, um die Qualität der Messergebnisse für verschiedene Schichtdicken für unterschiedlichen Materialien zu untersuchen.

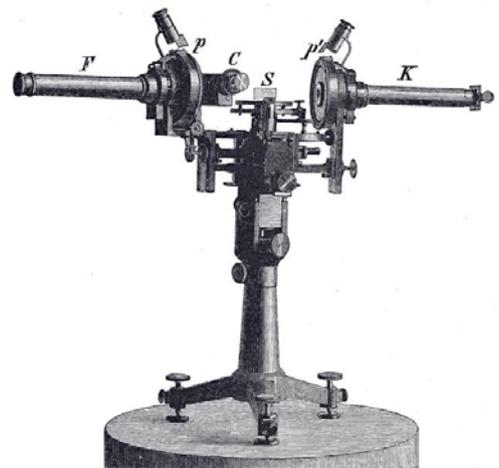


Abbildung 1.1: Ellipsometer Anfang des 20. Jahrhunderts [Dru02]

# 2 Theoretische Grundlagen

## 2.1 Allgemeine Grundlagen

### 2.1.1 Fresnel'sche Formeln und das Brechungsgesetz

Trifft eine ebene Welle auf die Grenzfläche zwischen den isotropen Medien (0) und (1), so wird ein Teil in einem Winkel  $\varphi_0$  reflektiert, während der andere Teil unter einem Winkel  $\varphi_1$  transmittiert wird.

Nach dem Gesetz von Snellius müssen alle drei Strahlen in einer Ebene liegen, wobei die Einfallsebene durch den ein- und ausfallenden Strahl sowie durch das Lot zur Oberfläche definiert wird. Es gilt

$$N_0 \cdot \sin \varphi_0 = N_1 \cdot \sin \varphi_1 \quad (2.1)$$

mit  $N = n - i \cdot k$ . Dabei ist  $n$  der reelle Brechungsindex und  $k$  der Extinktionskoeffizient des Mediums. Für transparente Materialien fällt der Extinktionskoeffizient  $k$  weg, und die Gleichung vereinfacht sich zu

$$n_0 \sin \varphi_0 = n_1 \sin \varphi_1 \quad (2.2)$$

wobei Einfalls- und Reflexionswinkel gleich groß sind. Eine weitere Beschreibung einer ebenen Welle, die auf eine Grenzfläche trifft erfolgt durch die so genannten Fresnel'schen Formeln.

Man betrachtet hierbei verschiedene Komponenten der elektrischen Feldvektoren. Dabei müssen sowohl die Stetigkeitsbedingungen der Tangentialkomponenten des Lichtvektors, als auch die vollständige Theorie der Reflexion, Polarisation und Brechung isotroper Medien berücksichtigt werden.

So erhält man die komplexwertigen Reflexions- und Brechungskoeffizienten für die parallele (p-Polarisation) und senkrechte (s-Polarisation) Polarisation bezüglich der Einfallsebene [Pohl83].

Mit den komplexen Amplituden der p- und s- Komponenten der einfallenden (e), reflektierten (r) und transmittierten (t) elektrischen Feldvektoren ( $E_{pe}, E_{se}, E_{pr}, E_{sr}, E_{pt}$  und  $E_{st}$ ) lässt sich in den folgenden Gleichungen die gesamte Theorie der Brechung, Reflexion und Polarisation isotroper Medien zusammenfassen:

$$r_p = \frac{E_{pr}}{E_{pe}} = \frac{n_1 \cdot \cos \varphi_0 - n_0 \cdot \cos \varphi_1}{n_1 \cdot \cos \varphi_0 + n_0 \cdot \cos \varphi_1} \quad (2.3)$$

$$r_s = \frac{E_{sr}}{E_{se}} = \frac{n_0 \cdot \cos \varphi_0 - n_1 \cdot \cos \varphi_1}{n_0 \cdot \cos \varphi_0 + n_1 \cdot \cos \varphi_1} \quad (2.4)$$

$$t_p = \frac{E_{pt}}{E_{pe}} = \frac{2 \cdot n_0 \cdot \cos \varphi_0}{n_1 \cdot \cos \varphi_0 + n_0 \cdot \cos \varphi_1} \quad (2.5)$$

$$t_s = \frac{E_{st}}{E_{se}} = \frac{2 \cdot n_0 \cdot \cos \varphi_0}{n_0 \cdot \cos \varphi_0 + n_1 \cdot \cos \varphi_1} \quad (2.6)$$

## 2.1.2 Theorie für zwei Grenzflächen

Soll die Dicke  $d$  einer dünnen Schicht auf einem Substrat bestimmt werden, müssen nun zwei Grenzflächen betrachtet werden. Eine zwischen der Umgebung und der zu vermessenden Schicht und die zweite zwischen der Schicht und dem Substrat.

Die Medien haben die Brechungsindizes  $n_0$ ,  $n_1$  und  $n_2$ .

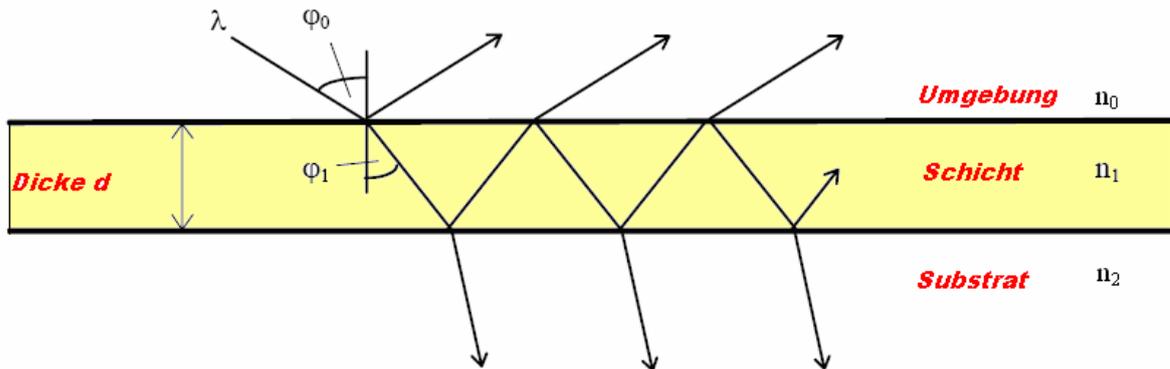


Abbildung 2.1: Verlauf einer ebenen Welle mit der Wellenlänge  $\lambda$  in einer Schicht der Dicke  $d$  auf einem Substrat. Dabei gilt: Einfallswinkel = Ausfallswinkel ( $\varphi_0$ ).  $\varphi_1$  ist der Brechungswinkel,  $n_0$ ,  $n_1$  und  $n_2$  sind die Brechungsindizes.

Auf die zu untersuchende Schicht trifft eine aus dem Medium (0) kommende ebene Welle und wird an der ersten Grenzfläche zu einem Teil unter  $\varphi_0$  reflektiert, zum anderen Teil unter  $\varphi_1$  transmittiert.

Die in die Schicht hinein gebrochene Komponente erfährt eine Mehrfachreflexion an den Grenzflächen (0-1) und (1-2), wobei bei jeder Reflexion ein kleiner Teil in das Substrat (2) hineingebrochen wird. Bei jedem Durchqueren erfährt die Welle eine durch die Schicht hervorgerufene Phasenänderung  $\delta$ , die unter anderem von der Schichtdicke abhängt. Für optisch isotrope, nicht absorbierende Oberflächenschichten gilt:

$$\delta = 2 \cdot \pi \frac{d}{\lambda} n_1 \cdot \cos \varphi_1 \quad (2.7)$$

Falls die Schicht absorbierend ist, werden alle in der Gleichung erscheinenden Parameter komplex [Fre69].

Diese Reflexions- und Brechungsvorgänge werden durch die in Abschnitt 2.1.1 erwähnten Fresnel'schen Formeln folgendermaßen beschrieben:

Der Lichtweg jedes Teilstrahles, das im Medium (0) ausläuft, ergibt sich durch das Produkt der Fresnelkoeffizienten und dem Term  $e^{-i\delta}$  für die auftretende Phasenverschiebung. Die ersten drei komplexen Amplituden der auslaufenden ebenen Partialwellen lauten  $r_0$ ,  $t_{01}t_{10}r_{12}e^{-2i\delta}$  und  $t_{01}t_{10}r_{10}r_{12}^2e^{-4i\delta}$ . Die Amplitude jeder weiteren Partialwelle besitzt den zusätzlichen Faktor  $r_{10}r_{12}e^{-2i\delta}$ .

Der erste Index der Fresnelkoeffizienten steht dabei für das Medium, aus dem der Strahl kommt, der zweite für das Medium an dessen Grenzfläche die Reflexion oder die Brechung stattfindet.

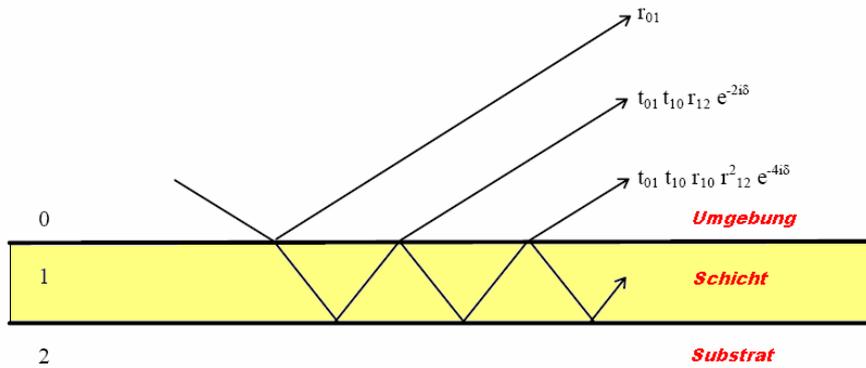


Abbildung 2.2: Auslaufende Partialwellen, beschrieben durch die entsprechenden Fresnelkoeffizienten: Der erste Index steht für das Medium, aus dem der Strahl kommt, der zweite bezeichnet das Medium, an dessen Oberfläche die Reflexion (r) bzw. Transmission (t) erfolgt.

Die resultierende reflektierte Welle R setzt sich aus diesen Partialwellen zusammen. Wendet man die unendliche geometrische Reihe an, so folgt

$$R = r_{01} + \frac{t_{01}t_{10}r_{12}e^{-2i\delta}}{1 - r_{01}r_{12}e^{-2i\delta}} = r_{01} + \frac{r_{01} + r_{12}e^{-2i\delta}}{1 - r_{10}r_{12}e^{-2i\delta}} \quad (2.8)$$

wobei sich die Beziehungen

$$r_{10} = -r_{01} \quad \text{und} \quad t_{01}t_{10} = 1 - r_{10}^2$$

aus dem Einsetzen in die Fresnel'schen Formeln ergeben.

Da Gleichung 2.8 allgemein gültig ist, kann der Vorgang sowohl für parallel als auch für senkrecht polarisiertes Licht beschrieben werden.

Es gilt:

$$R_s = \frac{r_{01s} + r_{12s}e^{-2i\delta}}{1 - r_{10s}r_{12s}e^{-2i\delta}} \quad (2.9)$$

$$R_p = \frac{r_{01p} + r_{12p}e^{-2i\delta}}{1 - r_{10p}r_{12p}e^{-2i\delta}} \quad (2.10)$$

Die gesamte Information über den Brechungs- und Reflexionsvorgang ist nun in diesen beiden Variablen enthalten.

## 2.2 Ellipsometrie

### 2.2.1 Grundlagen der Ellipsometrie

Durch die unterschiedliche Größe und Phasenverschiebung der parallel und senkrecht zur Einfallsebene liegenden Komponenten des elektrischen Feldvektors einer einfallenden polarisierten Schwingung ist das reflektierte Licht mit dem Amplitudenverhältnis  $\tan\Psi$  und der Phasendifferenz  $\Delta$  elliptisch polarisiert.

Man kann den Polarisationszustand des Lichtes auch vollständig durch den Ellipsenazimut  $\chi$  und der Elliptizität  $\gamma$  beschreiben (siehe Abbildung 2.3). Die Polarisationssebene wird bei der Reflexion gegenüber der Einfallsebene gedreht. Zwischen der großen Halbachse der Schwingungsellipse und der Einfallsebene ergibt sich der Winkel  $\chi$ . Außerdem wird das Verhältnis der Halbachsen  $\tan\gamma = a/b$  der Schwingungsellipse verändert, so dass die Ellipse entweder gestaucht oder gestreckt wird.

Von den vier Parametern  $\Psi, \Delta, \chi$  und  $\gamma$  reichen zwei aus, um den Polarisationszustand zu beschreiben.

In der ellipsometrischen Messtechnik verwendet man üblicherweise die Größen  $\Psi$  und  $\Delta$ , die so genannten *ellipsometrischen Winkel*. Die Hauptachsen des Bezugssystems werden parallel und senkrecht zur Einfallsebene gelegt [Fre69].

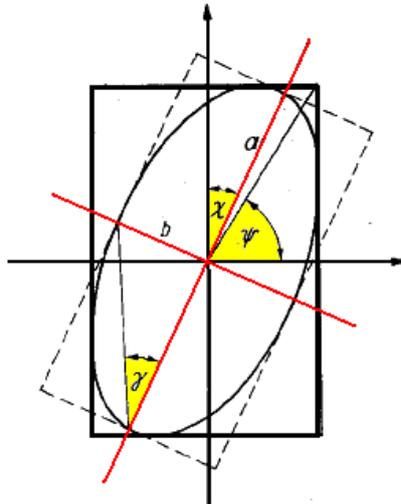


Abbildung 2.3: Charakteristische Größen des Polarisationszustandes von Licht [Fre69]

Diese Messgrößen stehen mit der Parallel- und Senkrechtkomponente der reflektierten Welle folgendermaßen im Zusammenhang (ellipsometrische Gleichung):

$$\tan\Psi \cdot e^{i\Delta} = \rho = \frac{R_p}{R_s} = \frac{r_{01p} + r_{12p}e^{-2i\delta}}{1 - r_{10p}r_{12p}e^{-2i\delta}} \cdot \frac{1 - r_{10s}r_{12s}e^{-2i\delta}}{r_{01s} + r_{12s}e^{-2i\delta}} \quad (2.11)$$

Somit besteht zwischen den optischen Eigenschaften des Systems Umgebung-Schicht-Substrat und den ellipsometrischen Winkeln  $\Psi$  und  $\Delta$  eine direkte Verbindung. Die komplexe Zahl  $\rho$  wird auch *ellipsometrisches Verhältnis* genannt.

Die funktionale Abhängigkeit der ellipsometrischen Winkel kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\tan \Psi \cdot e^{i\Delta} = \rho(\lambda, \varphi_0, d, n_0, n_1, n_2) \quad (2.12)$$

$d$  ist die zu vermessende Schichtdicke,  $n_0$ ,  $n_1$  und  $n_2$  die Brechungsindizes der Umgebung (Medium 0), der Schicht (Medium 1) und des Substrates (Medium 2),  $\varphi_0$  der Einfallswinkel und  $\lambda$  die Wellenlänge des Messlichtes im Vakuum.

Diese komplexwertige Gleichung kann nun in zwei reelle separiert werden.

Es gilt [Win55]:

$$\Psi = \tan^{-1} \left| \underbrace{\rho(\lambda, \varphi_0, d, n_0, n_1, n_2)}_{\substack{\text{abs. Betrag} \\ \text{von} \\ \rho}} \right| \quad (2.13)$$

$$\Delta = \arg \left( \underbrace{\rho(\lambda, \varphi_0, d, n_0, n_1, n_2)}_{\substack{\text{Argument} \\ \text{von} \\ \rho}} \right) \quad (2.14)$$

Bei einem Nullellipsometer erfolgt die Bestimmung von  $\Psi$  und  $\Delta$  über die Azimutwinkel für die Auslöschungsstellung eines Polarisators ( $\beta$ ) und eines Analysators ( $\alpha$ ). Damit dies erfolgen kann, muss das Messlicht nach der Reflexion an der Probenoberfläche linear polarisiert sein. Deshalb wird ein Lambda/4-Plättchen in den Strahlengang eingefügt (siehe 2.2.2). Zwischen  $\alpha$ ,  $\beta$ , der Stellung des Lambda/4-Plättchens  $\gamma$  und  $\rho$  besteht folgender Zusammenhang [Azza77]:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = -\tan \alpha \cdot \left( \frac{\tan \gamma - i \cdot \tan(\beta - \gamma)}{1 + i \cdot \tan \gamma \cdot \tan(\beta - \gamma)} \right) \quad (2.15)$$

Da der Polarisatorwinkel  $\beta$  mit dem Winkel des Lambda/4-Plättchens  $\gamma$  ausschließlich in einer Differenz auftritt, hängt die Elliptizität des Lichtes nur von der relativen Lage des Polarisators zum Lambda/4-Plättchen ab. Daher kann  $\gamma$  frei gewählt werden. Wird  $\gamma$  auf  $45^\circ$  festgelegt, so vereinfacht sich die obige Gleichung 2.15 zu

$$\rho = \tan \alpha \cdot e^{-2i(\beta - \pi/4)} \quad (2.16)$$

Diese Gleichung wird im Experiment durch zwei Winkelpaare erfüllt. Wird bei den Winkeln  $\alpha_1$  und  $\beta_1$  die Intensität des Messlichtes minimal, so gilt Gleichung 2.16 auch für die Winkel:

$$\beta_2 = \beta_1 + \pi/2 \quad (2.17) \quad \text{und} \quad \alpha_2 = 2\pi - \alpha_1 \quad (2.18)$$

Auch bei diesen Winkeln tritt im Experiment eine Intensitätsminimum ein. Es besteht folgender Zusammenhang mit den ellipsometrischen Winkeln:

$$\Psi = \frac{|\alpha_1| + |\alpha_2|}{2} \quad (2.19) \quad \text{und} \quad \Delta = 2\pi - (\beta_1 + \beta_2) \quad (2.20)$$

## 2.2.2 Nullellipsometrie

Das in dieser Arbeit verwendete Ellipsometer ist ein so genanntes Reflexions-Nullellipsometer. Der prinzipielle Aufbau ist in Abbildung 2.4 zu sehen.

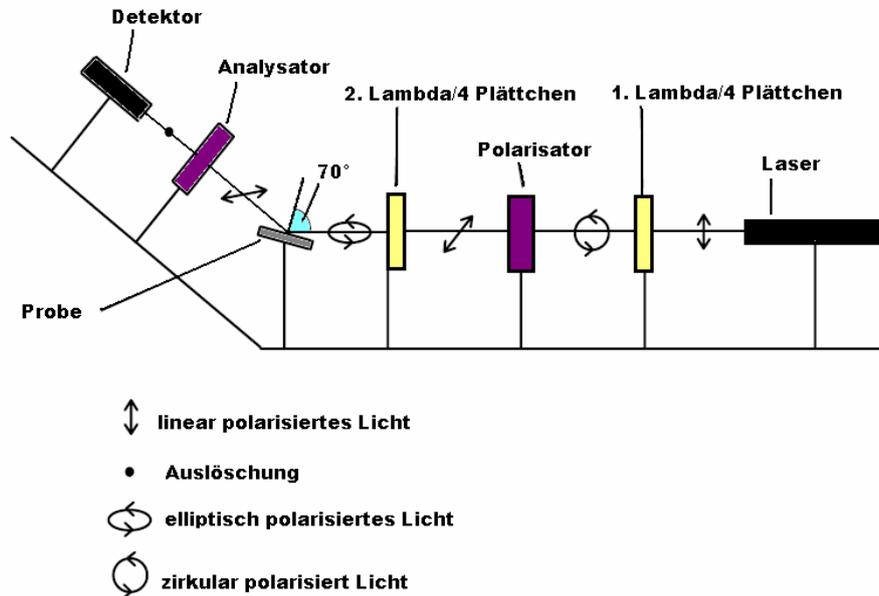


Abbildung 2.4: Komponenten und Aufbau eines Reflexions-Nullellipsometers

Die einzelnen optischen Komponenten sind zwei Lambda/4-Plättchen, ein Polarisator und ein Analysator. Ein Helium-Neon Laser ( $\lambda=632,8$  nm) sendet linear polarisiertes Licht aus. Damit das Licht nach dem Durchqueren des ersten Polarisationsfilters (Polarisator) bei jeder Winkelstellung dieselbe Amplitude hat, wird das erste Lambda/4-Plättchen um  $45^\circ$  gegen die Polarisations Ebene des Lasers gedreht, um eine zirkulare Polarisation zu erzeugen. Das zweite Lambda/4-Plättchen bewirkt eine elliptische Polarisation des Lichtes nach dem Durchgang durch den Polarisator. Seine Stellung ist durch den Winkel  $\gamma$  gegeben, um den die optische Achse des Plättchens gegen die Einfallsebene geneigt ist. Der Laserstrahl trifft anschließend im Winkel  $\varphi_0 = 70^\circ$  auf die Probe. Dabei wird die Elliptizität des einfallenden Strahles durch den Polarisator so eingestellt, dass das reflektierte Licht linear polarisiert ist. Durch einen zweiten Polarisationsfilter (Analysator) kann nun das linear polarisierte Licht ausgelöscht werden. Um dieses Intensitätsminimum sichtbar zu machen, ist ganz zum Schluss als Detektor eine Silizium-Photodiode angeschlossen. Im Idealfall tritt eine vollständige Lichtauslöschung ein. Deshalb wird diese Methode auch Nullellipsometrie genannt.

Bei einer Messung werden Polarisator und Analysator so lange abwechselnd verstellt, bis im Detektor ein Minimum zu erkennen ist. Eine Auslöschung tritt, wie in Abschnitt 2.2.1 beschrieben, für zwei verschiedene Winkelpaare ein. Die Messgrößen sind hierbei die Azimutwinkel des Polarisators  $\beta_1$  und  $\beta_2$ , sowie die des Analysators  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$ .

Für die Lage dieser Winkel gilt:

$$\begin{aligned} 45^\circ < \beta_1 < 225^\circ & & \beta_2 \approx \beta_1 + 90^\circ \\ 0^\circ < \alpha_1 < 90^\circ & & \alpha_2 \approx -\alpha_1 \end{aligned}$$

## 2.3 Lösung der ellipsometrischen Gleichung

Um aus der ellipsometrischen Gleichung die erwünschten Informationen wie Schichtdicke  $d$  und den Brechungsindex  $n_1$  der zu untersuchenden Schicht zu erhalten, wurde zu Beginn ein Computerprogramm verwendet, das die Lösungen iterativ berechnet hatte [Men96]. Es bezog seine Anfangswerte lediglich aus einem  $\Psi - \Delta$  Diagramm und war zudem recht kompliziert in der Handhabung [Des97]. Um diese Probleme zu umgehen, wurde 1997 in Rahmen einer Diplomarbeit das Programm „XEllip“ in C++ geschrieben, das einen analytischen Ansatz wählt und die Nachteile einer iterativen Lösung zu umgehen versucht. „XEllip“ sollte nun in LabVIEW umgeschrieben werden, um eine digitale Datenauslese zu ermöglichen. Das neue Programm „Elli“ basiert auf der gleichen analytischen Methode  $n_1$  und  $d$  zu bestimmen. Entwickelt wurde dieser Lösungsweg bereits 1994 vom kanadischen Physiker Jean-Piere Drolet an der Universität Québec [Dro94]. Er führte die ellipsometrische Gleichung auf ein Polynom 5.Grades zurück und reduzierte das Problem auf die Berechnung der Nullstellen dieses Polynoms.

### 2.3.1 Warum keine iterative Lösung?

Der Nachteil der in der Vergangenheit verwendeten numerischen Methoden besteht darin, dass die jeweilige Lösung nur sehr langsam konvergiert, manchmal sogar gar nicht erreicht wird. Sie ist stark abhängig von den gewählten Anfangsparametern der gesuchten Werte. Des Weiteren existiert in der Regel mehr als eine mögliche mathematische oder physikalische Lösung für die Messung eines Systems, d.h. verschiedene Systeme können zu gleichen Werten für  $\Psi$  und  $\Delta$  führen. Man müsste alle sinnvollen physikalischen Lösungen kennen, um die für das gegebene System zutreffende auszuwählen. Dies führt dazu, dass man zum Beispiel eine zweite Messung unter einem anderen Einfallswinkel durchführen muss, um die richtige Lösung „herauszufiltern“. Meistens kennt man im Voraus nicht einmal die Anzahl der möglichen Ergebnisse, da diese für verschiedene Systeme unterschiedlich sein kann. Daher hat man keine Sicherheit, dass alle Lösungen überhaupt gefunden werden [Dro94].

### 2.3.2 Lösungsmethode nach Drolet

Die von Drolet vorgeschlagene analytische Lösung basiert darauf, dass der Lösungsweg in zwei Schritte unterteilt wird. Als erstes ermittelt man den Brechungsindex  $n_1$  der zu untersuchenden Schicht, um daraus anschließend die Schichtdicke  $d$  zu berechnen. Die einzige Voraussetzung ist, dass die dünne Schicht einen reellen relativen Brechungsindex haben muss, d.h. transparent ist. Es gilt:

$$n = \frac{n_1}{n_0} = \text{reell}$$

Für absorbierende Schichten wurde 1962 von Dagman [Dag62] eine analytische Methode entwickelt, um die Schichtdicke und den Brechungsindex zu bestimmen. Leider benötigt man hier vier verschiedene Messungen mit zwei verschiedenen Einfallswinkeln und Umgebungsmedien.

## 2.4 Herleitung des Polynoms 5.Grades

Eine Schicht der Dicke  $d$  und dem Brechungsindex  $n_1$  zwischen zwei Medien mit den Brechungsindizes  $n_0$  (Umgebung) und  $n_2$  (Substrat) wird mit dem Ellipsometer vermessen. Man erhält das ellipsometrische Verhältnis  $\rho$ , das gegeben ist durch:

$$\rho = \frac{(Xr_{12p} + r_{01p}) \cdot (Xr_{12s}r_{01s+1})}{(Xr_{12p}r_{01p} + 1) \cdot (Xr_{12s} + r_{01s})} \quad (2.21)$$

Die hier eingeführte zusätzliche komplexe Variable  $X$  ist gegeben durch:

$$X = \exp\left(\frac{-4\pi i \cos(\varphi_1) dn_1}{\lambda}\right) \quad (2.22)$$

mit

$$\cos \varphi_j = \frac{[n_j^2 - n_0^2 \cdot (\sin \varphi_0)^2]^{0.5}}{n_j} \quad (2.23)$$

$\lambda$  ist die Wellenlänge des Messlichtes,  $\varphi$  der Einfallswinkel.

Für die Fresnelkoeffizienten  $r_{ijs}$  bzw.  $r_{ijp}$ , die die Reflexion an der Schichtgrenze zwischen den Medien  $ij$  beschreiben gilt:

$$r_{01p} = \frac{-n_0 \cos \varphi_1 + n_1 \cos \varphi_0}{n_0 \cos \varphi_1 + n_1 \cos \varphi_0} \quad (2.24)$$

$$r_{12p} = \frac{-n_1 \cos \varphi_2 + n_2 \cos \varphi_1}{n_1 \cos \varphi_2 + n_2 \cos \varphi_1} \quad (2.25)$$

$$r_{01s} = \frac{-n_1 \cos \varphi_1 + n_0 \cos \varphi_0}{n_1 \cos \varphi_1 + n_0 \cos \varphi_0} \quad (2.26)$$

$$r_{12s} = \frac{-n_2 \cos \varphi_2 + n_1 \cos \varphi_1}{n_2 \cos \varphi_2 + n_1 \cos \varphi_1} \quad (2.27)$$

Das Problem besteht nun darin, die gesuchten Parameter  $d$  und  $n_1$  aus den gegebenen Werten zu berechnen. Für einen reellen Brechungsindex können die unbekanntenen Größen  $d$  und  $n_1$  anhand der Gleichung 2.21 allein durch die Messung von  $\rho$  ermittelt werden. Die übliche Vorgehensweise war bisher die numerische Berechnung eines nichtlinearen Problems. Die nun folgenden Gleichungen sollen zeigen, dass man für den Fall  $n_1 = \text{reell}$  eine Lösung erhält, indem die Nullstellen eines Polynoms fünften Grades bestimmt werden.

Als erstes wird die Gleichung 2.21 in ein Polynom umgeformt:

$$aX^2 + bX + c = 0 \quad (2.28)$$

mit der Koeffizienten:

$$a = (-r_{01s} + r_{01p} \cdot \rho) \cdot r_{12p} r_{12s} \quad (2.29)$$

$$b = -r_{12p} - r_{01p} r_{12s} r_{01s} + \rho (r_{12s} + r_{12p} r_{01p} r_{01s}) \quad (2.30)$$

$$c = -r_{01p} + r_{01s} \rho \quad (2.31)$$

Da der relative Brechungsindex reell ist, gilt folgende Beziehung:

$$X^+ = \frac{1}{X} \quad (2.32)$$

Die komplex Konjugierte der Gleichung lautet:

$$c^+ X^2 + bX + a^+ = 0 \quad (2.33)$$

Kombiniert man die Gleichungen miteinander, erhält man den Ausdruck

$$X = \frac{aa^+ - cc^+}{-ab^+ + bc^+} \quad (2.34)$$

in dem  $X^2$  eliminiert wurde und auch keine Wurzeln vorhanden sind. Allerdings ist zu beachten, dass Gleichung 2.34 nur eine Lösung besitzt und nicht zwei, wie man anhand der p/q- Formel üblicherweise erwarten würde.

Wendet man Gleichung 2.32 erneut an, so bekommt man einen Ausdruck, der zwar von dem relativen Brechungsindex  $n$ , aber nicht von der Schichtdicke  $d$  abhängt.

$$(-ab^+ + bc^+)^+ \cdot (-ab^+ + bc^+) - (aa^+ - cc^+)^2 = 0 \quad (2.35 a)$$

Beziehungsweise ausmultipliziert:

$$-|a|^4 + |a|^2 |b|^2 - |c|^4 + 2|a|^2 |c|^2 - ac(b^+)^2 - b^2 a^+ c^+ = 0 \quad (2.35 b)$$

Führt man die Substitutionen

$$t = \frac{n_1 \cos \varphi_1}{n_0 \cos \varphi_0} \quad (2.36)$$

$$x = -\tan \varphi_0 \cdot \tan \varphi_2 \quad (2.37)$$

$$y = -\frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_0 \cos \varphi_0} \quad (2.38)$$

$$z = -\frac{\rho - 1}{\rho + 1} \quad (2.39)$$

ein, so hat man zunächst eine reelle Unbekannte  $t$  und sechs unabhängige Parameter (Real- und Imaginärteile von  $x$ ,  $y$  und  $z$ ). Dies scheint eine Verschlechterung der Situation zu sein, da man davor neben des zu bestimmenden reellen Parameters  $n$  nur

fünf unabhängige Parameter ( $\varphi_0$ , sowie je zwei für  $\rho$  und den komplexen Brechungsindex  $n_2$ ) hatte.

Allerdings sind  $x$  und  $y$  durch die folgende Gleichung miteinander verknüpft:

$$xy = x^+ y^+ = \tan^2 \varphi \quad (2.40)$$

Durch die Verbindung von  $x$  und  $y$  sind insgesamt auch jetzt fünf unabhängige Parameter vorhanden.

Man kann nun die Fresnelkoeffizienten,  $\rho$  sowie die Koeffizienten  $a$ ,  $b$  und  $c$  folgendermaßen schreiben:

$$r_{01p} = \frac{(t-1)(t-xy)}{(t+1)(t+xy)} \quad (2.41)$$

$$r_{12p} = -\frac{(t+x)(t+y)}{(t-x)(t-y)} \quad (2.42)$$

$$r_{01s} = -\frac{t-1}{t+1} \quad (2.42)$$

$$r_{12s} = \frac{t+y}{t-y} \quad (2.43)$$

$$\rho = -\frac{z-1}{z+1} \quad (2.44)$$

$$a = -(t+1)(t-1)(t+x)(t+y)^2(t+xyz) \cdot C \quad (2.45)$$

$$b = 2(t+y)(t-y) \left[ (t^4 + (2xy + x^2yz + 2xz + 1)t^2 + x^2yz) \right] \cdot C \quad (2.46)$$

$$c = -(t+1)(t-1)(t-x)(t-y)^2(t-xyz) \cdot C \quad (2.47)$$

mit

$$C = \frac{\rho+1}{(t+1)^2(t-x)(t-y)^2(t+xy)} \quad (2.48)$$

Der gemeinsame Faktor  $C$  für  $a$ ,  $b$  und  $c$  kann aus der Gleichung 2.35b herausgekürzt werden. Wird die Gleichung 2.35b ausmultipliziert, deutet zunächst alles auf ein Polynom 24. Grades hin. Ein solch hoher Grad macht eine nützliche analytische Lösung schwer. Glücklicherweise kann man wegen der Symmetrie von  $a$  und  $c$  viel vereinfachen.

Werden die Gleichungen 2.45 bis 2.47 in Gleichung 2.35b eingesetzt, kürzt sich der gemeinsame Faktor  $(t-1)^2(t+1)^2$  heraus.

Das so erhaltene Polynom 20. Grades lautet:

$$\left(-a_1 b_1^+ + b_1 c_1^+\right)^+ \left(-a_1 b_1^+ + b_1 c_1^+\right) - \left(a_1 a_1^+ - c_1 c_1^+\right)^2 (t^2 - 1)^2 = 0 \quad (2.49)$$

mit

$$a_1 = -(t+x)(t+y)^2(t+xy) \quad (2.50)$$

$$b_1 = 2(t+y)(t-y) \left[ t^4 + (2xy + x^2 yz + 2xz + 1)t^2 + x^2 yz \right] \quad (2.51)$$

$$c_1 = -(t-x)(t-y)^2(t-xyz) \quad (2.52)$$

Um den Grad des Polynoms weiter zu reduzieren, kann man die Gleichungen 2.50-2.52 ausmultiplizieren. Man erhält

$$a_1 = -t^4 - \alpha_3 t^3 - \alpha_2 t^2 - \alpha_1 t - \alpha_0 \quad (2.53)$$

$$b_1 = 2(t^6 + \alpha_4 t^4 + \alpha_3 t^2 - \alpha_0) \quad (2.54)$$

$$c_1 = -t^4 + \alpha_3 t^3 - \alpha_2 t^2 + \alpha_1 t - \alpha_0 \quad (2.55)$$

mit den Koeffizienten:

$$\alpha_0 = x^2 y^3 z$$

$$\alpha_1 = xy^2 + xy^3 z + 2x^2 y^2 z$$

$$\alpha_2 = y^2 + 2xy + 2xy^2 z + x^2 yz$$

$$\alpha_3 = x + 2y + xyz$$

$$\alpha_4 = -y^2 + 2xy + 2xz + x_2 yz + 1$$

$$\alpha_5 = -2xy^3 - y^2 - x^2 y^3 z - 2xy^2 z + x^2 yz \quad (2.56)$$

Nun werden die zwei Summanden der Gleichung 2.49 separat behandelt.

Betrachtet man den zweiten Teil, so fällt auf, dass in dem Ausdruck  $a_1 a_1^+ - c_1 c_1^+$  die Symmetrie von  $a_1$  und  $c_1$  die geraden Potenzen von  $t$  verschwinden lässt. Die Terme mit  $t^8, t^6, t^4, t^2$  und  $t^0$  (Konstante) fallen weg. Es gilt:

$$a_1 a_1^+ - c_1 c_1^+ = 2(g_6 t^6 + g_4 t^4 + g_2 t^2 + g_0) \cdot t \quad (2.57)$$

Die Koeffizienten  $g$  sind alle reell.

$$\begin{aligned}
 g_0 &= \alpha_0 \alpha_1^+ + \alpha_1 \alpha_0^+ \\
 g_2 &= \alpha_0 \alpha_3^+ + \alpha_1 \alpha_2^+ + \alpha_2 \alpha_1^+ + \alpha_3 \alpha_0^+ \\
 g_4 &= \alpha_1 + \alpha_2 \alpha_3^+ + \alpha_3 \alpha_2^+ + \alpha_1^+ \\
 g_6 &= \alpha_3 + \alpha_3^+
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

Quadriert man die Gleichung 2.57 auf beiden Seiten, bekommt man ein Polynom, indem alle Potenzen von  $t$  gerade sind. Wird nun dieser Ausdruck mit  $(t^2 - 1)^2$  multipliziert, erhält man ein Polynom 18. Grades mit reellen Koeffizienten.

Jetzt wird der erste Summand näher untersucht. Für den Ausdruck  $c_1^+ b_1 - a_1 b_1^+$  kürzt sich auf dieselbe Weise die höchste und die niedrigste Potenz heraus. Die verbliebenen Koeffizienten sind abwechselnd reell und imaginär. Besonders wichtig ist, dass der Koeffizient achten Grades und die Konstante dieselben sind, wie in Gleichung 2.57:

$$c_1^+ b_1 - a_1 b_1^+ = (g_6 t^8 + i f_7 t^7 + f_6 t^6 + i f_5 t^5 + f_4 t^4 + i f_3 t^3 + f_2 t^2 + i f_1 t - g_0) \cdot t \tag{2.59}$$

Die Koeffizienten  $f$  sind ebenfalls reell:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= (-\alpha_0 \alpha_5^+ - \alpha_0 \alpha_2^+ + \alpha_5 \alpha_0^+ + \alpha_2 \alpha_0^+) \cdot i \\
 f_2 &= \alpha_1 \alpha_5^+ - \alpha_0 \alpha_3^+ + \alpha_5 \alpha_1^+ - \alpha_3 \alpha_0^+ \\
 f_3 &= (-\alpha_0 - \alpha_2 \alpha_5^+ - \alpha_0 \alpha_4^+ + \alpha_5 \alpha_2^+ + \alpha_4 \alpha_0^+ + \alpha_0^+) \cdot i \\
 f_4 &= \alpha_3 \alpha_5^+ + \alpha_1 \alpha_4^+ + \alpha_5 \alpha_3^+ + \alpha_4 \alpha_1^+ \\
 f_5 &= (\alpha_5 - \alpha_0 - \alpha_5^+ - \alpha_2 \alpha_4^+ + \alpha_4 \alpha_2^+ + \alpha_0^+) \cdot i \\
 f_6 &= \alpha_1 + \alpha_3 \alpha_4^+ + \alpha_4 \alpha_3^+ + \alpha_1^+ \\
 f_7 &= (\alpha_4 - \alpha_2 - \alpha_4^+ + \alpha_2^+) \cdot i
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

Multipliziert man Gleichung 2.59 mit ihrer komplex Konjugierten, erhält man erneut ein Polynom 18. Grades mit reellen Koeffizienten, da sich wegen den alternierenden reellen und imaginären Koeffizienten die ungeraden Potenzen von  $t$  herauskürzen.

Da die so berechneten Polynome beide den Term  $4 \cdot t^2$  enthalten, kann dieser eliminiert werden, und der Grad des Polynoms wird um zwei auf nun 16 erniedrigt.

Um die Gleichung weiter zu vereinfachen, führt man die Variable  $s = t^2$  ein. Dies ist möglich, da nur noch gerade Potenzen von  $t$  vorhanden sind. Somit hat man ein Polynom 8. Grades in  $s$ .

Es gilt:

$$s = \frac{n_1^2 (\cos \varphi_1)^2}{n_0^2 (\cos \varphi_0)^2} \quad (2.61 \text{ a})$$

oder mit  $\tan^2 \varphi = xy$  :

$$s = (xy + 1)\varepsilon - xy \quad \text{beziehungsweise} \quad \varepsilon = s(\cos \varphi_0)^2 + (\sin \varphi_0)^2 \quad (2.61 \text{ b})$$

Dabei ist  $\varepsilon = (n_1/n_0)^2$  die relative dielektrische Konstante.

Da die beiden Summanden für den höchsten und niedrigsten Exponenten von s denselben Koeffizienten besitzen, fallen diese beim Zusammenfügen der beiden Teile weg. Kürzt man nun auch die triviale Nullstelle, so erhält man folgendes Polynom sechsten Grades:

$$j_6 s^6 + j_5 s^5 + j_4 s^4 + j_3 s^3 + j_2 s^2 + j_1 s + j_0 = 0 \quad (2.62)$$

Alle j sind reell und hängen folgendermaßen von den g-s und f-s ab.

$$j_0 = f_1^2 + 2g_0^2 - 2f_2g_0 - 2g_2g_0$$

$$j_1 = f_2^2 + 2f_3f_1 - g_2^2 - g_0^2 - 2f_4g_0 - 2g_4g_0 + 4f_2g_0$$

$$j_2 = f_3^2 + 2f_4f_2 + 2f_5f_1 + 2g_2^2 - 2g_4g_2 - 2f_6g_0 - g_6g_0 + 4g_4g_0 - 2g_2g_0$$

$$j_3 = f_4^2 + 2f_5f_3 + 2f_6f_2 + 2f_7f_1 - g_4^2 - g_2^2 - 2g_6g_2 + 4g_4g_2 + 2g_6g_0 - 2g_4g_0$$

$$j_4 = f_5^2 + 2f_6f_4 + 2f_7f_3 + 2f_2g_6 + 2g_4^2 - 2g_6g_4 + 4g_6g_2 - 2g_4g_2 - 2g_6g_0$$

$$j_5 = f_6^2 + 2f_7f_5 - g_6^2 + 2f_4g_6 - g_4^2 + 4g_6g_4 - 2g_6g_2$$

$$j_6 = f_7^2 + 2g_6^2 + 2f_6g_6 - 2g_6g_4 \quad (2.63)$$

Die triviale Nullstelle kann aus Gleichung 2.62 ebenfalls herausdividiert werden. Dies ist möglich, weil das Polynom keinen konstanten Term hat. Um dies zu zeigen wird Gleichung 2.62 durch die Variable  $\varepsilon$  anstatt von s ausgedrückt. Man setzt  $s = \varepsilon - xy$  ein und erhält:

$$j_6 x^6 y^6 - j_5 x^5 y^5 + j_4 x^4 y^4 - j_3 x^3 y^3 + j_2 x^2 y^2 - j_1 xy + j_0 = 0 \quad (2.64)$$

Dass dieser Term gleich Null ist, wird analytisch gezeigt. Dafür müssen die j-s direkt durch die Variablen x, y und z ausgedrückt werden. Die Gleichungen 2.56, 2.58 und 2.60 werden hierfür in Gleichung 2.64 eingesetzt. Dies führt zu einem Ausdruck, der insgesamt 2047 Terme beinhaltet, die sich aber alle wegheben.

So bekommt man ein Polynom fünften Grades für die relative dielektrische Konstante  $\varepsilon$ :

$$k_5\varepsilon^5 + k_4\varepsilon^4 + k_3\varepsilon^3 + k_2\varepsilon^2 + k_1\varepsilon + k_0 = 0 \quad (2.65)$$

Die Koeffizienten lauten:

$$\begin{aligned} k_0 &= j_1 - 6j_6x^5y^5 + j_5x^4y^4 - 4j_4x^3y^3 + 3j_3x^2y^2 - 2j_2xy \\ k_1 &= (j_2 + 15j_6x^4y^4 - 10j_5x^3y^3 + 6j_4x^2y^2 - 3j_3xy)(xy + 1) \\ k_2 &= (j_3 - 20j_6x^5y^5 + 10j_5x^2y^2 - 4j_4xy)(xy + 1)^2 \\ k_3 &= (j_4 + 15j_6x^2y^2 - 5j_5xy)(xy + 1)^2 \\ k_4 &= (j_5 - 6j_6xy)(xy - 1)^2 \\ k_5 &= j_6(xy + 1)^2 \end{aligned} \quad (2.66)$$

Da das Polynom nur reelle Koeffizienten hat, kann es entweder eine, drei oder fünf reelle Nullstellen besitzen. Um die Bedingung  $XX^+ = 1$  zu erfüllen, muss für die Lösungen  $\varepsilon \geq \sin^2 \varphi_0$  gelten.

Für  $\varepsilon < \sin^2 \varphi_0$  tritt an der Schicht Totalreflexion auf. Dieser Fall wird hier nicht weiter betrachtet, da es zu umfangreich ist.

Löst man für jede gültige Nullstelle nach  $d$  auf, bekommt man für die Schichtdicke:

$$d = \left( \frac{1}{4} \cdot \frac{\lambda}{\pi \cdot \cos \varphi_1 \cdot n_1} \right) i \cdot \ln X + \frac{1}{2} \cdot \frac{m\lambda}{\cos \varphi_2 \cdot n_1} \quad (2.67)$$

Die Schichtdicke  $d$  ist nur für ein ganzzahliges Vielfaches  $m$  von  $\lambda/2 \cdot \cos \varphi_2 \cdot n_1$  bekannt. Dieser Wert ändert den Betrag der in der Rechnung berücksichtigten Weglänge des Messlichtes in der Schicht. Die Zahl  $m$  steht für jede ganze Zahl, die das Ergebnis positiv oder physikalisch sinnvoll macht.

Anstatt für die Berechnung von  $X$  die Gleichungen 2.29 bis 2.31 zu verwenden, kann man in die rechte Seite von 2.34 die Substitutionen einsetzen. Auf diese Weise wird  $X$  durch die bereits bekannten Koeffizienten ausgedrückt:

$$\frac{1}{X} = \frac{g_6t^8 + f_6t^6 + f_4t^4 + f_2t^2 - g_0 + i(f_7t^6 + f_5t^4 + f_3t^2 + f_1) \cdot t}{(t^2 - 1)(g_6t^6 + g_4t^4 + g_2t^2 + g_0)} \quad (2.68)$$

Mit  $1/X = X^+$  gilt:

$$X = \frac{g_6t^8 + f_6t^6 + f_4t^4 + f_2t^2 - g_0 - i(f_7t^6 + f_5t^4 + f_3t^2 + f_1) \cdot t}{(t^2 - 1)(g_6t^6 + g_4t^4 + g_2t^2 + g_0)} \quad (2.69)$$

Die Größe  $i \cdot \ln X$  in 2.69 ist die negative Phase von  $X$ . Zur Berechnung dieser Phase kann man die Gleichung in Verbindung mit der Beziehung  $\arctan[(\text{Im}X)/(\text{Re}X)]$  verwenden. Da in 2.69 die Imaginärteile bereits getrennt vorliegen, lassen sie sich folglich gut verwenden. Bei der Wahl des Quadranten für die Phase ist genau auf die Vorzeichen des Imaginär- bzw. des Realteils von  $X$  zu achten.

Bei der aufgeführten Berechnung könnte man den Faktor  $(1 + xy)^2$  von den  $k_n$  trennen und dann das Polynom für  $(1 + xy) \cdot \varepsilon$  lösen. Allerdings ist es numerisch ausgewogener die  $k$ -s über 2.66 auszurechnen.

Die Berechnungen der einzelnen Koeffizienten nach den Gleichungen 2.36-2.39, 2.56, 2.58, 2.60, 2.62 und 2.66 ergeben sich Schritt für Schritt. Zur Ermittlung der Nullstellen stehen mehrere gut dokumentierte Algorithmen zur Verfügung, die in fast allen gängigen Programmiersprachen realisierbar sind.

Betrachtet man eine kurze Zusammenfassung der Herleitung, sieht man, dass sie eigentlich nur auf der expliziten Aufsummierung und Ausmultiplikation der Polynome beruht.

Nur wenn man die Bedingungen 2.35b für  $a$ ,  $b$  und  $c$  aufstellt, erhält man für die quadratische Gleichung  $X$  eine Lösung. Nach dem Kürzen des gemeinsamen Terms  $|C|^4$  bekommt man ein Polynom in  $t$ . Um 2.28 zu erhalten, muss man  $(t + 1)^2(t - 1)^2$  aus der Gleichung, die man nach dem Einsetzen von  $a$ ,  $b$  und  $c$  in 2.35b bekommen hat, herausdividieren. Durch das reine Ausmultiplizieren und Aufaddieren der verschiedenen Koeffizienten kommt man letztendlich auf ein Polynom fünften Grades für die relative dielektrische Konstante der zu vermessenden Schicht.

Da die analytische Berechnung vom Brechungsindex  $n_1$  und der Schichtdicke  $d$  keinen nennenswerten Fehler beinhaltet, beschränkt sich die Fehleranalyse auf den Messaufbau und den Messvorgang [Dro94].

# 3 Messablauf und Bedienung von Elli

## 3.1 Messablauf

Zuerst muss die Probe nach der Anleitung in 6.2 gereinigt werden, um Messfehler durch Verschmutzungen wie Staub, Fingerabdrücke etc. zu vermeiden. Anschließend wird sie auf die Probenplatte des Ellipsometers gelegt. Diese Platte kann man mit einer Mikrometerschraube in der Probenebene verschieben, wodurch mehrere Stellen der zu vermessenden Schicht abgerastert werden können.

Unter der Halterung befinden sich drei kleine Stellschrauben, mit denen eventuelle Abweichungen zum festen Einfallswinkel, hervorgerufen zum Beispiel durch unterschiedliche Probendicken, nachjustiert werden können. Zur Intensitätsstabilisierung muss der Laser mindestens 15 Minuten vor einer Messung eingeschaltet werden. Um die an der Photodiode erzeugte Spannung auf dem Bildschirm des Laborcomputers anzuzeigen, wird der digital-analog Wandler NI USB-6008 der Firma National Instruments über einen USB-Port angeschlossen. Beim dazwischen geschalteten Verstärker wird der Anzeige-Drehknopf auf „minus“ gestellt.

Der Azimutwinkel des Polarisators wird auf  $45^\circ$  und der des Analysators auf  $0^\circ$  gestellt und so gegeneinander gedreht, dass die Spannung minimal wird. Dabei sollen die Winkel in der Nähe eines Minimums stets abwechselnd nachreguliert werden, damit man möglichst exakte Werte bekommt. So erhält man das erste Winkelpaar  $(\alpha_1, \beta_1)$ . Danach dreht man die Azimutwinkel in die Nähe der zu erwartenden Werte für die Winkel  $(\alpha_2, \beta_2)$  und sucht erneut nach dem Spannungsminimum. Für die Winkel gelten folgende Vorgaben (siehe 2.2.2):

$$45^\circ < \beta_1 < 225^\circ$$

$$0^\circ < \alpha_1 < 90^\circ$$

$$\beta_2 \approx \beta_1 + 90^\circ$$

$$\alpha_2 \approx -\alpha_1$$

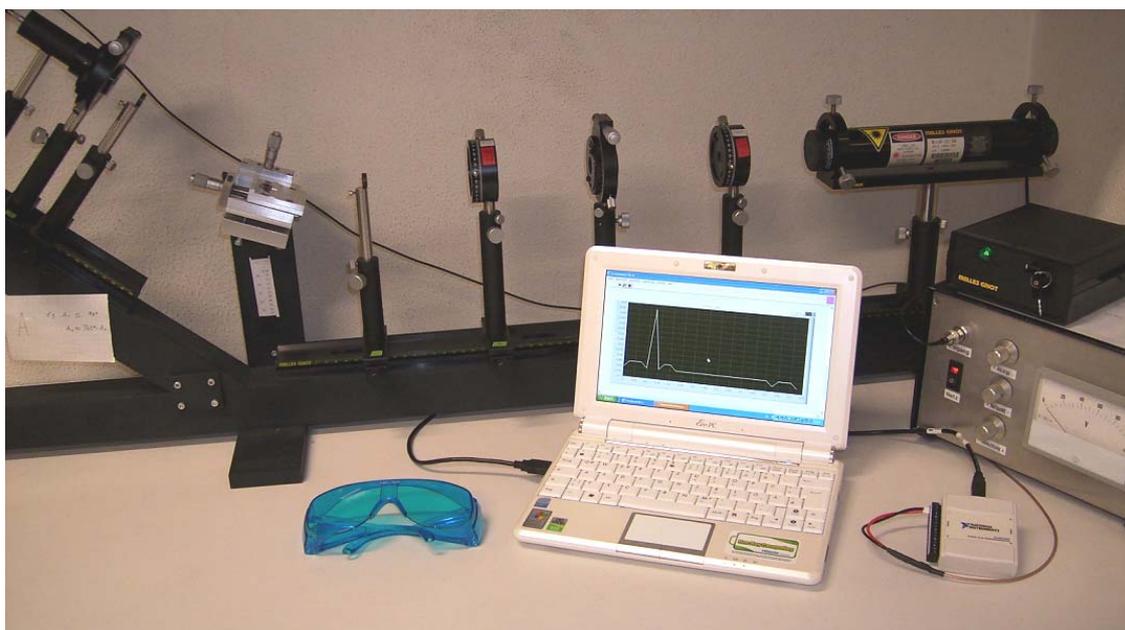


Abbildung 3.1: Messaufbau Nullellipsometer

## 3.2 Bedienung von Elli

### 3.2.1 Installation der „LabVIEW-Runtime-Engine“

Um die mit LabVIEW erstellten Programme auf einem anderen Rechner öffnen zu können, muss zunächst die „LabVIEW-Runtime-Engine“ für die LabVIEW Version 8.5 auf dem jeweiligen Computer installiert werden. Dafür werden folgende Systemvoraussetzungen empfohlen [Lab07]:

1. Ein Arbeitsspeicher von mindestens 256 MB
2. Eine Bildschirmauflösung von 1024×768 Pixel
3. Ein Pentium III, ein Celeron 600 MHz oder ein vergleichbarer Prozessor
4. Mindestens 180 MB Speicherplatz für die Erzeugung der Installationsprogramme
5. Unter Windows 2000 mindestens Service Pack 3

Zur Installation der LabVIEW-Runtime-Engine klickt man einfach auf „setup Installer“ (Abbildung 3.2) und folgt anschließend den Anweisungen.



Abbildung 3.2: Symbol zu Installation der „LabVIEW-Runtime-Engine“

### 3.2.2 Bedienung des Programms „Elli+Save Data“

Das Programm „Elli+Save Data“ besteht aus zwei Teilen. „Elli“ dient zur Identifizierung des Intensitätsminimums und zu der Berechnung des Brechungsindex  $n_1$  sowie der Schichtdicke  $d$ . Mit „Save Data“ kann man die gewonnenen Werte speichern.



Abbildung 3.3: Symbol des Programms „Elli+Save Data“

Klickt man „Elli+Save Data“ an, dann erscheinen beide Frontpanel (Abbildung 3.4 und 3.5).

#### 3.2.2.1 Datenauslese und Auswertung

Für die Messung und anschließende Auswertung muss das Frontpanel von „Save Data“ nicht beachtet werden. Es wird ausschließlich „Elli“ (Abbildung 3.4) verwendet.

Um die Intensität des Messlichtes hinter dem Analysator messen zu können, stellt man „Elli“ auf „Dauerbetrieb“. Dazu wird der Button  oben links in der Funktionsleiste des Programms angeklickt. In Abbildung 3.4 ist der Button durch einen roten Kreis gekennzeichnet.

Nun wird das Programm wiederholt ausgeführt und die Spannungskurve der Photodiode kann auf dem „Waveform Graph“ unten im Bild beobachtet werden. Durch wiederholtes Drehen der Winkelskalen von Polarisator und Analysator stellt man jetzt

das erste Winkelpaar ein, für das ein Intensitätsminimum eintritt. Ist das der Fall, zeigt das Spannungsdiagramm ein Minimum. Das erste Winkelpaar wird oben in die dafür vorhergesehenen Felder „Polarisatorwinkel 1“ und „Analysatorwinkel 1“ eingetragen. Anschließend wird der Vorgang für das zweite Winkelpaar wiederholt. Die Werte werden in die entsprechenden Felder „Polarisatorwinkel 2“ und „Analysatorwinkel 2“ eingetragen. Dabei kann das Programm gestoppt werden, indem man auf den Stopp-Knopf  rechts neben dem Button für den Dauerbetrieb drückt. Zum Schluss muss man nur noch den Brechungsindex  $N_2$  für das Substrat in „N Substrat“ eingeben und auf den  Button links neben  drücken. Das Programm wird jetzt nur einmal ausgeführt, um die „Dicke d“ und den „Brechungsindex N1“ der zu vermessenden Schicht zu berechnen.

Man erhält bis zu fünf Ergebnisse, aus denen man die physikalisch sinnvolle Lösung herausuchen muss. Im Beispiel in Abbildung 3.4 bekommt man wegen der in 2.4 beschriebenen Auswahlkriterien nur ein Ergebnis, das durch den violetten Kreis in gekennzeichnet ist. Die Konstante  $m$ , die man ebenfalls einstellen kann, bleibt zunächst bei jeder Messung auf Null. Misst man verhältnismäßig dicke Schichten von über 120 nm, so kann es sein, dass man für  $m$  eine ganze Zahl eingeben muss, um auf ein physikalisch sinnvolles Ergebnis zu kommen (siehe Abschnitt 2.4/Gleichung 2.67). Es ist zu beachten, dass die Schichtdicke  $d$  in Ångström angegeben wird.

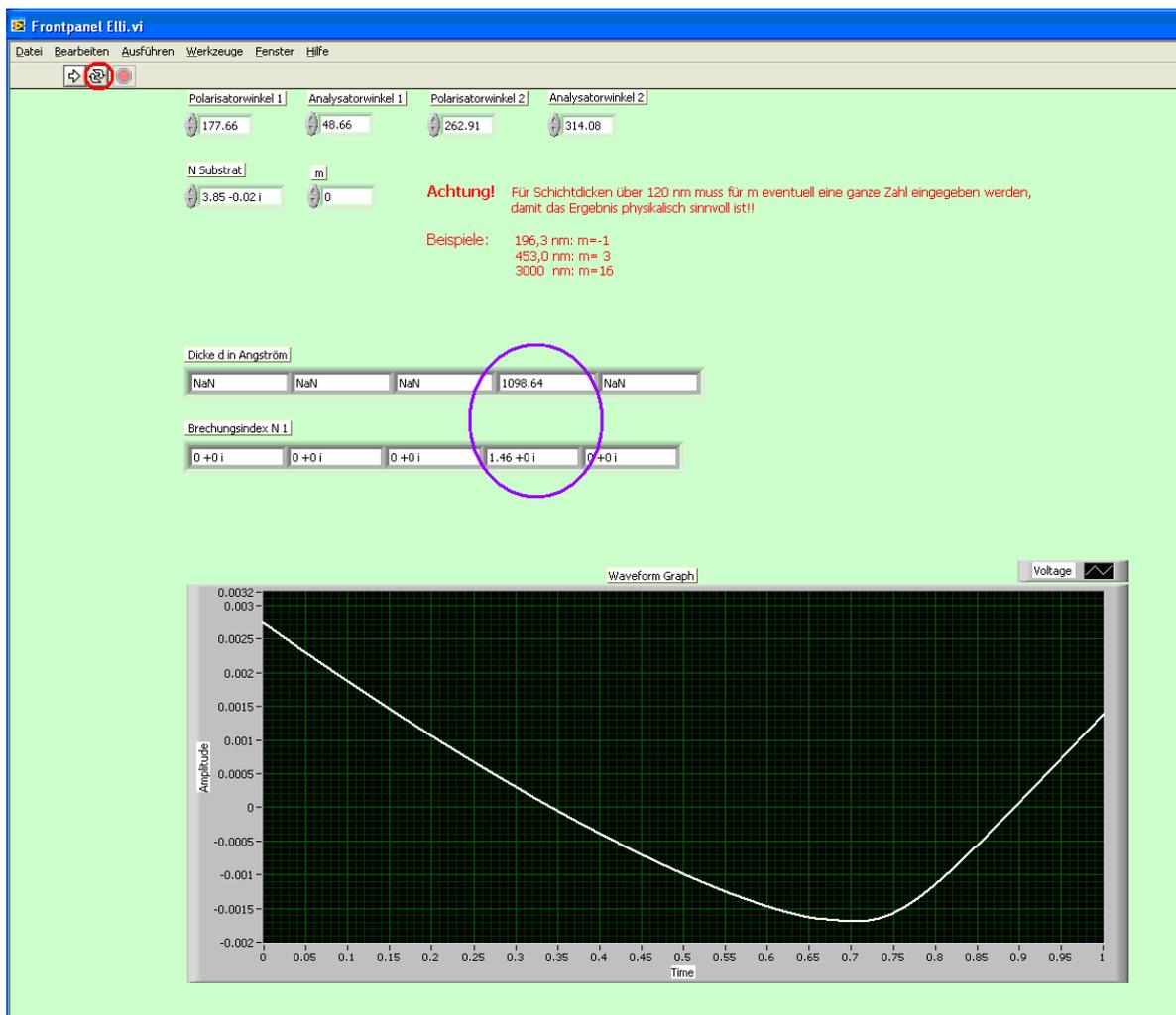


Abbildung 3.4: Ansicht des Frontpanels Elli mit Beispielwerten für eine 107,8 nm dicke  $\text{SiO}_2$ -Schicht auf Silizium

### 3.2.2.2 Datenspeicherung

Zum Speichern der gewonnenen Messergebnisse wird „Save Data“ verwendet.

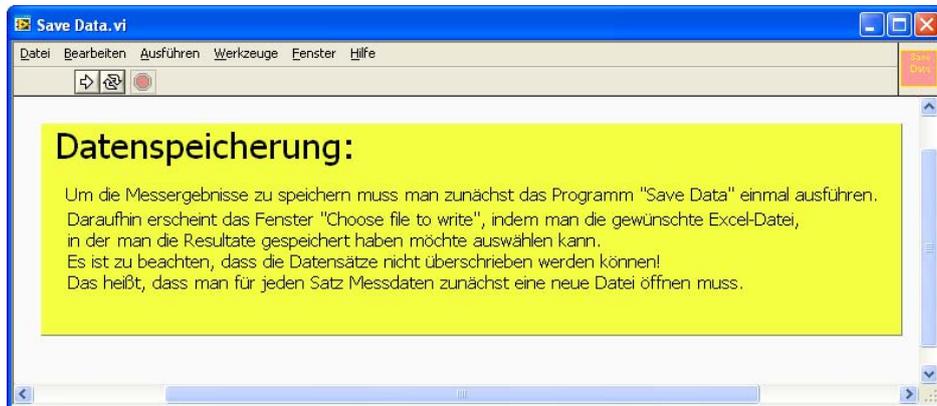


Abbildung 3.5: Frontpanel „Save Data“

Mit dem  Button wird das Programm einmal ausgeführt, und es erscheint das Fenster „Choose file to write“

Hier kann man eine Datei auswählen, indem man die Messergebnisse speichern möchte. Gespeichert werden folgende Größen als eine Texttabelle:

Zeile 1: Schichtdicke  $d$  in Angström

Zeile 2: Brechungsindex  $N_1$

Zeile 3: Die Messwinkel in folgender Reihenfolge:

Polarisatorwinkel 1-Analysatorwinkel 1-Polarisatorwinkel 2-Analysatorwinkel 2

Leider kann nur ein Satz von Messdaten pro Datei gespeichert werden, d.h. man muss jedes Mal eine neue Datei öffnen. Die Daten können auch nicht überschrieben werden.

### 3.2.3 Das Testpanel

Für die Digitalisierung der Spannungswerte des Detektors wird ein digital-analog Wandler (DAC) verwendet, dessen Gerätetreiber installiert sein muss, um „Elli“ auszuführen. Ist dies nicht der Fall, erscheint eine Fehlermeldung.

Damit man nicht auf jedem Rechner den Treiber installieren muss, wurde das Programm „Testpanel Elli“ geschrieben. Die Funktionsweise ist mit „Elli“ identisch, bis auf die Tatsache, dass die Spannungskurve des Detektors nicht zu sehen ist, und somit auch kein Gerätetreiber benötigt wird.

So kann man auf jedem beliebigen Computer alle Berechnungen mit den im Labor gemessenen Daten durchführen, solange die „LabVIEW-Runtime-Engine“ installiert ist.

## 4 Messungen

Durch die Wahl und die Anordnung der optischen Elemente ergeben sich bei der Messung keine systematischen Fehler [Men96].

Eine Fehlerquelle hingegen liefert die Justage (siehe Abschnitt 6.5). Für den Verlauf des Laserstrahles können horizontale oder vertikale Abweichungen von  $\pm 0,03^\circ$  auftreten. Bei der Justage des Polarisators addiert sich dieser Fehler quadratisch zu dem des Brewsterwinkels (ebenfalls  $\pm 0,03^\circ$ ) zu  $0,042^\circ$ . Da das Messlicht unter diesem Winkel auf das Brewsterfenster fällt, stellt sich nun die Frage, wie groß die Auswirkung auf die Justage des Polarisators ist. Testmessungen von M. Mendel haben gezeigt, dass auch bei einem gering abweichenden Brewsterwinkel der reflektierte Strahl ein Intensitätsminimum durchläuft. Da aber die Intensitätskurve nun flacher ist, wächst der Fehler beim Einstellen der Polarisationsoptik auf  $0,033^\circ$ . Eine weitere Unsicherheit stellt das Anschrauben des Adapters, indem sich die Optik befindet, dar. Dieser Wert wurde auf  $0,017^\circ$  geschätzt. Für das zweite Lambda/4-Plättchen entsteht durch den Justiervorgang eine maximale Abweichung von  $0,041^\circ$ , da die Elliptizität des Messlichtes durch die Winkeleinstellung des Polarisators relativ zum fest einjustierten Plättchen bestimmt wird. Der systematische Gesamtfehler des Polarisators berechnet sich zu  $0,058^\circ$  durch quadratische Addition.

Der systematische Fehler des Analysators von  $0,041^\circ$  beinhaltet unter anderem sowohl den Polarisatorfehler (ohne den Einfluss des Lambda/4-Plättchens) von  $0,037^\circ$ , als auch den Fehler durch das Festschrauben von  $0,017^\circ$  [Men96].

Die angegebenen Fehler in diesem Kapitel beziehen sich auf diese Justagefehler.

Für die Brechungsindizes der Substrate wurden folgende Werte verwendet:

- Silizium:  $n = 3,85 - 0,02i$  [Men96]
- Saphir:  $n = 1,7659$  [Val08]

### 4.1 Referenzproben

Um die Genauigkeit des Ellipsometers zu bestimmen, wurden dünne Halbleiterschichten bekannter Dicke als Referenzproben vermessen.

Die Proben wurden von Dr. Goldhahn (TU Ilmenau) zur Verfügung gestellt. Es handelt sich dabei um vier SiO<sub>2</sub>-Wafer (halbkreisförmig, mit einem Durchmesser von ca. 7 cm) auf Silizium mit den Dicken 43,1 nm; 58,2 nm; 107,8 nm und 196,3 nm.

Sie wurden an der TU Ilmenau hergestellt und am dortigen industriellen Ellipsometer im Spektralbereich von 1 eV bis 5 eV (Spektroskopische Ellipsometrie) sehr genau vermessen. Die Ergebnisse für die Schichtdicke  $d$  wurden über den gesamten Spektralbereich gemittelt. Es wird ein Fehler von  $\pm 0,5$  nm angegeben. Die recht großen Wafer wurden mit einer Diamantdrahtsäge in verschieden große Stücke zwischen 15 mm×6 mm und 15 mm×50 mm gesägt.

### 4.1.1 Untersuchung der $(43,1 \pm 0,5)$ nm Probe

Zunächst wurden mehrere Proben vermessen. Die einzelnen Messwerte sind in Tabelle 4.1 dargestellt:

Probe	n gemessen	d gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	1,449 $\pm 0,004$	44,7 nm $\pm 0,2$ nm	+ 1,6 nm (3,71%)	18,5	336,91	185,25	275,33
2	1,415 $\pm 0,004$	46,4 nm $\pm 0,2$ nm	+ 2,3 nm (7,66%)	19,08	337,33	185,58	275,75
3	1,456 $\pm 0,004$	44,0 nm $\pm 0,2$ nm	+ 0,9 nm (2,09%)	18,83	337,5	185,16	275,58
4	1,441 $\pm 0,004$	45,0 nm $\pm 0,2$ nm	+ 1,9 nm (4,41%)	18,33	336,75	185,33	275,5
5	1,490 $\pm 0,004$	42,6 nm $\pm 0,2$ nm	- 0,5 nm (1,16%)	18,83	337,75	186,08	274,08
6	1,472 $\pm 0,004$	43,4 nm $\pm 0,2$ nm	+ 0,3 nm (0,70%)	18,91	337,66	186,16	274,25

Tabelle 4.1: Messwerte für die 43,1 nm Probe aus Ilmenau

Mit Ausnahme der Probe 2 liegt die prozentuale Abweichung stets unter 5%. Es ist auffällig, dass alle Proben außer Nummer 5 stets zu dick gemessen worden sind. Der gemittelte Messfehler fällt mit + 1,2 nm (2,71%) geringer aus, als erwartet. Der systematische Fehler beträgt für die Schichtdicke 0,2 nm und für den Brechungsindex 0,004.

### 4.1.2 Untersuchung der $(58,2 \pm 0,5)$ nm Probe

Für die 58,2 nm Probe ergaben sich folgende Messwerte (Tabelle 4.2):

Probe	n gemessen	d gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	1,444 $\pm 0,003$	61,8 nm $\pm 0,2$ nm	+ 3,4 nm (5,84%)	23,75	331,66	179,58	270,00
2	1,450 $\pm 0,003$	61,2 nm $\pm 0,2$ nm	+ 3,0 nm (5,15%)	23,66	331,75	178,83	269,66
3	1,453 $\pm 0,003$	61,7 nm $\pm 0,2$ nm	+ 3,5 nm (6,01%)	24,66	332,33	178,83	269,16
4	1,465 $\pm 0,003$	60,7 nm $\pm 0,2$ nm	+ 2,5 nm (4,30%)	23,83	331,75	179,00	269,75
5	1,494 $\pm 0,003$	58,1 nm $\pm 0,2$ nm	- 0,1 nm (0,17%)	22,83	331,58	178,75	269,66
6	1,497 $\pm 0,003$	59,3 nm $\pm 0,2$ nm	+ 1,1 nm (1,89%)	24,08	332,00	179,16	268,41

Tabelle 4.2: Messwerte für die 58,2 nm Probe aus Ilmenau

Trotz der größeren Schichtdicke ist der Durchschnittswert mit 60,5 nm ungenauer als bei den 43,1 nm Proben. Den besten Wert liefert Probe 5 (58,1 nm). Analog zu den vorherigen Messungen sind fast alle Halbleiterschichten dicker als der Referenzwert. Die gemittelte Abweichung beträgt + 2,2 nm (3,84%) und entspricht den Erwartungen. Der systematische Fehler ist mit 0,2 nm für die Schichtdicke mit dem der 43,1 nm Probe identisch, für den Brechungsindex ist er mit 0,003 etwas geringer.

### 4.1.3 Untersuchung der $(107,8 \pm 0,5)$ nm Probe

Diese Probe ist fast doppelt so dick wie die vorherige, weshalb die Ergebnisse deutlich besser ausfallen sollten.

Probe	n gemessen	d gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	1,459 $\pm 0,001$	109,1 nm $\pm 0,2$ nm	+ 1,3 nm (1,21%)	43,16	309,83	175,5	265,0
2	1,460 $\pm 0,001$	108,7 nm $\pm 0,2$ nm	+ 0,9 nm (0,83%)	43,08	310,08	175,66	264,66
3	1,455 $\pm 0,001$	108,6 nm $\pm 0,2$ nm	+ 0,8 nm (0,74%)	42,5	310,58	175,75	265,0
4	1,454 $\pm 0,001$	108,8 nm $\pm 0,2$ nm	+ 1,0 nm (0,93%)	42,58	310,66	175,75	265,16
5	1,453 $\pm 0,001$	110,1 nm $\pm 0,2$ nm	+ 2,3 nm (2,13%)	43,73	310,0	175,66	265,58
6	1,468 $\pm 0,001$	110,4 nm $\pm 0,2$ nm	+ 2,6 nm (2,41%)	45,66	308,83	175,25	264,66

Tabelle 4.3: Messwerte für die 1078 nm Probe aus Ilmenau

Die prozentuale Abweichung ist mit durchschnittlich + 1,4% tatsächlich viel geringer als bei den dünneren Schichten. Allerdings beruht dieser gute Wert auf der viel größeren Schichtdicke. Der Mittelwert der Abweichung liegt mit + 1,5 nm deutlich unter dem Resultat der 58,2 nm Probe, allerdings noch über dem der 43,1 nm Schicht. Der systematische Fehler beträgt 0,2 nm für die Schichtdicke und 0,001 für den Brechungsindex.

### 4.1.4 Untersuchung der $(196,3 \pm 0,5)$ nm Probe

Bei dieser Schichtdicke ergaben sich am Anfang einige Probleme. Die Messungen lieferten zwar realistische Werte für den Brechungsindex, aber die Schichtdicken waren um über 100 nm zu dünn. Ein Messfehler der TU Ilmenau schied aus, da dort Schichten zwischen

80 nm und 100 nm gar nicht hergestellt werden und die Probe zusätzlich sehr genau vermessen worden war. Das Problem ließ sich auf die Variable  $m$  zurückverfolgen, die bereits bei dieser Dicke eingestellt werden muss. Für  $m = -1$  ergaben sich folgende Werte (Tabelle 4.4):

Probe	n gemessen	d gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	1,461 $\pm 0,002$	196,6 nm $\pm 0,5$ nm	+ 0,3 nm (0,15%)	38,5	328,83	95,16	184,91
2	1,449 $\pm 0,002$	200,2 nm $\pm 0,5$ nm	+ 3,9 nm (1,99%)	37,66	328,33	94,58	184,66
3	1,463 $\pm 0,002$	196,8 nm $\pm 0,5$ nm	+ 0,5 nm (0,25%)	37,91	328,75	95,25	184,83
4	1,460 $\pm 0,002$	197,4 nm $\pm 0,5$ nm	+ 1,1 nm (0,56%)	38,08	328,75	95,00	184,91
5	1,464 $\pm 0,002$	199,1 nm $\pm 0,5$ nm	+ 2,9 nm (1,48%)	36,41	329,25	93,5	186,16
6	1,470 $\pm 0,002$	197,5 nm $\pm 0,5$ nm	+ 1,2 nm (0,61%)	36,66	329,33	93,25	186,75

Tabelle 4.4: Messwerte für die 196,3 nm Probe aus Ilmenau

Hier wurden die Proben im Schnitt um 1,7 nm zu dick vermessen. Die prozentuale Abweichung ist mit + 0,84% auf Grund der großen Schichtdicke sehr gering. Der systematische Fehler beträgt  $\delta d = 0.5$  nm und  $\delta n = 0,002$ . Dass man nun die Variable m eingeben muss, verursacht keine bedeutenden Ungenauigkeiten. Der systematische Fehler ist um 0,3 nm größer, als bei den anderen Proben. Ein fehlerhafter Brechungsindex vom Substrat wirkt sich stärker aus, als bei den vorherigen Schichten. Gibt man beispielsweise für  $N_2 = 3,856 - 0,02$  i anstatt  $N_2 = 3,85 - 0,02$  i ein, so hat man bei der 196,3 nm Probe eine zusätzliche Abweichung von 0,5 nm, während dieser Wert bei der 107,8 nm Probe bei nur 0,1 nm liegt.

## 4.1.5 Ergebnis

Durch die Vermessung der vier Referenzproben aus Ilmenau konnte gezeigt werden, dass das Bonner Nullellipsometer im Bereich von  $d = 43,1$  nm bis  $d = 196,3$  nm gute Ergebnisse liefert. Die Mittelwerte der gemessenen Schichtdicken liegen außerhalb der Fehlergrenzen, was aber zu erwarten war, da der spektroskopische Ellipsometer in Ilmenau einen gemittelten Wert über den Spektralbereich von 1 eV bis 5 eV liefert, der weitaus genauer ist als Messungen mit nur einer Wellenlänge. Die Messfehler liegen deutlich über dem systematischen Fehler, der durch die Justage der optischen Elemente hervorgerufen wird (Tabelle 4.5).

<b>Schichtdicke</b>	(43,1 $\pm$ 0,5) nm	(58,2 $\pm$ 0,5) nm	(107,8 $\pm$ 0,5) nm	(196,3 $\pm$ 0,5) nm
<b>Abweichung</b>	+1,2 nm	+2,2 nm	+1,5 nm	+1,7 nm
<b>Syst. Fehler d</b>	0,2 nm	0,2 nm	0,2 nm	0,5 nm

Tabelle 4.5: Durchschnittliche Messfehler der vier Referenzproben aus Ilmenau

Daher ist es unbedingt erforderlich, den dominierenden statistischen Fehler durch folgende Maßnahmen möglichst gering zu halten:

1. Sorgfältige Reinigung der Proben
2. Einschalten des Lasers mindestens 15 Minuten vor der Messung
3. Untersuchung der Probe an einer intakten Stelle
4. Messung im Dunkeln

Ist die Probenoberfläche nicht sauber, so können je nach Grad der Verschmutzung Abweichungen von mehr als 50% auftreten. Im schlimmsten Fall bekommt man gar keine brauchbaren Ergebnisse.

Ebenso ist darauf zu achten, dass der Laser rechtzeitig eingeschaltet wird, um eventuelle Intensitätsschwankungen zu vermeiden. Die Größe des hierdurch hervorgerufenen Fehlers lässt sich schwer abschätzen, da diese Schwankungen nicht homogen ausgeprägt sind. Er dürfte aber im Bereich von einigen 10% liegen.

Ist die Oberfläche der zu vermessenden Schicht nicht intakt, so können keine realistischen Ergebnisse erwartet werden.

Der Fehler, der durch das Messen bei Tageslicht/Kunstlicht entsteht, wurde näher untersucht. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.6 aufgeführt:

<b>Schichtdicke</b>	<b>durchschnittliche Abweichung hell</b>	<b>durchschnittliche Abweichung abgedunkelt</b>
(43,1 ± 0,5) nm	11,92 %	2,71 %
(58,2 ± 0,5) nm	9,14 %	3,84 %
(107,8 ± 0,5) nm	11,47 %	1,40 %
(196,3 ± 0,5) nm	10,98 %	0,84 %

Tabelle 4.6: Durchschnittliche Abweichung der Schichtdicken vom Referenzwert bei Messungen im Hellen sowie im Dunkeln für vier SiO<sub>2</sub>-Proben der Dicken 43,1 nm, 58,2 nm, 107,8 nm und 196,3 nm. Es wurden jeweils die Durchschnittswerte aus 6 Messungen verwendet.

Man kann klar erkennen, dass der Messfehler bei einer Messung in einem abgedunkelten Labor teilweise um über 10 % verringert wird.

Bei Schichten oberhalb von ca. 120 nm muss die Variable m so eingestellt werden, dass man ein physikalisch sinnvolles Resultat erhält. Deshalb kann man Schichten nur dann vermessen, wenn die ungefähre Schichtdicke bekannt ist.

Die Variable m verursacht bei einer fehlerhaften Eingabe von N<sub>2</sub> (Brechungsindex Substrat) einen größeren Fehler, was man unbedingt beachten muss, da der Brechungsindex des Substrates durch Herstellungsfehler etc. durchaus vom Literaturwert abweichen kann. Andere Ungenauigkeiten bei der Messung sind aber nicht erkennbar. Die Abweichung des Mittelwertes der Messungen vom Referenzwert schwankt zwischen 1,2 nm für die 43,1 nm Probe und 2,2 nm für die 58,2 nm Probe. Abschließend kann man sagen, dass die prozentuale Abweichung des Durchschnittswertes für d mit wachsender Schichtdicke deutlich abnimmt.

## 4.2 Messung dicker Schichten

Im vorherigen Abschnitt tauchte das Problem auf, dass die aus den gemessenen Winkeln berechneten Schichtdicken ab ca. 120 nm von der Variable m abhängen. Den geeigneten Zahlenwert kann man nur durch die Variation von m finden, was bedeutet, dass man zumindest die Größenordnung von d kennen muss. Um das Verhalten von m zu untersuchen, wurden drei Proben im Bereich von 500 nm vermessen und zusätzlich eine ca. 3000 nm dicke Schicht.

## 4.2.1 (500 ± 20) nm AlN auf Saphir

Es wurde eine ca. 500 nm dicke AlN-Schicht auf Saphir verwendet. Insgesamt standen drei kleine Stücke (5 mm×5 mm), sowie eine mittelgroße Probe (10.7 mm×6.5 mm, Nummer 4) zur Verfügung, die alle vom selben Wafer stammen. Der Herstellungsfehler wurde von der Firma TDI mit 4% angegeben.

Probe	m	d gemessen	n gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	2	301,2 nm ± 0,0 nm	1,968 ± 0,001	- 198,8 nm (39,76 %)	8,91	350,16	126,83	216,66
	3	484,2 nm ± 0,1 nm		- 15,8 nm (3,16 %)				
	4	667,2 nm ± 0,2 nm		+ 167,2 nm (33,44 %)				
2	2	296,1 nm ± 0,0 nm	1,989 ± 0,001	- 203,9 nm (40,78 %)	9,00	351,41	125,91	215,41
	3	476,6 nm ± 0,1 nm		- 23,4 nm (4,68 %)				
	4	657,1 nm ± 0,2 nm		+ 157,1 nm (31,42 %)				
2	2	287,7 nm ± 0,0 nm	2,004 ± 0,001	- 212,3 nm (42,46 %)	8,41	352,75	125,66	216,41
	3	466,4 nm ± 0,1 nm		- 33,6 nm (6,72 %)				
	4	645,2 nm ± 0,2 nm		+ 145,2 nm (29,04 %)				
3	2	305,7 nm ± 0,0 nm	1,929 ± 0,001	- 194,3 nm (38,86 %)	10,75	350,66	130,00	218,41
	3	493,5 nm ± 0,1 nm		- 6,5 nm (1,3 %)				
	4	681,3 nm ± 0,2 nm		+ 181,3 nm (36,26 %)				
3	2	307,1 nm ± 0,0 nm	1,928 ± 0,001	- 192,9 nm (38,58 %)	10,5	350,16	130,25	218,00
	3	495,1 nm ± 0,1 nm		- 4,9 nm (0,98%)				
	4	683,1 nm ± 0,2 nm		+ 183,1 nm (36,62 %)				
4	2	300,2 nm ± 0,0 nm	1,976 ± 0,001	- 199,8 nm (39,96%)	9,66	351,16	127,00	215,33
	3	482,2 nm ± 0,1 nm		- 17,8 nm (3,56%)				
	4	664,2 nm ± 0,2 nm		+ 164,2 nm (32,84%)				
4	2	298,3 nm ± 0,0 nm	1,950 ± 0,001	- 201,7 nm (40,34%)	10,00	351,5	128,83	218,83
	3	483,5 nm ± 0,1 nm		- 16,5 nm (3,3%)				
	4	668,6 nm ± 0,2 nm		+ 168,6 nm (33,72%)				

Tabelle 4.7: Messergebnisse der 500 nm AlN-Probe auf Saphir für verschiedene Werte von m

Das einzig sinnvolle Resultat erhält man für  $m = 3$ . Für  $m = 2$  weichen die Schichtdicken durchschnittlich um  $-40,11\%$  ab, für  $m = 4$  um  $+33,33\%$ . Bildet man den Mittelwert aus den mit  $m = 3$  berechneten Ergebnisse, erhält man  $483,1 \text{ nm}$ , was ein durchaus realistischer Wert ist. Der Messfehler liegt, bezogen auf  $500 \text{ nm}$  bei  $-16,9 \text{ nm}$  ( $3,38\%$ ). Betrachtet man die Messergebnisse für die einzelnen Proben, so ist zu erkennen, dass die Schichtdicke über den Wafer verteilt nicht homogen war. Sie geht im Schnitt von  $471,5 \text{ nm}$  (Probe 2) über  $482,83 \text{ nm}$  (Probe 4) bis hin zu  $494,3 \text{ nm}$  (Probe 3). Probe 1 wurde ausgelassen, da nur eine Messung vorliegt. Der systematische Fehler ist mit  $0,1 \text{ nm}$  in der Schichtdicke für  $m = 3$  sehr gering, ebenso wie für den Brechungsindex mit  $0,001$ .

#### 4.2.2 $(453 \pm 45) \text{ nm Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ( $x = 15,1\%$ ) auf Saphir

Messung	m	d <sub>gemessen</sub>	n <sub>gemessen</sub>	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	2	266,9 nm $\pm 0,0 \text{ nm}$	2,111 $\pm 0,00$	- 186,1 nm (41,08%)	5,66	355,41	118,83	208,00
	3	434,3 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		- 18,7 nm (4,13%)				
	4	601,7 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		+ 148,7 nm (32,83%)				
2	2	274,9 nm $\pm 0,0 \text{ nm}$	2,096 $\pm 0,00$	- 178,1 nm (39,32%)	7,25	354,58	118,25	207,75
	3	443,8 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		- 9,2 nm (2,03%)				
	4	612,6 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		+ 159,6 nm (35,23%)				
3	2	275,2 nm $\pm 0,0 \text{ nm}$	2,084 $\pm 0,00$	- 117,8 nm (39,25%)	7,25	354,5	118,5	207,91
	3	444,3 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		- 8,7 nm (1,92%)				
	4	613,3 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		+ 160,3 nm (35,39%)				
4	2	232,6 nm $\pm 0,0 \text{ nm}$	2,084 $\pm 0,00$	- 220,4 nm (48,65%)	8,25	354,91	120,08	207,83
	3	447,7 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		- 5,3 nm (1,17%)				
	4	617,7 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		+ 164,7 nm (36,36%)				
5	2	277,7 nm $\pm 0,0 \text{ nm}$	2,081 $\pm 0,00$	- 175,3 nm (38,70%)	7,91	354,58	120,44	208,16
	3	448,1 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		- 4,9 nm (1,08%)				
	4	618,5 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		+ 165,5 nm (36,53%)				
6	2	262,3 nm $\pm 0,0 \text{ nm}$	2,130 $\pm 0,00$	- 190,7 nm (42,10%)	5,41	356,50	115,83	209,75
	3	428,1 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		- 24,9 nm (5,50%)				
	4	594,0 nm $\pm 0,1 \text{ nm}$		+ 141,0 nm (31,13%)				

Tabelle 4.8: Messergebnisse der  $453 \text{ nm Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 15,1\%$ ) Probe auf Saphir für verschiedene m-Werte

Hier wurde eine mittelgroße Probe (13 mm×4 mm) an mehreren Stellen vermessen. Bei dieser Probe handelt es sich um eine  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 15,1\%$ ) Schicht, deren Dicke mittels RBS (Rutherford Rückstreuung) am Instituto Tecnológico e Nuclear Lissabon (ITN) von Frau Dr. Lorentz bereits zu  $453 \text{ nm} \pm 10\%$  bestimmt worden war. Die Größe des Fehlers stammt vor allem daher, dass am ITN lediglich ein Stück des selben Wafers untersucht worden war, und nicht die hier vorliegende Probe. Aufgrund der Tatsache, dass die Schichtdicke eines Wafers nicht zwingend homogen ist, erhält man zusammen mit den Messfehlern einen so großen Wert. Auch bei dieser Messreihe bekommt man die besten Ergebnisse für  $m = 3$ . Die durchschnittliche Abweichung beträgt  $-11,9 \text{ nm}$  (2,64%), was die angegebene Schichtdicke bestätigt. Für  $m = 2$  beträgt der Wert  $-188,1 \text{ nm}$  (41,52%), für  $m = 4$  gilt  $+156,6 \text{ nm}$  (34,58%). Der systematische Fehler beträgt  $\delta d = 0,1 \text{ nm}$  und liegt für  $n_1$  unter 0,001.

### 4.2.3 ( $589 \pm 59$ ) nm $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ( $x = 4,3\%$ ) auf Saphir

Diese Probe wurde ebenfalls am ITN mit RBS vermessen. Es galten dieselben Bedingungen, wie für die 453 nm dicke Schicht. Hier standen insgesamt drei Stücke eines Wafers zur Verfügung. Zwei hatten die Maße 4 mm×4 mm, die Dritte 4.5 mm×6 mm. Alle wurden an zwei Stellen vermessen (Tabelle 4.9). Bei einer der 4 mm×4 mm Proben (Nummer 3) war die Oberfläche beschädigt, daher wurden die Ergebnisse nicht berücksichtigt und in der separaten Tabelle 4.10 aufgeführt.

Probe	m	d <sub>gemessen</sub>	n <sub>gemessen</sub>	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	2	413,2 nm ± 1,0 nm	1,901 ± 0,003	- 175,8 nm (29,85%)	13,41	345,75	140,5	228,75
	3	604,6 nm ± 1,4 nm		+ 15,6 nm (2,65%)				
	4	798,1 nm ± 2,1 nm		+ 209,1 nm (35,50%)				
1	2	400,7 nm ± 1,0 nm	1,932 ± 0,003	- 118,3 nm (31,97%)	14,33	346,5	140,58	229,66
	3	588,2 nm ± 1,4 nm		- 0,8 nm (0,14%)				
	4	775,7 nm ± 1,7 nm		+ 186,7 nm (31,70%)				
2	2	407,4 nm ± 1,0 nm	1,916 ± 0,003	- 181,6 nm (30,83%)	14,00	346,33	140,41	229,50
	3	596,8 nm ± 1,4 nm		+ 7,8 nm (1,32%)				
	4	786,3 nm ± 1,7 nm		+ 197,3 nm (33,50%)				
2	2	395,3 nm ± 1,0 nm	1,935 ± 0,003	- 193,7 nm (32,89%)	14,58	346,16	139,91	229,00
	3	583,4 nm ± 1,4 nm		- 5,6 nm (0,95%)				
	4	769,5 nm ± 1,7 nm		+ 180,5 nm (30,65%)				

Tabelle 4.9: Messergebnisse der 589 nm  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 4,3\%$ ) Probe auf Saphir für verschiedene m-Werte

Probe	m	d gemessen	n gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
3	2	312,9 nm ± 1,0 nm	2,000 ± 0,003	- 276,1 nm (46,87%)	11,75	349,58	124,66	213,33
	3	491,6 nm ± 1,4 nm		- 97,4 nm (16,54%)				
	4	670,3 nm ± 1,7 nm		+ 81,3 nm (13,80%)				
3	2	316,3 nm ± 1,0 nm	2,010 ± 0,003	- 272,7 nm (46,30%)	12,00	348,58	124,91	213,41
	3	493,9 nm ± 1,4 nm		- 95,1 nm (16,15%)				
	4	671,5 nm ± 1,7 nm		+ 82,5 nm (14,01%)				

Tabelle 4.10: Messergebnisse der beschädigten 589 nm  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 4,3\%$ ) Probe auf Saphir für verschiedene m

Ohne Probe Nummer 3 ergeben sich folgende Durchschnittswerte für die Abweichung:

- m = 2: – 184,9 nm (31,39%)
- m = 3: + 4,3 nm (0,73%)
- m = 4: + 194,4 nm (32,84%)

Die Ergebnisse aus Lissabon werden mit der Ellipsometermessung bestätigt. Es fällt aber auf, dass der systematische Fehler mit  $\delta d = 1,4$  nm sich für die Schichtdicke im Vergleich zu den beiden vorherigen Proben vervielfacht hat.

#### 4.2.4 (3000 ± 120) nm AlN auf Saphir

Um das Verhalten von m bei noch dickeren Schichten zu untersuchen, wurden mehrere Bruchstücke eines AlN-Wafers auf Saphir vermessen. Die Größe der Proben lag zwischen 10 mm×5 mm und 20 mm×6 mm. Die Schätzung des Herstellerfehlers auf 4% stammt wie bei 4.2.1 von der Firma TDI.

Der im Programm einzustellende m-Wert beträgt 16. Man sieht in Tabelle 4.11 deutlich, dass hier die prozentuale Abweichung bei den benachbarten Werten für m deutlich geringer ist, als bei den Proben um 500 nm. Sie liegt für m = 15 im Mittel bei – 6,33 % (189,9 nm) und für m = 17 bei + 5,95% (178,5 nm). Man erhält für m = 16 gemittelt d = 2994,3 nm (0,19%). Der systematische Fehler in der Schichtdicke ist mit 2,7 nm erneut gestiegen, beim Brechungsindex bleibt er aber mit 0,001 sehr niedrig.

Probe	m	d <sub>gemessen</sub>	n <sub>gemessen</sub>	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
1	15	2799,9 nm ± 2,3 nm	1,965 ± 0,001	- 200,1 nm (6.67%)	11,33	349,08	144,41	233,75
	16	2983,2 nm ± 2,4 nm		- 16,8 nm (0.56%)				
	17	3166,5 nm ± 2,6 nm		+ 166,5 nm (5.55%)				
2	15	2802,3 nm ± 1,9 nm	1,967 ± 0,001	- 197,7 nm (6.59%)	10,66	349,75	144,5	233,75
	16	2985,4 nm ± 2,0 nm		- 14,6 nm (0.49%)				
	17	3168,5 nm ± 2,1 nm		+ 168,5 nm (5.62%)				
3	15	2776,2 nm ± 2,8 nm	1,974 ± 0,001	- 223,8 nm (7.46%)	11,66	347,83	144,41	233,75
	16	2958,5 nm ± 3,0 nm		- 41,5 nm (1.38%)				
	17	3140,8 nm ± 3,2 nm		+ 140,8 nm (4.69%)				
4	15	2842,3 nm ± 2,8 nm	1,940 ± 0,001	- 157,7 nm (5.26%)	11,41	347,33	142,91	232,33
	16	3028,7 nm ± 3,0 nm		+ 28,7 nm (0.96%)				
	17	3215,2 nm ± 3,2 nm		+ 215,2 nm (7.17%)				
5	15	2829,9 nm ± 2,8 nm	1,946 ± 0,001	- 170,1 nm (5.67%)	11,33	347,25	142,75	233,00
	16	3015,5 nm ± 3,0 nm		+ 15,5 nm (0.52%)				
	17	3201,2 nm ± 3,2 nm		+ 201,2 nm (6.71%)				

Tabelle 4.11: Messergebnisse der 3000 nm AlN-Probe auf Saphir

## 4.2.5 Ergebnis

Das Ellipsometer eignet sich gut Schichtdicken im Bereich von 500 nm nachzumessen. Dies ist von großem Nutzen, da allgemeine Fehlerangaben in den Datenblättern häufig nicht zu finden sind, höchstens grobe Schätzungen. Zusätzlich ist die Schichtdicke über den Wafer nicht homogen, weshalb eine Kontrolle von d erforderlich ist.

Bei dem Auswertprogramm „Elli“ muss man nur darauf achten, dass der Parameter m richtig eingestellt wird. Betrachtet man die Ergebnisse für alle drei dargestellten m-Werte einer Messung, dann fällt auf, dass die Resultate der benachbarten m-s umso stärker abweichen, je genauer das Ergebnis für die zu vermessende Schicht ist. Dies ist neben dem Brechungsindex ein guter Anhaltspunkt für die Qualität einer Messung. Bei der 3000 nm Schicht beträgt die prozentuale Abweichung wegen der großen Schichtdicke zu den nächsten m-Werten durchschnittlich 6,14%. Das bedeutet, dass bei zu großem d die Probe nicht problemlos nachgemessen werden kann, da ein Herstellungsfehler von über 5% nicht mehr nachvollziehbar ist.

Außerdem lässt sich beobachten, dass der systematische Fehler für die Schichtdicke mit wachsendem  $d$  zunimmt. Lag er bei der 453 nm dicken Probe bei 0,1 nm, so steigt er bei der 3000 nm dicken Probe schon auf 2,7 nm.

Material	AlN	AlN	Al <sub>0,15</sub> Ga <sub>0,85</sub> N	Al <sub>0,04</sub> Ga <sub>0,96</sub> N
Schichtdicke [nm]	500 ± 20	3 ± 0.12	453 ± 45	589 ± 59
Abweichung [nm]	- 16.9	- 5,7	-11.9	+ 4.3
Syst. Fehler $d$ [nm]	± 0,1	± 2,7	± 0.1	± 1.4

Tabelle 4.12: Durchschnittliche Messfehler der vier dicken Schichten

## 4.3 Messung extrem dünner Schichten

Bereits in 4.1 wurde gezeigt, dass die relative Abweichung bei dünner werdenden Schichten zunimmt. Bisher wurden nur Proben mit einer Dicke ab  $(43,1 \pm 0,5)$  nm vermessen. In dem folgenden Abschnitt wird der Messfehler bei Schichten unter 20 nm untersucht. Der Herstellungsfehler der vorliegenden Schichten HfO<sub>2</sub> auf Silizium wird auf 0,5 nm geschätzt. Die Probendicken wurden von Frau Dr. Catherine Dubourdiou an der Universität Grenoble (INPG) mittels Röntgen-Reflektometrie nachgemessen.

Erschwerend kommt hinzu, dass sich zwischen dem Silizium-Substrat und der HfO<sub>2</sub>-Schicht eine 0,8 nm dicke SiO<sub>2</sub>-Schicht befindet. Diese dünne Pufferschicht kann aufgrund der geringen Dicke der HfO<sub>2</sub>-Schicht nicht ohne weiteres vernachlässigt werden, da das Auswertprogramm des Ellipsometers nur für Einschichtsysteme geeignet ist.

### 4.3.1 Untersuchung einer $(17 \pm 0,5)$ nm dicken HfO<sub>2</sub>-Schicht auf Silizium

Für die Untersuchung extrem dünner Halbleiterschichten wurde zunächst eine 10 mm×6 mm große HfO<sub>2</sub>-Probe auf einem Silizium-Substrat vermessen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.13 dargestellt:

$d$ gemessen	$n$ gemessen	Abweichung	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
26,3 nm ± 0,1 nm	1,682 ± 0,006	+ 9,3 nm (54,71%)	14,25	342,33	191,25	281,58
25,8 nm ± 0,1 nm	1,816 ± 0,006	+ 8,8 nm (51,76%)	13,41	341,83	190,16	280,66
26,6 nm ± 0,1 nm	1,636 ± 0,006	+ 9,6 nm (56,47%)	14,66	342,75	191,66	282,08

Tabelle 4.13: Messergebnisse für die 17 nm Hafniumdioxid-Probe auf Silizium

Die Abweichung beträgt bei  $m = 0$  durchschnittlich + 9,2 nm (54,31%). Auch für verschiedene Zahlenwerte für  $m$  verbessert sich das Ergebnis nicht. Der systematische Fehler ist mit 0,1 nm verschwindend gering im Vergleich zu dem hohen Messfehler.

Ein Versuch als Substrat SiO<sub>2</sub> anstatt von Si anzunehmen brachte keine Verbesserungen. Es konnte kein brauchbares Ergebnis erzielt werden.

### 4.3.2 Untersuchung einer $(4,9 \pm 0,5)$ nm dicken $\text{HfO}_2$ -Schicht auf Silizium

Um die Fehlerentwicklung deutlicher zu sehen, wurde eine noch dünnere Schicht mit  $d = (4,9 \pm 0,5)$  nm vermessen (Tabelle 4.14).

<b>d gemessen</b>	<b>n gemessen</b>	<b>Abweichung</b>	<b><math>\alpha_1</math></b>	<b><math>\alpha_2</math></b>	<b><math>\beta_1</math></b>	<b><math>\beta_2</math></b>
15,0 nm $\pm 0,1$ nm	1.297 $\pm 0.004$	11,1 nm (226,53%)	11,66	348,5	209,25	299,41
10,5 nm $\pm 0,1$ nm	1.636 $\pm 0.004$	5,6 nm (114,29%)	11,66	348,83	209,00	299,16
10,0 nm $\pm 0,0$ nm	2.202 $\pm 0.004$	5,1 nm (104,08%)	11,16	349,00	208,75	298,83

Tabelle 4.14: Messergebnisse für die 4,9 nm Hafniumdioxid-Probe auf Silizium

Der durchschnittliche Wert der Abweichung liegt bereits über 100%. Somit ist es nicht mehr sinnvoll, noch dünnere Proben zu untersuchen, da Messungen mit so großem Fehler nicht aussagekräftig sind.

### 4.3.3 Ergebnis

Leider kann man derart dünne Schichten mit einer Pufferzone nur sehr ungenau mit dem Bonner Nullellipsometer vermessen. Schon bei der  $(17 \pm 0,5)$  nm Probe betrug die Abweichung mit rund 9 nm über 50%. Die Hauptursache liegt wahrscheinlich in dem Fehler, den die dünne  $\text{SiO}_2$ -Schicht verursacht. Solche Pufferschichten sind auch bei AlN auf Saphir üblich. In 4.1.2 und 4.2.4 wirkten sie sich allerdings kaum auf die Messungen aus, da die untersuchten Schichten mit ca. 500 nm beziehungsweise ca. 3000 nm um einige Zehnerpotenzen dicker waren. Es ist auch nicht möglich, diese  $\text{SiO}_2$  Schicht als Substrat zu betrachten. Die Ergebnisse für die Brechungsindizes für  $\text{HfO}_2$  liegen für diesen Fall im Bereich 2,9 – 3 und die berechneten Schichtdicken weisen eine noch höhere Abweichung auf, als davor. Grobe Herstellungsfehler können wegen der Kontrollmessungen in Grenoble ausgeschlossen werden. Abschließend kann man sagen, dass Einschichtsysteme ab ungefähr 30 nm mit einer zufrieden stellenden Genauigkeit gemessen werden können, das Ellipsometer aber für so dünne Schichten mit einer Pufferzone schlecht geeignet ist.

## 4.4 Brechungsindizes

Betrachtet man die berechneten Brechungsindizes, so stimmen einige nicht mit den Literaturwerten überein. In Tabelle 4.15 sind diese Werte den berechneten gegenübergestellt. Dabei wurden stets die Brechungsindizes ausgewählt, bei denen die Abweichung bei der Schichtdicke am geringsten war.

Probe	Schicht	Substrat	n Literatur	n gemessen	Abweichung
17 nm	HfO <sub>2</sub>	Si	1,91	1,816 ± 0,006	4,92%
4,9 nm	HfO <sub>2</sub>	Si	1,91	2,202 ± 0,004	15,29%
43,1 nm	SiO <sub>2</sub>	Si	1,457	1,472 ± 0,004	1,00%
58,2 nm	SiO <sub>2</sub>	Si	1,457	1,494	2,54%
107,8 nm	SiO <sub>2</sub>	Si	1,457	1,455	0,14%
196,3 nm	SiO <sub>2</sub>	Si	1,457	1,461	0,27%
500 nm	AlN	Al <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2,150	1,928	10,31%
3000 nm	AlN	Al <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2,150	1,967	8,49%
453 nm	Al <sub>0,15</sub> Ga <sub>0,85</sub> N	Al <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2,22 < x < 2,25	2,081	ca. 6,5%
589 nm	Al <sub>0,04</sub> Ga <sub>0,96</sub> N	Al <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2,22 < x < 2,25	1,932	13%

Tabelle 4.15: Gegenüberstellung der theoretischen und gemessenen Brechungsindizes. Die theoretischen Werte der Brechungsindizes von den Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N Schichten stammen aus einem Diagramm (Abbildung 4.1) [Muth99] und können nur abgeschätzt werden. Die Angaben für SiO<sub>2</sub> beziehen sich auf die Wellenlänge 619,9 nm anstatt der verwendeten 632,8 nm [Sopra]. Die restlichen Zahlen [HO94] gelten für  $\lambda = 632,8$  nm.

Da die Schichtdicken unter anderem aus den Brechungsindizes berechnet werden, kann man Rechen- und Messfehler größtenteils ausschließen, falls das Ergebnis für d eine geringe Abweichung vom Referenzwert zeigt. Außerdem ist zu beachten, dass die Literaturwerte durchaus von den tatsächlichen Brechungsindizes abweichen können, da sie zum größten Teil an Einkristallen gemessen worden sind.

Die Abschnitte 4.1 bis 4.3 zeigen, dass das Ellipsometer die besten Messungen zwischen 100 nm und 200 nm liefert. Tatsächlich sind die Resultate für die Brechungsindizes in diesem Bereich am besten. Die Abweichung bei dünnen Proben lässt sich mit der zusätzlichen Pufferschicht begründen. Es ist sehr auffällig, dass der Fehler für alle Halbleiterschichten auf einem Saphir-Substrat besonders hoch ist. Eine mögliche Erklärung wäre die Tatsache, dass bei Saphir der Einfallswinkel des Messlichtes den Brechungsindex beeinflusst. Bei den Berechnungen wurde der Wert für den ordentlichen Strahl verwendet, obwohl das Licht im 70°-Winkel auf die Probe trifft. Allerdings ist der Brechungsindex für den außerordentlichen Strahl höher als beim ordentlichen, was den Fehler zu den gemessenen Werten noch vergrößern würde. So scheidet diese Erklärung aus.

Eine andere Ursache könnte sein, dass bei Saphir als ein transparentes Material der Extinktionskoeffizient k im Gegensatz zu Silizium gleich Null ist.

Da aber die gemessenen Schichtdicken meist nur gering von den angegebenen Werten abweichen, ist es am wahrscheinlichsten, dass die Brechungsindizes wegen Verunreinigungen oder anderen Umständen tatsächlich nicht mit den Literaturwerten übereinstimmen.

Ein interessantes Beispiel ist hierbei die 589 nm Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N (x = 4,3%)-Schicht. In Abschnitt 4.2.3 wird gezeigt, dass diese Probe bei hohen Schichtdicken die geringste Abweichung zum angegebenen Wert zeigt. Gleichzeitig kann man Tabelle 4.15 entnehmen, dass mit ca. 13% der Fehler beim Brechungsindex am höchsten ist.

Da  $d$  aus  $n_1$  berechnet wird, gibt es nur zwei mögliche Ursachen. Entweder ist die angegebene Schichtdicke fehlerhaft und die gesamte Messung war sehr ungenau, oder der Aluminiumanteil liegt deutlich über 4,3% (siehe Abbildung 4.1).

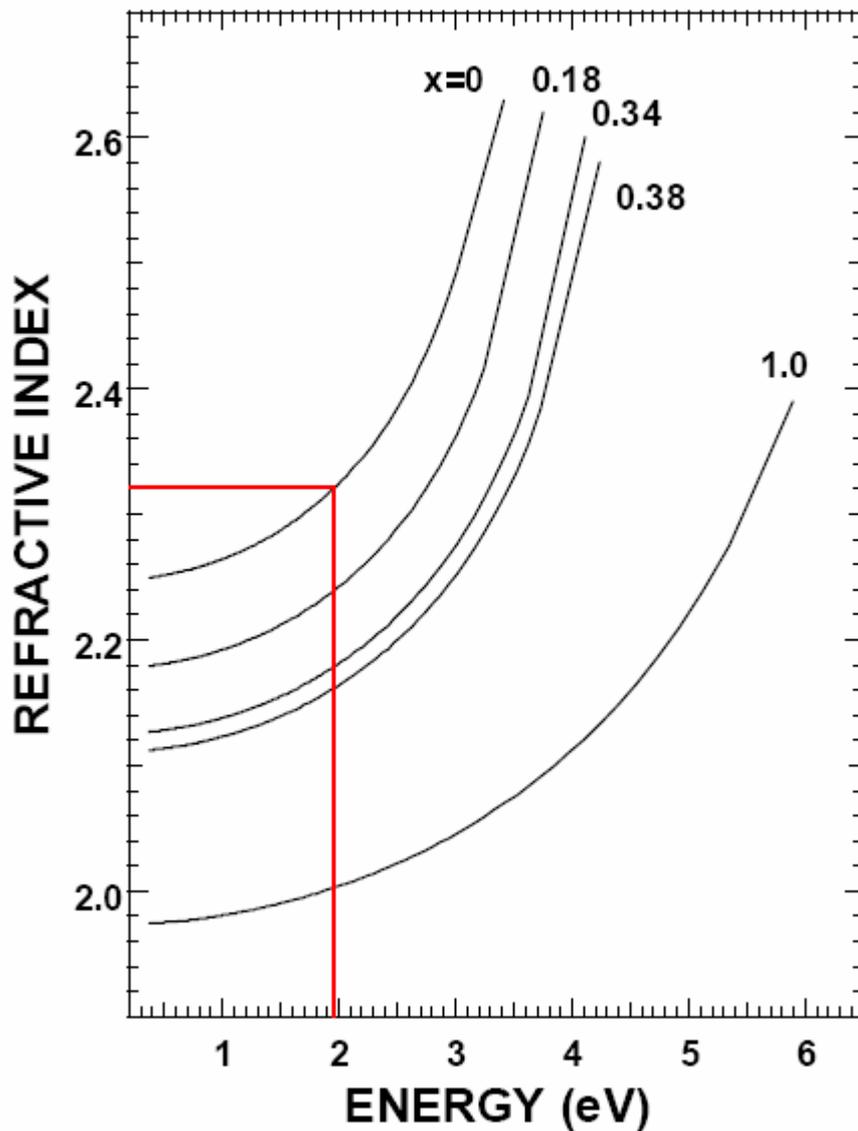


Abbildung 4.1: Der Verlauf des Brechungsindex von  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  für verschiedene Energien und  $x$ -Werte. Die Wellenlänge des Lasers im Versuchsaufbau von  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$  entspricht dabei einer Energie von  $1,96 \text{ eV}$  [Muth99].

## 5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde zunächst das Auswertprogramm „Xellip“ für das Bonner Nullellipsometer von C++ in LabVIEW umgeschrieben.

Um die Spannungswerte der Photodiode auf dem Bildschirm des Laborcomputers verfolgen zu können, wurde das Messverfahren mittels eines digital-analog Wandlers (DAC) digitalisiert. Da eine Messung im Hellen einen zusätzlichen Fehler von ca. 10% verursacht, muss der Raum komplett abgedunkelt werden. Die bisherige analoge Spannungsanzeige war nur sehr schlecht beleuchtet, weshalb man die Intensitätsminima nicht deutlich genug erkennen konnte. Dies ist nun am Bildschirm ohne Probleme möglich. Die einfache Bedienung der Benutzeroberfläche von LabVIEW erlaubt eine unkomplizierte und schnelle Messung ohne langwieriges Einarbeiten. Allerdings kann das neue Ausleseprogramm „Elli“ wegen des integrierten Spannungsdiagramms nur an Computern benutzt werden, an denen der Gerätetreiber des DAC installiert ist. Um die im Labor gewonnenen Messwerte auch an anderen Rechnern auswerten zu können, oder um die Ergebnisse nachzukontrollieren, wurde „Testpanel Elli“ programmiert. Mit dem zusätzlichen Programm „Save Data“ können alle am Laborrechner ermittelten Ergebnisse, sowie die Messwinkel gespeichert werden.

Anschließend wurden Proben verschiedener Dicke und Materialien untersucht, um den bestmöglichen Messbereich des Ellipsometers zu bestimmen. Zunächst wurden vier Referenzproben ( $\text{SiO}_2$  auf Silizium) zwischen 43,1 nm und 196,3 nm vermessen, um die Genauigkeit des Ellipsometers zu testen.

Bei der 196,3 nm Probe tauchte zu ersten Mal das Problem auf, dass ein im Auswertprogramm enthaltener Parameter  $m$ , der die Weglänge des Messlichtes in der Schicht um eine Wellenlänge ändert, von Null abweicht und nun auf der Benutzeroberfläche eingestellt werden muss. Daher ist es notwendig, dass man die Größenordnung der Schichtdicke kennt, um den Parameter  $m$  entsprechend auswählen zu können. Die Proben können nur nachgemessen werden. Ab ca. 3  $\mu\text{m}$  liegt der Unterschied zu den benachbarten Zahlenwerten von  $m$  bei 6%. Eventuelle Herstellungsfehler in diesem Prozentbereich können nicht erkannt werden.

Um eine untere Grenze für die noch messbaren Schichtdicken zu ermitteln, wurden zwei  $\text{HfO}_2$ -Proben auf Silizium mit  $d = (17 \pm 0,5)$  nm und  $d = (4,9 \pm 0,5)$  nm untersucht. Leider wurden die Messungen durch eine ca. 0,8 nm dicke Pufferschicht aus  $\text{SiO}_2$  stark beeinflusst. Schätzungsweise kann man sagen, dass Einschichtsysteme zwischen 30 nm und 2000 nm gut mit dem Ellipsometer gemessen werden können.

Alle Messungen haben gezeigt, dass der aus den Winkelpaaren ermittelte Brechungsindex  $n_1$  ein guter Anhaltspunkt für die Qualität der Ergebnisse ist. Da die Schichtdicke  $d$  unter anderem aus  $n_1$  berechnet wird, kann man bei einem unrealistischen Brechungsindex kein brauchbares Ergebnis erwarten. An diesem Kriterium konnte man auch sehen, dass für transparente Substrate die Werte ungenauer sind. Ein weiteres Indiz für eine gelungene Messung ist die prozentuale Abweichung der Schichtdicke für die zwei benachbarten  $m$ -s. Je größer dieser Wert ist, desto besser ist das Ergebnis für  $d$ .

Um genauere Resultate zu erhalten, müssten mehrere Messungen mit unterschiedlichen Wellenlängen (Spektroskopische Ellipsometrie) und/oder unter verschiedenen Winkeln (Variable Angle Spectroscopic Ellipsometry = VASE) durchgeführt werden. Mit solchen Methoden lassen sich sowohl absorbierende Schichten, als auch Vielschichtsysteme vermessen. Mittlerweile gibt es eine Vielzahl von hochmodernen Ellipsometern, die solche Messungen teilweise voll automatisch ausführen können. Leider liegen die Kosten für diese Geräte meist über 40.000 €. Da die Funktionsweise dieser Ellipsometer sehr kompliziert ist, und eine Messung mit selbst

zusammengestellten optischen Elementen aufwendig wäre, kann man solche Ellipsometer im Rahmen einer Diplomarbeit schwer konstruieren. Mit dem Bonner Nullellipsometer lassen sich aber einfache Messungen im geeigneten Messbereich sehr schnell und einfach ausführen. Mit etwas Übung benötigt man für eine Messung inklusive Auswertung weniger als 5 Minuten.

# 6 Anhang

## 6.1 Quellcode

### 6.1.1 Eine kurze Einführung in LabVIEW

LabVIEW benutzt, im Gegensatz zu den üblichen Programmiersprachen auf Textbasis die graphische Programmiersprache G. Die Programme, so genannte „virtuelle Instrumente“ (VIs) werden in Blockdiagrammform erstellt. Die Bezeichnung VI kommt daher, dass die Programme in ihrem Erscheinungsbild und in ihrer Funktionsweise tatsächlichen Instrumenten sehr ähnlich sind.

Diese VIs besitzen neben einer interaktiven Benutzeroberfläche ein Datenflussdiagramm, das als Quellcode dient. Durch Icon-Verbindungen können einzelne VIs von VIs höherer Ebenen aufgerufen werden.

Im Einzelnen haben die virtuellen Instrumente folgende Struktur:

- Das **Frontpanel** ist die interaktive Benutzeroberfläche des Programms. Es imitiert die Schalttafel eines Instrumentes, indem es mit Drehknöpfen, Drucktasten, Graphen und anderen Bedienelementen ausgestattet werden kann. Die Dateneingabe erfolgt über die Tastatur und die Maus. Anschließend können die Ergebnisse auf dem Computerbildschirm eingesehen werden.
- Das **Blockdiagramm** enthält die Anweisungen des Programms und ist in G erstellt. Es stellt graphisch den Quellcode dar.
- Die einzelnen VIs sind in hierarchischer Anordnung nutzbar und können als Top-Level-Programme oder Unterprogramme eingesetzt werden. Ein VI, das einem anderen VI untergeordnet ist, wird **SubVI** bezeichnet. Das **Icon** eines virtuellen Instrumentes ist hierbei eine graphische Parameterliste, sodass Daten eines VIs an ein SubVI weitergeleitet werden können.

Somit können komplizierte Anwendungen in eine Reihe von einfachen Teilaufgaben umgewandelt werden, indem man einfach für jede Teilaufgabe ein VI erstellt und diese dann kombiniert. Das resultierende Top-Level-VI besteht aus einer Ansammlung von SubVIs, die die einzelnen Anwendungsfunktionen darstellen [Lab98].

## 6.1.2 Alpha-2.vi

In dem SubVI Alpha-2.vi werden die Koeffizienten  $\alpha_0$  bis  $\alpha_5$  sowie ihre komplex Konjugierten  $\alpha_0^+$  bis  $\alpha_5^+$  berechnet. Aus dem Einfallswinkel  $\varphi_0$  sowie dem Brechungsindex des Substrats  $n_2$  erhält man mit dem Gesetz von Snellius

$$n_0 \sin \varphi_0 = n_2 \sin \varphi_2$$

die Koeffizienten x und y (siehe Abschnitt 2.4):

$$x = -\tan \varphi_0 \cdot \tan \varphi_2 \quad (2.37)$$

$$y = -\frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_0 \cos \varphi_0} \quad (2.38)$$

Der dritte Koeffizient z wird über die gemessenen Winkel des Polarisators ( $\beta_1$  und  $\beta_2$ ) und des Analysators ( $\alpha_1$  und  $\alpha_2$ ) über die Gleichungen 2.19, 2.20, 2.11 und 2.39 berechnet:

$$\Psi = \frac{|\alpha_1| + |\alpha_2|}{2} \quad (2.19)$$

$$\Delta = 2\pi - (\beta_1 + \beta_2) \quad (2.20)$$

$$\rho = \tan \Psi \cdot e^{i\Delta} \quad (2.11)$$

$$z = -\frac{\rho - 1}{\rho + 1} \quad (2.39)$$

Die Alphas berechnen sich folgendermaßen (Gleichung 2.56):

$$\alpha_0 = x^2 y^3 z$$

$$\alpha_3 = x + 2y + xyz$$

$$\alpha_1 = xy^2 + xy^3 z + 2x^2 y^2 z$$

$$\alpha_4 = -y^2 + 2xy + 2xz + x_2 yz + 1$$

$$\alpha_2 = y^2 + 2xy + 2xy^2 z + x^2 yz$$

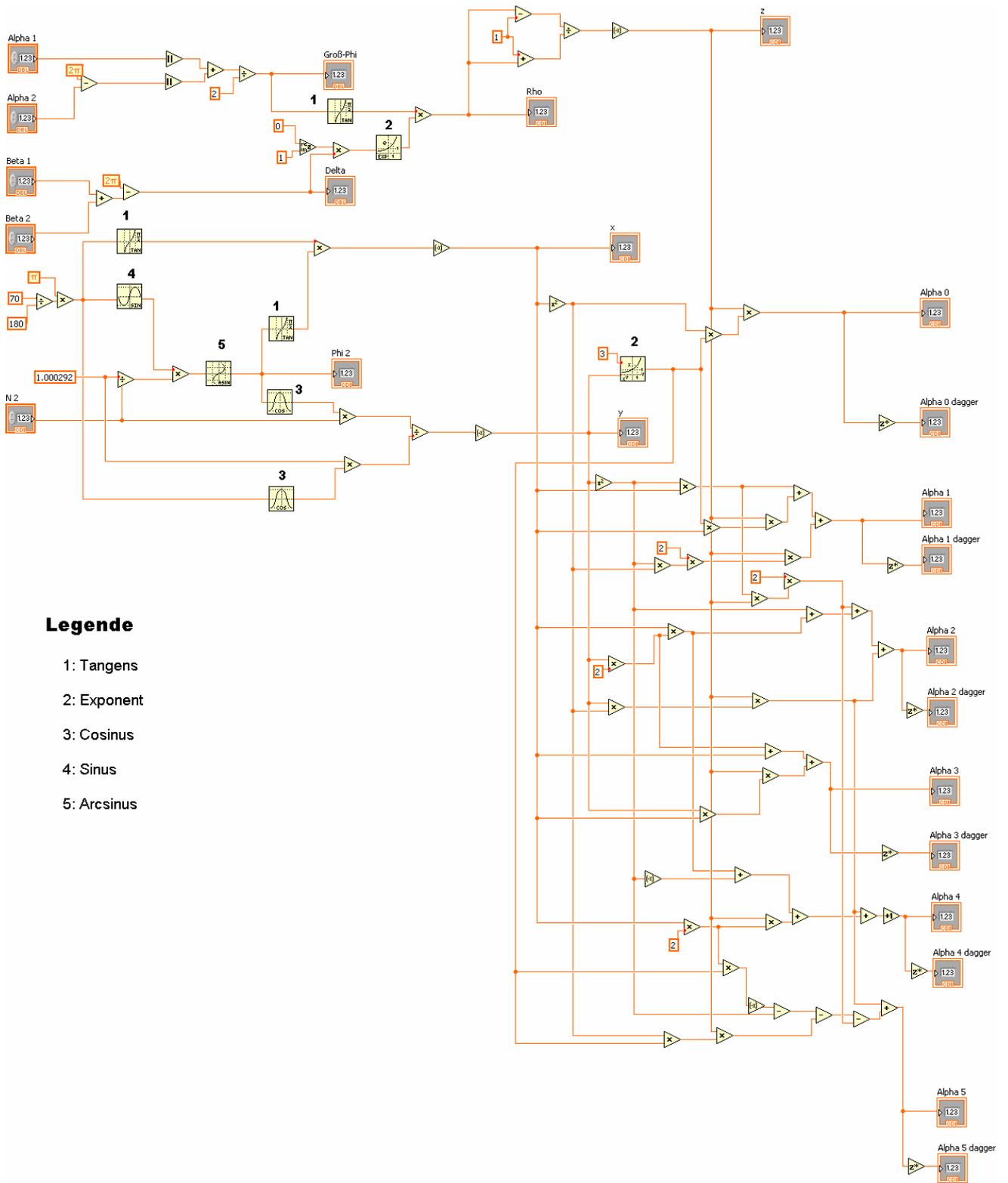
$$\alpha_5 = -2xy^3 - y^2 - x^2 y^3 z - 2xy^2 z + x^2 yz$$

### Input:

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2, Einfallswinkel 70°

### Output:

Groß-Phi, Delta, Rho, x, y, z, Alpha 0-Alpha 5, und Alpha 0 dagger bis Alpha 5 dagger



**Legende**

- 1: Tangens
- 2: Exponent
- 3: Cosinus
- 4: Sinus
- 5: Arcsinus

### 6.1.3 g, f\_2.vi

Im SubVI g, f\_2.vi werden die reellen Koeffizienten g und f ermittelt. Um das Blockdiagramm übersichtlich zu machen wurde das Icon von Alpha-2.vi eingefügt. So erhält man f und g direkt aus den bereits berechneten Alphas.

$$g_0 = \alpha_0 \alpha_1^+ + \alpha_1 \alpha_0^+$$

$$g_2 = \alpha_0 \alpha_3^+ + \alpha_1 \alpha_2^+ + \alpha_2 \alpha_1^+ + \alpha_3 \alpha_0^+$$

$$g_4 = \alpha_1 + \alpha_2 \alpha_3^+ + \alpha_3 \alpha_2^+ + \alpha_1^+$$

$$g_6 = \alpha_3 + \alpha_3^+ \tag{2.58}$$

und

$$f_1 = (-\alpha_0 \alpha_5^+ - \alpha_0 \alpha_2^+ + \alpha_5 \alpha_0^+ + \alpha_2 \alpha_0^+) \cdot i$$

$$f_2 = \alpha_1 \alpha_5^+ - \alpha_0 \alpha_3^+ + \alpha_5 \alpha_1^+ - \alpha_3 \alpha_0^+$$

$$f_3 = (-\alpha_0 - \alpha_2 \alpha_5^+ - \alpha_0 \alpha_4^+ + \alpha_5 \alpha_2^+ + \alpha_4 \alpha_0^+ + \alpha_0^+) \cdot i$$

$$f_4 = \alpha_3 \alpha_5^+ + \alpha_1 \alpha_4^+ + \alpha_5 \alpha_3^+ + \alpha_4 \alpha_1^+$$

$$f_5 = (\alpha_5 - \alpha_0 - \alpha_5^+ - \alpha_2 \alpha_4^+ + \alpha_4 \alpha_2^+ + \alpha_0^+) \cdot i$$

$$f_6 = \alpha_1 + \alpha_3 \alpha_4^+ + \alpha_4 \alpha_3^+ + \alpha_1^+$$

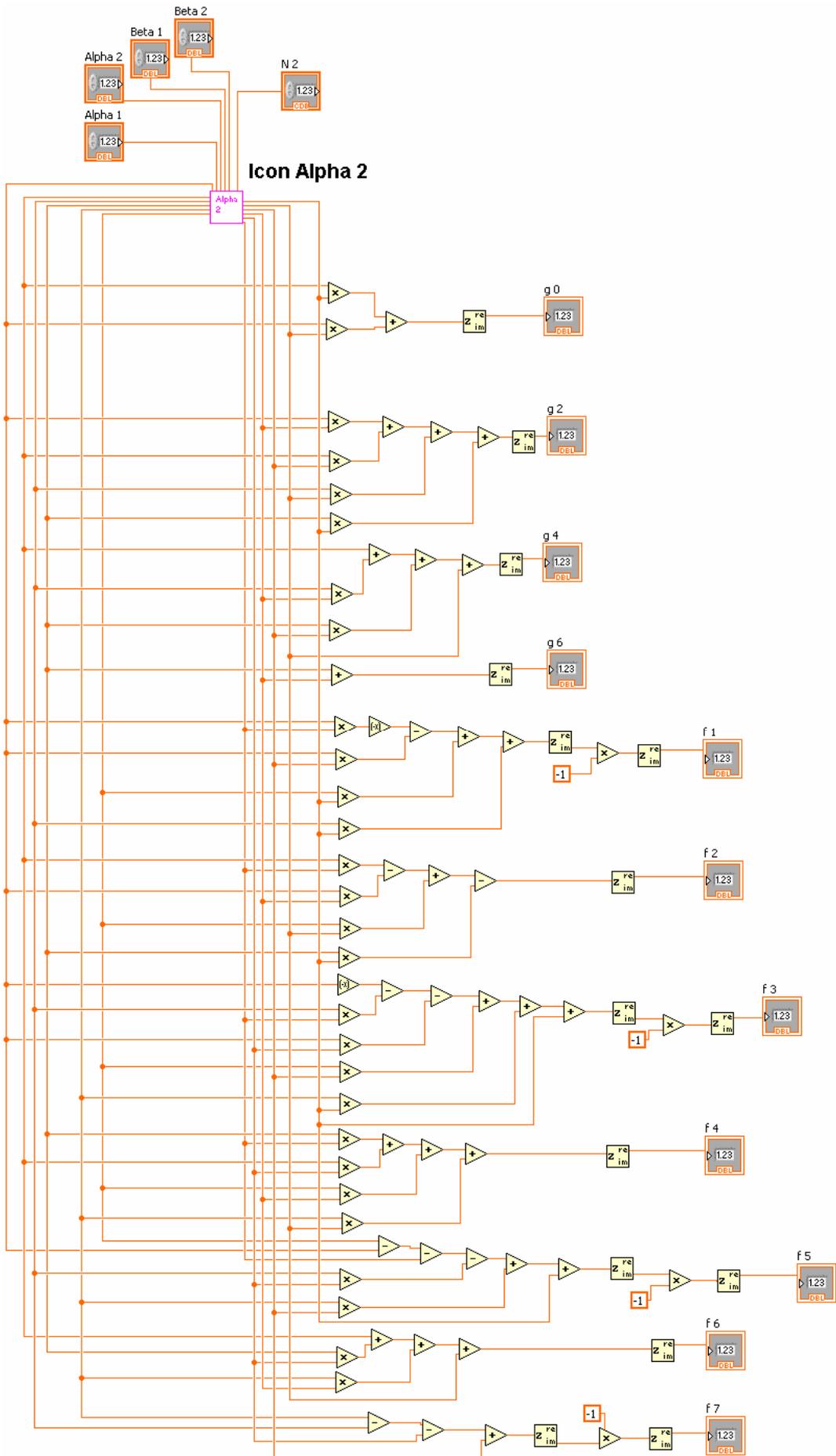
$$f_7 = (\alpha_4 - \alpha_2 - \alpha_4^+ + \alpha_2^+) \cdot i \tag{2.60}$$

#### **Input:**

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

#### **Output:**

$g_0$  bis  $g_6$  und  $f_1$  bis  $f_7$



## 6.1.4 j neu.vi

In diesem SubVI werden die reellen Koeffizienten  $j_0$  bis  $j_6$  berechnet.  
Analog zu g,f\_2 wurde ein Icon verwendet.

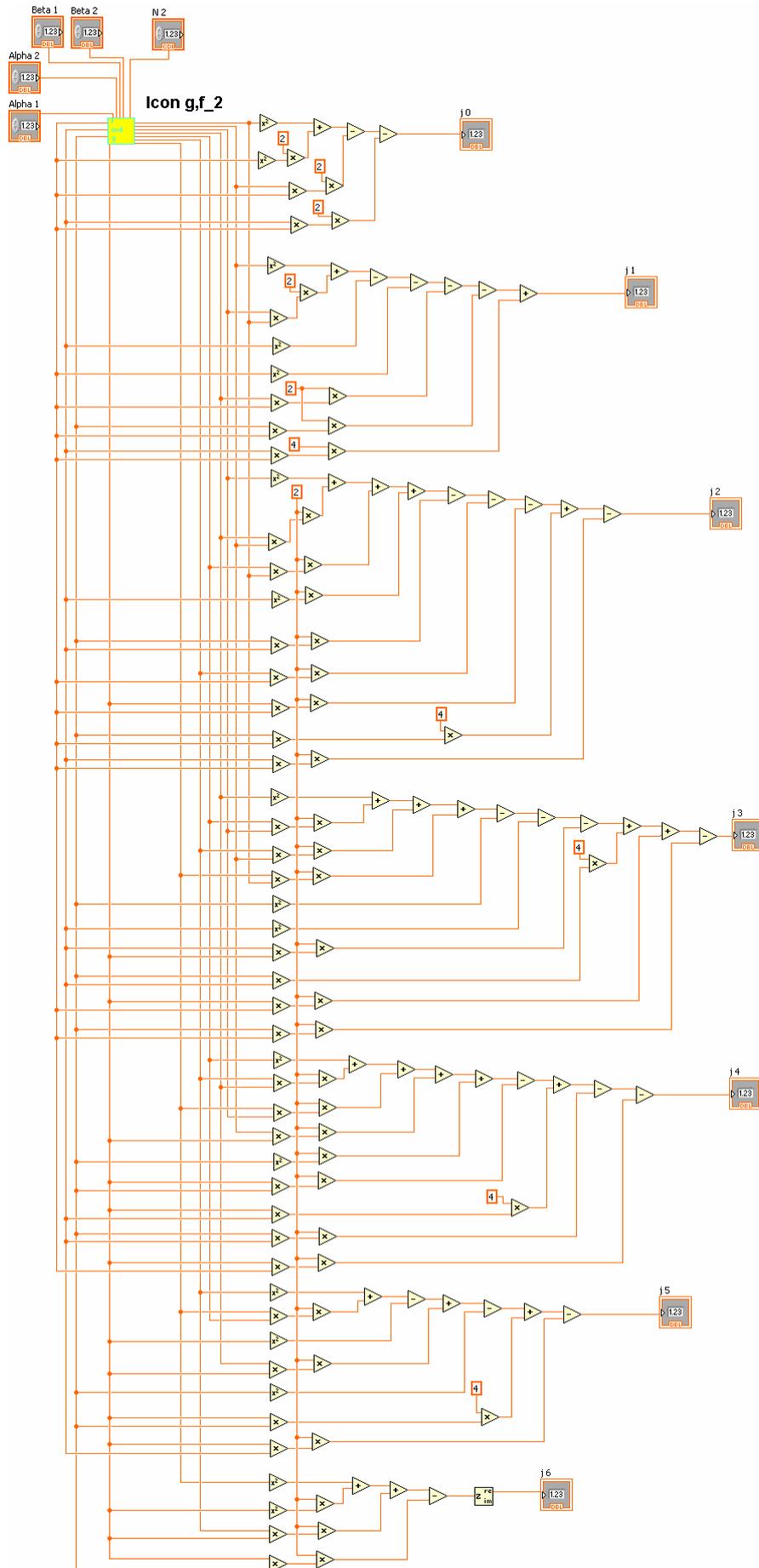
$$\begin{aligned}j_0 &= f_1^2 + 2g_0^2 - 2f_2g_0 - 2g_2g_0 \\j_1 &= f_2^2 + 2f_3f_1 - g_2^2 - g_0^2 - 2f_4g_0 - 2g_4g_0 + 4f_2g_0 \\j_2 &= f_3^2 + 2f_4f_2 + 2f_5f_1 + 2g_2^2 - 2g_4g_2 - 2f_6g_0 - g_6g_0 + 4g_4g_0 - 2g_2g_0 \\j_3 &= f_4^2 + 2f_5f_3 + 2f_6f_2 + 2f_7f_1 - g_4^2 - g_2^2 - 2g_6g_2 + 4g_4g_2 + 2g_6g_0 - 2g_4g_0 \\j_4 &= f_5^2 + 2f_6f_4 + 2f_7f_3 + 2f_2g_6 + 2g_4^2 - 2g_6g_4 + 4g_6g_2 - 2g_4g_2 - 2g_6g_0 \\j_5 &= f_6^2 + 2f_7f_5 - g_6^2 + 2f_4g_6 - g_4^2 + 4g_6g_4 - 2g_6g_2 \\j_6 &= f_7^2 + 2g_6^2 + 2f_6g_6 - 2g_6g_4\end{aligned}\tag{2.63}$$

### **Input:**

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

### **Output:**

$j_0$  bis  $j_6$



## 6.1.5 k neu.vi

Aus den  $j$ -s werden nun die Koeffizienten  $k_0$  bis  $k_5$  ermittelt.

$$k_0 = j_1 - 6j_6x^5y^5 + j_5x^4y^4 - 4j_4x^3y^3 + 3j_3x^2y^2 - 2j_2xy$$

$$k_1 = (j_2 + 15j_6x^4y^4 - 10j_5x^3y^3 + 6j_4x^2y^2 - 3j_3xy)(xy + 1)$$

$$k_2 = (j_3 - 20j_6x^5y^5 + 10j_5x^2y^2 - 4j_4xy)(xy + 1)^2$$

$$k_3 = (j_4 + 15j_6x^2y^2 - 5j_5xy)(xy + 1)^2$$

$$k_4 = (j_5 - 6j_6xy)(xy - 1)^2$$

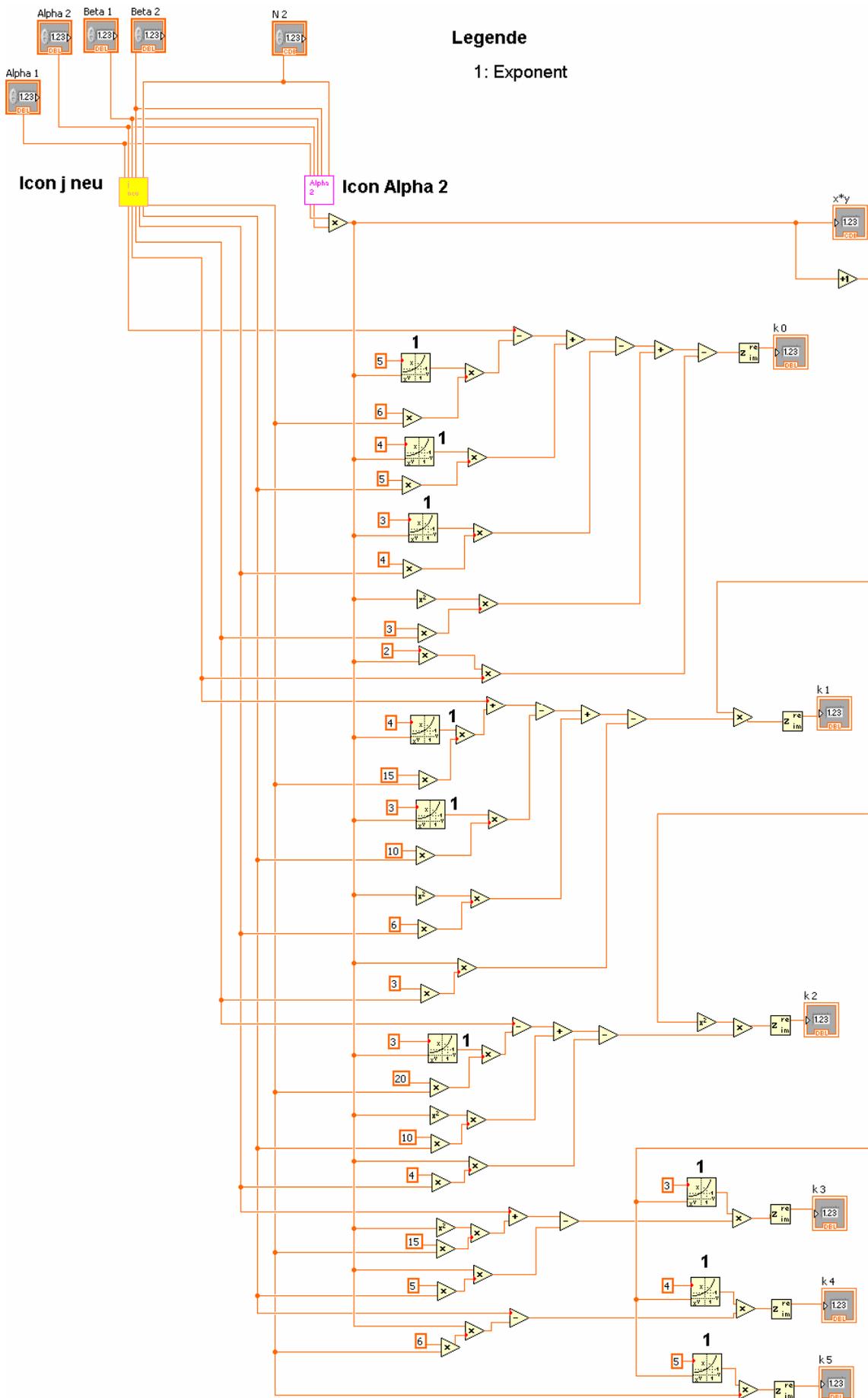
$$k_5 = j_6(xy + 1)^2 \tag{2.66}$$

### **Input:**

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

### **Output:**

$k_0$  bis  $k_5$



## 6.1.6 Epsilon.vi

Die Nullstellen des Polynoms fünften Grades werden über die Funktion „Polynomial Roots“ ermittelt.

$$k_5\varepsilon^5 + k_4\varepsilon^4 + k_3\varepsilon^3 + k_2\varepsilon^2 + k_1\varepsilon + k_0 = 0 \quad (2.65)$$

Zunächst werden die in k neu.vi berechneten Koeffizienten k gebündelt. Dieser Cluster wird anschließend in eine Anordnung (Array) umgewandelt, um die Nullstellen zu berechnen. Dabei können verschiedene Methoden gewählt werden.

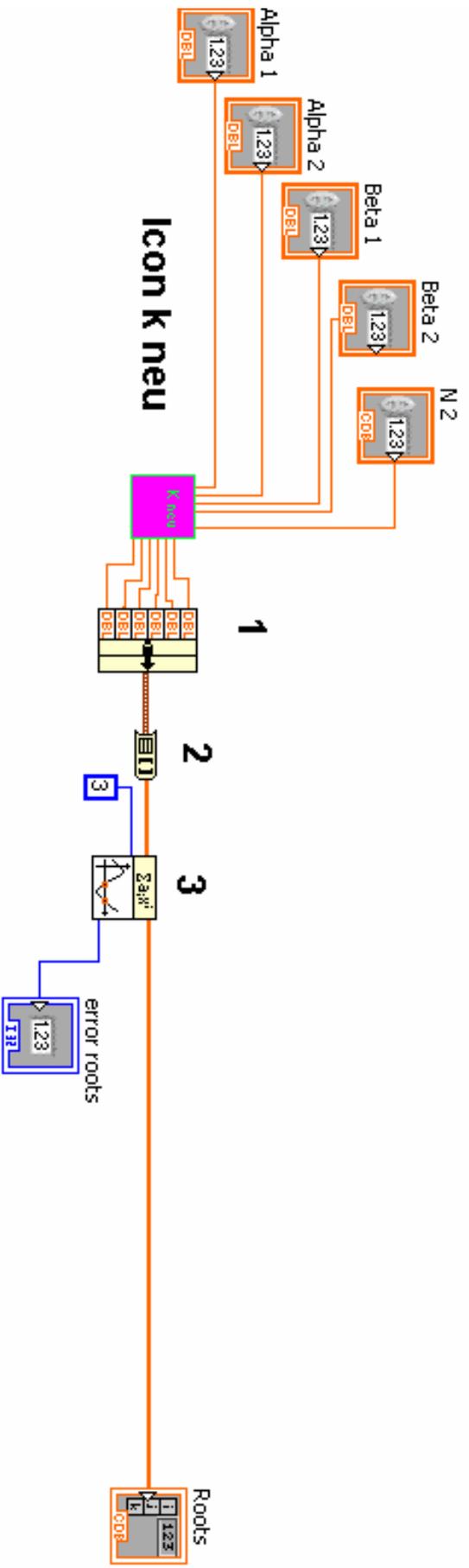
Die 3 steht für „Advanced Refinement“. Hier sind die Lösungen entweder real oder komplex konjugiert. Dieser Lösungsweg ist besonders genau und gut für doppelte Nullstellen geeignet.

### **Input:**

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

### **Output:**

Nullstellen des Polynoms  $\varepsilon_1$  bis  $\varepsilon_5$  als eine Anordnung (Array mit fester Reihenfolge)



**Legende**

- 1: "Bundle to cluster"
- 2: "Cluster to Array"
- 3: "Polynomial Roots"

## 6.1.7 n1+phi1.vi

Über die Beziehung  $\varepsilon = (n_1/n_0)^2$  kann nun der Brechungsindex  $N_1$  der zu vermessenden Schicht bestimmt werden. Dabei muss  $\varepsilon \geq \sin^2 \varphi_0$  gelten.

Im Blockdiagramm wurde die „True/False“ Funktion verwendet, um diese Bedingung zu erfüllen. Zuerst wurden die realen Ergebnisse für  $\varepsilon$  herausgefiltert, anschließend jene, auf die die zusätzliche Bedingung  $\varepsilon \geq \sin^2 \varphi_0$  zutrifft.

Dazu musste die Anordnung in ein Cluster umgewandelt werden, um sie „aufbrechen“ (unbundle) zu können.

Nachdem die geeigneten Nullstellen separiert worden sind, werden die einzelnen Werte wieder in eine Anordnung zusammengefasst, wobei die ursprüngliche Reihenfolge erhalten bleibt.

Für die unbrauchbaren Ergebnisse erscheint auf dem Frontpanel Null.

Anschließend können  $\varphi_1$  und der Parameter  $t$  berechnet werden:

$$n_0 \sin \varphi_0 = n_1 \sin \varphi_1 \quad (2.2)$$

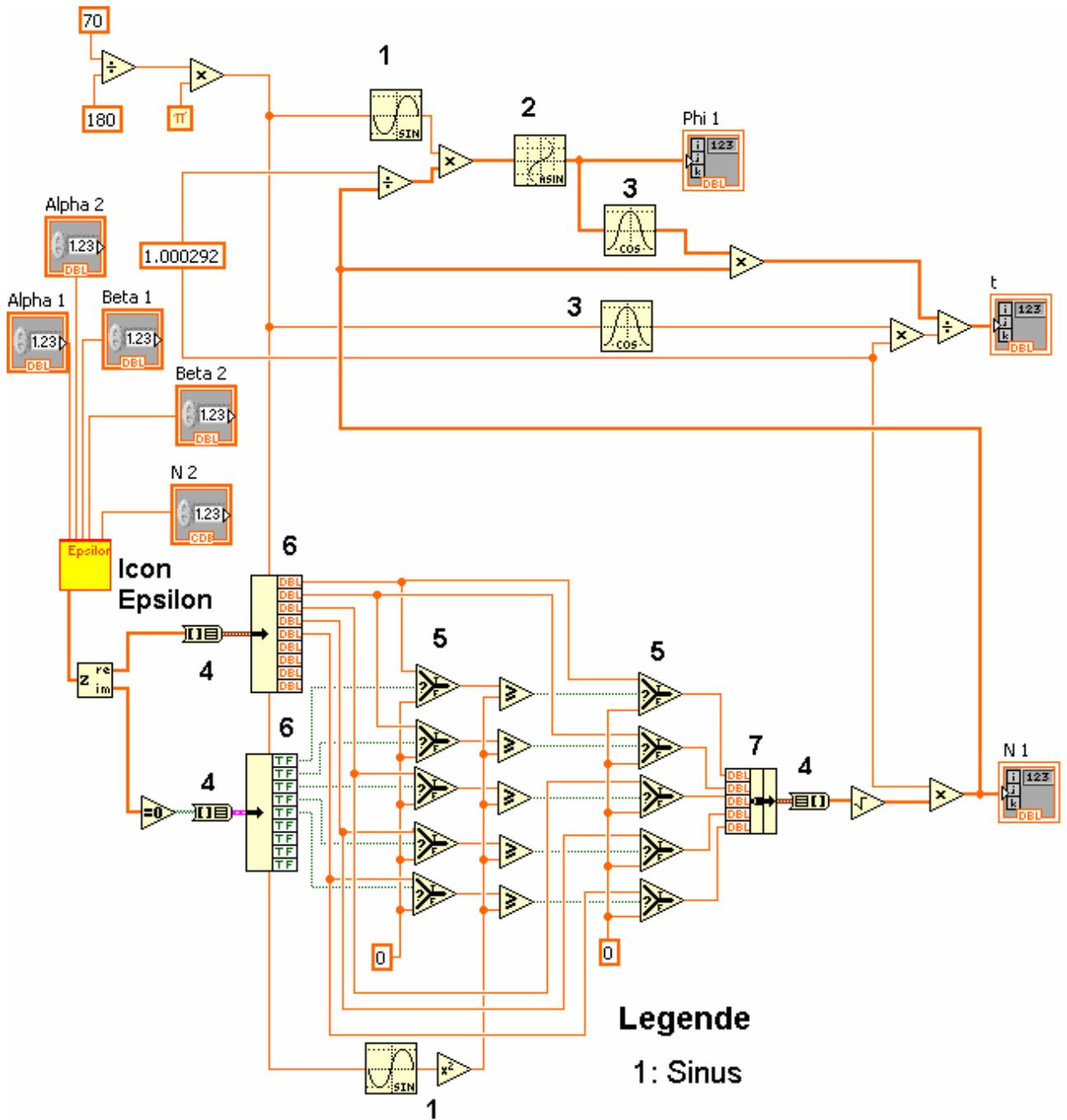
$$t = \frac{n_1 \cos \varphi_1}{n_0 \cos \varphi_0} \quad (2.36)$$

### **Input:**

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

### **Output:**

Phi 1, t, N 1



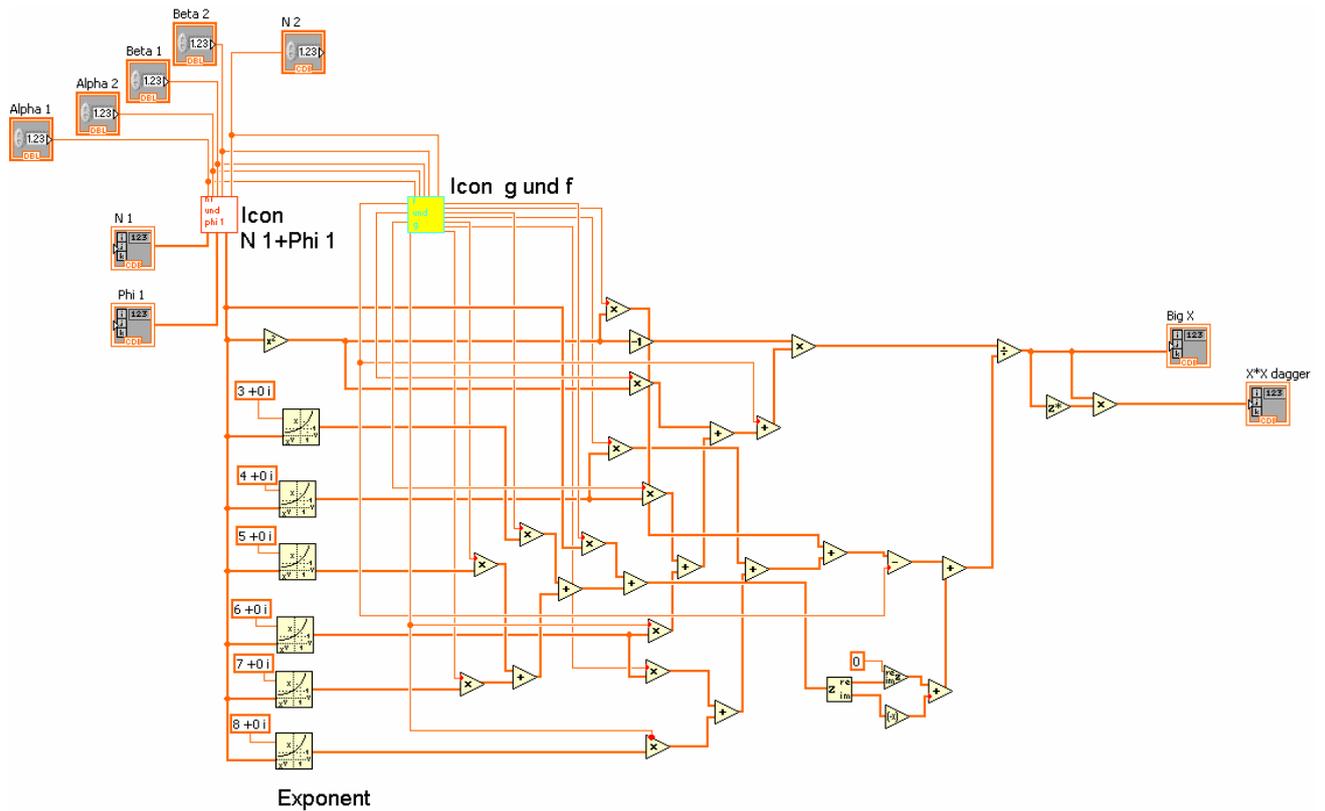
- Legende**
- 1: Sinus
  - 2: Arcsinus
  - 3: Cosinus
  - 4: "Array to Cluster"
  - 5: "True/False"
  - 6: "Unbundle"
  - 7: "Bundle"

## 6.1.8 Big X.vi

Nach der Gleichung (2.69)

$$X = \frac{g_6 t^8 + f_6 t^6 + f_4 t^4 + f_2 t^2 - g_0 - i(f_7 t^6 + f_5 t^4 + f_3 t^2 + f_1) \cdot t}{(t^2 - 1)(g_6 t^6 + g_4 t^4 + g_2 t^2 + g_0)}$$

kann jetzt X berechnet werden.



### Input:

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

### Output:

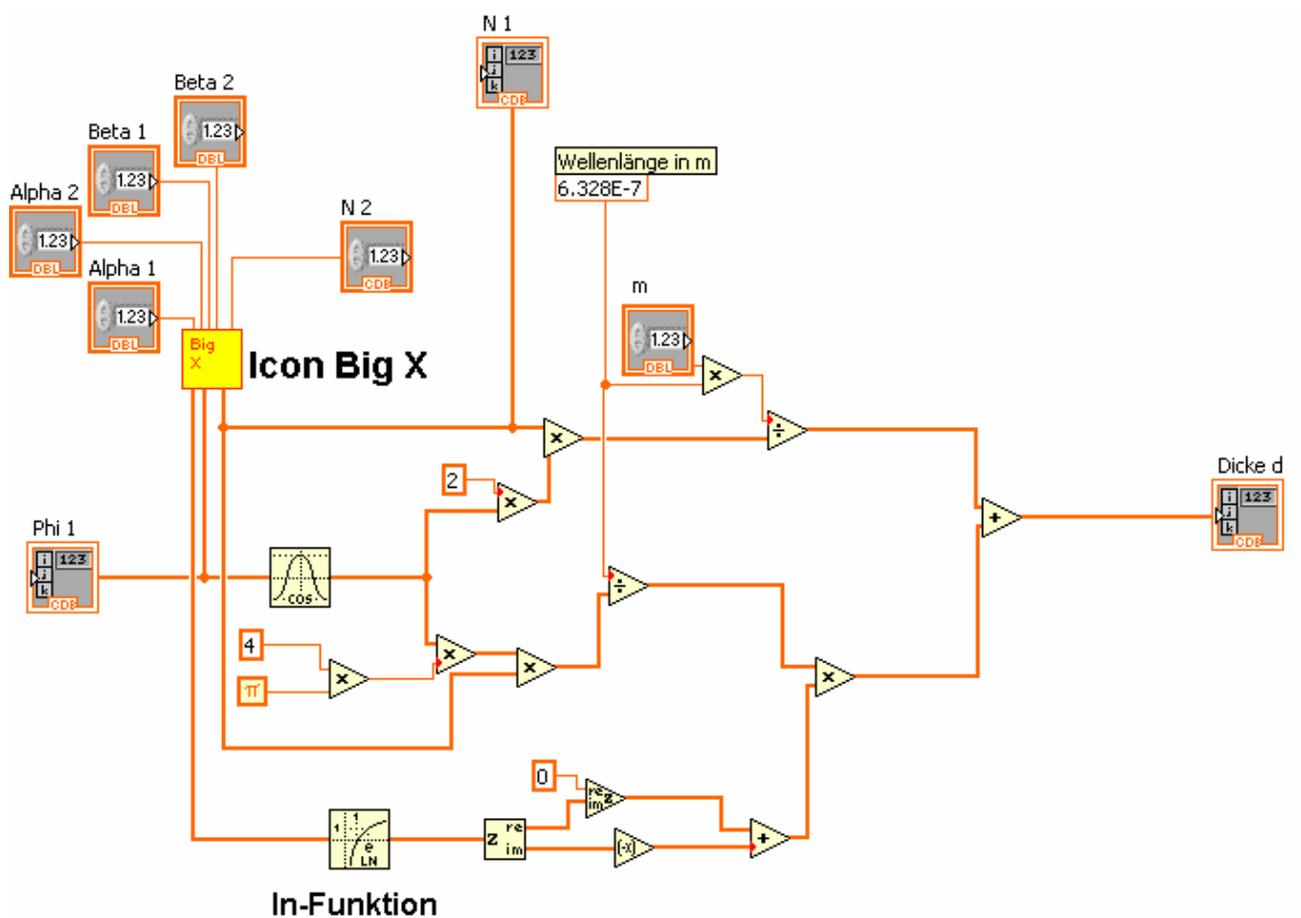
X und  $X \cdot X^+$

## 6.1.9 Dicke D.vi

Mit der Formel

$$d = \left( \frac{1}{4} \cdot \frac{\lambda}{\pi \cdot \cos \varphi_1 \cdot n_1} \right) i \cdot \ln X + \frac{1}{2} \cdot \frac{m \lambda}{\cos \varphi_2 \cdot n_1} \quad (2.67)$$

kann man nun die Dicke d der Schicht bestimmen.



### Input:

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2

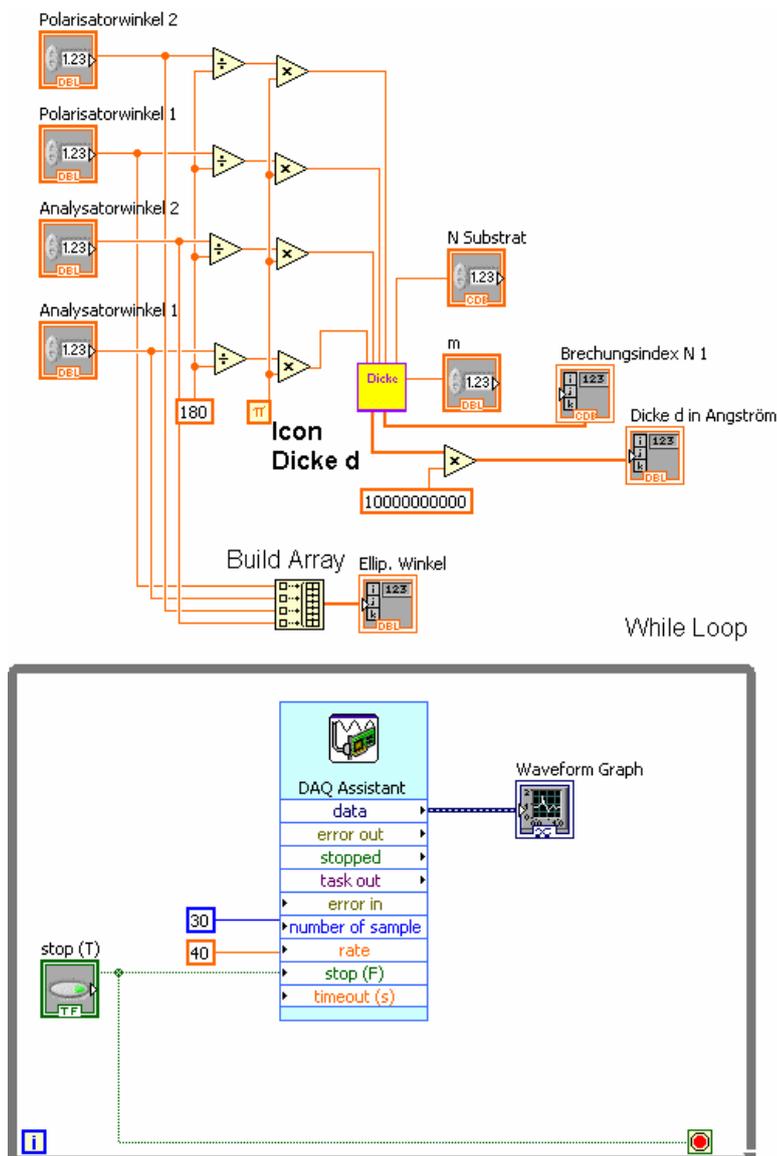
### Output:

Dicke d

## 6.1.10 Frontpanel Elli.vi

Frontpanel Elli.vi ist das finale Top-Level VI. Im oberen Teil des Blockdiagramms wird die Dicke  $d$  der zu vermessenden Schicht in Angström umgerechnet, um übersichtlichere Zahlen als Ergebnis auf dem Frontpanel zu haben. Weiter unten werden die gemessenen Winkel in einem Array zusammengefasst, um die Daten kompakter speichern zu können. Ganz unten ist die Anzeige für die Spannungskurve des Detektors programmiert. Der „While Loop“ bewirkt, dass in ihm das Subdiagramm DAQ Assistent kontinuierlich ausgeführt wird.

Der DAQ-Assistent bestimmt die Rate sowie die Samplezahl des Wandlers, der die Spannung der Photodiode in ein digitales Signal umwandelt. Die Spannungskurve kann auf dem Frontpanel im Diagramm „Waveform Graph“ beobachtet werden.



### Input:

Alpha 1, Alpha 2, Beta 1, Beta 2, N2 und m

### Output:

N 1, d, Messwinkel, Spannungskurve

## 6.1.11 Save Data.vi

Um die Daten einer Messung speichern zu können werden alle Ergebnisse sowie die Messwinkel über das Programm „Save Data“ in eine Excel-Datei gespeichert. Alle Anordnungen werden zu einem weiteren Array zusammengefasst und in einer Matrix gespeichert (siehe Abschnitt 3.2.2.2).



### **Input:**

Kein Input, alles wird aus der SubVI Frontpanle Elli.vi übernommen

### **Output:**

Eine Excel-Datei mit den gespeicherten Werten:

Dicke  $d$  in Angström

Brechungsindex  $N_1$

Gemessene Winkel in der Reihenfolge:

Beta 1, Alpha 1, Beta 2, Alpha 2

## 6.2 Reinigung der Proben

Damit die Ellipsometermessung nicht verfälscht wird, ist eine gründliche Reinigung dringend notwendig. Um eventuelle Verunreinigungen der Probenoberfläche zu beseitigen, muss die Probe einem vierstufigen Reinigungsprozess unterzogen werden. Besonders häufig treten die Verschmutzungen beim Zurechtschneiden der Proben mit der Diamantdrahtsäge auf. Die Probenstücke werden mit feinem Staub vom Schneiden, mit Wasserspritzern und durch Fingerabdrücke verschmutzt.

Die benötigten Chemikalien sind 99%-iges Trichlorethylen  $C_2HCl_3$ , Aceton  $(CH_3)_2CO$ , Isopropanol  $(CH_3)_2CHOH$  sowie destilliertes Wasser.

Als chlorhaltige Verbindung ist Trichlorethylen ätzend. Um Verätzungen an der Haut und den Augen zu vermeiden und um sich vor giftigen Dämpfen zu schützen muss unter dem Abzug gearbeitet werden. Das Tragen von Schutzkleidung ist ebenfalls notwendig. Für die Reinigung wird folgendes benötigt:

- Drei Kunststoffspritzflaschen für Aceton, Isopropanol und destilliertes Wasser
- Ein Sammelbehälter für chlorhaltige Lösungen mit Einfülltrichter
- Ein Sammelbehälter für die übrigen Lösungen mit Einfülltrichter
- Eine leere Kunststoffspritzflasche zum Trocknen der Probe
- Vier Glasschalen
- Zwei Bechergläser
- Ein vorgefertigtes Kunststoffbrett für die Glasschalen
- Eine Pinzette

Für die Reinigung werden die Glasschalen in das Kunststoffbrett gelegt und die Lösungen eingefüllt. Um Verwechslungen zu vermeiden sind die Namen der Chemikalien in das Brett eingraviert. Die Proben dürfen nur am Rand mit der Pinzette berührt werden, damit die zu vermessende, meist sehr dünne Schicht nicht beschädigt wird.

Zunächst wird die Probe zwei Minuten lang in Trichlorethylen bewegt und danach mit einer Ecke auf Löschpapier gelegt, damit die Tropfen abfließen können. Anschließend wird die Probe über dem ersten Becherglas mit Aceton abgespült. Das Becherglas sollte gekennzeichnet werden, damit sich nur in diesem Behälter Trichlorethylenrückstände befinden. Nachdem die Probe zwei Minuten lang in Aceton bewegt worden ist, soll die Probenecke erneut an Löschpapier abgetupft und die Probe über dem zweiten Becherglas mit Isopropanol abgespült und anschließend fünf Minuten lang in Isopropanol bewegt werden. Danach erneut an Löschpapier abtupfen und mit destilliertem Wasser über dem zweiten Becherglas abspülen. Zum Schluss eine halbe Minute in destilliertem Wasser bewegen und wieder auf Löschpapier abtupfen.

Danach wird die Probe mit der Pinzette festgehalten und mit der Kunststoffspritzflasche auf einer sauberen Unterlage getrocknet.

Bei der Entsorgung ist darauf zu achten, dass der Inhalt des ersten Becherglases und das Trichlorethylen in den Sammelbehälter für chlorhaltige Lösungen geschüttet werden. Alle übrigen Reste kann man in den zweiten Sammelbehälter entleeren. Das verwendete Löschpapier muss unter dem Abzug getrocknet werden, um eventuelle Reaktionen mit anderen Chemieabfällen zu vermeiden. Alle Behälter und das Kunststoffbrett werden mit Spülmittel abgewaschen [Kern92].

## 6.3 Spezielle Werkzeuge und Hilfsmittel

### Laserbrille

Um eventuelle Augenschäden beim Arbeiten mit dem Laser zu vermeiden soll stets eine Laserbrille getragen werden. Sie stammt von der Firma Laservision (Modell P0 16203, Katalog 1996) und ist speziell für den von uns verwendeten Helium-Neon Laser der Wellenlänge 632,8 nm und Leistungen bis zu 10 mW hergestellt worden.

### Justierkreuz

Dieser 140 mm hohe Aluminiumstab wird zur Justage der Höhe des Laserstrahles benötigt. Im oberen Bereich befindet sich ein schwarzer Kunststoffstreifen, in dem untereinander drei Kreuze unterschiedlicher Dicke eingraviert sind.

### Feinwinkelmesser

Der Feinwinkelmesser der Firma Mitutoyo kann in der Feinmechanikwerkstatt ausgeliehen werden. Er ist insbesondere für die Justage des Brewsterfensters gedacht.

### PVC-Justierhilfe für den Feinwinkelmesser

Diese Justierhilfe aus PVC dient zur Einjustierung des Brewsterfensters (Abschnitt 6.5). Sie ist 214 mm hoch, 100 mm breit und 30 mm tief. An der unteren Kante hat sie eine 25 mm×8 mm große Nut, mit der sie auf der optischen Bank aufgesetzt werden kann. Diese ist für den Feinwinkelmesser gedacht. Oben auf die erniedrigte Stufe wird die Drehscheibe mit der Winkelskala gelegt. Der lange Schenkel des Feinwinkelmessers wird in die Nut geschoben, die sich etwas oberhalb der Stufe befindet. Die herumlaufende Nut (5 mm) ist für den 90°-Winkelmesser gedacht. Ein 90°-Winkel ohne Anschlag kann in dieser Nut ebenfalls verwendet werden.

### 90°-Winkel

Die Schenkel dieses Präzisionswinkels der Firma Gödde messen 70 mm und 100 mm und besitzen einen Anschlag. Der 90°-Winkel dient zur Justage der optischen Elemente senkrecht zum Verlauf des Laserstrahls.

### PVC-Justierhilfe für den 90° Winkel

Die Maße dieser Justierhilfe sind 195 mm×103 mm×25 mm. Sie besitzt außerdem eine 7 mm×8 mm große Nut, mit der sie auf die optische Bank angebracht werden kann. Zur Justage der optischen Komponenten wird der Anschlag des 90°-Winkels mit Zeige- und Mittelfinger parallel zur 103 mm langen Kante auf der Seite der optischen Bank an die senkrechte Fläche der PVC-Justierhilfe gedrückt. Dabei berührt der 10 cm lange Schenkel des Winkels den zu justierenden Halter des jeweiligen optischen Elements. Die große Schraube am Ständer ist dabei zunächst geöffnet und kann nach der Justage mit der freien Hand festgezogen werden.

## Optische Bank aus Holz

Für die Justage des Polarisators mittels der Brewstermethode wird eine zweite optische Bank benötigt. Auf ihr wird eine Irisblende befestigt, um den Strahl auszublenden, der auf der vom Laser abgewandten Seite des Brewsterfensters reflektiert wird.

## Schwarze Kunststoffstreifen für die Lambda/4-Plättchen und das Glan-Thompson-Prisma

Diese Kunststoffstreifen dienen zur Befestigung/Lösung der Lambda/4-Plättchen und der Glan-Thompson-Optik im Polarisator und Analysator in ihren jeweiligen Adaptern.

## Brewsterfenster

Das Brewsterfenster wird zur Justage des Polarisators benötigt. Es wird auf einem Linsenhalter (07 LHF 007) montiert. Der Durchmesser beträgt 25 mm bei einer Dicke von 6 mm. Bei der hier verwendeten Wellenlänge von 632,8 nm hat das Schottglas BK 7 (02 WBK 224) einen Brechungsindex von  $n=1,51509$ .

## Kunststoffbrett und Glasschalen für die Probenreinigung

Zur Probenreinigung wird ein 500 mm×122 mm×20 mm großes Kunststoffbrett mit vier runden Vertiefungen für Glasschalen verwendet. Die benötigten vier Glasschalen dürfen einen Durchmesser von maximal  $d=101$  mm haben.

## 6.4 Geräteliste

Die Spezifikationsnummern der einzelnen Geräte beziehen sich auf den Katalog von 1995/96 der Firma Melles-Griot [MeG95].

### Laser

Der im Aufbau verwendete Helium-Neon Laser (05 LHP 121) besitzt eine Wellenlänge von  $\lambda = 632,8$  nm und eine Leistung von 2 mW. Da er zur Gefahrenklasse IIIA gehört, darf er nur mit einer geeigneten Laserbrille betrieben werden. Die Langzeitstabilität in der Frequenz beträgt  $\pm 2\%$ . Der Laserstrahl ist mit einem Polarisationsverhältnis von 500/1 linear polarisiert, wobei sich diese leichte Elliptizität nicht auf die Messung auswirkt. Um Intensitätsschwankungen zu vermeiden, sollte die Messung erst nach einer 15-minütigen Aufwärmphase beginnen. Der Laserhalter (07 HLH 001) hat zwei Halterringe mit je drei Justierschrauben aus Kunststoff, die zur Justage dienen. Diese dürfen während der Messung auf keinen Fall verstellt werden, da sonst eine erneute Justage erforderlich ist. Das zugehörige Netzteil (05 LPL 911-065) darf nur dann eingeschaltet werden, wenn der Laser angeschlossen ist. Die Spannungsversorgung kann mit einem Schlüssel verriegelt werden.

### Glan-Thompson-Polarisator

Sowohl in dem Analysator als auch im Polarisator befinden sich zwei aneinander gekittete Glan-Thompson-Prismen (Glan-Thompson-Polarisator) aus doppelt brechendem Kalkspat, deren optische Achse parallel zu den Einfallsebenen steht. So wird die einlaufende Welle in zwei Strahlen aufgespaltet, wobei die Welle mit senkrechter Schwingungsrichtung zur optischen Achse an der Kittschicht totalreflektiert wird. Der Wellenanteil, dessen Schwingungsrichtung parallel zur optischen Achse liegt, durchläuft die Optik ohne merklichen Verlust.

Die hier verwendeten Prismen (03 PTH 109/A) haben eine lichtdurchlässige Einfallfläche von 25 mm<sup>2</sup>. Sie besitzen ein Minimum an Gitterfehlern und haben keine sichtbaren Streuzentren, was eine hohe Reinheit des transmittierten Strahles gewährleistet. Des Weiteren haben sie eine Antireflexionsbeschichtung. Mit speziellen Kunststoffstreifen (Abschnitt 6.3) werden die Prismen in die jeweiligen Adapter (07 HPP 002) befestigt, der anschließend in einen Polarisationshalter (07 HPT 001) geschraubt wird. Dieser Halter besitzt eine drehbare 360°-Einteilung und kann mit einer Feststellschraube fixiert und anschließend mit einer Mikrometerschraube in einem Bereich von 15° genau eingestellt werden. Die Skala kann mit einer Genauigkeit von 5'(0,12°) abgelesen werden.

### Irisblende

Um eventuell auftretende Lichtreflexe im Messaufbau abzuschirmen wird hinter dem zweiten Lambda/4-Plättchen und vor dem Analysator je eine Irisblende (04 IDC 000) angebracht. Der Durchmesser der lichtdurchlässigen Öffnung wird durch Drehen am Außenring variiert. Die größt mögliche Öffnung beträgt 8 mm, die kleinste 0,7 mm. Die Ständer für die Blenden wurden in der Werkstatt des HISKP angefertigt.

## Lambda/4-Plättchen

Die hier verwendeten Lambda/4-Plättchen (02 WQR 003/633) bestehen aus doppelbrechendem Kalkspat und besitzen einen Durchmesser von 10 mm. Die Plättchen zerlegen eine linear polarisierte ebene Welle in eine Parallel- und eine Senkrechtkomponente zur optischen Achse. Nach dem Verlassen der Plättchen eilt die parallele Komponente der senkrechten um  $90^\circ$  voraus. Die Optik ist speziell auf die Wellenlänge 632,8 nm angepasst. Am Rand haben die Plättchen eine kleine Einkerbung, deren Mittelsenkrechte die Richtung der optischen Achse angibt.

Sie werden mit einem Kunststoffstreifen (Abschnitt 6.3) in einem Adapter (07 HPA 001) befestigt, der dann in einen Halter (07 HPR 001) eingeschraubt wird. Diese Halterung besitzt ebenfalls eine  $360^\circ$ -Skaleneinteilung und kann mit einer Fixierschraube festgestellt werden.

## Optische Bänke, Reiter und Ständer

Die hier optische Bank besteht aus zwei Teilen. Die rechte Hälfte ist 75 cm lang (07 ORN 005) und verläuft horizontal, die linke Hälfte ist 25 cm lang (07 ORN 001) und ist geneigt, um dem Strahlenverlauf nach der Reflexion zu folgen.

Auf der optischen Bank werden acht Reiter (07 OCN 501) montiert, wobei vor allem bei der geneigten Hälfte darauf geachtet werden muss, dass nach jedem Verstellen oder Anmontieren die Schrauben festgezogen werden, da sonst die Komponenten durch Abrutschen beschädigt werden können.

Der Laser ist auf einem 8 cm langen Ständer (07 PHL 006) mit einem Innendurchmesser von 22 mm montiert. Für die optischen Elemente stehen vier 8 cm lange Ständer (07 PHL 006) auf der geneigten Seite und drei 12 cm lange Ständer (07 PHS 008) auf der waagerechten Seite zur Verfügung. Die Ständer haben jeweils einen Innendurchmesser von 12 mm.

## Photodiode

Die maximale Empfindlichkeit der ca.  $7,8 \text{ cm}^2$  großen quadratischen Photodiode aus Silizium liegt bei einer Wellenlänge von 780 nm. Für die hier verwendete Wellenlänge von 632,8 nm beträgt die Empfindlichkeit ungefähr 85%, was auch bei schwacher Intensität einen gut messbaren Photostrom liefert [AEG79]. Bei gekreuzter Polarisator-Analysator Stellung sind Polarisatordrehungen von bis zu  $1'$  messbar. Ein Öffnungswinkel von  $120^\circ$  gewährleistet eine optimale Signalverarbeitung, obwohl die Diode nach dem Anlöten auf eine Lemobuchse nicht ganz senkrecht auf dem Strahlengang sitzt.

Bei der Bestrahlung mit einer klx Beleuchtungsstärke bei Normlicht A beträgt die Leerlaufspannung 400 mV und der Kurzschlussstrom 80 mA. Der Hellsperrstrom beträgt  $85 \mu\text{A}$  und die Sperrspannung 5 V.

## Digital-Analog Wandler (DAC)

Um das Detektorsignal auf den Computerbildschirm zu übertragen benötigt man einen DAC, um das analoge Ausgangssignal des Verstärkers zu digitalisieren.

Hierfür wurde der NI USB-6008 von National Instruments verwendet. Er besitzt acht „single ended“ bzw. vier differentielle analoge Eingänge und ebenso viele digitale Ausgänge, desweiteren eine Input Auflösung von 12 bit und eine maximale Sampling Rate von 10 kS/s [Ni09].

Die maximale Eingangsspannung beträgt 10 V, mit einem Überspannungsschutz bis 35 V.

Die Stromversorgung und der Anschluss des USB-6008 an den Computer erfolgt über einen 2.0 USB Port.

## Verstärker

Das Laserlicht wird hinter dem Analysator durch die Siliziumphotodiode detektiert. Bei vollem Lichteinfall beträgt das Detektorsignal 0,4 V. Sind Polarisator und Analysator in Auslöschungsstellung, beträgt das Signal nur noch weniger als einen mV. Ein Verstärker ist daher dringend notwendig. Es wird ein logarithmischer Verstärker nach dem Vorbild des manuellen Ellipsometers der University of Surrey in Guildford/England verwendet [Men96].

Der Verstärker arbeitet mit einem Transistor, der die exponentielle Abhängigkeit des Kollektorstromes  $I_C$  von der Basis-Emitter-Spannung  $U_{BE}$  ausnutzt [Tiet74].

Es gilt:

$$I_C = I_{EC} \cdot \exp(U_{BE}/U_T) \quad \text{für} \quad U_{BE} > 0$$

Mit dem Emitterstrom  $I_{EC}$  und der Temperaturspannung  $U_T$ .

Für die Ausgangsspannung  $U_A$  ergibt sich:

$$U_A = -U_T \ln \frac{U_E}{I_{EC} R_1}$$

Da die Eingangsspannung des Digital-Analog Wandlers 10 V nicht überschreiten darf, gilt für die Verstärkung der Eingangsspannung:

$U_E$ [mV]	0,05	0,5	5,0	50	500
$U_A$ [V]	1,0	2,8	5,0	7,5	10,0

Dabei muss der Regler der +/- Anzeige auf dem minus Anschlag stehen. Der Verstärker wurde in der Elektronikwerkstatt des HISKP gebaut.

## 6.5 Justage

### Laser

Der Laserstrahl muss parallel zur optischen Bank eingestellt werden. Dafür verwendet man das in 6.3 beschriebene Justierkreuz.

Zuerst wird der Laser in den Laserhalter eingesetzt. Dieser Halter wird am äußersten Ende der horizontalen optischen Bank befestigt. Mit Hilfe der drei Justierschrauben wird der Laser in den Halteringen nach Augenmaß möglichst waagrecht festgeschraubt.

Dann wird das Netzgerät des Lasers an den Laser sowie an das Netz angeschlossen und der Laser wird eingeschaltet. Man darf nicht vergessen, dass ab jetzt die Laserbrille getragen werden muss. Zur Stabilisierung des Laserstrahls sollte man 15 Minuten warten.

Anschließend wird der Halter in seinem Ständer so hoch eingestellt, dass der Strahl ca. 3mm über der Vertiefung des Mittelstages auf der Probenplatte auftrifft. Die  $\mu\text{m}$ -Schraube des Schiebers steht für die parallele Translation auf 3 mm, die für die senkrechte auf 6 mm.

Um den Messstrahl parallel zur optischen Bank einzustellen wird nun ein Höhenfeststerring am Justierstab befestigt. Danach wird der Stab in einen Ständer nahe am Laser so eingeschraubt, dass der Laserstrahl genau in die Mitte des obersten Kreuzes auftrifft. Dieser Ständer wird dann in eine laserferne Position geschoben (also ganz links auf der horizontalen optischen Bank). Der Laser wird mittels der kleinen Justierschrauben an den Halteringen justiert, damit der Strahl in der Mitte des Kreuzes auftrifft. Der Justierstab wird so lange hin- und hergeschoben, bis auf dem gesamten Weg der Strahl in der Mitte des Kreuzes bleibt. Für eine noch genauere Einstellung kann man diesen Vorgang für die beiden kleineren Kreuze wiederholen.

Danach dürfen alle Schrauben der Laserhalterung nicht mehr aufgemacht und verstellt werden, da sonst die Parallelität des Messstahles nicht mehr gewährleistet ist. Ebenso sollten Stöße gegen den Laser vermieden werden. Der Fehler in vertikaler und horizontaler Richtung liegt bei  $0,03^\circ$  [Men96].

Nach der Justage des Lasers wird der Detektor über den Verstärker und den DAQ an den Computer angeschlossen. Das Programm wird auf „Dauerbetrieb“ gestellt, um den Intensitätsverlauf des Laserlichtes beobachten zu können.

Die optischen Komponenten werden so in den Strahlengang eingesetzt, dass die Winkelskalen ihrer Halter auf der dem Laser abgewandten Seite liegen.

### Erstes Lambda/4-Plättchen

Das erste Lambda/4-Plättchen, der Analysator sowie der Polarisator werden nun zusammen mit einer Höhenfeststellschraube auf je einen 12 cm großen Ständer montiert. Der Detektor (ebenfalls auf einem 12 cm Ständer) wird in den Strahlengang gebracht und der Verstärker eingeschaltet. Die +/- Anzeige muss ganz auf minus gedreht werden.

Der Polarisator wird zwischen dem Laser und dem Detektor so auf Strahlhöhe gebracht, dass der Messstrahl den Kristall auch bei einer vollen Azimutdhrehung ganz trifft. Mit Hilfe des  $90^\circ$ -Winkels und der PVC-Justierhilfe wird der Polarisator senkrecht zum Strahl gedreht. Dann wird der Polarisator in die Auslöschungsstellung  $P_A$

zur Polarisationssebene des Lasers gedreht. Anschließend wird der Winkel  $P_A - 45^\circ$  eingestellt.

Jetzt befestigt man den Analysator zwischen Polarisator und Detektor und justiert ihn wie den Polarisator senkrecht zum Strahl. Der Auslöschungswinkel vom Analysator wird eingestellt und das Lambda/4-Plättchen zwischen die Optiken platziert (Abbildung 6.1).

Nach der Justage senkrecht zum Strahl dreht man so lange am Skalenring, bis auf dem Computerbildschirm ein Intensitätsminimum angezeigt wird. Die Skala wird mit einer Feststellschraube fixiert.

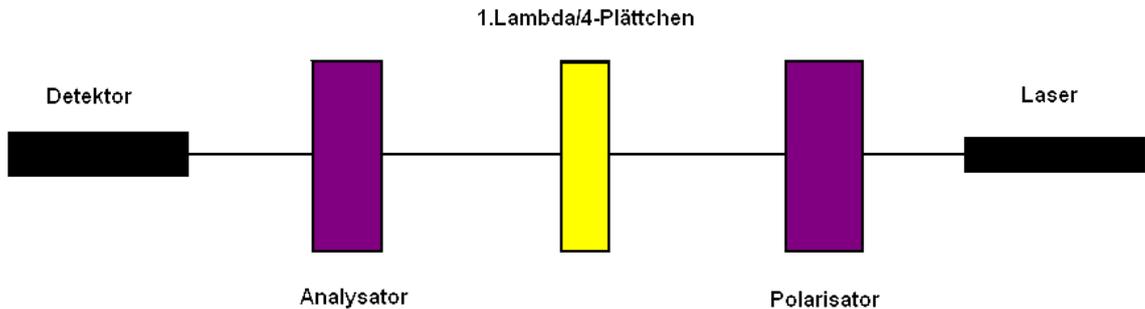


Abbildung 6.1: Anordnung der optischen Elemente bei der Justage des ersten Lambda/4-Plättchens

## Brewsterfenster

Das Brewsterfenster wird in die vorhergesehene Halterung eingesetzt und auf der waagerechten optischen Bank auf Strahlhöhe gebracht. Der Höhenfeststeller wird festgeschraubt, die darunter liegende größere Schraube offen gelassen.

Jetzt wird das Brewsterfenster mit der Hilfe der PVC-Justierhilfe und dem Feinwinkelmesser  $33,43^\circ \approx 33^\circ 26'$  zu dem Laserstrahl gedreht. Dazu wird die Justierhilfe mit dem Feinwinkelmesser so an das Brewsterfenster gelegt, dass die Justierhilfe senkrecht auf der optischen Bank steht. Der Feinwinkelmesser muss auf der unteren Stufe der Justierhilfe aufliegen und darf horizontal nicht gekippt werden. Der lange Schenkel wird so eingestellt, dass er nicht über den kurzen Schenkel hinausragt und ganz in der Nut der Justierhilfe liegt. Der kurze Schenkel berührt das Brewsterfenster jetzt ganz genau.

Bei der Einstellung des Winkels sind die  $26'$  genau dann erreicht, wenn der  $25'$  Strich gerade nicht mit dem  $0'$  Justierstrich zur Deckung kommt.

Eine zweite Person kann nun die untere Schraube festdrehen. Die Anordnung der optischen Geräte und der Hilfsmittel ist in Abbildung 6.2 dargestellt.

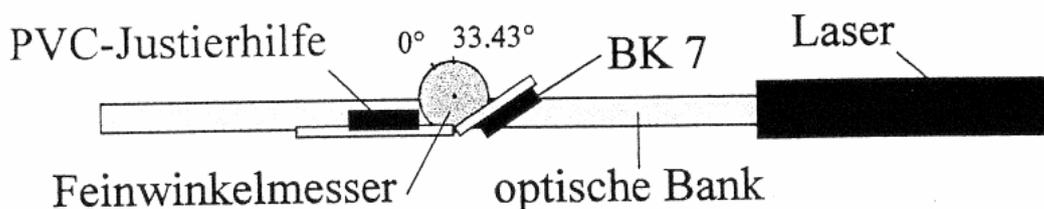


Abbildung 6.2: Anordnung für die Einstellung des Brewsterfensters [Men96]

## Polarisator

Die Justage des Polarisators muss sehr sorgfältig durchgeführt werden, da alle späteren Messungen darauf aufbauen. Der Raum muss deshalb komplett abgedunkelt werden. Das justierte Brewsterfenster teilt den Laserstrahl in zwei Anteile. Der Hauptstrahl wird an der lasernahen Oberfläche reflektiert, der Nebenstrahl an der Rückseite des Brewsterfensters. Der Detektor wird auf einem Ständer auf die optische Bank aus Holz montiert und in den Hauptstrahl gestellt. Vor den Detektor wird eine Irisblende so eingestellt, dass der Nebenstrahl ausgeblendet wird.

Mit einer der für die Optiken angefertigten Kunststoffstreifen wird der Fixierring geöffnet, welches das Glan-Thompson-Prisma im Adapter einschließt, um die Polarisatoroptik im Halter grob zu einzustellen. Man geht folgendermaßen vor:

Zuerst werden die Adapterschrauben leicht gelöst und der Adapter im Halter so gedreht, dass sie mittig in der Schraubensührungsschiene liegen. Die Schrauben werden festgedreht und der Halter mit der Skala nach oben auf eine saubere Unterlage gelegt. Dann schraubt man das Glan-Thompson-Prisma mit dem Kunststoffstreifen aus dem Adapter heraus und legt es zunächst auf die Unterlage. Danach wird das Prisma so in den Adapter gelegt, dass die kleinen eingravierten Striche, die für die Polarisationsebene stehen, ungefähr in die  $0^\circ$ -Skalenrichtung zeigen. Jetzt muss man den weißen Abstandsring auf die Optik legen und alles mit dem schwarzen Fixierring festdrehen. Danach setzt man den Polarisator zwischen das erste Lambda/4-Plättchen und das Brewsterfenster und stellt es mit Hilfe des  $90^\circ$ -Winkels und der PVC-Justierhilfe senkrecht zum Laserstrahl ein.

Nach dieser groben Einstellung wird der Polarisator auf  $90^\circ \pm 1'$  eingestellt und die Skalierung festgedreht. Danach erfolgt die Feinjustage, die sehr sorgfältig durchgeführt werden muss. Dazu müssen alle Lichter ausgemacht werden. Die Adapterschrauben werden zunächst leicht gelöst. Der ca. 0,5 cm auf der Rückseite des Polarisationshalters herausragende Adapter muss so lang gedreht werden, bis auf dem Bildschirm des Computers ein Intensitätsminimum zu sehen ist. Dabei zieht man den Adapter leicht in die Richtung des Lasers, damit er nicht im Halter verkippt. Das Licht kann jetzt wieder eingeschaltet werden, um die Adapterschrauben wieder festzudrehen. Anschließend wird der Polarisator um einige Grad aus der Stellung für das Intensitätsminimum herausgedreht und das Licht wieder ausgeschaltet. Nun wird wieder das Minimum eingestellt. Dieses relative Minimum kann von dem vorherigen Wert abweichen, da in der Zwischenzeit das Licht eingeschaltet war.

Die Justage ist beendet, wenn die Skala nach der zweiten Einstellung auf  $90^\circ \pm 1'$  steht. Ist dies nicht der Fall, so muss man die Feinjustage wiederholen.

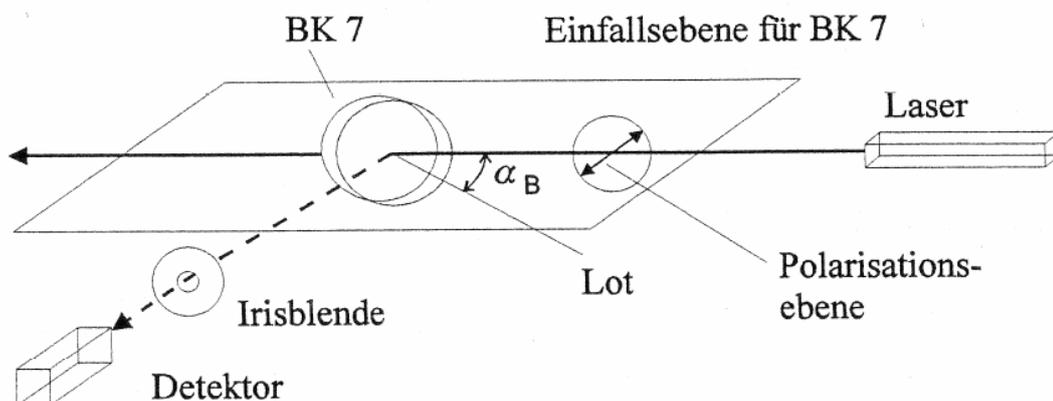


Abbildung 6.3: Anordnung zur Justage des Polarisators [Men96]

## Analysator

Nun soll der Analysatorkristall im Adapter mit folgendem Aufbau justiert werden:

Laser - erstes Lambda/4-Plättchen – Polarisator – Detektor

Der Polarisator steht auf  $45^\circ \pm 1'$ . Die Analysatoroptik wird jetzt analog zum Polarisator grob justiert. Anschließend stellt man den Analysatorhalter zwischen Polarisator und Detektor. Die Skala des Analysators wird auf  $135^\circ \pm 1'$  eingestellt und die Feinjustage durchgeführt. Diese erfolgt auf dieselbe Art und Weise wie für den Polarisator beschrieben.

## Zweites Lambda/4-Plättchen

Der Halter des zweiten Lambda/4-Plättchens wird mit der Skala nach oben auf eine saubere Unterlage gelegt. Nachdem man die Skala auf  $45^\circ$  festgeschraubt hat, dreht man den Adapter so, dass die Schraubenlöcher in der Mitte der Führungsschiene liegen. Senkrecht zu der Einkerbung auf dem Plättchen liegt die optische Achse, die in  $0^\circ$ -Skalenrichtung zeigen soll. Zunächst justiert man nach Augenmaß und dreht die Schrauben wieder fest. Dann stellt man den Halter zwischen Polarisator und Analysator, so dass die Skala auf der laserabgewandten Seite liegt. Der Raum wird erneut abgedunkelt und die Skala so eingestellt, dass der Detektor ein Minimum anzeigt. Die Skalenfeststellschraube wird festgedreht. Die Justage ist dann beendet, wenn das Minimum bei offener Feststellschraube gleich dem bei geschlossener ist. Währenddessen darf das Licht nicht eingeschaltet werden. Die Messungenauigkeit dieser Methode liegt bei  $\pm 0,017^\circ$  [Men96].

## Probenhalter

Der Probenhalter ist so geneigt, dass der Laserstrahl im  $70^\circ$ -Winkel auftrifft. Dieser Winkel wurde von der Feinmechanikwerkstatt mit einer Genauigkeit von weniger als einem Hundertstel Grad eingestellt. Die Probe liegt auf der Probenplatte oberhalb des 1 mm hohen Mittelsteiges. Mit einem  $\mu\text{m}$ -Schieber kann die Platte von 3 mm auf bis zu 13 mm ausgefahren werden. Unter der Probenplatte sind drei Justierschrauben angebracht, die diese mit der Federplatte und dem Winkel verbinden. In das Ende dieser Schrauben sind von oben kleine M2-Schrauben eingeklebt, die mit ihren Köpfen in der Federplatte hängen. Sie ziehen die Probenplatte gegen die Kraft der Federn nach unten und sind für das Nachjustieren des  $70^\circ$ -Einfallwinkels gedacht. Aufgrund der Probendicke oder der Oberflächenbeschaffenheit kann der reflektierte Strahl ein wenig von dem parallelen Strahlengang abweichen, wodurch der Messstrahl nicht mehr ganz genau auf den Analysator und schließlich auf den Detektor trifft. Vor dem Analysator wird eine Irisblende angebracht und die Öffnung ganz klein gestellt. Weicht nun der reflektierte Strahl von der Ideallinie ab, wird er nicht mehr von der Blende durchgelassen. Mit den kleinen Justierschrauben kann man den Probenhalter so nachjustieren, dass der Strahl durch die Blende gelassen wird und damit der reflektierte Strahl wieder parallel zur optischen Achse verläuft.

## 6.6 Notwendigkeit der Brewster-Justiermethode

Bei der Nullellipsometrie ist es erlaubt die Winkeleinstellungen des Polarisators, des zweiten Lambda/4 -Plättchens und des Analysators frei zu wählen. Wenn das zweite Lambda/4-Plättchen um  $+45^\circ$  gegen die Einfallsebene geneigt ist, minimiert sich der statistische und systematische Fehler [Azza77].

Weicht aber die optische Achse von der  $45^\circ$ -Richtung ab, so wird das Messlicht elliptisch polarisiert und der Detektor weist eine erhöhte Intensität nach.

Daher muss bei der Justage (siehe 6.5) die Polarisationsrichtung des Polarisators exakt auf  $45^\circ$  eingestellt werden. Die Polarisationsrichtung kann aber nicht auf der Winkelskala abgelesen werden, da der Adapter und die Optik darin frei drehbar sind. Die Polarisationssebene ist zwar auf der Optik durch eine Einkerbung angegeben, aber damit kann man den Polarisator nur bis auf  $\pm 1^\circ$  auf die  $0^\circ$ -Skalenstellung kalibrieren.

Messungen an 60 nm dicken  $\text{Si}_3\text{N}_4$ -Schichten auf GaAs haben ergeben, dass diese Ungenauigkeit einen Fehler im Brechungsindex von 0,1 und in der Schichtdicke von 5 nm verursacht [Men96].

Daher muss bei der Justage die Brewstermethode angewandt werden, um die Messgenauigkeit entscheidend zu verbessern. Diese Methode erlaubt die absolute Winkelbestimmung der Polarisationssebene und damit die Kalibrierung der Skala bis auf eine Genauigkeit von  $1'$ . Der Fehler beim Brechungsindex wird so auf 0,005 und bei der Schichtdicke bis auf 0,5 nm beschränkt [Men96].

## 7 Literatur

- [AEG79] AEG TELEFUNKEN, Halbleiterübersicht 1978/79, Heilbronn (1978)
- [Azza77] R. M. A. Azzam, N.M Bashara: *Ellipsometry and Polarized Light*. North-Holland Publishing Company, New York (1977)
- [Dag62] E.E Dagman: *Analytical solution of the inverse ellipsometry problem in the modeling of a single-layer reflecting system*. Opt. Spectrosc. (USSR) **62**, 500-503 (1987)
- [Des97] T. Dessauvage: *Untersuchung dünner  $\text{Si}_3\text{N}_4$  – Schichten mit Ellipsometrie und RBS*. Diplomarbeit, Universität Bonn (1997)
- [Dro94] J.-P. Drolet, S.C. Russev, M.I. Boyanov, R.M. Leblanc: *Polynomial Inversion of the single transparent layer problem in Ellipsometry*. J. Opt. Soc. Am. A/Vol. 11, No 12/December 1994, p.3284-91
- [Dru02] P. Drude: *The Theorie of Optics*. New York, Dover Publications (1902)
- [Fre69] M. Frenzel: *Ellipsometrische Bestimmung der Dicke und Brechzahl dünner Schichten auf Silizium*. Kristall und Technik, 4, 1, S. 149-160 (1969)
- [HO94] *Handbook of Optics*, Vol. 2, 2<sup>nd</sup> edition. McGraw-Hill (1994)
- [Kern92] W. Kern: *Handbook of semiconductor Wafer Cleaning Technologie*. no. 5, 723-8 (1992)
- [Lab07] LabVIEW - Versionshinweise, August 2007
- [Lab98] Benutzerhandbuch LabVIEW, Auflage Juli 1998
- [MeG95] Melles Griot, Optikkatalog, Bensheim (1995)
- [Men96] M. Mendel: *Aufbau und Test eines Ellipsometers zur Bestimmung der optischen Eigenschaften dünner dielektrischer Schichten*. Diplomarbeit, Universität Bonn (1996)
- [Muth99] J.F Muth: *Absorption coefficient and refractive index of GaN, AlN and AlGaIn alloys*. MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 4S1, G5.2 (1999)
- [Ni09] Datenblatt USB-6008, National Instruments (2009)
- [Pohl83] R. W. Pohl: *Optik und Atomphysik*. 13. Auflage, Springer-Verlag (1983)

- [Tiet74] Tietze/Schenk: *Halbleiterschaltungstechnik*.  
3. Auflage, Berlin (1974)
- [Sar04] S. Sarter: *Folien zur Vorlesung Oberflächenanalytik SS 05*.  
Freiburger Materialforschungszentrum, Institut für Mikrosystemtechnik  
(2004/05)
- [Sopra] SOPRA N&K Database
- [Val08] Valley Design Corp. Mai 2008  
[www.quartz-silica.net/sapphire.htm](http://www.quartz-silica.net/sapphire.htm)

## 8 Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Diplomarbeit beigetragen haben.

An erster Stelle gilt mein Dank Herrn Priv. Doz. Dr. Reiner Vianden, der diese Arbeit überhaupt ermöglicht hat und mir jederzeit mit Rat und Tat zur Seite stand.

Herrn Prof. Dr. Karl Maier möchte ich sehr für die Übernahme des Koreferates danken.

Des Weiteren danke ich Herrn Dr. Rüdiger Goldhahn von der TU Ilmenau für die Referenzproben, ohne die eine genaue Charakterisierung des Ellipsometers gar nicht möglich gewesen wäre, sowie Frau Dr. Katharina Lorenz und Frau Dr. Catherine Dubourdieu für Ihre Hilfe bei den anderen Proben.

Nicht zu vergessen:

Die gesamte Arbeitsgruppe, die immer eine große Unterstützung war.

Mein Dank gilt hierbei Riccardo Valentini für die vielen Mühen mit der Diamantdrahtsäge, Michael Steffens für die Ratschläge bei der Programmierung, Maqsud Rasulbayev für den Beistand bei den außergewöhnlichsten Problemen, Nicole Santen und Krystyna Müller für die weibliche Unterstützung und schließlich Patrick Kessler, Dr. Jakob Penner und Thomas Geruschke für Proben und gute Ideen.

Herrn Eichler danke ich vielmals für die Hilfe bei der Reparatur einiger optischer Elemente, die in den letzten Jahren irgendwie beschädigt worden sind.

Herrn D'Hein danke ich vielmals für den Umbau des Verstärkers, damit der DAC nicht zerstört wird.

Außerdem möchte ich mich bei Yamil Chain und Teresa Negrini für die guten Gespräche bedanken.

Ganz besonders möchte ich mich bei Daniel Di Martino bedanken, immer für mich da war und all meine Launen während des Studiums ertragen musste.

Elli und Palmarino Di Martino danke ich für ihre Unterstützung. Als Erinnerung hat das Auswertprogramm den Namen Elli erhalten.

Abschließend möchte ich Monika und Uwe Murmann danken, ohne die mein Studium viel schwerer verlaufen wäre.