

**Von gewöhnlicher bis hin zu ungewöhnlicher
spektroskopischer ellipsometrischer Invertierung zur
optischen Charakterisierung dünner Schichten**

Inauguraldissertation

zur
Erlangung der Würde eines Doktors der Philosophie
vorgelegt der
Philosophisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Basel

von

R. Shui-Ching Ho (何瑞清)

aus Hongkong, China

Basel, 2005

Genehmigt von der Philosophisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

auf Antrag von:

Prof. Dr. Peter Oelhafen
Prof. Dr. Ernst Meyer

Basel, den 20. September 2005

Prof. Dr. Hans-Jakob Wirz, Dekan

Danksagung

Mein Dank gilt all denen, die während der Ausführung dieser Arbeit Beiträge und Unterstützung geleistet haben. Namentlich möchte ich mich an dieser Stelle bei

Herrn Prof. Dr. Peter Oelhafen für die Empfehlung und das Angebot zum Thema der Ellipsometrie, die grosszügige Vermittlung der Technik, die Aufnahme in seine Forschungsgruppe, die mir gegebene Freiheit und Unterstützung, sein mir entgegengebrachtes Vertrauen und seine ausdauernde Geduld, bei

Herrn Prof. Dr. Ernst Meyer für sein Interesse an dieser Arbeit und die Übernahme des Korreferates, bei

allen ehemaligen und jetzigen Mitarbeitern der ESCA Gruppe: Dr. Jamila Boudaden, Herrn Michael Büttner, Dr. Hans-Gerd Boyen, Dr. Teresa Maria de los Arcos, Dr. Michael Gunnar Garnier, Dr. Jürgen Geng, Dr. Dieter Robert Kohler, Frau Iris Mack, Dr. Marc Ley, Dr. Georges Reber, Dr. Petra Reinke, Dr. Andriy Romanyuk, Dr. Andreas Schüler, Herrn Gregory de Temmerman, Dr. Matthias Töwe, Dr. Ivan Videnović, Dr. Ralf Wahrenberg und Dr. Thormen Wrase, für ihre Hilfe und Zusammenarbeit im Arbeitsumfeld, bei

zahlreichen Mitarbeitern des Physikalischen Instituts: Herrn Peter Reimann, Herrn Roland Steiner und Frau Verena Thommen-Geiser für ihre technische Unterstützung, bei

Frau Nadja Breger, Herrn Michael Büttner, Frau Lucia Grüter, Herrn Marco Longitano, Frau Eva Neumann, Herrn Markus von Runkel und Dr. Matthias Töwe für ihre sorgfältige Durchsicht meiner Arbeit, bei

meiner Familie: Wan-Fat Ho, Yau-Tai Kong [†1997], Shui-Ying Irene Ho, Yat-Tai Florence Ho, Shui-Mei Ho, Shui-Ching Frankie Ho, Sui-Fong Ho, Sui-Yuen Ho und Ka-Po Cindy Yu, für die unterschiedenen Formen ihrer Sorge und Liebe

herzlich bedanken.

Bei dieser Gelegenheit möchte ich all den Dozenten:

C. Bandle, H. Bebie, G. Beutler, B. Binggeli, H.-P Blau, P. Bochsler, F. Bühler, H. Burkhart, R. Buser, G. Czapek, P. Eberhardt, J. Gasser, H.-J. Güntherodt, H. Hartl, J. Hüsler, H.-P Hutter, E. Kopp, D. Kotschick, J. Lang, C. Leubner, H. Leutwyler, D. Loss, D. Masser, E. Meyer, N. Nessler, B. Pfister, J. Pfeiderer, B. Plattner, K. Pretzl, J. Rätz, C. Riedtmann, F.-N. Rösel, W. Saurer, J. Schacher, C. Schönenberger, G. Tammann, L. Tauscher, T.-K. Thielemann, C. Traber, D. Trautmann, C. Trefzger, C. Ullrich, E. Vass, R. Weinberger, P. Zoller,

sowie ihren wissenschaftlichen Mitarbeitern und Assistenten herzlich bedanken, bei denen ich Vorlesungen, Praktika, und wissenschaftliche Arbeiten bei den vielen Haltestellen meines akademischen Abenteuers in Europa besucht bzw. durchgeführt habe.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1-3
2. Grundlagen der Optik und der Ellipsometrie	
2.1 Optische Variablen und Funktionen	4-5
2.2 Optische und dielektrische Konstanten	5-12
2.3 Dispersion	12-18
2.4 Optische Funktionen	18-21
2.5 Ellipsometrische Funktionen	22-24
2.6 Optisches Modell	24-26
2.7 Optische Invertierung	26-28
2.8 Modellabhängigkeit	29-30
2.9 Iterative vs. unmittelbare Suche nach der globalen Nullstelle	30-32
2.10 Rückblick auf die Entwicklung der ellipsometrischen Invertierung	32-34
3. Experimentelles	
3.1 Schichtenherstellung	35-36
3.2 Ellipsometer	37-38
3.3 Substrat	39-50
4. Anpassung anhand von Dispersionsformeln	51
4.1 Simulation	53-71
4.2 Siliziumoxid	72-76
4.3 Titanoxid	77-87
4.4 Aluminiumoxid	88-96
4.5 Einsatz in Mehrschichtsysteme	97-112

5. Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung	113
5.1 Spektroskopische Konsistenz der Schichtdicke	114-126
5.2 Automatisierung der spektroskopischen Anpassung	127-130
5.3 Leistungsüberprüfung des kommerziellen Programms	131-132
5.4 Monochromatische Anpassungsüberprüfung anhand simulierter Messungen	133-141
5.5 Mathematische Formulierung des Konvergenzproblems bei iterativer Suche	142-144
5.6 Problemdiagnose des kommerziellen Invertierungsverfahrens	145-147
6. Exakte Invertierung für nicht-absorbierende Filme	
6.1 Theorie	148-152
6.2 Wurzelwahlverteilung	153-165
6.3 Monochromatische Invertierung	166-168
6.4 Spektroskopische Erweiterung	169-172
6.5 Experiment	172-181
7. Ungewöhnlicher Algorithmus zur Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung	
7.1 Begriff und Entwicklung	182-194
7.2 Anwendung	195-204
7.3 Diskussion	205
8. Schlusswort	206-208
Anhang	
A Anleitung zur MATLAB-Programmierung	209-212
B Programmobjekte	213-217
C Anleitung zur Programmbedienung	218-220
D Programmierquellcode	221-309
E Erste Anpassungsergebnisse	310-318
F Proben	319-321
Literaturverzeichnis	322-329

1. Einleitung

Als optische Messtechnik dient die Ellipsometrie dem Zweck, die optischen Konstanten eines Materials im gemessenen Schichtsystem zu bestimmen und dadurch die optischen Eigenschaften sowohl des Materials als auch des optischen Systems zu charakterisieren. Ellipsometrische Messung ist bekannt für ihre hohe Empfindlichkeit und Nichtdestruktivität. Ellipsometer sind normalerweise einfach zu bedienen und ellipsometrische Messungen lassen sich relativ schnell durchführen [Urb93]. Trotz der vielen Vorteile ist die Invertierung der durch die Messung gewonnenen ellipsometrischen Gleichungen auf keinen Fall einfach. Obschon Theorie und Prinzip der Ellipsometrie [Azz79] schon seit ihren Pionieren [Dru89a, Dru89b, Dru90] vor gut einem Jahrhundert bekannt gewesen sind, hat die mathematische Entwicklung der Invertierung kaum mit den technischen Fortschritten mithalten können und ist eine der grössten Herausforderungen geblieben [Ghe68]. Da die ellipsometrischen Gleichungen im Allgemeinen komplex und transzendental sind, lassen sie sich nicht analytisch, sondern nur mittels numerischer Anpassung invertieren. Ein grundlegendes Problem ist, dass die ellipsometrischen Messdaten an sich nicht nützlich [Yu03] sind. Für die Invertierung ist die Annahme und Parametrisierung eines geeigneten optischen Modells notwendig. Im Fall einer Abweichung von der theoretischen Berechnung ist es kaum möglich zu unterscheiden, ob aufgetretene Fehler auf die Anpassungsansätze oder auf ungeeignete Modelle zurückzuführen sind. Spektroskopische Ellipsometrie ist in eine neue Ära eingetreten. Das Hauptanliegen liegt nicht mehr im experimentellen Entwurf sondern in der Interpretation der Messdaten [Jel93a]. Die vorliegende Dissertation beschäftigt sich hauptsächlich mit den mathematischen Vorgängen zur spektroskopischen ellipsometrischen Invertierung.

Bei der typischen Charakterisierung der Invertierungsverfahren der spektroskopischen ellipsometrischen Messungen sind zwei Merkmale zu unterscheiden. Numerische Anpassungen können entweder iterativ oder nicht-iterativ sein. Spektroskopische Invertierungen können Wellenlänge-für-Wellenlänge oder formelhaft für das gesamte Spektrum ausgeführt werden. Die notwendigen Grundlagen und die mathematische Formulierung der Invertierungsproblematik werden in Kapitel 2 erörtert. Dort wird auch ein Rückblick auf die Entwicklung der ellipsometrischen Invertierung im Hinblick auf das Vorhandensein und die Geschwindigkeit des Computers gegeben. Dann in Kapitel 3 werden die benötigten experimentellen Teile, unter anderem die verwendeten Anlagen, die Herstellung der Schichten und ihre chemische

Charakterisierung besprochen. Die übrigen Kapitel beschäftigen sich mit gewöhnlichen und ungewöhnlichen Invertierungsproblemen.

Im Laufe der Zeit hat sich die Leistungsfähigkeit der Rechner erheblich erhöht. Spektroskopische Invertierung kann formelhaft für das gesamte Spektrum ausgerechnet werden. Dieser Vorgang wird zur Entwicklung eines Mehrschichtsystems verwendet und in Kapitel 4 dargestellt. Die aus dieser Studie entstandenen Beiträge zur Publikation werden nicht reproduziert und sind auf [Bou03, Sch03] zu verweisen. Es gab eine Zeit, in der die Dispersionen etablierter Schichten unbekannt waren. Zur Charakterisierung neuartiger Filme und zum Suchen neuer Dispersionsformeln ist es fundamental und unerlässlich, eine optische Messung einmal an allen Messpunkten des Wellenlängenbereichs Messpunkt-für-Messpunkt (fortan Wellenlänge-für-Wellenlänge) einzeln zu charakterisieren. Über Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Invertierung wird jedoch in der Literatur sehr wenig berichtet. Da alle bekannten kommerziellen Programme zur Invertierung ellipsometrischer Messungen mit numerischer Iteration auf unterschiedliche Art arbeiten, deren Implementierung nicht durchsichtig ist, wird beim Neueinstieg in jedes Programm ausführliche Kontrolle und Überprüfung nötig. In den vergangenen Jahrzehnten sind nur wenige Publikationen erschienen, die dieses Verfahren dokumentieren. Trotz der hohen Rechengeschwindigkeit des modernsten Prozessors bedeutet Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung noch immer einen grossen Aufwand. Anhand eines kommerziellen Programms werden einige ungewöhnliche Probleme der Automatisierung der spektroskopischen Invertierung in Kapitel 5 erläutert, über die in seltenen Artikeln berichtet wurde [Zag99]. Wie bei den meisten numerischen Iterationen liegen auch hier beim untersuchten Programm die allgemeinen Probleme vor, dass Anfangswerte für die anzupassenden Parameter zum Starten der Iteration erraten werden müssen, dass ihre Abstände so nah wie möglich an den Werten der Lösungen sein sollten, und dass die globalen Nullstellen nicht von den lokalen Nullstellen unterschieden werden können [Yu03].

Es entsteht daher die Absicht, reflexionsbasierende spektroskopische ellipsometrische Gleichungen möglichst exakt zu invertieren. Kapitel 6 und 7 beschäftigen sich damit, die reflektionsbasierte ellipsometrische Gleichung (2.4.12) möglichst exakt zu invertieren. Ausser bei einigen Modellen lassen sich die Gleichungen nicht analytisch invertieren. Zu den Ausnahmen gehört die einwinklige, monochromatische semianalytische ellipsometrische Invertierung [McC63] auf der Basis des {Luft| nichtabsorbierende Schicht |Substrat} Modells, bei welchem die nichtabsorbierende Schicht zu charakterisieren ist und die optischen Konstanten des Substrats bekannt sind. Bei diesem klassischen Fall wird

für den Brechungsindex ein Wert angenommen, der eine Selektionsregel [Svi96] erfüllt. Die Schichtdicke wird explizit als eine Funktion des Brechungsindex ausgedrückt [Mcc63]. Durch Umstellung der ellipsometrischen Funktion auf eine quadratischen Gleichung [Azz75] und durch Auflösung der komplexen Wurzel werden zwei komplexen Dickenfunktionen erhalten. Da lediglich eine Wurzel zur korrekten Lösung führt, ist die Betrachtung der falschen Wurzel unnötig. Wenn man diese im voraus kennt, kann die Rechenzeit erspart werden. Darüber hinaus wird die durch die falschen Wurzel entstandenen Unsicherheit vermieden. Infolgedessen kann eine zuverlässigere und schnellere Invertierung der einwinkeligen in-situ ellipsometrischen Messung für nicht-absorbierend Schicht implementiert werden. Eine solche Implementierung setzt eine Vorkenntnisse der Verteilung des Beitrags von den zwei Wurzeln zur korrekten Lösung voraus. Um die Möglichkeit einer schnelleren oder sichereren Implementierung auszukundschaften, wird das Verteilungsmuster in den ersten drei Abschnitten des Kapitels 6 unter die Lupe genommen. Die interessanten Befunde wurden bereits in der englischen Fassung veröffentlicht [Ho04]. In den übrigen Abschnitten werden die Erweiterung auf Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Invertierung behandelt. Die Ergebnisse tragen dazu bei, die erfundene Sorge [Shu96, Alt98, Bos98, Mar00] für Mehrdeutigkeit der spektroskopischen Schichtdickebestimmung zu säubern.

Zuletzt wird in Kapitel 7 auf die Entwicklung und Implementierung eines auf einem ungewöhnlichen Ansatz basierenden allgemeinen Algorithmus' zur nicht-iterativ, von benachbarten Wellenlängen unabhängigen Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung eingegangen. Dank der ständig steigenden Leistungsfähigkeit der modernen Computer ist die sonst unmöglich längere Berechnungszeit dieses Ansatzes zeitmässig möglich geworden. Die alte Tugend des Fleisses auf Basis einer nicht-iterativen Suche nach Lösung wird zu neuem Leben erweckt.

2. Grundlagen der Optik und der Ellipsometrie

2.1 Optische Variablen und Funktionen

Unter den optischen Eigenschaften eines Gegenstandes versteht ein durchschnittlicher Bürger vielleicht nur Farbe und Glanz, denen in der Physik die spektrale Verteilung der Reflexion (R) in Abhängigkeit von der Wellenlänge bzw. -intensität entspricht. Weniger augenfällig trotz der alltäglichen Erfahrung mit Materialien wie Glas und Wasser, ist die Transmission (T) ebenfalls wellenlängenabhängig. Aus diesen beiden Größen, der Reflexion und der Transmission, wird die Absorption (A) wie folgt abgeleitet:

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda) \quad (2.1.1)$$

Diese drei optischen Größen sind gerade diejenigen, welche von der kommerziellen Nutzung verlangt werden und welche durch optische Messungen zugänglich sind. Jedoch sind sie keine fundamentalen Materialeigenschaften, da sie abhängig von der optischen Anordnung oder dem optischen System sind. Die optische Charakterisierung liegt den von der Anordnung des Systems unabhängigen intrinsischen Eigenschaften jeder beteiligten Komponente zu Grunde. Die intrinsischen Eigenschaften eines Materials werden durch die optischen Konstanten

$$\tilde{n} = n - ik \quad (2.1.2),$$

oder die dielektrischen Konstanten

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_r + i \epsilon_i \quad (2.1.3)$$

definiert. In einem Mehrschichtsystem beispielsweise sind die optischen Funktionen von den Schichtdicken (d), Leitfähigkeit (σ), Dichte (ρ), der Reihenfolge der Schichten usw., abhängig. Da unten müssen wir zwischen der Menge der unabhängigen Variablen des optischen Systems

$$X = \{\epsilon_r, \epsilon_i, n, k, d, \sigma, \rho, \dots\} \quad (2.1.4)$$

und der Menge der optisch messbaren Größen unterscheiden. Die letzteren lassen sich als mathematische Funktionen $F(x)$ der ersteren ausdrücken. Von jetzt an werden die letzteren als optische Funktionen genannt. Je nach instrumenteller Anordnung können weitere weniger intuitive optische Größen gemessen werden, beispielsweise zum elektromagnetischen Feld senkrecht oder parallel aufgelöste Komponenten der erwähnten Größen $R_{\perp}, R_{\parallel}, T_{\perp}, T_{\parallel}, A_{\perp}, A_{\parallel}$. Dazu gehören auch die Phasenverschiebung der Reflexion und der

Transmission: δ_{\perp} , δ_{\parallel} , oder die durch ellipsometrische Messung gewonnenen Variablen Ψ und Δ , sowie ihre Varianten $\tan(\Psi)$ und $\tan(\Delta)$. Somit wird die Menge der optischen Funktionen auf

$$\mathcal{F} = \{R, R_{\parallel}, R_{\perp}, T, T_{\parallel}, T_{\perp}, \delta_{\parallel}, \delta_{\perp}, \rho, \rho_{\parallel}, \rho_{\perp}, \Psi, \Delta, \tan(\Psi), \tan(\Delta)\} \quad (2.1.5)$$

erweitert, wobei $F(x) \in \mathcal{F}$ und $x \in X$ gelten. Die Menge der unabhängigen Variablen kann weiter in eine Untermenge der intrinsischen optischen Parameter und eine Untermenge der physikalischen Parameter des optischen Modells zerlegt werden:

$$X = \{\{n, k, \varepsilon_r, \varepsilon_i\}, \{d, \sigma, \dots\}\} \quad (2.1.6)$$

Daher gilt entweder $X = \{n, k, d, \sigma, \dots\}$ oder $X = \{\varepsilon_r, \varepsilon_i, d, \sigma, \dots\}$. Die optische Charakterisierung eines Materials aus einem optischen Modell besteht darin, die optischen Konstanten durch Invertieren der optischen Funktionen zu bestimmen. Gemessen werden zugängliche optische Funktionen, $F_1(n, k)$, $F_2(n, k)$ usw.. Die Bestimmung von n und k erfolgt durch Invertieren der Funktionen, üblicherweise mittels numerischer Anpassung.

2.2 Optische und dielektrische Konstanten

Eigentlich sind die ‘‘Materialkonstanten’’ gar keine Konstanten, denn ihre Werte hängen von der Wellenlänge ab. Die Dielektrizität und die Permeabilität sind im Allgemeinen tensorielle Größen und beschreiben die frequenz- und richtungsabhängige Antwort (Suszeptibilität χ) des Systems auf äussere Erregung mittels elektromagnetischer Felder. Das Verhalten elektrischer und magnetischer Felder elektromagnetischer Strahlung, die mit Materien in Wechselwirkung stehen, lässt sich makroskopisch durch die vier Maxwell-Gleichungen

$$\nabla \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.2.1)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu \vec{J} + \mu \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (2.2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.2.4)$$

beschreiben. Dabei stehen μ_0 , ε_0 , μ_r , ε_r , ρ , \vec{D} , \vec{E} , \vec{B} und \vec{H} für magnetische Feldkonstante, elektrische Feldkonstante, Permeabilität, Dielektrizität,

Ladungsdichte, elektrische Verschiebungsdichte, elektrische Feldstärke, magnetische Flussdichte bzw. magnetische Feldstärke. Unter der Annahme, dass sich keine freien Ladungen im Medium ansammeln ($\rho = 0$), werden die Maxwell'schen Gleichungen bei einem nicht magnetischen ($\mu_r = 1$), homogenen (μ und ε sind richtungsunabhängig) und linearen Medium,

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \quad (2.2.5)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.2.6),$$

nach dem Einsetzen des ohmschen Gesetzes (dass die Stromdichte proportional zur elektrischen Feldstärke ist),

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (2.2.7),$$

wie folgt

$$\nabla \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.2.8)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \sigma \vec{E} + \mu_0 \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.2.9)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (2.2.10)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.2.11)$$

Wendet man den Nabla Operator auf die beiden gekoppelten Differentialgleichungssysteme an und führt eine Vektoranalyse aus, erhält man die Wellengleichungen:

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 \quad (2.2.12)$$

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} - \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (2.2.13)$$

Da die magnetischen Felder direkt an die elektrischen Felder gekoppelt sind und beide Felder dieselbe Gleichung erfüllen, ist es ausreichend, lediglich die elektrischen Felder zu betrachten. Als Lösungsansatz erweist sich

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (2.2.14)$$

als geeignet. Durch einen Vergleich mit den klassischen Wellengleichungen lässt sich eine komplexe Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$\tilde{v} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon}}} = \frac{c}{\tilde{n}} \quad (2.2.15)$$

definieren. Somit gilt

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}} \quad (2.2.16)$$

wobei \tilde{n} und $\tilde{\varepsilon}$ definiert sind als

$$\tilde{n} = n - ik \quad (2.2.17)$$

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_r + i\varepsilon_i \quad (2.2.18)$$

Die intrinsischen optischen Eigenschaften lassen sich gleichwertig entweder durch n und k oder durch ε_r und ε_i ausdrücken. In der Literatur ist der Vorzug bei der Benutzung dieser oder jener Variablen geteilt. Dementsprechend kann eine optische Funktion entweder als $F(\tilde{n})$ oder $F(\tilde{\varepsilon})$ ausgedrückt werden. Wenn die unabhängigen Variablen als der reelle und der imaginäre Teil der komplexen Zahl, $\tilde{n} = n - ik$ bzw. $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_r - i\varepsilon_i$, dargestellt werden, entstehen die optischen Funktionen $F(n, k)$ oder $F(\varepsilon_r, \varepsilon_i)$. Sie können durch Ersetzen der Variablen \tilde{n} und $\tilde{\varepsilon}$ ineinander konvertiert und mit $\tilde{\varepsilon}$ und \tilde{n} ausgedrückt werden. Daher ist es nötig, die Funktionen $f_{\tilde{\varepsilon}}$ und $f_{\tilde{n}}$ zu kennen, die \tilde{n} und $\tilde{\varepsilon}$ ineinander abbilden (Abb. 2.2.1).

$$\begin{array}{ccc} \tilde{n} & \xrightarrow{f_{\tilde{\varepsilon}}} & \tilde{\varepsilon} \\ & \xleftarrow{f_{\tilde{n}}} & \end{array}$$

Abb. 2.2.1 Funktionen, $f_{\tilde{n}}$ und $f_{\tilde{\varepsilon}}$, die \tilde{n} und $\tilde{\varepsilon}$ verknüpfen.

Per Definition gelten $\tilde{\varepsilon} = f_{\tilde{\varepsilon}}(\tilde{n}) = \tilde{n}^2$ und $\tilde{n} = f_{\tilde{n}}(\tilde{\varepsilon}) = \sqrt{\tilde{\varepsilon}}$. Der Bereich, $\{(n, k) \mid n > 0, k \geq 0\}$, in dem n und k definiert sind und dem ersten Viertel des n - k -Raums entspricht, wird durch die Funktion $f_{\tilde{n}}$ auf den Bereich $\{(\varepsilon_r, \varepsilon_i) \mid \varepsilon_i \geq 0\} \setminus \{(\varepsilon_r, 0) \mid \varepsilon_r \leq 0\}$ abgebildet, der dem ersten und zweiten Viertel des ε_r - ε_i -Raums entspricht (Abb. 2.2.2). Umgekehrt wird der letztere Bereich durch $f_{\tilde{\varepsilon}}$ auf den ersteren abgebildet. Die undefinierte positive k -Achse $\{(n, k) \mid n = 0, k \geq 0\}$ entspricht der undefinierten negativen ε_i -Achse $\{(\varepsilon_r, 0) \mid \varepsilon_r \leq 0\}$, wenn der Geltungsbereich erweitert würde.

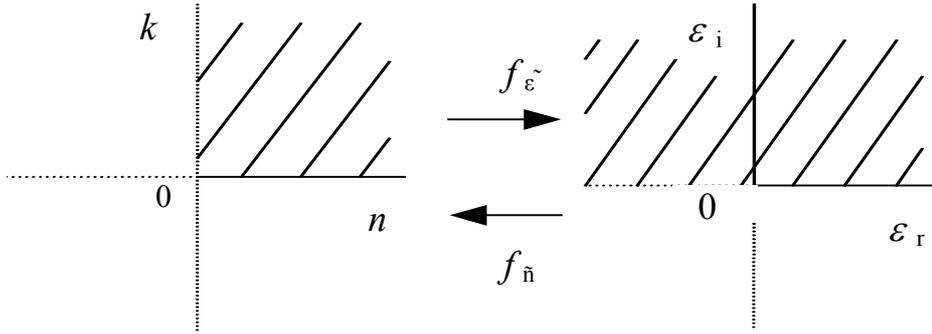


Abb. 2.2.2 Definitionsbereich und Bereich der Funktionen $f_{\tilde{n}}$ und $f_{\tilde{\varepsilon}}$.

Dargestellt in polaren Koordinaten, $\tilde{\varepsilon}(\tilde{n}) = |\tilde{n}|^2 e^{i2\theta_{\tilde{n}}}$, wird das Argument verdoppelt während die Magnitude ins Quadrat gesetzt wird. Umgekehrt gilt $\tilde{n}(\tilde{\varepsilon}) = \sqrt{|\tilde{\varepsilon}|} e^{i\theta_{\tilde{\varepsilon}}/2}$, wobei das Argument halb so groß ist, während die Wurzel der Magnitude gezogen wird. Die ausführliche Struktur der Abbildung in polaren Koordinaten ist in Abb. 2.2.3 aufgezeichnet.

In kartesischen Koordinaten gilt

$$\tilde{\varepsilon} = f_{\tilde{\varepsilon}}(n-ik) = (n-ik)^2 \quad (2.2.19)$$

Es folgt nach der Trennung des reellen bzw. imaginären Teils

$$\varepsilon_r = n^2 - k^2 \quad (2.2.20)$$

$$\varepsilon_i = 2nk. \quad (2.2.21)$$

Umgekehrt gilt

$$\tilde{n} = f_{\tilde{n}}(\varepsilon_r - i\varepsilon_i) = \sqrt{\varepsilon_r - i\varepsilon_i}. \quad (2.2.22)$$

Daher

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} + \varepsilon_r}{2}} \quad (2.2.23)$$

$$k = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} - \varepsilon_r}{2}} \quad (2.2.24)$$

Die Abbildungen 2.2.4 und 2.2.5 zeigen die vertikalen und horizontalen Linien, welche die konstanten Werte von n und k darstellen, als gekrümmte Kurve auf der ε_r - ε_i -Ebene. Im Gegensatz dazu zeigen Abbildungen 2.2.6 und 2.2.7 die Abbildung der konstanten Werte von ε_r und ε_i auf gekrümmten Konturenlinien auf der n - k -Ebene.

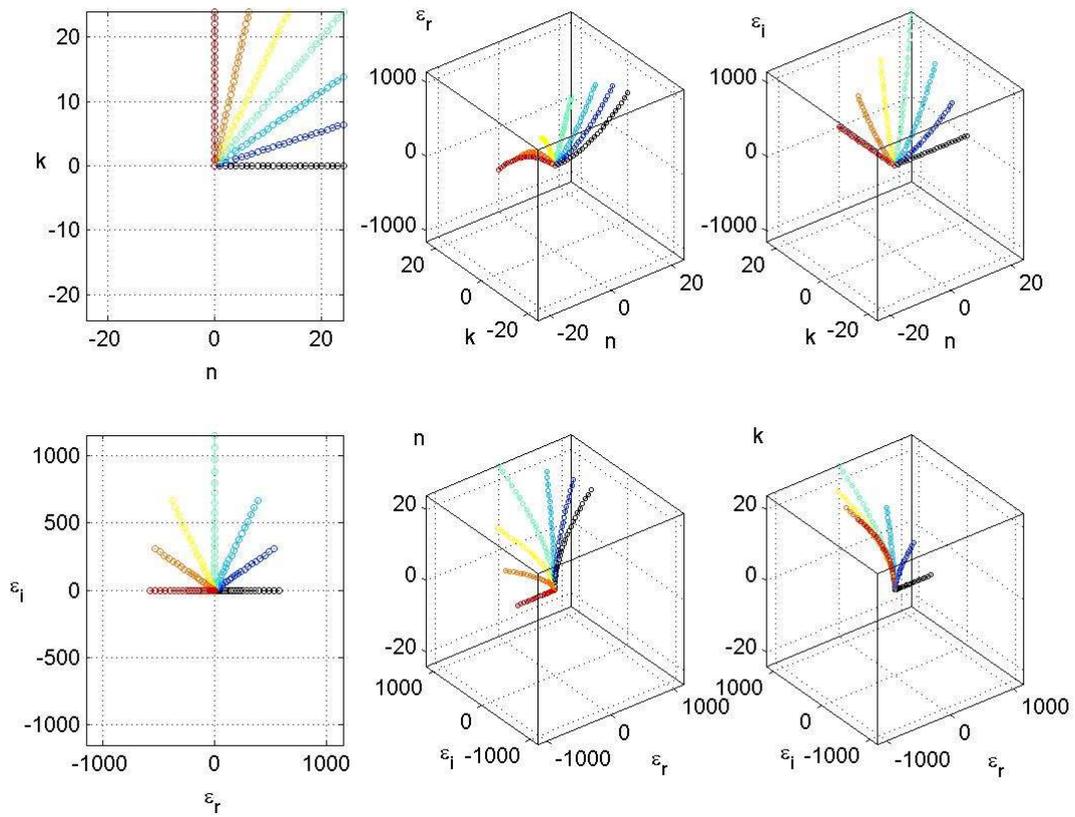


Abb. 2.2.3 Abbildung in polaren Koordinaten

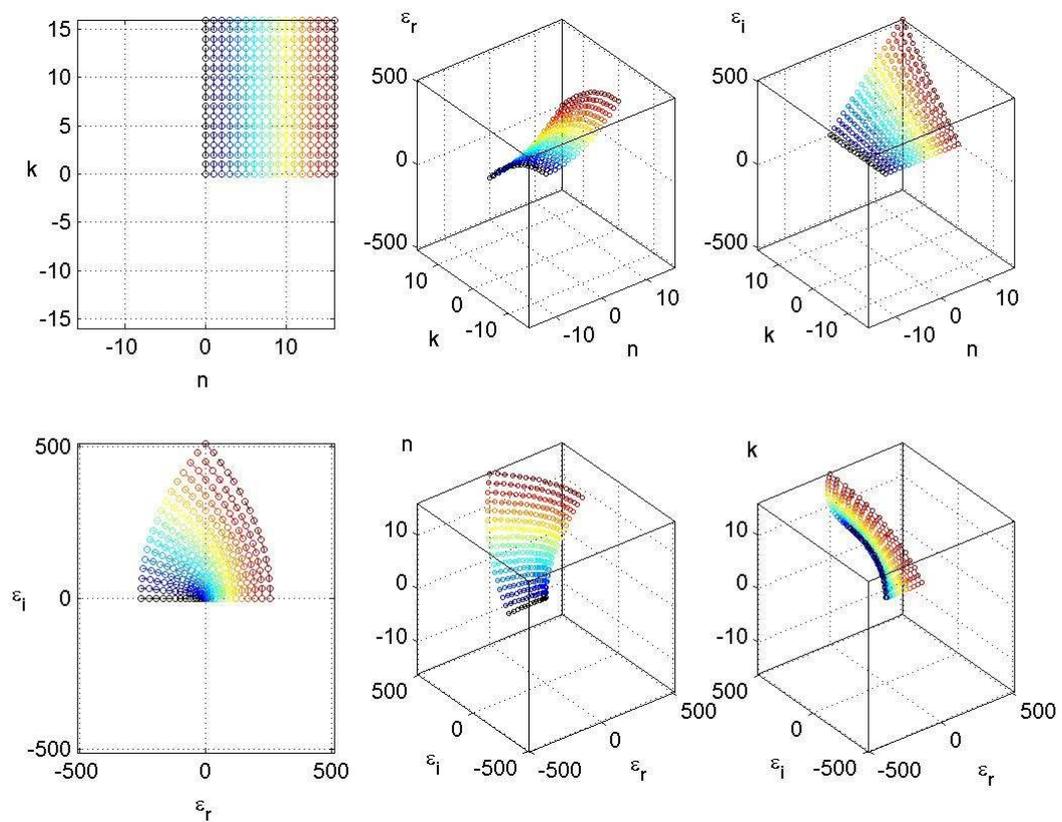


Abb. 2.2.4 Abbildung von optischen Konstanten n und k .

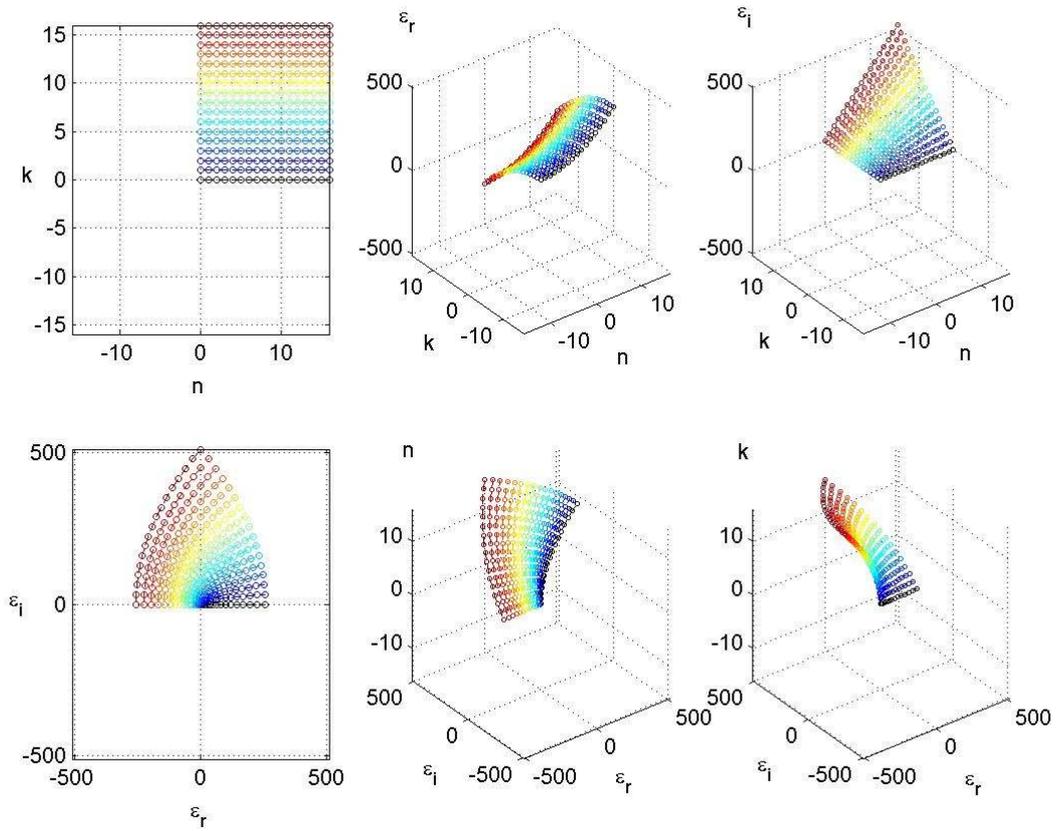


Abb. 2.2.5 Abbildung von optischen Konstanten n und k .

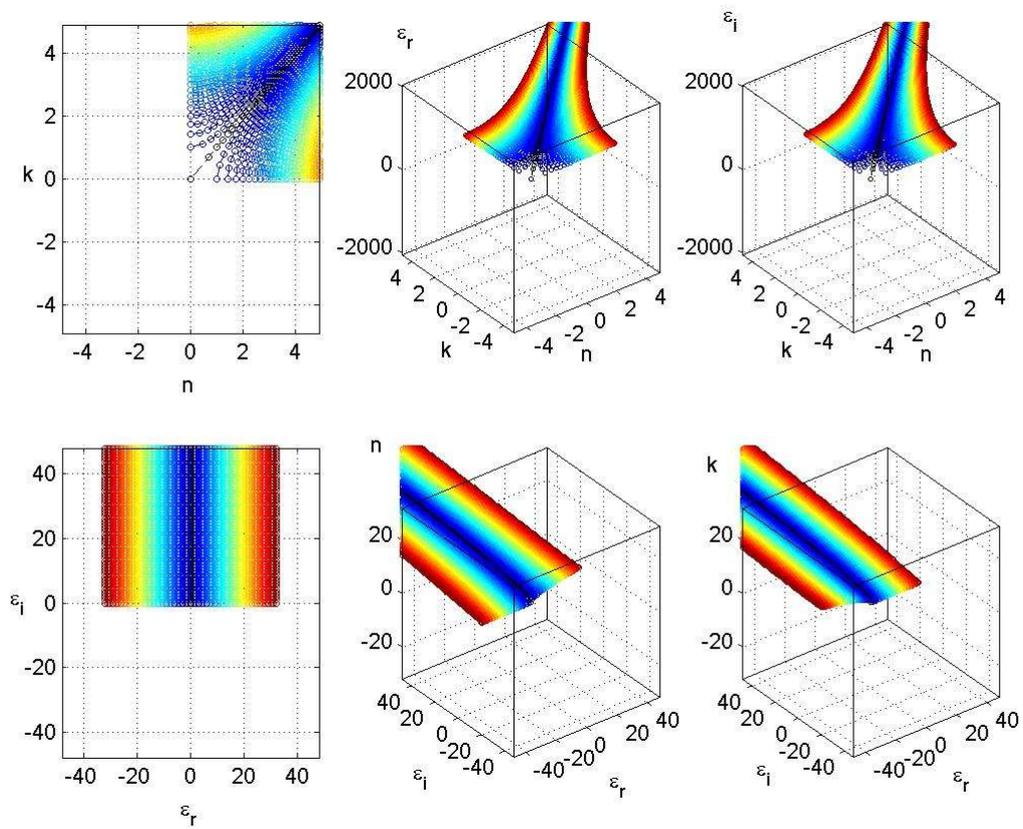


Abb. 2.2.6 Abbildung von dielektrischen Konstanten ϵ_r und ϵ_i .

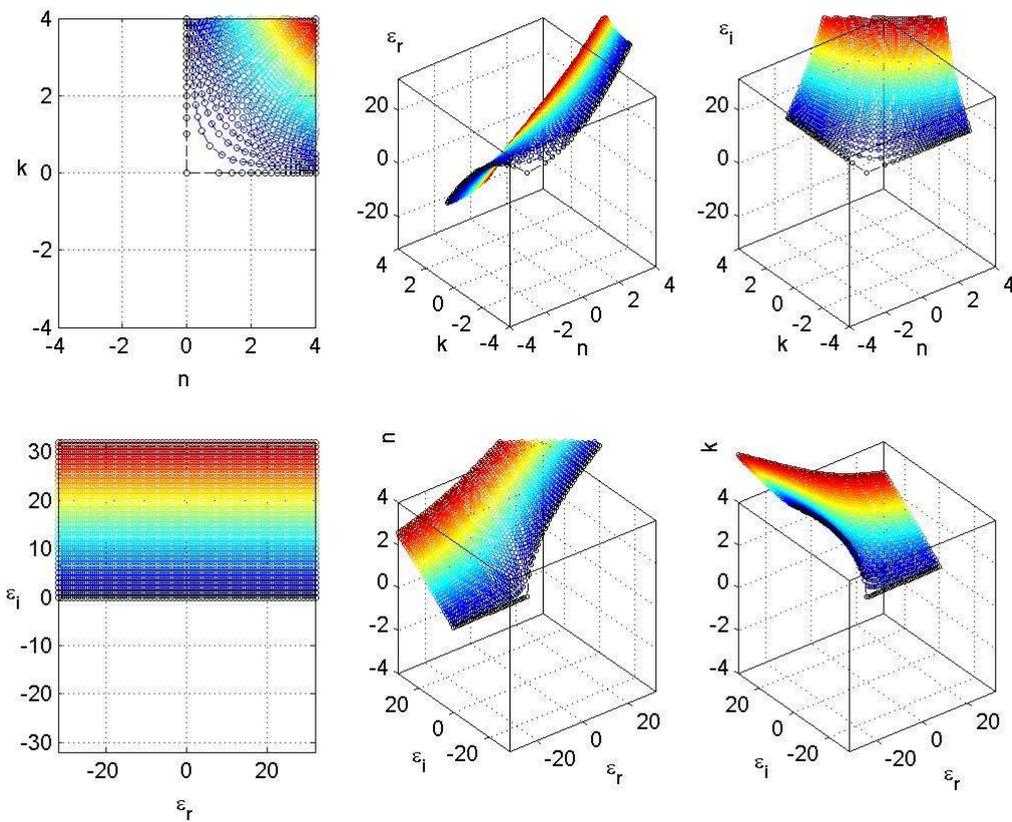


Abb. 2.2.7 Abbildung von dielektrischen Konstanten ε_r und ε_i .

Die komplexe Funktion ist differenzierbar und kontinuierlich. Dies lässt sich durch die Cauchy-Riemann-Gleichung

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial n} = \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial k} \quad (2.2.25)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial k} = -\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial n} \quad (2.2.26)$$

bestätigen. Der ε_r - ε_i -Raum ist orthogonal, weil

$$\nabla \varepsilon_r \cdot \nabla \varepsilon_i = 0 \quad (2.2.27)$$

gilt, gefolgt von

$$\nabla \varepsilon_r = 2n\vec{e}_n + 2k\vec{e}_k \quad (2.2.28)$$

$$\nabla \varepsilon_i = 2k\vec{e}_n - 2n\vec{e}_k \quad (2.2.29)$$

Deshalb schneiden sich die iso- ε_r - und iso- ε_i -Konturen im rechten Winkel. Umgekehrt gilt dasselbe für iso- n - und iso- k -Konturen auf der ε_r - ε_i -Ebene. Dies lässt sich durch

$$\nabla n \cdot \nabla k = 0 \quad (2.2.30)$$

bestätigen. Bei jeder Wellenlänge entspricht \tilde{n} einem Punkt auf der n - k -Ebene.

2.3 Dispersion

Der Brechungsindex fast aller Stoffe ist wellenlängenabhängig. Die spektrale Abhängigkeit eines Materials von der Wellenlänge, dargestellt als $\tilde{n}(\lambda)$, erweist sich als Wanderung des Punktes bezüglich λ . Daher ist ein Material eindeutig durch einen Pfad im dreidimensionalen n - k - λ -Raum dargestellt. Die Projektion eines solchen Pfades auf die n - k -Ebene ist eindeutig. Wegen der eins-zu-eins Abbildung vom n - k -Raum auf den ε_r - ε_i -Raum entspricht jeder Pfad im n - k -Raum, der die intrinsischen optischen Eigenschaften eines Materials charakterisiert, eindeutig einem Pfad auf der ε_r - ε_i -Ebene (Abb. 2.3.1) und umgekehrt.

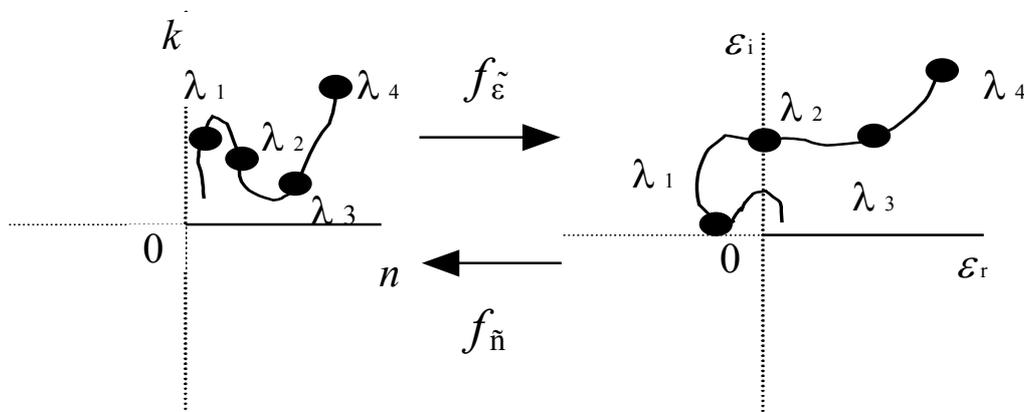


Abb. 2.3.1 Abbildung eines $\tilde{n}(\lambda)$ Pfades auf der n - k -Ebene auf $\tilde{\varepsilon}(\lambda)$ auf der ε_r - ε_i -Ebene

Für Materialien mit $k \neq 0$ ist die Reflexion auf eine Grenzfläche einer dicken Probe dieses Materials das einfachste Modell. Eine optische Funktion ist die Abbildung des entsprechenden $\tilde{n}(\lambda)$. Um die zwei Parameter zu bestimmen, sind mindestens zwei solche Funktionen notwendig, z.B. $F_1(x,y)$ und $F_2(x,y)$, wobei x - y n - k oder ε_r - ε_i sein kann. Daher entspricht $\tilde{n}(\lambda)$ einer eindeutigen Flugbahn auf der F_1 - F_2 -Ebene. Iso- F_1 - und iso- F_2 -Konturen können auf die x - y -Ebene gezeichnet werden und umgekehrt. Dementsprechend können die Messfehler analysiert werden. Das Invertieren der gemessenen optischen Funktionen, die

mit Fehlern behaftet sind, je nach $\tilde{\epsilon}$ oder \tilde{n} , erzeugt verschiedene Fehlermuster. Eine angemessene Untersuchung steht noch aus.

Lorentz-Lorentz Modell

Von besonderer Bedeutung ist die Wechselwirkung von Nichtleitern (Dielektrika) mit Licht. Während die Maxwellsche Theorie die Materie als ein Kontinuum behandelt, muss man die Wechselwirkung zwischen der Welle und dem Medium in einer atomaren Ebene untersuchen um die Frequenzabhängigkeit des Brechungsindex in dielektrischen Medien besser zu erklären. Man denkt sich die Materie als eine Anordnung sehr vieler polarisierbarer, eng benachbarter kleiner Atome im Vakuum. Jedes gebundene Elektron kann man sich als einen gedämpften klassischen harmonischen Oszillator vorstellen, dessen Bewegungsgleichung nach dem zweiten Newtonschen Gesetz, unter Berücksichtigung einer antreibenden und zwei rücktreibenden Kräften wie folgt lautet:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_{\text{Treibung}} - F_{\text{Bindung}} - F_{\text{Dämpfung}} \quad (2.3.1)$$

wobei

$$F_{\text{Treibung}} = q_e E(t) = q_e E_0 \cos(\omega t) \quad (2.3.2)$$

der vom elektrischen Feld E der einfallenden Lichtwelle mit der Frequenz ω auf ein Elektron mit einer Ladung q_e ausgeübten Anregung entspricht;

$$F_{\text{Bindung}} = -m \omega_0^2 x \quad (2.3.3)$$

der bei kleinen Auslenkungen aus dem Gleichgewicht entstandenen Anziehung entspricht; und

$$F_{\text{Dämpfung}} = -m \gamma \frac{dx}{dt} \quad (2.3.4)$$

dem Energieverlust entspricht, der in Folge der Dämpfung auftritt und proportional zum Dämpfungsfaktor γ beträgt. Mit dem Ansatz $x(t) = x_0 e^{i\omega t}$ ergibt sich die Polarisation für jedes Elektron

$$p(t) = q_e x(t) = \frac{q_e^2 / m_e}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} E(t) \quad (2.3.5).$$

Zur Verallgemeinerung des Sachverhalts nimmt man an, dass sich in jeder Volumeneinheit N Moleküle befinden, von denen jedes aus r_j Oszillatoren mit

den Eigenfrequenzen $r\omega_j$ und Dämpfungsfaktor γ_j besteht. Bei Betrachtung der Verknüpfung von elektrischer Polarisation mit der Ladungsdichte $P=q_e x N$ und dem elektrischen Feld $P = \varepsilon_0 \chi_e E = \varepsilon_0 (\varepsilon_r - 1) E = (\varepsilon - \varepsilon_0) E$ folgt

$$\tilde{n}^2(\omega) = \tilde{\varepsilon}_r = 1 + \frac{Nq_e^2}{\varepsilon_0 m_e} \sum_j \left(\frac{r_j}{\omega_j^2 - \omega^2 + i\gamma_j \omega} \right) \quad (2.3.6)$$

Für Gas ist N , und folglich der zweite Term, sehr klein und daher kann man die Dispersionsrelation von $\tilde{\varepsilon}_r$ und \tilde{n} , mit der binomischen Expansion und der Annäherung $(1+x)^{1/2} \approx 1+x/2$ nach der Trennung der realen und imaginären Teile, als Funktion von ω finden:

$$n(\omega) \cong 1 + \frac{Nq_e^2}{2\varepsilon_0 m_e} \sum_j \left(\frac{r_j(\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \right) \quad (2.3.7)$$

$$k(\omega) \cong \frac{Nq_e^2}{2\varepsilon_0 m_e} \sum_j \left(\frac{r_j \gamma_j \omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \right) \quad (2.3.8)$$

$$\alpha(\omega) \cong \frac{Nq_e^2}{\varepsilon_0 m_e c} \sum_j \left(\frac{r_j \gamma_j \omega^2}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \right) \quad (2.3.9)$$

wobei die Gewichtungsfaktoren r_j 's die Bedingung $\sum r_j = 1$ erfüllen. Im Rahmen der klassischen Mechanik lassen sich die r_j -Glieder als die Oszillatorstärken der verschiedenen Schwingungsmoden eines Moleküls mit jeweiligen Eigenfrequenzen interpretieren. Die Eigenfrequenzen können mehrfach über einem breiten Spektralbereich verteilt sein. In der Umgebung jeder Resonanzstelle ist die Form der n - und k -Kurve vorwiegend von den ungewichteten Summanden abhängig, nämlich

$$f_{nj} = \frac{(\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \quad (2.3.10)$$

$$f_{kj} = \frac{\gamma_j \omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \quad (2.3.11)$$

$$f_{aj} = \frac{\gamma_j \omega^2}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \quad (2.3.12)$$

Jeder Summand wird durch drei Größen bestimmt. Um die Untersuchung der obigen drei Funktionen zu erleichtern, betrachtet man nur die relative Größe von ω und γ_j bezüglich der Resonanzstelle ω_j , nämlich $x = \omega/\omega_j$ und $b = \gamma_j/\omega_j$. Daher kann man die Funktionen als $f_{nj} = g_{nj}/(\omega_j)^2$, $f_{kj} = g_{kj}/(\omega_j)^2$ bzw. $f_{aj} = g_{aj}/\omega_j$ umschreiben, wobei

$$g_{nj} = \frac{1-x^2}{(1-x^2)^2 + b^2 x^2} \quad (2.3.13)$$

$$g_{kj} = \frac{bx}{(1-x^2)^2 + b^2 x^2} \quad (2.3.14)$$

$$g_{aj} = \frac{bx^2}{(1-x^2)^2 + b^2 x^2} \quad (2.3.15)$$

gelten. Nun sind g_{nj} , g_{kj} und g_{aj} nur von zwei Größen abhängig, nämlich x und b . Sie sind in Abb. 2.3.2 dargestellt.

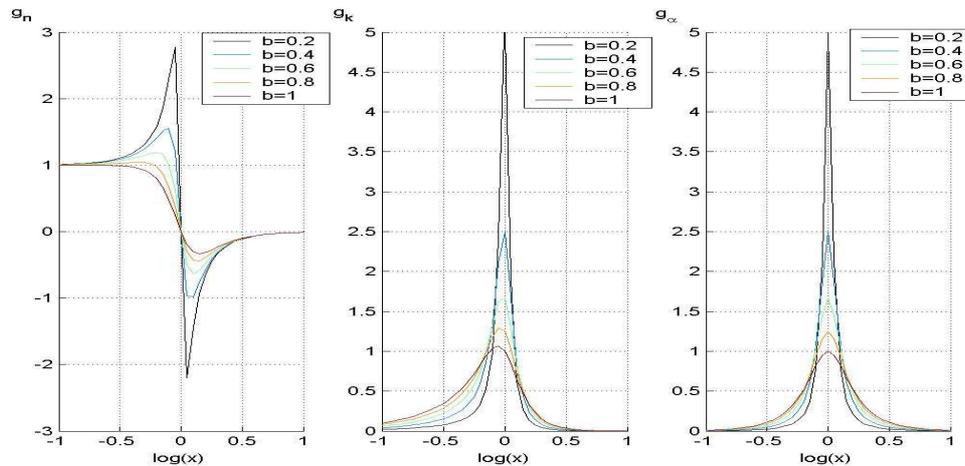


Abb. 2.3.2 Abhängigkeit des g_{nj} , g_{kj} und g_{aj} von x und b .

In einem Bereich weit von der Nachbarschaft der nächsten zwei Resonanzen, z.B. ω_{j-1} und ω_j , steigt die n -Kurve allmählich mit wachsendem ω . Gerade vor der Resonanzstelle kommt $n(\omega)$ zu einem Maximalwert und sinkt sehr rasch zu einem Minimalwert. Dann beginnt der Zyklus wieder. Dort wo die n -Kurve am raschesten sinkt ist k , und deshalb die Absorption, am höchsten da $\alpha=2k$ für den Absorptionskoeffizient gilt. Im Allgemeinen sieht $n(\omega)$ in einem Zyklus folgendermassen aus und kann in vier Zonen unterteilt werden.

Zone	ω	g_{nj}	g_{kj}
I	$\omega < \omega_j$	Steigt allmählich bis zu einem Maximalwert	Steigt allmählich
II	$\omega < \omega_j$	Fällt rasch vom Maximalwert ab bis auf Null	Steigt rasch zu einem Maximalwert
III	$\omega > \omega_j$	Fällt rasch vom Null bis auf dem Minimalwert	Fällt rasch vom Maximalwert ab
IV	$\omega > \omega_j$	Steigt allmählich vom Minimalwert	Fällt allmählich ab

Tabelle 2.3.1 Aufteilung der Dispersion auf verschiedene Zonen.

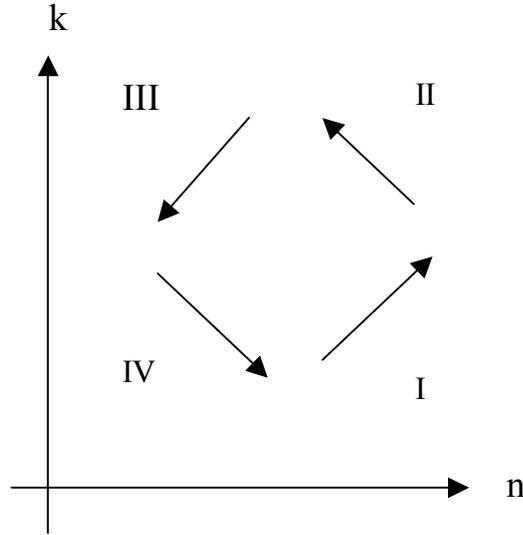


Abb. 2.3.3 Symbolischer Verlauf n & k in Zonen I, II, III, IV

Im Bereich innerhalb Zone I, in dem die Frequenz deutlich kleiner als diejenige der nächsten Resonanzstelle ist ($\omega < \omega_j$), kann man mit der folgenden Annäherung

$$\frac{\omega_j^2 - \omega^2}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2} \cong \frac{1}{\omega_j^2} \left[1 + \left(\frac{\omega_j^2 - \gamma_j^2}{\omega_j^4} \right) \omega^2 + \left(\frac{\omega_j^4 - 3\omega_j^2 \gamma_j^2 + \gamma_j^4}{\omega_j^8} \right) \omega^4 \right] \quad (2.3.16)$$

die Frequenz von der Summe herausziehen, damit sich n als ein Polynom von ω ausdrücken lässt. Wegen des Abstands ist die Wirkung von γ_j nicht spürbar. Man kann den Term $\gamma_j^2 \omega^2$ im Nenner weglassen. Nach dem Einsetzen in (2.3.7) erhält man

$$n(\omega) \cong 1 + \left(\frac{Nq_e^2}{2\varepsilon_0 m_e} \sum_j \frac{r_j}{\omega_j^2} \right) + \omega^2 \left(\frac{Nq_e^2}{2\varepsilon_0 m_e} \sum_j \frac{r_j}{\omega_j^4} \right) + \omega^4 \left(\frac{Nq_e^2}{2\varepsilon_0 m_e} \sum_j \frac{r_j}{\omega_j^6} \right) \quad (2.3.17)$$

Die Gleichung hat die Form der bekannten Cauchy-Formel:

$$n(\lambda) = A_0 + \frac{A_1}{\lambda^2} + \frac{A_2}{\lambda^4} \quad (2.3.18)$$

wobei A_1 , A_2 und A_3 Konstanten sind. Im Allgemeinen ist die Cauchy-Formel nur für nichtleitende Materialien, in einem Spektralbereich mit kleineren Frequenzen als die Resonanzstelle, anwendbar.

Bei der Resonanz absorbiert das Medium die größte Lichtmenge. Mit zunehmender Dämpfung (oder b) ist die Resonanz weniger scharf. Erwähnenswert ist, dass während sich der Höchstbetrag von g_{ω_j} mit wachsendem b immer noch an der Resonanzstelle befindet, liegt die Stelle des Peaks von g_{kj} nicht genau an ω_j sondern verschiebt sich um einen kleinen Abstand in die Richtung des kleineren ω wegen des zusätzlichen Terms $\gamma_j^2 \omega^2$ im Nenner $(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2$. Nach der Ableitung vom Nenner ergibt es sich, dass der Minimalwert des Nenners, bzw. der Maximalwert von g_{kj} , bei $\omega = (\omega_j^2 - \gamma_j^2/2)^{1/2}$ liegt. Der Absorptionsband wird breiter. Traditionell wird die Absorptionsbreite durch die zwei Punkte definiert, bei denen die Absorption halb so groß wie jene des Peaks ist. Alternativ könnte sie durch das Maximum, das Minimum und sogar den Wendepunkt der n -Kurve gekennzeichnet werden. Der Wendepunkte von g_{nj} erfährt ähnliche Verschiebung. Die Nullstellen von g'_{nj} befinden sich an $\omega_{I\pm} = (\omega_j^2 \pm \gamma_j \omega_j)^{1/2}$. Wenn die Dämpfung klein ist, gilt $b \rightarrow 0$ wegen $\gamma_j \ll \omega_j$. Daraus folgt, dass der Höchstwert annäherungsweise an

$$\omega_{I\pm} \approx \omega_j \pm \frac{\gamma_j}{2} \quad (2.3.19)$$

liegt. Bei beschränkter Dämpfung wendet man die Annäherung $|1-x^2| \rightarrow 0$ aus $|\omega - \omega_j| \ll \omega_j$ an und nimmt an, dass beide Größen, $|\omega - \omega_j|$ und γ_j , von gleicher Ordnung sind. Berücksichtigt man nur die niedrigsten summierten Potenzen, $1-x^2$ und b und g''_{nj} , ergeben sich die zwei äusseren Wendepunkten

$$\omega_{II\pm} \approx \omega_j \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_j \quad (2.3.20)$$

während sich der mittlere Wendepunkt bei $\omega_{III} \approx \omega_j$ befindet. Der Abstand zwischen den Höchstpunkten und den äusseren Wendepunkten ist ein guter Anzeiger der Breite der Resonanz und folglich des Dämpfungsfaktors γ_j , da die Abstände beider Punkte jeweils vom mittleren Wendepunkt im linearen Verhältnis mit dem Dämpfungsfaktor stehen: Daher lassen sich γ_j und ω_j bezüglich $\omega_{I\pm}$ und $\omega_{II\pm}$ ausdrücken:

$$\gamma_j \approx 2 \frac{\omega_{I\pm} - \omega_{II\pm}}{\sqrt{3} - 1} \quad (2.3.21)$$

$$\omega_j \approx \frac{\sqrt{3} \omega_{I\pm} - \omega_{II\pm}}{\sqrt{3} - 1} \quad (2.3.22)$$

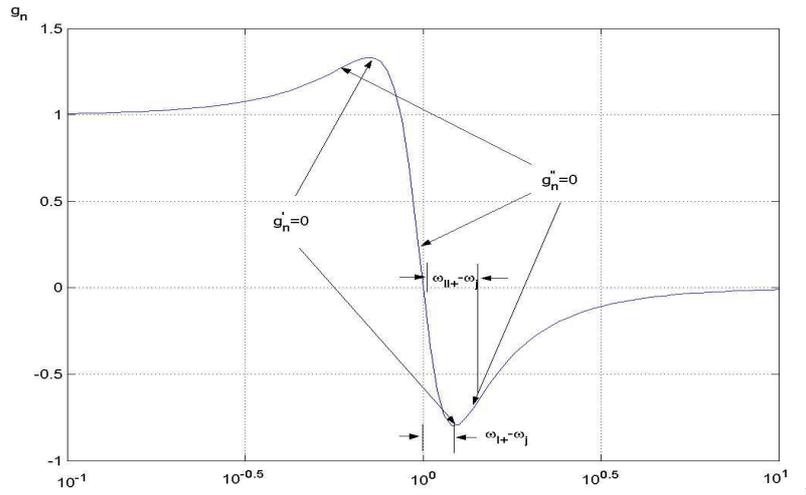


Abb. 2.3.4 Der mittlere Wendepunkt ist wichtig, weil er die Resonanzstelle schätzungsweise festlegt.

Es reicht bereits, nur die Stelle des Höchstpunkts und des Wendepunkts zu kennen, um die Resonanzstelle zu finden, auch wenn die letztere nicht im Messbereich auftaucht. Gegeben sei eine von optischen Messdaten angepasste n -Kurve. Durch Festlegung von drei Punkten kann man den Dämpfungsfaktor bestimmen und daher die Zweckmässigkeit des Dämpfungsmodells quantifizieren. Interessanterweise stehen die zwei in Frage kommenden Abstände in einer Pythagoraschen Beziehung mit γ_j :

$$(\omega_I - \omega_j)^2 + (\omega_{II} - \omega_j)^2 = \gamma_j^2 \quad (2.3.23)$$

2.4 Optische Funktionen

2.4.1 Jones Formulierung

Der Lösungsansatz (2.2.14) beschreibt eine abstrakte Welle im mathematischen Raum. Die entsprechende Lösung im physikalischen Raum ist im reellen Teil

$$\text{Re}[\vec{E}(\vec{r}, t)] = \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (2.4.1)$$

enthalten, der den zeitlichen und räumlichen Verlauf der elektrischen Feldstärke einer linear polarisierten, ebenen gedämpften Welle mit Kreisfrequenz ω und Ausbreitungsrichtung, parallel zum Wellenvektor \vec{k} beschreibt. Wegen

$$\vec{E} \cdot \vec{k} = 0 \quad (2.4.2)$$

ist Licht eine transversale Welle, bei der das elektrische Feld (und das magnetische Feld) senkrecht zur Ausbreitungsrichtung steht. Da eine Überlagerung von zwei beliebigen Wellen wieder eine Lösung ist, kann der Polarisationszustand von linear auf elliptisch verallgemeinert werden. Der in der Polarisationssebene, senkrecht zur Ausbreitungsrichtung oszillierende elektrische Feldvektor, kann durch Zerlegung in zwei beliebige Polarisationsrichtungen zum Ausdruck gebracht werden. Es ist üblich, die Polarisationszustände in einem System von zwei orthogonalen Basisvektoren zu beschreiben. Legt man die Ausbreitungsrichtung in der z-Achse, lautet die allgemeinste ebene Welle im kartesischen Koordinatensystem und in Matrix-Darstellung

$$\vec{E}(z, t) = \begin{pmatrix} E_x \cos(kz - \omega t + \delta_x) \\ E_y \cos(kz - \omega t + \delta_y) \end{pmatrix} \quad (2.4.3)$$

wobei E_x und E_y die Feldamplituden der Komponenten in der jeweiligen Richtung sind. Mathematisch kann die Behandlung der Polarisation, als Sachverhalt der linearen Algebra, mit komplexen mathematischen Wellen besser umgehen, deren Matrix-Darstellung lautet:

$$\vec{E}(z, t) = \begin{pmatrix} E_x e^{i(kz - \omega t + \delta_x)} \\ E_y e^{i(kz - \omega t + \delta_y)} \end{pmatrix} \quad (2.4.4)$$

Der Polarisationszustand kann, nach dem Weglassen der zeitlichen und räumlichen Information, repräsentativ durch den Jones-Vektor

$$\vec{E}(z = 0) = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{x0} e^{i\delta_x} \\ E_{y0} e^{i\delta_y} \end{pmatrix} \quad (2.4.5)$$

kompakt beschrieben werden, in den die vollständige Information der Polarisation, Amplituden $|E_x|$ und $|E_y|$, und die Phasen δ_x und δ_y , der beiden Vektoren E_x und E_y eingehen. Aus dem Jones-Vektor kann die gesamte Welle

$$\vec{E}(z, t) = \text{Re} \left[\vec{E}(z = 0) e^{i(kz - \omega t)} \right] \quad (2.4.6)$$

rekonstruiert werden. Mit dieser Formulierung können die eintretenden elektrischen Felder in ein System und die austretenden elektrischen Felder aus dem System über eine 2x2 Jones-, oder eine dazu äquivalente Müller-Matrix miteinander verknüpft.

$$\begin{pmatrix} E_{x,aus} \\ E_{y,aus} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x,ein} \\ E_{y,ein} \end{pmatrix} \quad (2.4.7)$$

Eine explizite Rechnung einer optischen Funktion ist nur mit bestimmten physikalischen Einschränkungen und der Annahme des optischen Systems möglich. Diesbezüglich benötigt man ein optisches Modell, das aus planparalleler Stapelung von homogenen Schichten mit wohl-definierten Dicken und optischen Konstanten besteht. Im Allgemeinen kann die Transmission eines Lichtstrahls durch diesen Strahlengang über Multiplikation von mehreren Jones-Matrizen beschrieben werden. Das Koordinatensystem für diese 2x2 Matrizen entspricht den Richtungen parallel und senkrecht zur Einfallsebene.

Zur Berechnung einfacher Systeme gibt es eine alternative Vorgehensweise. Da unten besteht das einfachste, nicht triviale System aus zwei Medien (Medium j und Medium $j+1$) mit unterschiedlichen dielektrischen Eigenschaften. Trifft ein Lichtstrahl aus einem Medium auf die Grenzfläche zwischen den zwei Medien, wird ein Teil des Lichts unter dem gleichem Winkel des einfallenden Lichtstrahls reflektiert. Der Rest dringt in das neue Medium (Medium $j+1$) ein und ändert seine Richtung gemäss dem Brechungsgesetz von Snellius. Licht, das parallel (\parallel) zur Einfallsebene polarisiert ist, wird anders reflektiert als senkrecht (\perp) zur Einfallsebene polarisiertes Licht. Mit der Zerlegung der Jones-Vektoren der einfallenden, reflektierten bzw. durchgedrungenen elektrischen Felder in diese zwei Richtungen

$$\vec{E}_{j,ein}(z=0) = \begin{pmatrix} E_{\parallel,j,ein} \\ E_{\perp,j,ein} \end{pmatrix} \quad (2.4.8)$$

$$\vec{E}_{j,aus}(z=0) = \begin{pmatrix} E_{\parallel,j,aus} \\ E_{\perp,j,aus} \end{pmatrix} \quad (2.4.9)$$

$$\vec{E}_{j+1,ein}(z=0) = \begin{pmatrix} E_{\parallel,j+1,ein} \\ E_{\perp,j+1,ein} \end{pmatrix} \quad (2.4.10)$$

und mit der Forderung, dass die Transversalkomponenten des elektrischen und des magnetischen Feldes die Grenzfläche stetig passieren, können die *Fresnelschen* Formeln hergeleitet werden. Man erhält Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für die Polarisationsrichtungen parallel und senkrecht zur Einfallsebene

$$r_{\parallel,j,j+1} = \frac{E_{\parallel,j,aus}}{E_{\parallel,j,ein}} = \frac{\tilde{n}_{j+1} \cos \phi_j - \tilde{n}_j \cos \phi_{j+1}}{\tilde{n}_{j+1} \cos \phi_j + \tilde{n}_j \cos \phi_{j+1}} \quad (2.4.11)$$

$$r_{\perp,j,j+1} = \frac{E_{\perp,j,aus}}{E_{\perp,j,ein}} = \frac{\tilde{n}_j \cos \phi_j - \tilde{n}_{j+1} \cos \phi_{j+1}}{\tilde{n}_j \cos \phi_j + \tilde{n}_{j+1} \cos \phi_{j+1}} \quad (2.4.12)$$

$$t_{\parallel j,j+1} = \frac{E_{\parallel j+1,aus}}{E_{\parallel j,ein}} = \frac{2\tilde{n}_j \cos \phi_j}{\tilde{n}_{j+1} \cos \phi_j + \tilde{n}_j \cos \phi_{j+1}} \quad (2.4.13)$$

$$t_{\perp j,j+1} = \frac{E_{\perp j+1,aus}}{E_{\perp j,ein}} = \frac{2\tilde{n}_j \cos \phi_j}{\tilde{n}_j \cos \phi_j + \tilde{n}_{j+1} \cos \phi_{j+1}} \quad (2.4.14)$$

Die Koeffizienten sind komplex und geben das Verhältnis von einfallender und reflektierter, das Verhältnis von einfallender und durchgedrungener elektrischer Feldstärke an. Bei der Reflexion an bzw. Transmission durch ein System mit drei Medien (gekennzeichnet mit tiefgestellten 1, 2 und 3), müssen die Vielfachreflexionen an beiden Grenzflächen aufsummiert und der Amplitudenverlauf im Innern der mittleren Schicht berücksichtigt werden. Die Herleitung der Reflexionskoeffizienten und Transmissionskoeffizienten wird in vielen Büchern [Dit76, Hea70, Bor59] ausführlich behandelt und wird an dieser Stelle deshalb nicht ausführlicher beschrieben. Sie errechnen sich aus den Reflexionskoeffizienten der einzelnen Phasengrenzen und sehen wie folgt aus.

$$r_{\parallel 123} = \frac{r_{\parallel 12} + r_{\parallel 23} Z}{1 + r_{\parallel 12} r_{\parallel 23} Z} \quad (2.4.15)$$

$$r_{\perp 123} = \frac{r_{\perp 12} + r_{\perp 23} Z}{1 + r_{\perp 12} r_{\perp 23} Z} \quad (2.4.16)$$

$$t_{\parallel 123} = \frac{t_{\parallel 12} t_{\parallel 23} Z}{1 + r_{\parallel 12} r_{\parallel 23} Z} \quad (2.4.17)$$

$$t_{\perp 123} = \frac{t_{\perp 12} t_{\perp 23} Z}{1 + r_{\perp 12} r_{\perp 23} Z} \quad (2.4.18)$$

mit

$$Z = \exp(-i2\beta) \quad (2.4.19)$$

$$\beta = 2\pi \left(\frac{d_2}{\lambda} \right) (n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \phi_1)^{\frac{1}{2}} \quad (2.4.20),$$

wobei die Indizes 12 und 23 der Fresnelkoeffizienten die Phasengrenze zwischen Medium 1 und Medium 2, bzw. zwischen Medium 2 und Medium 3, bezeichnen.

2.5 Ellipsometrische Funktionen

Das Prinzip der Ellipsometrie geht auf Paul Drude (1864 - 1906) zurück. Mit Hilfe eines Ellipsometers wird die Änderung des Polarisationszustandes des Lichts nach erfolgter Reflexion an einer Probe bestimmt. Neben Lichtquelle und Detektor bilden Polarisator, Probe und Analysator die Grundelemente des optischen Strahlengangs. Polarisator und Analysator sind Elemente, die nur für das Licht einer bestimmten Polarisationsrichtung durchlässig sind. Die Transmissionsachse des Polarisators sei um den Winkel P , die des Analysator um den Winkel A gegenüber der Einfallsebene geneigt. Wir betrachten eine ebene Lichtwelle. Der Polarisationszustand der einfallenden (E_{ein}) und reflektierten (E_{aus}) Welle lässt sich mit Hilfe der Jones-Notation aus (2.4.5) wie folgt beschreiben:

$$\vec{E}_{\text{ein}}(z=0) = \begin{pmatrix} E_{\parallel, \text{ein}} \\ E_{\perp, \text{ein}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{\parallel, \text{ein}} e^{i\varphi_{\parallel, \text{ein}}} \\ E_{\perp, \text{ein}} e^{i\varphi_{\perp, \text{ein}}} \end{pmatrix} \quad (2.5.1)$$

$$\vec{E}_{\text{aus}}(z=0) = \begin{pmatrix} E_{\parallel, \text{aus}} \\ E_{\perp, \text{aus}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{\parallel, \text{aus}} e^{i\varphi_{\parallel, \text{aus}}} \\ E_{\perp, \text{aus}} e^{i\varphi_{\perp, \text{aus}}} \end{pmatrix} \quad (2.5.2)$$

Wenn die Durchlassrichtung parallel zur Einfallsebene liegt, wird die Transmission durch einen Polarisator durch die Matrix

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5.3)$$

beschrieben. Da die Transmissionsrichtung des Polarisators um den Winkel P gegenüber der Einfallsebene geneigt ist, wird \hat{T} bezüglich des Koordinatensystems transformiert. Hierzu benutzt man eine Drehmatrix

$$\hat{D}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (2.5.4),$$

wobei α dem Drehwinkel entspricht. Die Reflexion an der Probe wird durch eine Matrix

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} r_{\parallel} & 0 \\ 0 & r_{\perp} \end{pmatrix} \quad (2.5.5)$$

beschrieben. Die Reflexionskoeffizienten der Probe, r_{\parallel} und r_{\perp} , seien als Eigenwerte in diesem Koordinatensystem gegeben. Bei isotropen Proben hat die Jones-Matrix nur Diagonalelemente. Nach der Reflexion an der Probe passiert der Lichtstrahl den Analysator, dessen Transmissionsachse um den Winkel A gegenüber der Einfallsebene geneigt ist, bevor er auf den Detektor fällt. Die

Behandlung ist analog zur Beschreibung der Transmission durch den Polarisator. Man erhält nach dem Durchgang eines monochromatischen Lichtstrahls durch den Strahlengang die Feldstärke E_{aus} im Detektor.

$$E_{aus} = [\hat{D}(-A)\hat{T}_{Analytator}\hat{D}(A)]\hat{R}[\hat{D}(-P)\hat{T}_{Polarisator}\hat{D}(P)]E_{ein} \quad (2.5.6)$$

In einer ellipsometrischen Messung wird die Änderung des Polarisationszustand durch die Reflexion an einer Probe bestimmt. Die Änderung des Polarisationszustands wird durch die ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ erfasst:

$$\Psi = \tan^{-1} \left| \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} \right| = \tan^{-1} \left(\frac{|E_{\parallel,aus}|/|E_{\parallel,ein}|}{|E_{\perp,aus}|/|E_{\perp,ein}|} \right) \quad (2.5.7)$$

$$\Delta = \delta_{\parallel} - \delta_{\perp} = (\varphi_{\parallel,aus} - \varphi_{\perp,aus}) - (\varphi_{\parallel,ein} - \varphi_{\perp,ein}) \quad (2.5.8),$$

wobei sich die Reflexionskoeffizienten

$$r_{\parallel} = \frac{E_{\parallel,aus}}{E_{\parallel,ein}} = \frac{|E_{\parallel,aus}| e^{i\varphi_{\parallel,aus}}}{|E_{\parallel,ein}| e^{i\varphi_{\parallel,ein}}} = \frac{|E_{\parallel,aus}|}{|E_{\parallel,ein}|} e^{i(\varphi_{\parallel,aus} - \varphi_{\parallel,ein})} = |r_{\parallel}| e^{i\delta_{\parallel}} \quad (2.5.9)$$

$$r_{\perp} = \frac{E_{\perp,aus}}{E_{\perp,ein}} = \frac{|E_{\perp,aus}| e^{i\varphi_{\perp,aus}}}{|E_{\perp,ein}| e^{i\varphi_{\perp,ein}}} = \frac{|E_{\perp,aus}|}{|E_{\perp,ein}|} e^{i(\varphi_{\perp,aus} - \varphi_{\perp,ein})} = |r_{\perp}| e^{i\delta_{\perp}} \quad (2.5.10)$$

aus (2.5.1 und 2.5.2) ergeben. Ψ nimmt Werte von 0° bis 90° und Δ von 0° bis 360° an. Dabei ist Δ die Phasendifferenz zwischen paralleler und senkrechter Richtung des komplexen Fresnel Reflexionskoeffizienten (r_{\parallel} und r_{\perp}) bei gegebener Wellenlänge und gegebenem Einfallswinkel. Hingegen ist $\tan(\Psi)$ ein Mass für die Änderung des Amplitudenverhältnisses von r_{\parallel} und r_{\perp} . Aus (2.5.5 und 2.5.6) folgt die ellipsometrische Gleichung aus dem Verhältnis der komplexen Reflexionskoeffizienten r_{\parallel} und r_{\perp} :

$$\rho = \tan \Psi \cdot \exp(i\Delta) = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{|r_{\parallel}| e^{i\delta_{\parallel}}}{|r_{\perp}| e^{i\delta_{\perp}}} = \frac{|E_{\parallel,aus}|/|E_{\parallel,ein}|}{|E_{\perp,aus}|/|E_{\perp,ein}|} \quad (2.5.11)$$

Sowohl die ellipsometrischen Winkel als auch die ellipsometrische Gleichung werden ellipsometrische Funktionen genannt. Bei optischen Systemen mit zwei bzw. drei Medien sehen die ellipsometrischen Funktionen wie folgt aus:

$$\rho_{12} = \tan \Psi_{12} \cdot \exp(i\Delta_{12}) = \frac{r_{\parallel 12}}{r_{\perp 12}} \quad (2.5.12)$$

$$\Psi_{12} = \tan^{-1} \left| \frac{r_{\parallel 12}}{r_{\perp 12}} \right| \quad (2.5.13)$$

$$\Delta_{12} = \arg \left(\frac{r_{\parallel 12}}{r_{\perp 12}} \right) \quad (2.5.14)$$

Unter $F(M_3)$ kommt lediglich das Subskript 123 vor, das für das klassische Modell {Luft | Film | Substrat} steht.

$$\rho_{123} = \tan \Psi_{123} \cdot \exp(i\Delta_{123}) = \frac{r_{\parallel 123}}{r_{\perp 123}} \quad (2.5.15)$$

$$\Psi_{123} = \tan^{-1} \left| \frac{r_{\parallel 123}}{r_{\perp 123}} \right| \quad (2.5.16)$$

$$\Delta_{123} = \arg \left(\frac{r_{\parallel 123}}{r_{\perp 123}} \right) \quad (2.5.17)$$

$$\left(\tilde{n}^2 - \sin^2 \phi \right)^{\frac{1}{2}} = \eta - i\gamma \quad (2.5.18)$$

2.6 Optisches Modell

Eine optische Funktion ist sowohl von der Zusammensetzung als auch von der Größe des optischen Modells abhängig. Die Modellabhängigkeit eines Systems mit M -Schichten kann als $F(M_m)$ kompakt ausgedrückt werden. Beispielsweise entspricht $F(M_2)$ einer optischen Funktion in Bezug auf ein Modell mit zwei Schichten. Das Modell kann sich, wie (2.4.11), (2.4.12), (2.4.13) und (2.4.14), auf das Untersystem {Schicht j | Schicht $j+1$ } beziehen, oder wie (2.5.11), (2.5.12), (2.5.13) und (2.5.14), auf das System {Luft | Substrat} beziehen. Zur Menge $F(M_3)$ gehören beispielsweise (2.4.15), (2.4.16), (2.4.17), (2.4.18), (2.5.15), (2.5.16) und (2.5.17). Im Allgemeinen kann man die Berechnung mit Hilfe der Jones Matrix und der Müller Matrix systematisch induktiv durchführen. Bei einer optischen Funktion gehen sowohl alle physikalischen Größen als auch intrinsische Parameter der einzelnen Materialien des optischen Systems in die Menge der unabhängigen Variablen ein. Dabei gilt $X = \{n_1, k_1, d_1, n_2, k_2, d_2, \dots, n_m, k_m, d_m\}$. Da die Reihenfolge und die Anordnung eine Rolle spielen, kann ein m -Schicht Modell, einschliesslich der Luft und des Substrats, durch eine $m \times 3$ Matrix

$$M_{m,3} = \begin{bmatrix} n_1 & k_1 & d_1 \\ n_2 & k_2 & d_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ n_m & k_m & d_m \end{bmatrix}$$

dargestellt werden, wobei jede 1x3-Untermatrix für eine Schicht steht. So entspricht beispielsweise $L_{13}=[n_1 \ k_1 \ d_1]$ der obersten Schicht, $L_{23}=[n_2 \ k_2 \ d_2]$ der zweiten usw.. Eine Stapelung von m Schichten kann als

$$M_{m,3} = \begin{bmatrix} L_{1,3} \\ L_{2,3} \\ \vdots \\ \vdots \\ L_{m,3} \end{bmatrix}$$

dargestellt werden, wobei $L_{i3}=[n_i \ k_i \ d_i]$ für die i -te Schicht steht. Wegen mangelnden Raumes wird für die Darstellung die Transponierung $M_{m3}=[L_{1,3}^\dagger \ L_{2,3}^\dagger \ \dots \ L_{m,3}^\dagger]^\dagger$ verwendet. Wenn die Anzahl der Variablen jeder Schicht bekannt ist, kann man die Darstellung, nach dem Weglassen des Suffixes 3, auf $M_m=[L_1^\dagger \ L_2^\dagger \ \dots \ L_m^\dagger]^\dagger$ vereinfachen. Ein optisches Modell lässt sich durch Herstellung eines Schichtsystems realisieren. An dieser Stelle ist es zweckmässig, zwischen dem optischen Modell und der Angabe der physikalischen Zusammensetzung eines Schichtsystems zu unterscheiden. Die letztere wird anschaulich in $\{\}$ eingeschlossen: $\{\text{Mat}_1 \ | \ \text{Mat}_2 \ | \dots \ | \ \text{Mat}_n\}$. Bezüglich jedes physikalischen Schichtsystems gibt es ein unmittelbares optisches Modell, das einfach durch Schicht-für-Schicht Umschreibung aus dem physikalischen Modell entstanden ist: $M_m = [L_1^\dagger L_2^\dagger \dots L_m^\dagger]^\dagger \doteq \{\text{Mat}_1 \ | \ \text{Mat}_2 \ | \dots \ | \ \text{Mat}_m\}$. Jedoch ist die Darstellung des optischen Modells nicht mathematisch eindeutig. Es können zwei optische Modelle M_a und M_b vorkommen, die die Bedingung $F(M_a)=F(M_b)$ erfüllen. In diesem Fall werden M_a und M_b als gleichwertig gegenüber der betroffenen optischen Funktion F definiert, dargestellt als $M_a \cong M_b$. Wenn sich mehrere physikalische Modelle auf ein gemeinsames optisches Modell beziehen, ist es zweckmässiger, das mathematisch einfachste optische Modell als den allgemeinen Vertreter auszuwählen.

Betrachten wir nun das allereinfachste physikalische Modell $\{\text{Luft} \ | \ \text{Mat} \ | \ \text{Luft}\}$ als Beispiel. Daraus folgt das unmittelbare optische Modell

$$M_3 = [L_1^\dagger L_2^\dagger L_3^\dagger]^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n & k & d \\ 1 & 0 & \infty \end{bmatrix}.$$

Sowohl bei transmissionsbezogenen als auch bei reflexionsbezogenen Messungen müssen die von den Schichtgrenzen mehrfach reflektierten Komponenten berücksichtigt werden. Je nach Größe von d muss man beim Summieren der Komponenten auf kohärente oder nicht-kohärente Interferenzen

achten. Die Transparenz des Materials ist wellenlängenabhängig: für Glass beispielsweise im sichtbaren Bereich und für Silizium im Infrarotbereich. Die mittlere Schicht wird überflüssig, wenn $k > 0$ gilt und kd genügend groß ist, indem das eingedrungene Licht schon vor dem Auftauchen auf der anderen Seite der Schicht vollständig absorbiert wird. Die Größenordnung der Eindringtiefe von Metallen liegt zwischen ein- und zweihundert Nanometern. In einem solchen Fall kann d als unendlich groß gleichgestellt werden. Die Oberfläche der Schicht dient als Substrat, als ob die Reflexion auf {Luft | Schicht} durchgeführt wird. Das unmittelbare optische Modell M_3 wird mit $M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n & k & \infty \end{bmatrix}$ gleichwertig und daher gilt $M_3 \cong M_2$. Weil die Schichtdicke keine Rolle spielt, kann die Darstellung als $M_2 = \begin{bmatrix} n_1 & k_1 \\ n_2 & k_2 \end{bmatrix}$ vereinfacht werden. Dies trifft auch für Materialien im transparenten Bereich zu, wenn die rückseitige Reflexion durch Aufrauen verhindert wird. In der vorliegenden Dissertation sind alle ellipsometrischen Messungen in der Luft durchgeführt worden. Daher gilt bei der ersten Schicht $n_1=1$, $k_1=0$, und $d=\infty$. Dazu sind sie alle auf Reflexion bezogen. Es folgt, dass die letzte Schicht dem Substrat entspricht. Untersucht wurden einseitig poliertes Silizium, dickes Gold und rückseitig angerautes Glas. Daher gilt $L_m = [n_m \ k_m \ \infty]$. In über 90% der Publikationen im Gebiet der ellipsometrischen Invertierung wird es ebenfalls mit dem Einschichtsystem $M_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n_2 & k_2 & d_2 \\ n_3 & k_3 & \infty \end{bmatrix}$ gearbeitet.

2.7 Optische Invertierung

Die optische Charakterisierung eines Materials besteht darin, seine optischen Konstanten n und k durch Invertieren der gemessenen optischen Funktionen zu bestimmen. Bis auf wenige Fälle (Kapitel 6), beispielsweise $[[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n \ k \ \infty]^\dagger]^\dagger$ und $[[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n \ k \ \infty]^\dagger [n_{\text{sub}} \ k_{\text{sub}} \ \infty]^\dagger]^\dagger$ mit bekannter n_{sub} und k_{sub} , ist der Invertierungsvorgang im Allgemeinen nicht analytisch. Auch wenn es der Fall ist, kann man weder direkt noch einfach auf die Lösung kommen. Numerische Anpassungen sind notwendig.

i. Monochromatische Invertierung

Um p unbekannte Variablen, $\{x_{1,\lambda_i}, x_{2,\lambda_i}, \dots, x_{p,\lambda_i}\} \in X_{\lambda_i}$ in einem optischen Modell M bei einer gegebenen Wellenlänge λ_i zu bestimmen, sind im Allgemeinen q optische Messungen, $\{F_{1,\lambda_i}^{\text{meas}}, F_{2,\lambda_i}^{\text{meas}}, \dots, F_{q,\lambda_i}^{\text{meas}}\} \in \mathcal{F}_{\lambda_i}$, erforderlich, wobei $q \geq p$. Sowohl die Variablen als auch die optischen Funktionen lassen sich

als Vektoren, $\vec{x}_{\lambda_i} = (x_{1,\lambda_i}, x_{2,\lambda_i}, \dots, x_{p,\lambda_i})$ bzw. $\vec{F}_{\lambda_i}^{meas} = (F_{1,\lambda_i}^{meas}, F_{2,\lambda_i}^{meas}, \dots, F_{q,\lambda_i}^{meas})$, kompakt ausdrücken. Da die gesuchten Funktionen $\vec{F}_{\lambda_i}^{theo} = (F_{1,\lambda_i}^{theo}, F_{2,\lambda_i}^{theo}, \dots, F_{q,\lambda_i}^{theo})$ modellabhängig sind, kann man sie als $\vec{F}(M(\vec{x}_{\lambda_i})) = (F_1(M(\vec{x}_{\lambda_i})), F_2(M(\vec{x}_{\lambda_i})), \dots, F_q(M(\vec{x}_{\lambda_i})))$ schreiben. Daher kann die monochromatische Bestimmung des Lösungsvektors \vec{x}_{λ_i} aus dem Vektor der optischen Funktionen $\vec{F}_{\lambda_i}^{meas}$ als eine Umkehrfunktion, $\vec{F}_{\lambda_i}^{meas} \mapsto \vec{x}_{\lambda_i}$ dargestellt werden. Die Anpassung besteht darin, verschiedene Werte von \vec{x}_{λ_i} nachzuprüfen, bis die Theorie $\vec{F}(M(\vec{x}_{\lambda_i}))$ der Messung $\vec{F}_{\lambda_i}^{meas}$ am besten passt. Mathematisch kann die Anpassungsfähigkeit im Allgemeinen durch eine Abstands- oder Fehlerfunktion

$$err(\vec{x}_{\lambda_i}) = dist(\vec{F}(M(\vec{x}_{\lambda_i})), \vec{F}_{\lambda_i}^{meas}) \quad (2.7.1)$$

quantifiziert werden. Eine am häufigsten, ebenfalls vom *Spectraray* Programm der SENTECH benutzte Fehlerfunktion, ist der ungewichtete quadratische Mittelwert, der als *LSQ* bezeichnet wird:

$$LSQ(\vec{x}_{\lambda_i}) = \frac{1}{q} \sqrt{\sum_{j=1}^q (F_j(M(\vec{x}_{\lambda_i})) - F_{j,\lambda_i}^{meas})^2} \quad (2.7.2)$$

Dies ist eigentlich ein spezieller Fall des gewichteten quadratischen Mittelwertes, wobei jeder Term durch Division seiner entsprechenden Fehler korrigiert wird. Theoretisch ist die allgemeine, ungewichtete Option genauer, wobei allerdings noch zahlreiche grundlegende Fragen [Jel93] ungeklärt sind. Daher wird in dieser Arbeit nicht auf diese Option verzichtet.

Bei der obigen Fehlerfunktion befindet sich die beste Anpassung an der globalen Nullstelle $\vec{x}_{\lambda_i}^{(0)} \in X_{\lambda_i}$, bei der

$$LSQ(\vec{x}_{\lambda_i}^{(0)}) = \frac{1}{q} \sqrt{\sum_{j=1}^q (F_j(M(\vec{x}_{\lambda_i}^{(0)})) - F_{j,\lambda_i}^{meas})^2} < LSQ(\vec{x}_{\lambda_i}) \quad \forall \vec{x}_{\lambda_i} \in X_{\lambda_i}, \quad (2.7.3)$$

das globale Minimum ist. Für mehrwinklige ellipsometrische Messungen, die uns jetzt betreffen, gilt

$$LSQ(\vec{x}_{\lambda_i}) = \frac{1}{q} \sqrt{\sum_{j=1}^q \left\{ \left[\psi_j(M(\vec{x}_{\lambda_i})) - \psi_{j,\lambda_i}^{meas} \right]^2 + \left[\Delta_j(M(\vec{x}_{\lambda_i})) - \Delta_{j,\lambda_i}^{meas} \right]^2 \right\}} \quad (2.7.4)$$

wobei q der Anzahl Messungen an verschiedenen Winkeln entspricht, während $2q$ der Anzahl optischer Funktionen entspricht und $2q > p$ gilt. Wegen der Winkelabhängigkeit kann man die obenstehende Beziehung wie folgt ausdrücken:

$$LSQ(\bar{x}_{\lambda_i}) = \frac{1}{q} \sqrt{\sum_{j=1}^q \left\{ \left[\psi(M(x_{1,\lambda_i}, x_{2,\lambda_i}, \dots, x_{p,\lambda_i}), \phi_j) - \psi_{\phi_j, \lambda_i}^{meas} \right]^2 + \left[\Delta(M(x_{1,\lambda_i}, x_{2,\lambda_i}, \dots, x_{p,\lambda_i}), \phi_j) - \Delta_{\phi_j, \lambda_i}^{meas} \right]^2 \right\}} \quad (2.7.5)$$

ii. Spektroskopische Invertierung

Bei einer spektroskopischen Messung kann die Invertierung immer nach dem obigen Vorgang Messpunkt-für-Messpunkt für den ganzen spektralen Bereich (Wellenlänge-für-Wellenlänge) ausgeführt werden. Bei N Messpunkten verläuft der Wellenlängenindex i in den Gleichungen (2.7.1) bis (2.7.5) von 1 bis N . Dabei sind N Fehlerfunktionen zu berechnen und N Lösungsvektoren \bar{x}_{λ_i} anzupassen. In keinem Fall sind die Lösungsvektoren völlig unabhängig voneinander, da die physikalischen Variablen wellenlängenabhängig sind. Als erstes sollte jede Schichtdicke konstant bezüglich der Wellenlänge bleiben. Was die optischen Konstanten angeht, stehen sie an verschiedenen λ_i miteinander in Beziehung. Bei vielen Materialien sind solche Formeln bereits bekannt, u.a. die Cauchy-Formel, Sellmeier-Formel [Bor93], Forouhi-Bloomer-Formel [For86]. In solchem Fall wird der Lösungsvektor als Funktion der Wellenlänge beschrieben: $\bar{x}(\lambda) = (x_1(\lambda), x_2(\lambda), \dots, x_p(\lambda))$. Der anzupassende Vektor der optischen Funktionen wird $\vec{F}(M(\bar{x}(\lambda)))$, deren Modellabhängigkeit eine zusätzliche Dimension der Wellenlänge besitzt. Daher werden die Np anzupassenden Variablen je nach der Form der Formel auf eine Dutzend Parameter reduziert, die die Wellenlängenabhängigkeit der Vektoren erzeugt. Daher gibt es nicht ein Spektrum von N Fehlerfunktionen, sondern eine Fehlerfunktion für das ganze Spektrum von N Messpunkten.

$$LSQ(\bar{x}) = \frac{1}{2Nq} \sqrt{\sum_i^N \sum_{j=1}^q \left\{ \left[\psi(M(x_{1,\lambda_i}, x_{2,\lambda_i}, \dots, x_{p,\lambda_i}), \phi_j) - \psi_{\phi_j, \lambda_i}^{meas} \right]^2 + \left[\Delta(M(x_{1,\lambda_i}, x_{2,\lambda_i}, \dots, x_{p,\lambda_i}), \phi_j) - \Delta_{\phi_j, \lambda_i}^{meas} \right]^2 \right\}} \quad (2.7.6)$$

Statt N globale Nullstellen gibt es nur eine Nullstelle $\bar{x}^{(0)}$ zu bestimmen.

2.8 Modellabhängigkeit

Zuallererst hängt die Richtigkeit der globalen Nullstelle einer Anpassung von der Angemessenheit des entsprechenden optischen Modells ab. Bei einem unangemessenen optischen Modell kann sich die globale Nullstelle zu einer lokalen Nullstelle umwandeln und umgekehrt. Der vom angenommenen optischen Modell verursachte Fehler sollte so gering wie möglich sein, dass die Wanderung der globalen Nullstelle aus der gewünschten Stelle mit zunehmender Abweichung nur allmählich geschieht. Die Nullstelle sollte sich nicht sprungweise plötzlich zu einer lokalen Nullstelle umwandeln. Auch wenn ein ideales optisches Modell mit einem angemessenen $\bar{x}_\lambda^{(0)}$ existiert und getroffen wird, ist die Suche nach der globalen Nullstelle nicht gesichert. Eine Grundeigenschaft der optischen Funktion ist Surjektivität: $F(M_a)=F(M_b) \Rightarrow M_a=M_b$. Anders ausgedrückt ist ein optisches Modell M_a , das mittels einer bestimmten optischen Funktion auf ein gegebenes Bild abgebildet ist, nicht eindeutig. Das heisst, es könnte ein anderes M_b geben, das mittels der gleichen optischen Funktion auf das gleiche gegebene Bild abgebildet ist. In Bezug auf diese Eigenschaft sind einige Merkmale bei der Invertierung zu bemerken. Eine mathematische Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung, $F(M_m) \approx F_{\text{meas}}$, garantiert nicht eine Entsprechung der physikalischen Realität. Unter welchen Bedingungen ein solcher Zufall geschehen wird, ist bisher nie systematisch untersucht worden. Bei der monochromatischen Anpassung besteht die Möglichkeit, dass ein optisches Modell als ein anderes verwechselt wird. Allerdings nimmt die Wahrscheinlichkeit mit der Größe des Wellenlängenbereichs ab. Bei der spektroskopischen Invertierung passiert ein solcher Zufall in der Praxis nur ganz unerwartet, ausser wenn die Dispersionen der verschiedenen Schichten, bezüglich spektraler Struktur und Beträgen, in geringem Kontrast zueinander stehen. Üblicherweise ist es schon erfreulich, wenn anhand eines angenommenen optischen Modells $F(M_m) \approx F_{\text{meas}}$ erzielt wird, da ein passendes Modell oft rätselhaft ist. Ohne gegebene physikalische Information über die Beschichtung ist das Rätsel praktisch nicht lösbar. Man kann nur mit dem einfachsten Modell mit der niedrigsten Anzahl Schichten anfangen und Schritt-für-Schritt vorgehen. Es bedeutet nicht, dass es ein universelles Einschichtmodell M_3 gibt, damit $F(M_3) \approx F(M_m)$ gilt. Ganz im Gegenteil ist eine solche Annahme im Allgemeinen ein Irrtum. Ein anzupassendes Modell darf nicht einfacher sein als die Umschreibung aller versteckten und bekannten Schichten. In der Praxis enthält das intuitiv einfachste Modell oft ungenügende Anzahl Schichten. Typischerweise können signifikante Abweichungen auf inhomogene Schichten und unebene Zwischenflächen (einschliesslich Rauheit) zurückgeführt werden. Nicht alle derartigen Abweichungen sind korrigierbar. Bei gewissen Konfigurationen lässt sich der unerwünschte Übergang von einer Schicht zur nächsten, durch eine zusätzliche effektive Zwischenschicht modellieren, die als effektive Mischfunktion f_{eff} der optischen Konstanten der zwei benachbarten Schichten

L_{j-1} und L_j definiert ist. Dabei gilt $L_{j-1,j} = \left[\sqrt{\tilde{\epsilon}_{\text{eff}}(\text{Re}(n_{j-1}^2), \text{Re}(n_j^2), r)} \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\text{eff}}(\text{Im}(k_{j-1}^2), \text{Im}(k_j^2), r)} d \right]$ mit den Randbedingungen: $\tilde{\epsilon}_{\text{eff}}(\tilde{n}_{j-1}, \tilde{n}_j, 0) = \tilde{n}_{j-1}^2$ und $\tilde{\epsilon}_{\text{eff}}(\tilde{n}_{j-1}, \tilde{n}_j, 1) = \tilde{n}_j^2$. In allen Fällen wird n durch die Variable r parametrisiert und \tilde{n} ist kontinuierlich bezüglich r . Es gibt einige Theorien des Effektiven Mediums, die die Einbettung von Material der Schicht j in Schicht $(j-1)$ behandelt. Je nach Theorie ist die Annahme der Einbettungskonfiguration, Gültigkeitsbereich und Beschränkung anders. Unter anderem gibt es die klassische Theorien von Bruggeman [Bru35]:

$$\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{\epsilon}_{j-1}, \tilde{\epsilon}_j, r) = \frac{1}{2} \left[3r(\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1}) - (2\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1}) + \sqrt{9p^2(\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1})^2 - 6p(\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1})(2\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1}) + (2\tilde{\epsilon}_j + \tilde{\epsilon}_{j-1})^2} \right] \quad (2.8.1),$$

und Maxwell-Garnet [Max04]:

$$\tilde{\epsilon}_{\text{Max}}(\tilde{\epsilon}_{j-1}, \tilde{\epsilon}_j, r) = \frac{\tilde{\epsilon}_{j-1} [(\tilde{\epsilon}_j + 2\tilde{\epsilon}_{j-1}) + 2r(\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1})]}{(\tilde{\epsilon}_j + 2\tilde{\epsilon}_{j-1}) - r(\tilde{\epsilon}_j - \tilde{\epsilon}_{j-1})} \quad (2.8.2).$$

Beide haben ihre Beschränkung bei den Anwendungen. Während die erstere nicht die dielektrische Anomalie [Coh73] erklärt, scheitert die letztere bei der Erzeugung der Perkolationschwelle. Eine Verbesserung der beiden Theorien wurde von Sheng [She81] anhand seines Modells [She80] behandelt.

2.9 Iterative kontra unmittelbare Suche nach der globalen Nullstelle

Die Suche nach der globalen Nullstelle, gleichgültig ob nach $\bar{x}_{\lambda_i}^{(0)}$ im Falle der Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung, oder nach $\bar{x}^{(0)}$ im Falle der formelmässigen Invertierung, ist keinesfalls trivial. Ihr Erfolg hängt sowohl vom Algorithmus als auch von der Implementierung ab. Was den Algorithmus angeht, sind grundsätzlich zwei Suchbegriffe zu unterscheiden, einerseits die universelle Suche durch direkten Vergleich und andererseits die iterative Suche. Im Prinzip können beide Suchbegriffe sowohl bei Wellenlänge-für-Wellenlänge als auch bei formelmässiger spektroskopischer Invertierung angewendet werden. Erfahrungsgemäss ist die universelle Suche bei formelmässiger spektroskopischer Invertierung nicht nötig, indem die Dispersionsformel als eine Zwangsbedingung dient, die die spektralen Freiheitsgrade der Unbekannten erheblich reduziert. Daher liegt die globale Nullstelle der spektroskopischen Fehlerfunktion, im Gegensatz zu jener der monochromatischen Fehlerfunktion, in einem deutlichen Tal. Die Schwierigkeit liegt im Allgemeinen darin, auf die geeignete Dispersionsformel zu stossen, ausser wenn die zu charakterisierenden Schicht wohl bekannt ist.

i. Unmittelbare Suche

Im Folgenden wird die universelle Suche der globalen Nullstelle nur bei monochromatischer Invertierung diskutiert, die der Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung zu Grunde liegt. Obwohl in solch einem Fall die Rechenbelastung pro Fehlerfunktion vergleichsweise reduziert wird, ist die Rechensbelastung noch immer zeitaufwendig. Um den Zeitaufwand weiter zu reduzieren, kann man beispielsweise die Suche auf einen kleineren Raum $X_{S(\lambda_i)} \subset X_{\lambda_i}$ beschränken, wobei $\bar{x}^{(0),X_S} \in X_{S(\lambda_i)}$ abzusichern ist. Somit werden $err(\bar{x}_{\lambda_i}^{(1)}), \dots, err(\bar{x}_{\lambda_i}^{(N)})$ für eine dichte Gesamtheit von Punkten $X_{S(\lambda_i)} = \{\bar{x}_{\lambda_i}^{(1)}, \dots, \bar{x}_{\lambda_i}^{(N)}\} \subset X$ berechnet und direkt verglichen, um das Minimum $\bar{x}_{\lambda_i}^{(0),X_S} = \min\{err(\bar{x}_{\lambda_i}^{(1)}), \dots, err(\bar{x}_{\lambda_i}^{(N)})\}$ herauszufinden. Ferner wird $\bar{x}_{\lambda_i}^{(0)}$ durch $\bar{x}_{\lambda_i}^{(0),X_S} \in X_{S(\lambda_i)}$ angenähert, da die Rechensbelastung wegen der Anzahl der einzurechnenden Punkte ohne modernen Generationen von Prozessoren zu groß war. Es ist bekannt, dass für eine ideale Messung mit einem perfekten optischen Modell, wobei $err(\bar{x}^0) = 0$ gilt, aus $err(\bar{x}^{(0),X_{S_1}}) \neq 0$ $\bar{x}^{(0)} \notin X_{S_1}$ folgt. Ein anderer Raum X_{S_1} muss abgetastet werden bis $err(\bar{x}^{(0),X_{S_1}}) = 0$ erfüllt ist. In der Praxis, bei der systematische Fehler und Rauschen in der Messung unvermeidbar sind, ist $err(\bar{x}^0) \neq 0$ zu erwarten. Keineswegs kann man sicherstellen, ob $\bar{x}^{(0),X_i} = \bar{x}^{(0),X}$ gilt. Es ist vielmehr möglich, dass $\exists j$ s.t. $\bar{x}^{(0),X_{S_{i+j}}} < \bar{x}^{(0),X_i}$. Der Suchraum muss X_S groß genug gewählt werden, damit $\bar{x}^{(0)} \in X_S$. Der Suchraum $X_S = \{\bar{x}^{(1)}, \bar{x}^{(2)}, \dots, \bar{x}^{(N)}\}$ muss ebenfalls vergrößert werden, was eine Verlangsamung der Suche zur Folge hat.

ii. Iterative Suche

Vor der Erfindung der modernen Prozessoren war die spektroskopisch nichtiterative Suche nach der globalen Nullstelle, weder Wellenlänge-für-Wellenlänge noch formelmässig, praktisch unbrauchbar. Zahlreiche iterationsbasierte oder angeblich intelligentere Algorithmen wurden zur Implementierung der monochromatischen Invertierung vorgeschlagen und überprüft. Im Gegensatz zu unmittelbarem Suchen ist $X_{S(\lambda_i)}$ eine angeordnete Menge. Die Anordnung von $\bar{x}_{\lambda_i}^{(j)}$, wobei $j \in \{1, 2, \dots, N\}$, wird durch das Suchverfahren, die Form der Fehlerfunktion und die Implementierung der Programmierung vorgeschrieben. Wie bei den meisten kommerziellen Anpassungsprogrammen sind die Zwischenereignisse den Benutzern nicht zugänglich. Bekannt sind lediglich die Eingabe und die Ausgabe. Die effektive Wirkung der Suchroutine kann als eine Funktion $F_I(\bar{x}_{\lambda_i})$ angesehen werden,

fortan iterative Suchfunktion genannt, die $\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)}$ in $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)}$ abbildet (Abb. 2.9.1). Infolgedessen gilt $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)} = F_I(\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)})$. Zum Starten der iterativen Suchroutine ist $\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)} = \vec{x}_{\lambda_i}^{(1)} = (x_{1,\lambda_i}^{(1)}, x_{2,\lambda_i}^{(1)}, \dots, x_{p,\lambda_i}^{(1)})$ einzugeben. Als Ausgabe ist der letzte Wert $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)} = \vec{x}_{\lambda_i}^{(N)} = (x_{1,\lambda_i}^{(N)}, x_{2,\lambda_i}^{(N)}, \dots, x_{p,\lambda_i}^{(N)})$, mit dem die Iteration aufhört. Wie die Iteration tatsächlich abläuft, also wie die Zwischenwerte sich im Laufe der Suche herausstellen, bleibt ein Rätsel, das nur phänomenologisch beobachtet und experimentell überprüft werden kann.

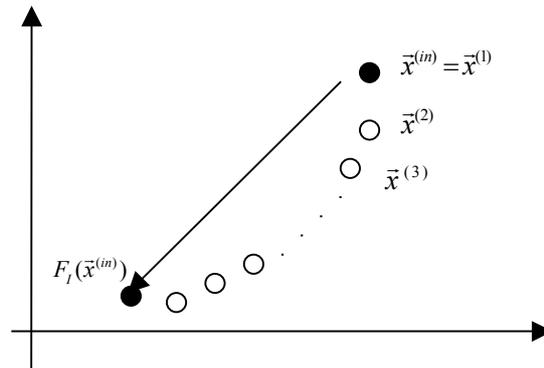


Abb. 2.9.1: Die Iteration wirkt eventuell wie eine Funktion F_I , die $\vec{x}^{(in)}$ in $\vec{x}^{(out)}$ abbildet, nämlich $\vec{x}^{(out)} = F_I(\vec{x}^{(in)})$.

2.10 Rückblick auf die Entwicklung der ellipsometrischen Invertierung

Die Geschichte der spektroskopischen ellipsometrischen Invertierung muss der Entwicklung des elektronischen Computers gegenübergestellt werden. Man könnte das letzte Jahrhundert wissenschaftsgeschichtlich praktisch in zwei Hälften teilen. Zu Beginn des letzten Jahrhunderts hat Drude als Pionier eine mathematisch aufwendige lineare Approximation [Dru89a, Dru89b, Dru90] für das Einschichtmodell vorgebracht. Sowie ihre Varianten [Tro31, Luc48, Arc57] gilt die Approximation für $d=50-100\text{\AA}$. Die Approximation zweiter Ordnung [Leb39] gilt für absorbierende Filme mit der Schichtdicke bis $d=1000\text{\AA}$. Ausser dass sie mehrere Bestätigungen [Tro33, Rot49, Bat51, Mcc63, Arc67, Hol67b, Old67, Yol67] angeregt haben, fanden die Gleichungen beschränkte Anwendung, da sie nur für Schichten galten, deren Dicke eine viel kleinere Nanometerzahl aufwies als die Wellenlänge des einfallenden Lichts. Nach mehr als einem halben Jahrhundert waren nur vereinzelte Diskussionen über ellipsometrische Invertierung für Einschichtsysteme [Tro29, Tro31, Luc48, Win46, Bat51, Win55, Rot57, Fau58, Bor59, Arc62] erschienen. So haben beispielsweise Faucher et al. [Fau58] mit einfachen Gesetzen der Reflexion, Beugung und Interferenz, den Geltungsbereich ausserhalb des linearen Bereichs erweitert. Saxena [Sax65] hat den spezifischen Teil des analytischen Verfahrens von Drude verbessert. Die oben genannten Verfasser arbeiten entweder mit

graphischer Interpolation oder mit interpoliertem Vergleich von tabellarisch aufgezeichneten Daten. Im heutigen Sinn würden solche Methoden Unannehmlichkeiten und Umstände bereiten. Die graphische Darstellung [Arc62] der ellipsometrischen Gleichungen muss beispielsweise für jedes Substrat wiederholt werden [Ghe68]. Die exakten ellipsometrischen Gleichungen zur Bestimmung der optischen Konstanten einer auf einem Substrat abgeschiedenen Schichte waren vor dem Einzug des modernen Computers praktisch nicht brauchbar [So72].

Der Einzug des elektronischen Computers in der zweiten Hälfte des vorigen Jahrhunderts gab der Ellipsometrie neuen Antrieb. Die Ausführung von Rechnungen durch computergesteuerte Programme wurde ermöglicht. Es waren McCrackin et al. [Mcc63], die zum ersten Mal die Programmierung eines numerischen Verfahrens ausführten. Zahlreiche Verfahren [Hol67a, So72, Rei72, Cel76, Yor83] wurden vorgeschlagen und ausprobiert, um die ellipsometrischen Gleichungen effizienter zu invertieren. Holmes [Hol67a] brachte ein modifiziertes Verfahren vor, das die Berechnung der Variablen n und k von derjenigen der Variable d abtrennt. Oldham [Old68] überprüfte ein anderes auf Newton-Iteration basierendes Verfahren zur Berechnung der optischen Konstanten absorbierender Filme mit bekannter Schichtdicke. Dieses Verfahren hätte weniger Rechenschritte als dasjenige von McCrackin et al. [Mcc63] benötigt, allerdings war die Wahrscheinlichkeit des Scheiterns war größer, weil mehrdeutige Lösungen nicht in Betracht gezogen wurden. Ghezzi [Ghe68] arbeitete mit einem neuen Begriff und behauptete, dass alle oben erwähnten Beschränkungen und widrigen Umstände überwunden wurden. Aber seine Methode setzt eine unabhängige Bestimmung des n , der Schichtdicke, voraus, z.B. mittels den Ansätzen von Abelès [Abe50a] oder Lewis [Lew64]. Die gleiche ungünstige Voraussetzung weisen zahlreiche Publikationen [Ghe68, Ved68, Yam75, Han73, So72] auf. Beispielsweise arbeitete die Methode von Vedam et al. [Ved68] mit zwei verschiedenen Medien. Die Suche nach intelligenten Invertierungsansätzen war in dem relativ jungen Computerzeitalter eine Mode.

Mit der rasch zunehmenden Rechengeschwindigkeit des modernen Prozessors gegen das Ende des letzten Jahrhunderts wurden mathematisch anspruchsvollere Algorithmen und Überlegungen, wie Genetischer Algorithmus [Cor00], multidimensionaler Newtonscher Algorithmus [Eas88], gedämpfter quadratischer Mittelwert [Urb93], Polynom der fünfter Ordnung [Dro94], CSA („classical simulated annealing“) [Kir83, Pol00], FSA („fast simulated annealing“) [Szu87], GSA („generalized simulated annealing“) [Tsa96, Xia97, Mun98, Gut99, Ell00, Yu03], in der ellipsometrischen Invertierung und spektroskopisch angewendet.

Dennoch ist das allgemeine Verhalten der ellipsometrischen Funktion noch nicht gut verstanden. Zahlreiche Studien der ellipsometrischen Funktion existieren, ob graphisch, analytisch oder numerisch, wurden aber nur für die Bestimmung der optischen Parameter und Schichtdicke [Lek90, Flu98, Ibr71, Pol98] durchgeführt. Andere Studien der ellipsometrischen Funktion an spezifischen Winkeln sind vorhanden, die auf die direkte Bestimmung der Schichtdicke abzielen [Ghe68, Azz83, Gal98]. Eine ausführliche mathematische Analyse ist wünschenswert aber existiert [Azz75, Azz83, You89] nur für bestimmte Modelle, Messwinkel, Materialien, usw..

Als optisches System kommt vorwiegend der klassische Fall {Luft | Schicht | Substrat}, sowohl vor als auch gerade nach dem Einzug des Computers, vor. Innerhalb dieses Falls wurde {Luft | nichtabsorbierende Schicht | absorbierendes Substrat} oft zum Testen numerischer Methoden spezifisch betrachtet [Arc62, Mcc63, Sax65, Hol67a, Ghe68, Old68, Ved68, Mcc69, Rei72]. Standardmässig zählen die numerischen Methoden auf iterative Verfahren [Cha85]. Beispielsweise legte Reinbergs [Rei72] Methode die Newton-Iteration zu Grunde. Typischerweise muss bei einem iterativen Algorithmus ein Anfangswert (oder Startwert) erraten werden, der kritisch für die Konvergenz des Endwertes [Cha85] ist. Das Divergenzproblem könnte eine inhärente Eigenschaft der ellipsometrischen Funktion sein [You89, Zag99]. Diese Fragestellung ist aber nie gründlich untersucht worden [Zag99].

Die meisten vorgebrachten Ansätze wurden nur bei monochromatischer Invertierung ausprobiert. Eine Erweiterung auf die Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Invertierung ist selbstverständlich nicht problemlos. Über Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung wird jedoch in der Literatur sehr wenig bis gar nicht eingegangen. In der Praxis ist ein manuelles Starten und Beenden der Invertierung bei jeder Wellenlänge undenkbar. Eine Automatisierung der Vorgänge ist notwendig und stellt eine zusätzliche Herausforderung dar. Eine spezielle Art von Divergenzproblem, das aus der Automatisierung der Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung entsteht, wurde aufgedeckt und in Kapitel 5 präsentiert. Eine allgemeine Lösung wird in Kapitel 7 angestrebt.

Kapitel 3 Experimentelles

3.1 Schichtenherstellung

Die Reihe von a-Si/C₆₀-Filmen wurde durch Sublimation aus einer C₆₀-Quelle und Bedampfen aus einer Si-Quelle auf Si(100)-Substrat im Ultrahochvakuum hergestellt [Rei02]. Einige Goldproben wurden auch durch Bedampfen aus einer Goldquelle hergestellt. Ansonsten wurden die meisten in vorliegender Arbeit untersuchten Proben durch physikalische Gasphasendeposition (PVD), plasmaaktivierte chemische Gasphasendeposition (CVD) oder kombinierte CVD-PVD im Hochvakuum (Abb. 3.1.1) produziert. Die technischen Details der Depositionsanlage wurden schon von mehreren Autoren [Gam96, Gen00, Sch00a, Vid03] eingehend beschrieben. Je nach Beschichtung wurden verschiedene Gase verwendet. Zur Herstellung reiner Metallschichten (PVD) oder metallhaltiger Schichten (PVD+CVD) wurde Argon als Prozessgas zum „Sputtering“ (Zerstäuben) des mit dem gewünschten Metalltarget versehenen Magnetrons benutzt. Zur Herstellung von Oxid-, Kohlenwasserstoff-, und Kohlenwasserstickstoffschichten (CVD) wurden reaktives Plasma von Sauerstoff, Methan, bzw. Stickstoff gezündet. Beispielsweise wurden Proben aus Siliziumoxid, Aluminiumoxid und Titanoxid auf Siliziumsubstrat mit Argon-Sauerstoff-Prozessgasgemisch mittels reaktives Magnetron-Sputtering [Sch00b] auf Silizium-, Aluminium- und Titantarget abgeschieden. Zur Herstellung der Reihe von a-C:H:N-Proben wurde ein herkömmliches CVD-Verfahren mit Leistungseinspeisung durch einen Hochfrequenzgenerator eingesetzt.

Um Beschichtungen mit den erwünschten Eigenschaften herzustellen, sind zahlreiche Parameter auf experimentellem Weg zu optimieren. Dies beinhaltet Substrat-Biasspannung, Substrat-Temperatur, Gasfluss, Gasdruck, usw.. Die Größe des Spielraums und die Suche nach dem Arbeitsbereich variiert von Fall zu Fall. Die Herstellungsparameter der in vorliegender Arbeit untersuchten Proben werden in der Probenliste im Anhang F angegeben. Vor der Herstellung von endgültigen Messproben der Standardgröße wurde die erwünschte chemische Zusammensetzung auf einer Testprobe mittels in-vacuo XPS und UPS überprüft. Photoelektronenspektroskopie ist in den vergangenen Jahrzehnten rasch zu einer Standard-Technik der Oberflächenphysik etabliert worden. Das Prinzip wurde gut beschrieben [Car79, Hüf95] und auf den Aufbau des Spektrometers wird in zahlreichen Dissertationen [Ind87, Thi95, Gam96] der gleichen Forschungsgruppe verwiesen. Für den UV-Bereich wurden He-I (21.22eV) und He-II (40.82eV) Emissionslinien aus einer mit Heliumgas betriebenen Gasentladungslampe

verwendet. Für den Röntgenbereich wurde die mittels einer Magnesiumanode erzeugte K_{α} -Übergangslinie (1253.6eV) verwendet.

Mittels in-situ Reflektometrie wurden die Gleichmässigkeit des Schichtwachstums und die Abscheidungsrate bei Deposition transparenter Beschichtungen überwacht. Bei der Laser-Wellenlänge $\lambda=550$ nm wurde die Schichtdicke abgeschätzt. Zum Abschätzen der Beschichtungsdicke steht zusätzlich ein Schwingquartz zur Verfügung. Die Erfahrung und zahlreiche Versuche haben gezeigt, dass der Schwingquartz die Arbeit während der Versuchsphase der ellipsometrischen Anpassung nicht erleichtert. Im Gegenteil muss er mit der ellipsometrischen Messung geeicht werden und ist nur nützlich, um bereits untersuchte Beschichtungen unter der gleichen Herstellungsparametern zu reproduzieren.

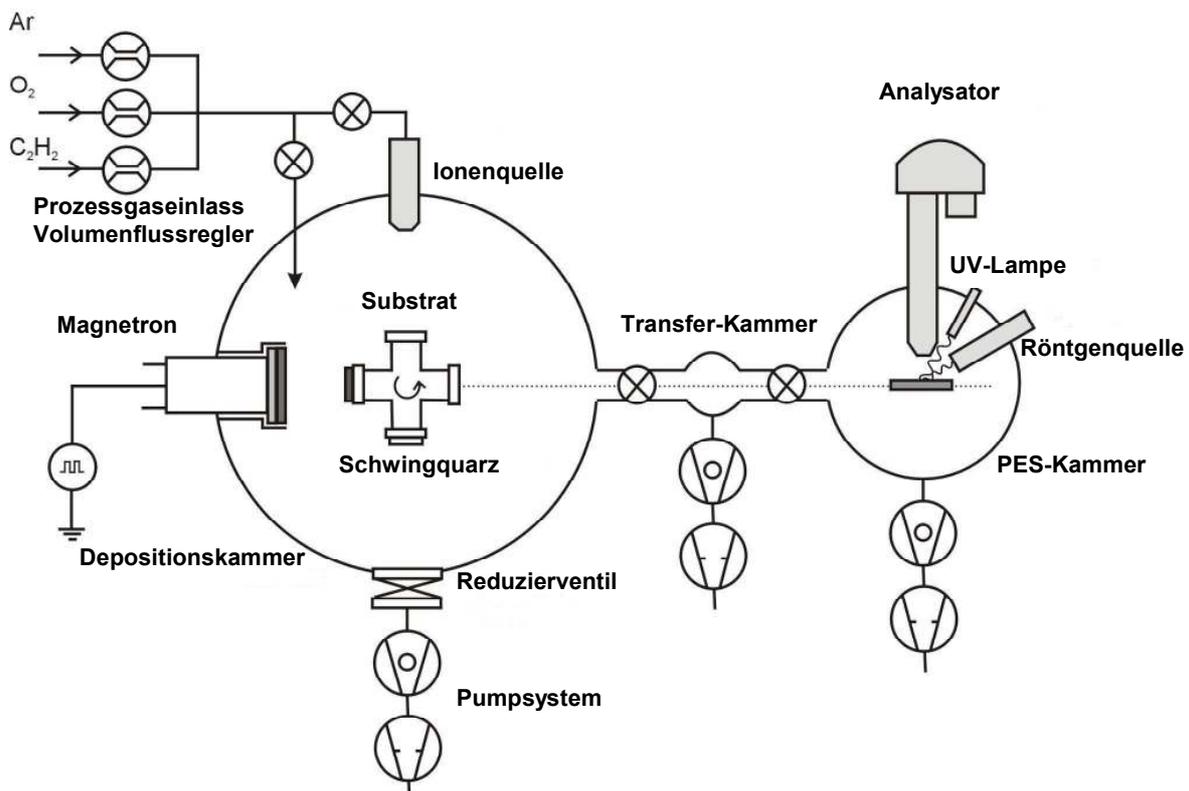


Abb. 3.1.1: Aufbau der Anlage zur Schichtherstellung und in-vacuo photoelektronischen Messung.

3.2 Ellipsometer

i. Messapparatur

Die in vorliegender Arbeit betrachteten ellipsometrischen Messdaten wurden mit einem von der Firma SENTECH hergestellten kommerziellen Ellipsometer (SE 850) in der Art des rotierbaren Analysators durchgeführt. Die Grundkomponenten des Ellipsometers bestehen aus der Lichtquelle, dem Polarisator, der Messeinheit, dem Analysator und dem Detektor (Abb. 3.2.1). Als Lichtquelle dient eine Xenon-Lampe. Der spektrale Messbereich liegt im sichtbaren Bereich (VIS) zwischen 300nm und 800nm. Weiterhin ist das Gerät mit einem Auto-Retarder ausgestattet. Das von der Lampe ausgehende Licht wird vom separat aufgestellten Monochromator in einzelne Wellenlängen aufgeschlüsselt und über eine Glasfaserleitung zum Polarisator geführt. Der Polarisator ist auf 45° eingestellt. Daher wird das Licht linear auf 45° polarisiert, bevor es zur Probe gelangt. Nach der Reflexion von der Probe ist das Licht im Allgemeinen elliptisch polarisiert.

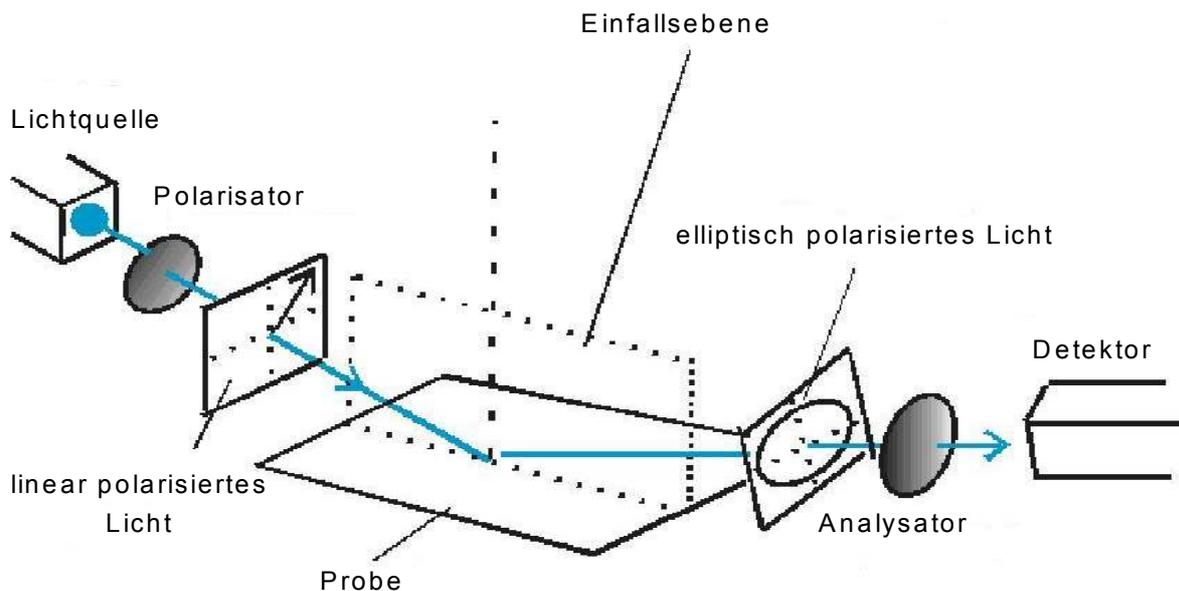


Abb. 3.2.1: Schematische Darstellung des Prinzips der ellipsometrischen Messung

Die Gestalt der Polarisierung wird dann durch den Analysator und den Detektor untersucht. Im Prinzip ist der Analysator nichts anderes als ein Polarisator. Mit Hilfe der Rotation des Analysators wird der Zustand der Polarisierung in allen Richtungen schrittweise aufgelöst. Anhand der Ergebnisse wird die Gestalt der elliptischen Polarisierung gerechnet und rekonstruiert. Daraus ergibt sich die ellipsometrische Gleichung. Nach Wiederholung des gleichen Vorgangs für jede zu detektierende Wellenlänge wird ein Ψ -Spektrum und ein Δ -Spektrum für jeden

Einfallswinkel erstellt. Bei mehrwinkliger Messung wird der Winkel manuell umgestellt und jeweils zwei Spektren werden gewonnen. Um die Messgenauigkeit zu erhöhen und das Rauschen zu reduzieren, kann man die Schritte der Rotation verkürzen oder die Anzahl der Rotationen erhöhen.

ii. Softwareparameter

Für die Auswertung wird die *Spectrarray*-Software ebenfalls von der Firma SENTECH verwendet. Nach Angaben wird Simplex Algorithmus grundsätzlich in der iterativen Suche implementiert. Vor dem Anfang einer monochromatischen oder Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung lassen sich folgende Parameter auswählen. Die Bedingung zum Abbruch einer Iteration wird von „*Stop if LSQ is less than*“ und „*Minimum number of iterations*“ entschieden. Diese zwei Parameter, fortan LSQ_{low} , bzw. N_{up} gekennzeichnet, sind eng verwandt. Der Erfahrung nach hört der Iterationsvorgang auf, bevor N_{up} erschöpft ist, wenn LSQ_{low} nicht genügend klein ist. Wenn N_{up} nicht genügend groß ist, hört der Vorgang auf, auch wenn $LSQ < LSQ_{low}$ noch nicht erfüllt ist. Deshalb muss N_{up} so groß wie möglich und LSQ_{low} so klein wie möglich angegeben werden, um nach dem Beenden des Iterationsvorgangs eine Nullstelle von LSQ zu erreichen. Wir wissen aus Erfahrung, dass sich die fortlaufende LSQ schon nach ein paar Dutzend Iterationen nur noch in der Größenordnung von einigen Kommastellen hinter dem Dezimalpunkt ändert. Praktisch wird die Anzahl von Iterationen nie 100 überschreiten. Mit anderen Worten erweist sich LSQ nach 100 Iterationen kaum als wirklich aufgebessert. Deshalb dient $N_{up} = 4000$ als eine praktische Unendlichkeit. Was LSQ_{low} angeht, wird die überhaupt kleinste Zahl, 0.0001, gewählt. Diese Anforderung reicht aus, um eine Genauigkeit von zwei Stellen hinter dem Dezimalpunkt für n , k and d zu erzielen. Somit sollte im Prinzip eine lokale Nullstelle gefunden werden können.

Zur Einschränkung des Suchbereiches können „*Minimum*“ und „*Maximum*“ gewählt werden. Dazu gibt es „*Reset minimum*“, „*Reset maximum*“ und „*Type difference*“, die in enger Beziehung miteinander und mit den obigen Parametern stehen. Ohne die Quellcodes der *Spectrarray*-Software einsehen zu können, müssen Benutzer die Veranlagung phänomenologisch testen und charakterisieren. Fortan werden die Parameter als $x_{\lambda_i}^{(min)}$, $x_{\lambda_i}^{(max)}$, $x_{\lambda_i}^{(min_{reset})}$, $x_{\lambda_i}^{(max_{reset})}$, bzw. $x_{\lambda_i}^{(jump)}$ gekennzeichnet. $x_{\lambda_i}^{(min)}$ und $x_{\lambda_i}^{(max)}$ beschränken den Suchraum. Was $x_{\lambda_i}^{(min_{reset})}$ und $x_{\lambda_i}^{(max_{reset})}$ betrifft, so bleiben diese ein Rätsel. Versuche haben gezeigt, dass $x_{\lambda_i}^{(jump)}$ mit $x_{\lambda_i}^{(min_{reset})}$ und $x_{\lambda_i}^{(max_{reset})}$ in enger Beziehung steht.

3.3 Substrat

i. Silizium

Als Substrat wurde [100]-orientierte Siliziumwafer verwendet. Die Größe der Proben, ausser bei der Reihe von a-Si/C₆₀-Proben (10x15mm²), betrug etwa 40x40mm². Die Substrate wurden jeweils in einem Ultraschallbad in Alkohol und hochreinem Aceton gereinigt und mit Stickstoff trocken geblasen. Nach dem Einbau in die jeweilige Depositionskammer und nach der Evakuierung wurden die Substrate, im Gegensatz zur bisherigen Praxis, vor der Deposition von Schichten nicht weiter durch Zerstäuben der Oberfläche mittels eines Argonplasmas, bzw. Bestrahlung mit Argonionen gereinigt. Denn die ungewisse Veränderung der Oberfläche ist schwierig nachträglich zu modellieren. Daher muss die etwa 1.8nm dicke natürliche Siliziumoxidschicht immer mitberücksichtigt werden.

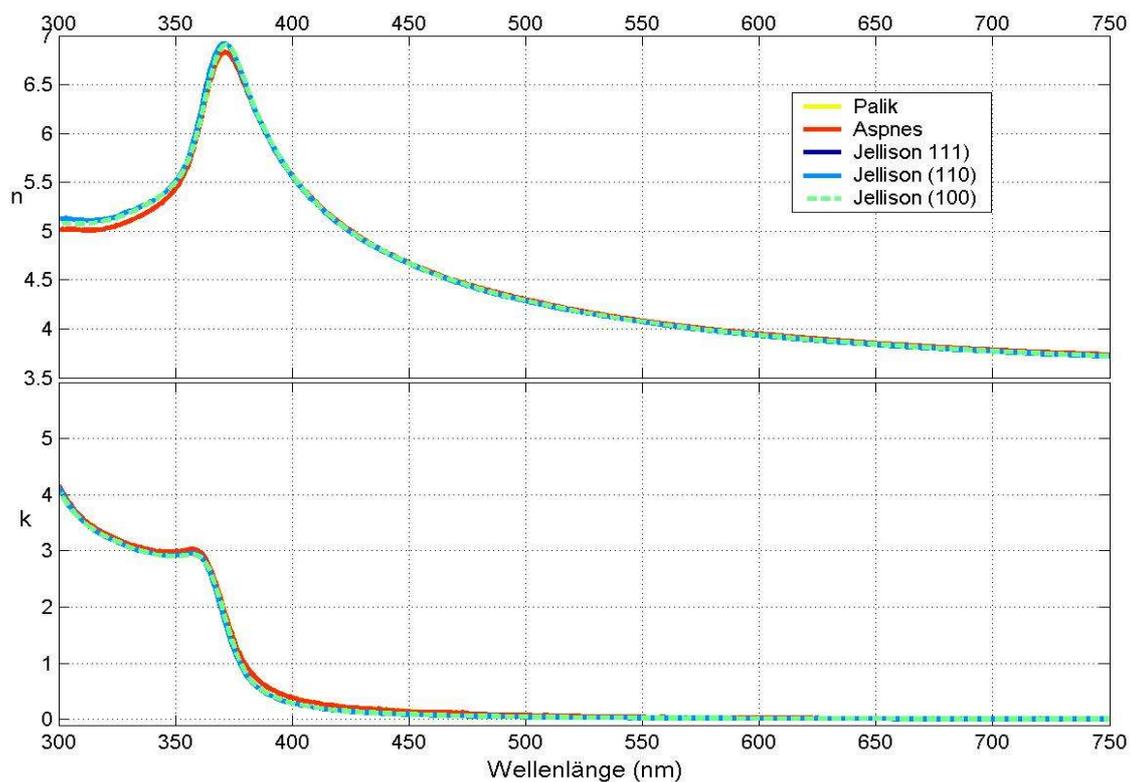


Abb. 3.3.1a: Vergleiche von verschiedenen bekannten Dispersionsrelationen des Siliziums, die von Palik [Pal85], Aspnes [Asp80] bzw. Jellison [Jel93] beigetragen werden und von Spectraray [Dit97] unterstützt werden.

In der Materialbibliothek der *Spectraray* sind fünf Materialdateien zu finden, die man für den Aufbau des optischen Modells verwenden kann. Sie wurden von drei Autoren beigetragen [Pal85, Asp80, Jel93] und von Spectraray [Dit97] unterstützt werden. Ihre spektralen Dispersionen werden in Abbildung 3.3.1a gegenübergestellt. Die Abweichung zwischen ihnen ist fast nicht spürbar für den gesamten Wellenlängenbereich bis auf den Bereich von $\lambda=300-370\text{nm}$, in dem die Abweichung jedoch sehr gering ist. Die Simulationen $\Psi([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Si}}(\lambda)\ k_{\text{Si}}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger$, 70°) und $\Delta([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Si}}(\lambda)\ k_{\text{Si}}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger$, 70°), wobei die Dispersionen für Silizium jeweils eingesetzt wird, werden in Abbildung 3.3.1b zusammen mit der Messung eines Substrats (Abb. 3.3.3) gegenübergestellt. In allen Versuchen der vorliegenden Arbeit, bei denen Silizium als bekanntes Substrat vorkommt, werden die Dispersionen von Palik [Pal85] angenommen.

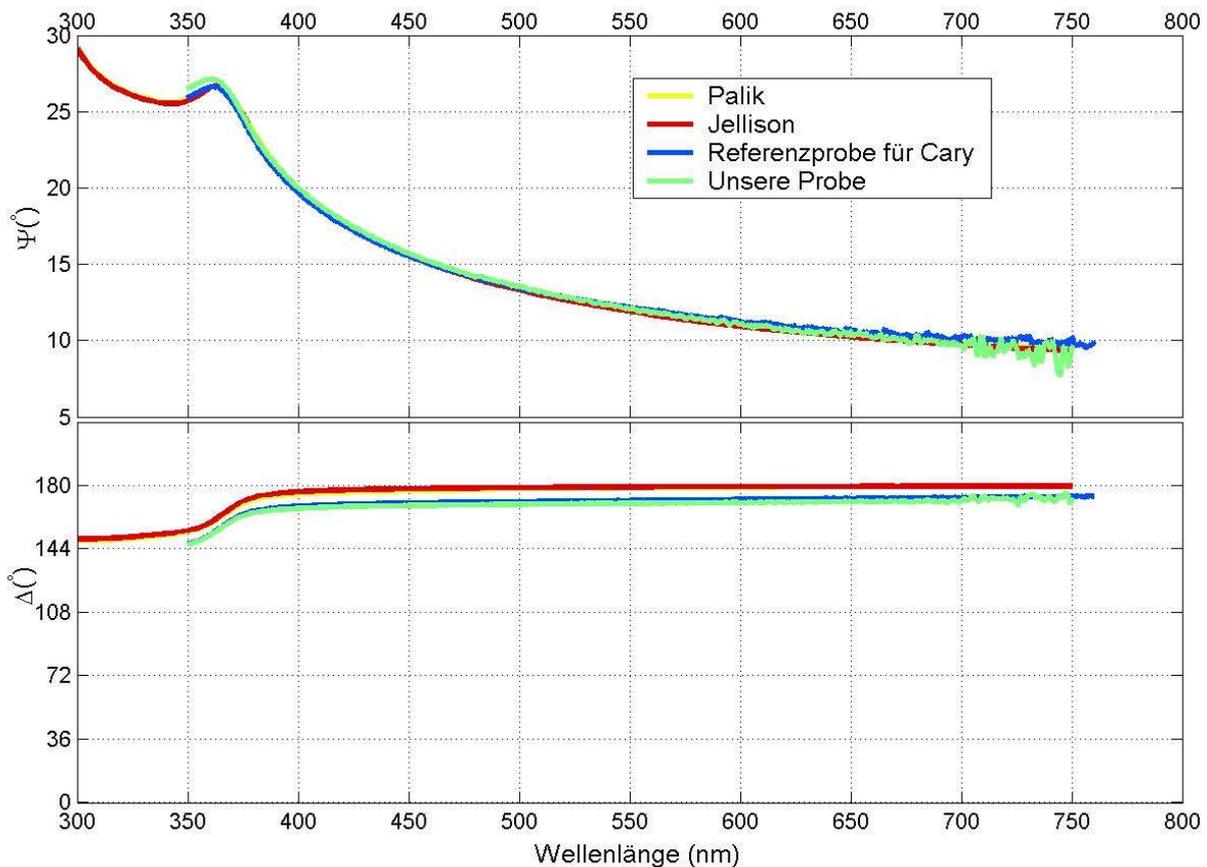


Abb. 3.3.1b: Vergleich von verschiedenen bekannten Dispersionsrelationen des Siliziums.

ii. Dicke Goldschicht

Anders als Siliziumsubstrat, bei dem ein darauf aufgebautes optisches Modell entweder mit der natürlichen Oxidoberfläche oder mit einer undefinierten Siliziumoberfläche leben muss, bietet ein *in situ* hergestelltes Substrat die sauberste Oberfläche. Zu diesem Ziel dienen dicke absorbierende Materialien. Allerdings muss ein frisches Substrat auch erst einmal der ex-situ ellipsometrischer Charakterisierung unterzogen werden. Der ex-situ Zustand der Oberfläche muss möglichst erhalten bleiben. Daher können nur diejenigen eingesetzt werden, die chemisch beständig gegen Oxidation sind. Für diese Doppelanforderungen kommen ausschliesslich die Edelmetalle in Frage. Hier wird lediglich Gold betrachtet, weil die Unstimmigkeit der von verschiedenen Autoren erhobenen Dispersionen im Vergleich zu anderen Edelmetallen [Nil74] am geringsten ist. Die zahlreichen Dispersionen werden mit unterschiedlicher Messtechnik anhand unterschiedlichen optischer Schichtmodelle gewonnen. Es ist notwendig, zuerst festzustellen, ob, und wenn ja, welche der Literaturdispersionen zur optischen Modellierung des selbsthergestellten Goldsubstrats brauchbar sind.

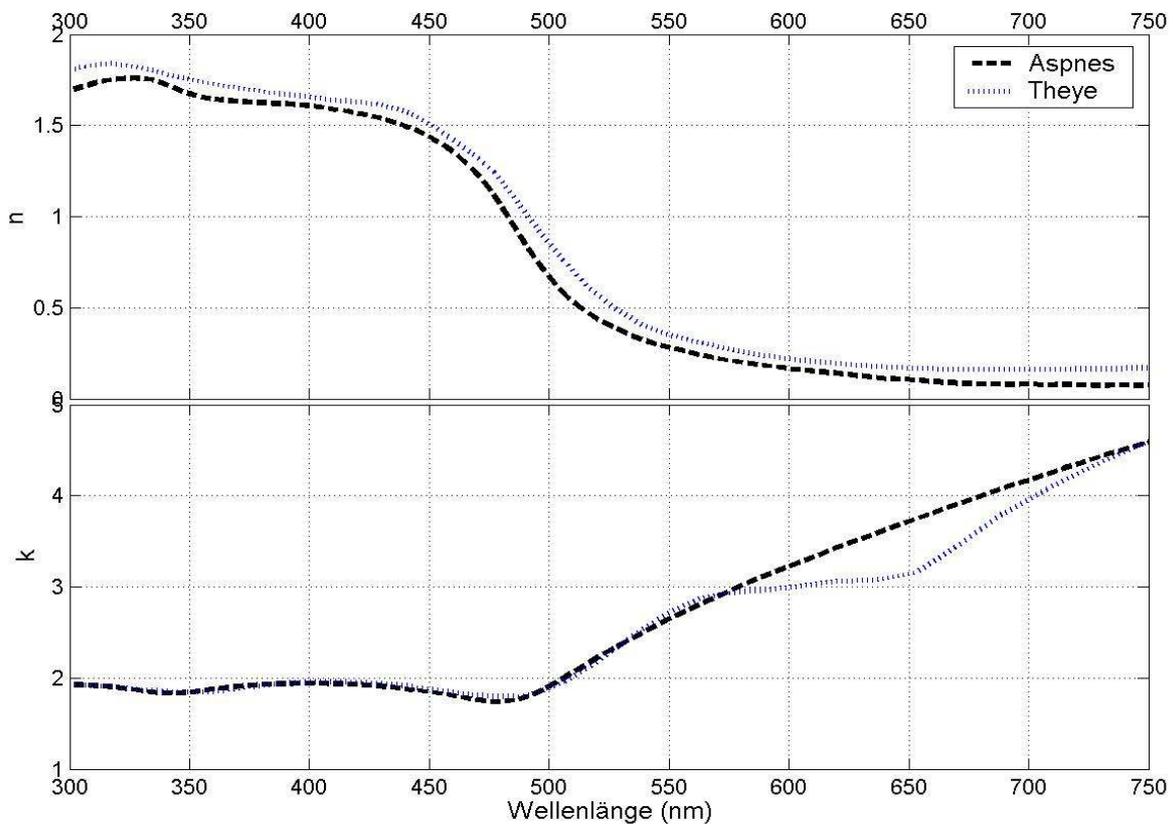


Abb. 3.3.2a: Vergleiche von $\tilde{n}_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ und $\tilde{n}_{\text{Au[Thè70]}}$, die auf Aspnes et al. [Asp80], bzw. Thèye [Thè70] zurückzuführen sind.

Für den betrachteten Wellenlängenbereich beruht die Erstellung der Handbuchdaten von Palik [Pal85] auf der Arbeit von Thèye [Thè70]. Das Kriterium, nämlich dass die besten Goldfilme die höchsten ε_i haben, wird in der ausführlichen Diskussion von Aspnes et al. [Asp80] übernommen. Das *Spectraray* Programm stellt zwei Materialdateien für Gold zur Verfügung, die sich gerade auf Aspnes et al. [Asp80] und auf Palik [Pal85] beziehen. Daher ist es sinnvoll, die zwei Dispersionen, $\tilde{n}_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ und $\tilde{n}_{\text{Au[Thè70]}}(\lambda)$ erst einmal gegenüberzustellen. (Abb. 3.3.2a). Da sich die Diskussion von Thèye [Thè70], als auch diejenige von Aspnes et al. [Asp80] auf den ε_r - ε_i Raum bezieht, vergleichen wir auch $\tilde{\varepsilon}_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ mit $\tilde{\varepsilon}_{\text{Au[Thè70]}}(\lambda)$ (Abb. 3.3.2b).

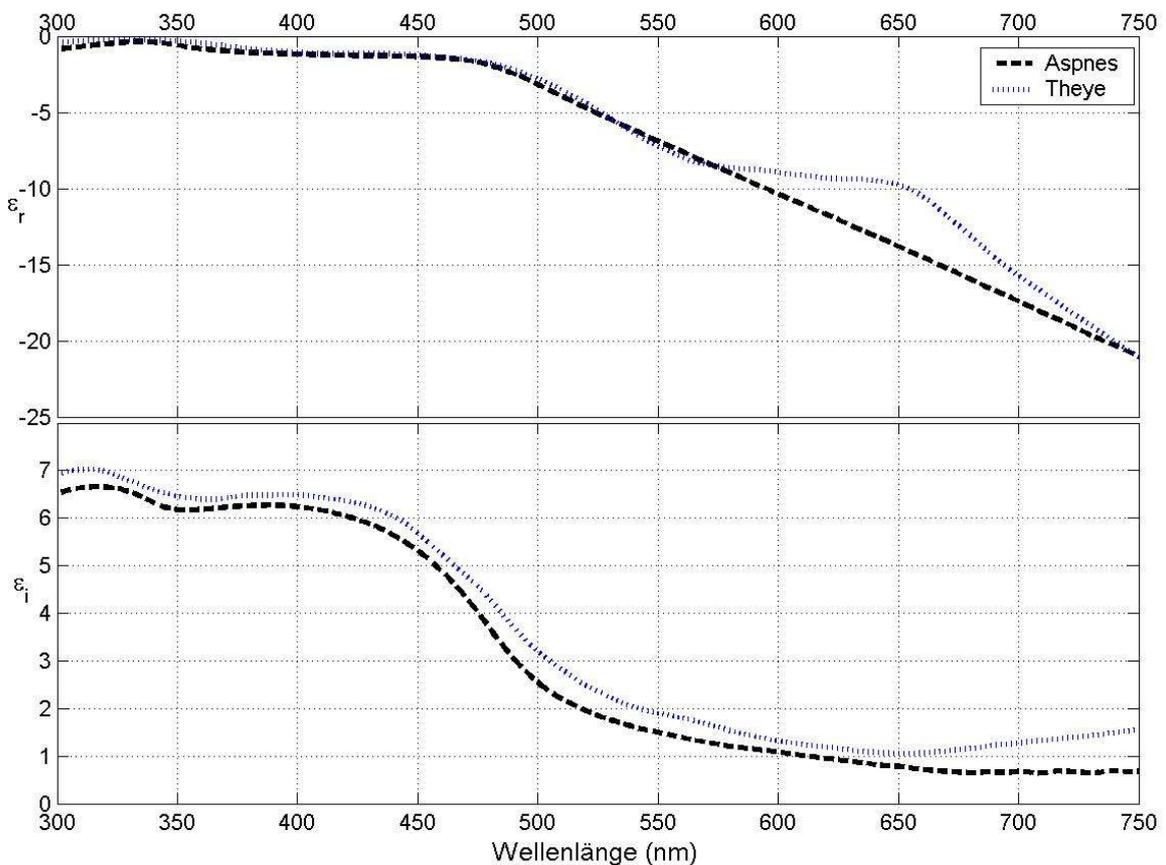


Abb. 3.3.2b: Vergleiche von $\tilde{\varepsilon}_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ mit $\tilde{\varepsilon}_{\text{Au[Thè70]}}(\lambda)$, die auf Aspnes et al. [Asp80], bzw. Thèye [Thè70] zurückzuführen sind.

Der Unterscheid zwischen den beiden Quellen fällt am stärksten bei der ε_r -Kurve und der k -Kurve im Wellenlängenbereich $\lambda=560\text{-}750\text{nm}$ auf, in welchem Diskontinuitäten in der Ableitung bei $\lambda=650\text{nm}$ und $\lambda=560\text{nm}$ vorliegen. Diese Diskontinuität entspricht tatsächlich einer Lücke an 2.0eV ($\lambda=619.93\text{nm}$) und 2.1eV (590.41nm), zwischen $\lambda=652.55\text{nm}$ (1.9eV) und $\lambda=563.57\text{nm}$ (2.2eV), bei den mit 0.1eV Abstand aufgelisteten k -Daten [Pal85]. Es stellt sich eine grundlegende Frage: Welche Dispersion ist zuverlässiger oder zumindest zur Beschreibung unserer Goldproben zweckmässiger? Bei der Simulation $F_{\text{Au[The70]}}(\lambda)=F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Au[The70]}}(\lambda)\ k_{\text{Au[The70]}}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ und $F_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)=F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)\ k_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$, wobei jeweils $F=\Psi, \Delta$, ersieht man (Abb. 3.3.3), dass das an $k_{\text{Au[The70]}}(\lambda)$ haftende deutlichste Abweichungsmerkmal hauptsächlich auf $\Delta_{\text{Au[The70]}}(\lambda)$ übertragen wird. Im Vergleich zu $\Delta_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ sinkt $\Delta_{\text{Au[The70]}}(\lambda)$ erheblich im betroffenen Wellenlängenbereich.

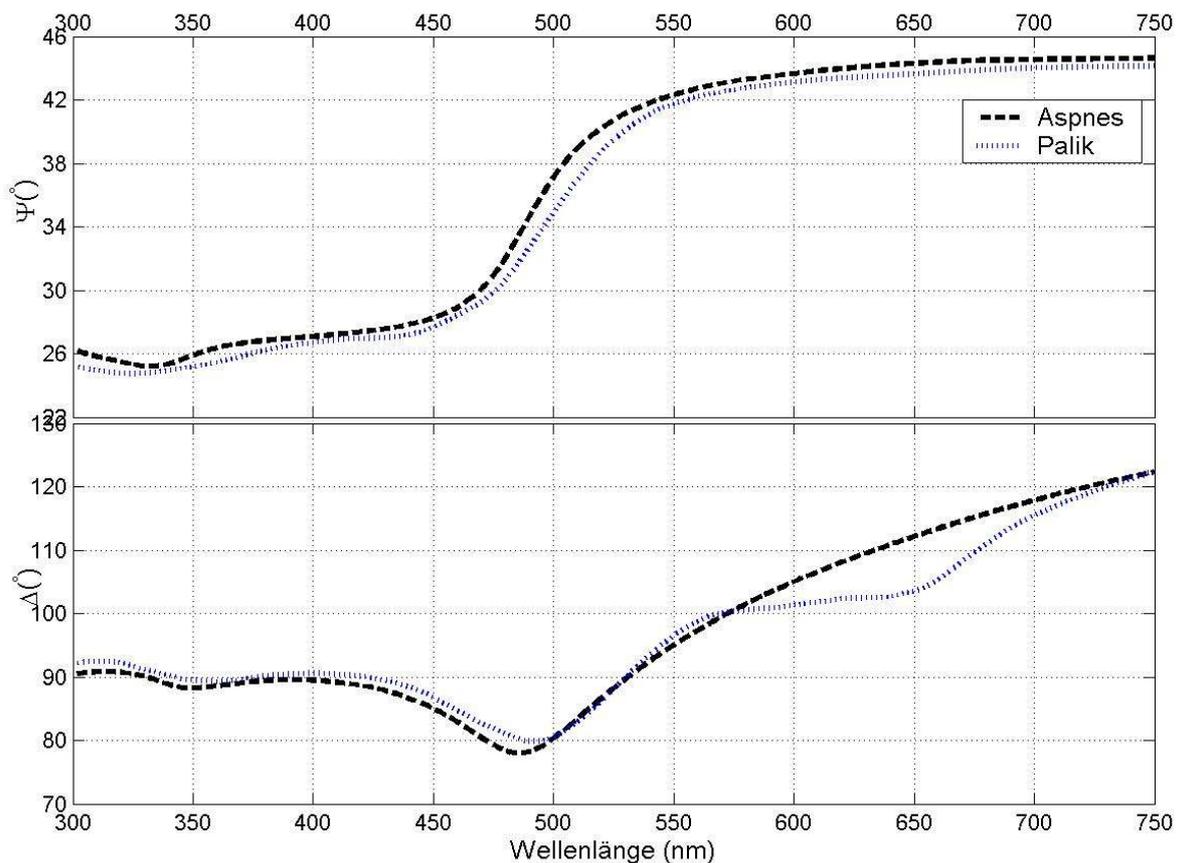


Abb. 3.3.3: Gegenüberstellung der Simulation $F_{\text{Au[The70]}}(\lambda)=F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Au[The70]}}(\lambda)\ k_{\text{Au[The70]}}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ und $F_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)=F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)\ k_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$, wobei jeweils $F=\Psi, \Delta$.

In der umfassenden Diskussion über die Quelle der Abweichungen haben Aspnes et al. [Asp80] die Unstimmigkeit bei den meisten Literaturdaten auf Leerräume innerhalb undichter Verpackung, Rauheit und Zwischenschichten zurückgeführt. Von diesen ist der erste Faktor für den Interbandbereich am wichtigsten. Der Einfluss des ersten Faktors auf Δ wird simuliert und in Abb. 3.3.4a und Abb. 3.3.4b veranschaulicht. Es zeigt, dass das gesamte Δ -Spektrum mit zunehmendem Anteil von Leerräumen sinkt, während die Grundformen der Kurven erhalten bleiben. Beim Einfluss der Rauheit gilt der gleiche Entwicklungstrend. Je nach Dicke einer hinzugefügten Oberschicht und ihrer Rauheit wird das gesamte Δ -Spektrum entsprechend nach oben oder unten skaliert.

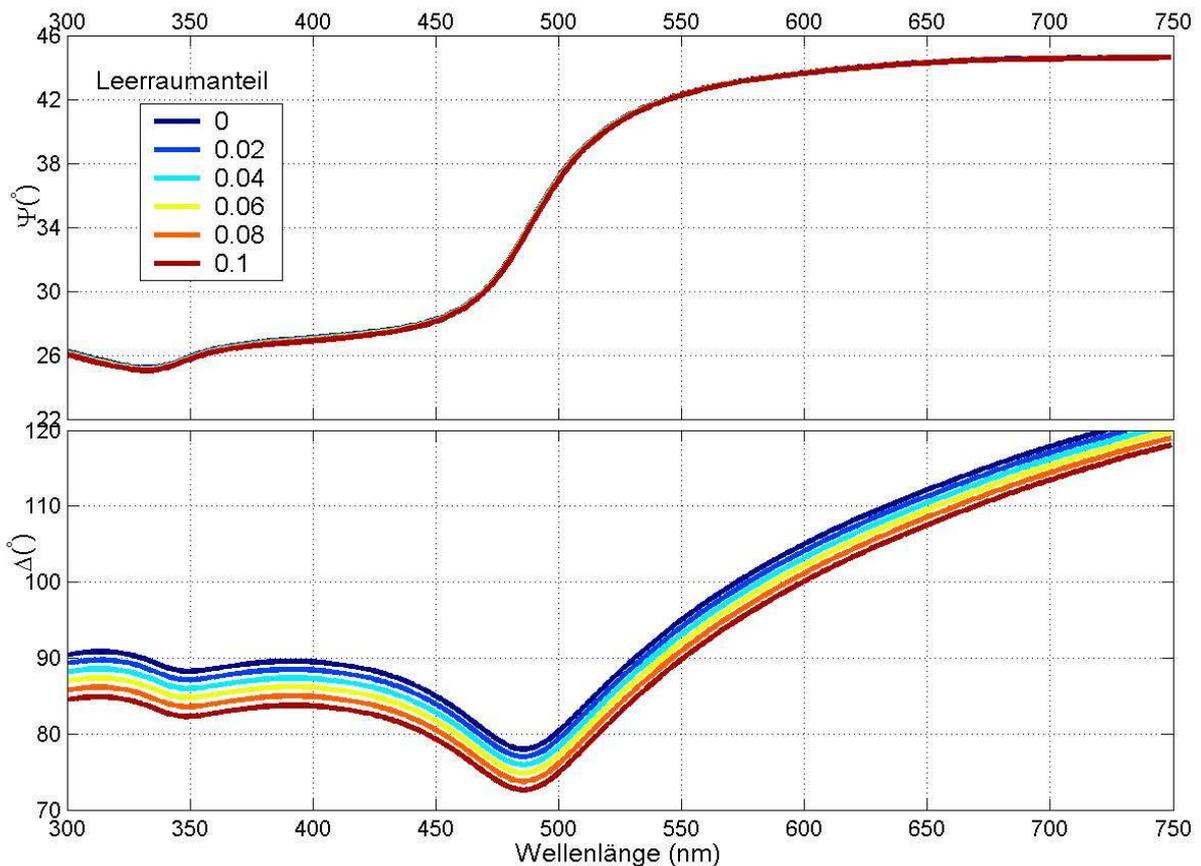


Abb. 3.3.4a: Simulation $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\text{Re}(f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Au}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \text{Im}(f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Au}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \right]^\dagger, 70^\circ)$, wobei jeweils $F = \Psi, \Delta$; mit $r = 0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 1$.

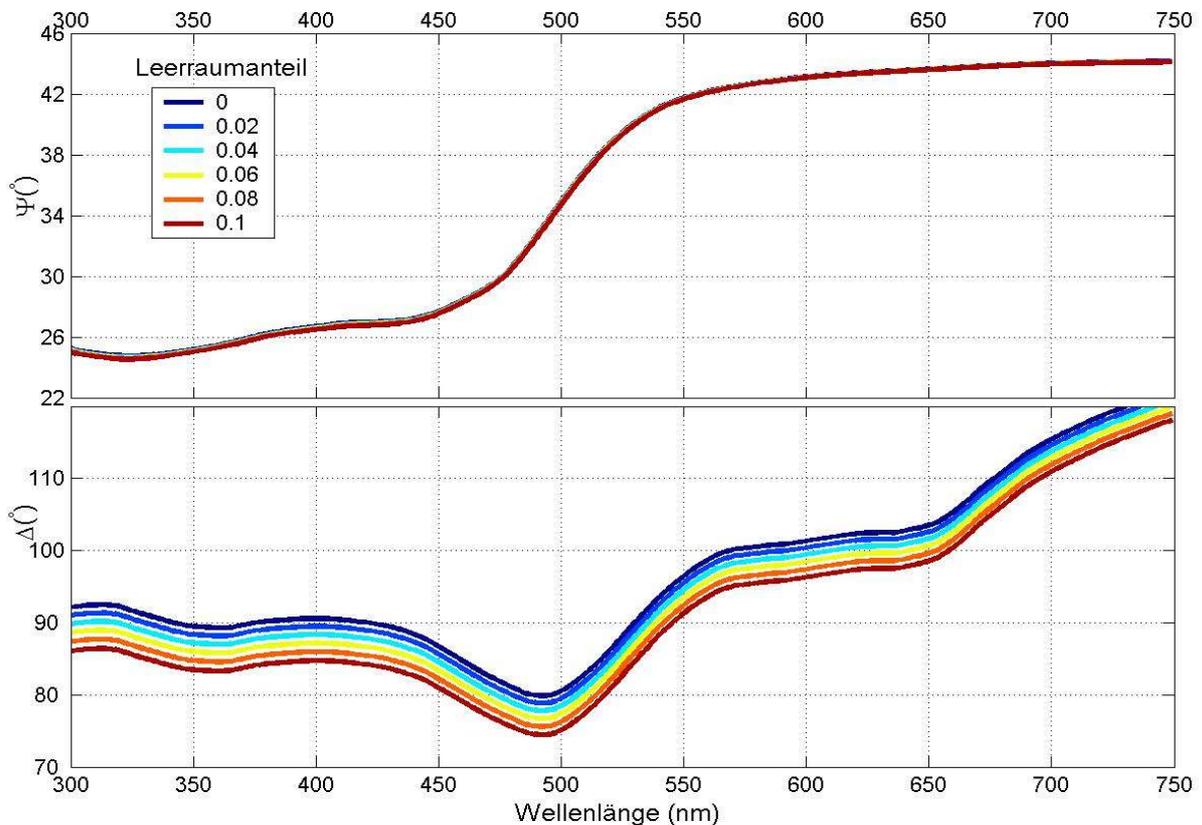


Abb. 3.3.4b: Simulation $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger [\operatorname{Re}(f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Au}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \operatorname{Im}(f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Au}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \infty]^\dagger, 70^\circ)$, wobei jeweils $F = \Psi, \Delta$; mit $r = 0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 1$.

Eine Gegenüberstellung der Δ -Messungen unter $\vartheta = 70^\circ$ an Goldproben unterschiedlicher Herstellung und Alter weist zwei wichtige Merkmale auf (Abb. 3.3.5). Zum einen wird das erwähnte Merkmal im Wellenlängenbereich $\lambda = 560\text{--}750\text{nm}$ bei Thèyes k -Kurve nicht beobachtet. Weder Palik noch Aspnes et al. haben diesen Unterschied unter die Lupe genommen. Das besondere Merkmal von Thèye sollte nicht eine Eigenschaft der idealen „echten Goldmasse“, sondern eine Sondereigenschaft der sehr dünnen Goldschichten sein, an denen die Messung durchgeführt wurden. Bis auf den oberen Wellenlängenbereich stimmen die k - und ε_r -Kurven der zwei Quellen relativ gut überein.

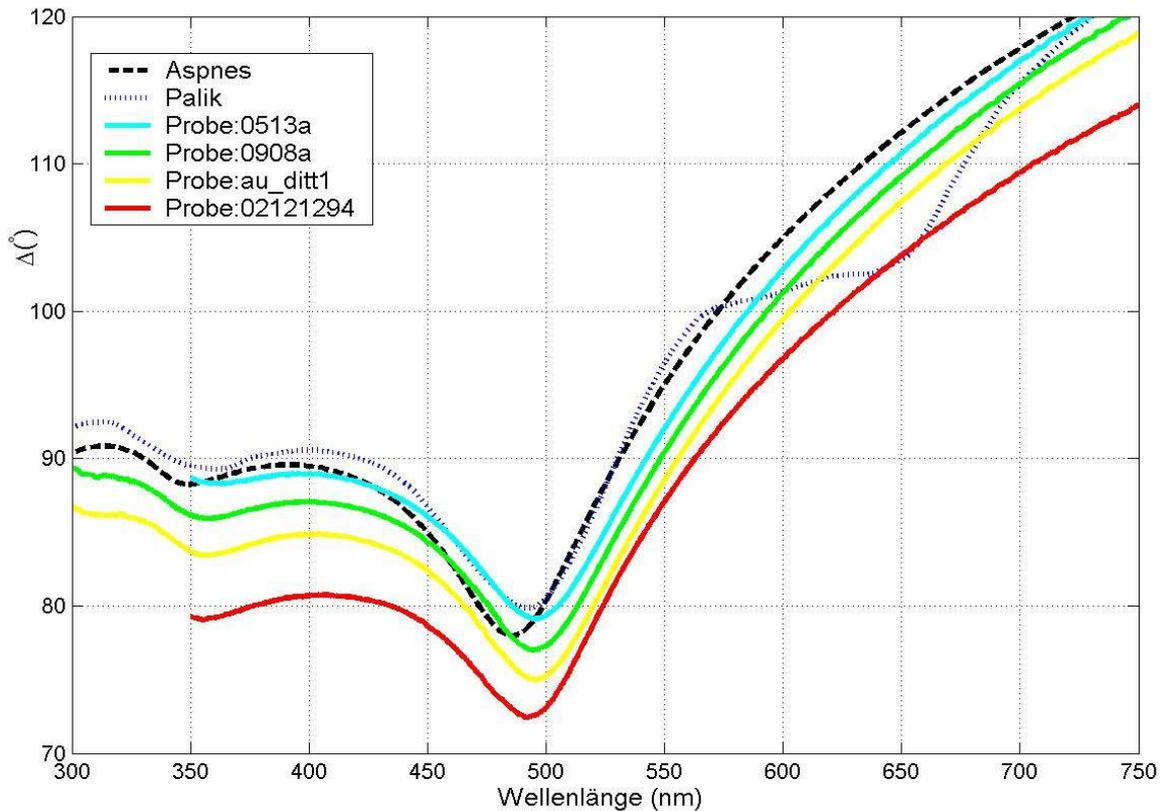
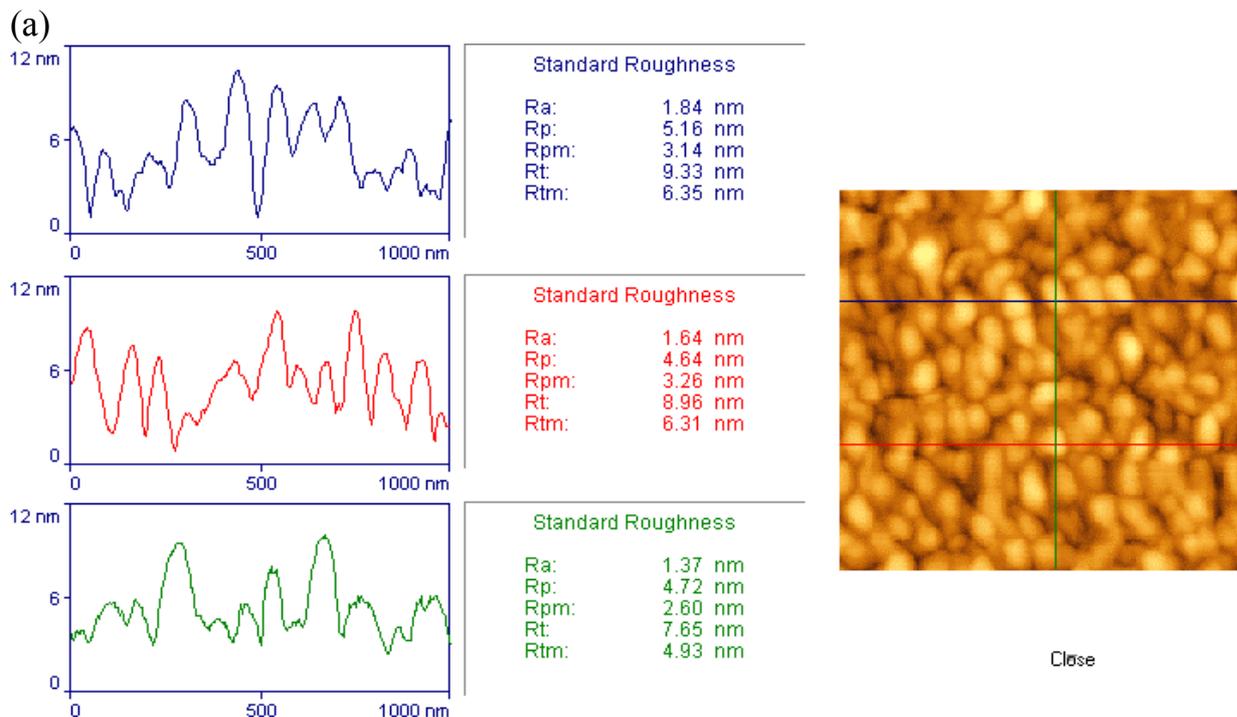


Abb. 3.3.5: Vergleich von Δ -Messungen an unterschiedlichen Goldproben unter $\vartheta=70^\circ$, die aus verschiedenen Zeiten und Depositionsanlagen stammen.

Im Allgemeinen weichen die n - und ε_i -Kurven der zwei Quellen voneinander so ab, dass $\varepsilon_{i\text{Au}[\text{Th}\acute{e}70]}$ gleichmässig h"oher ist als $\varepsilon_{i\text{Au}[\text{Asp}80]}$, und $n_{\text{Au}[\text{Th}\acute{e}70]}$ ebenfalls gleichmässig h"oher als $n_{\text{Au}[\text{Asp}80]}$ f"ur den gesamten Wellenl"angensbereich (Abb 3.3.2a und Abb 3.3.2b). In der Diskussion von Aspnes et al. [Asp80] wird die h"ochste Abweichung zwischen verschiedenen Literaturwerten der ε_i im Allgemeinen durch den Unterschied zwischen der H"ohe der Maxima in der N"ahе von $\lambda=320\text{nm}$ bezeichnet, der $\pm 15\%$ betr"agt. Im jetzigen Vergleich betr"agt der entsprechende Unterschied lediglich $\pm 5.45\%$, wobei sich die Wellenl"ange der jeweiligen Maxima um 2 nm verschiebt. Paliks Bevorzugung auf Th"eys Dispersionen im Interbandbereich beruht auf dem Kriterium von Aspnes et al. [Asp80]: die besseren Goldproben haben h"ohere ε_i . Mit ihrem eigenen Kriterium sollte die Goldprobe von Aspnes et al., deren ε_i niedriger ist, mehr Leerr"äume als diejenige von Th"eys enthalten. Ohne weitere Begr"undung haben sie ihre selbstbestimmten Dispersionen als Referenz angenommen und diejenigen von Th"eys als negative Leerraumanteile enthaltend bezeichnet. Eigentlich gibt es beim Vergleich von Aspnes [Asp80] noch ein ε_i -

Kurve [Pel69], die auf einer höheren Ebene als Thèyes ε_i -Kurve liegt. Bei Übernahme des Kriteriums von Aspnes et al. hat Palik nicht erklärt, weshalb er auf jenes verzichtet hat. Wie Abb 3.3.3 bereits gezeigt hat, liegt das Minimum von $\Delta_{\text{Au[Thè70]}}$ an $\lambda=492\text{nm}$, gegenüber $\lambda=486\text{nm}$ bei $\Delta_{\text{Au[Asp80]}}$, näher demjenigen der gemessenen Δ . Daher ist weder die erstere noch die letztere allein überzeugend. Scheinbar setzt sich die Δ -Kurve der „besten Goldprobe“ aus derjenigen von Aspnes unterhalb von $\lambda=492\text{nm}$ und derjenigen von Palik oberhalb dieser Wellenlänge zusammen. In Bezug auf dieses Ideal wird versucht, die beste Goldprobe herzustellen und deren Rauheit zu korrigieren.

Zu anderen bemerkenswerten Merkmalen unterscheiden sich die Δ -Kurven grundsätzlich durch ihre Höhe. Wenn Leerräume und Rauheit die einzige Begründung für die Qualitätsschwankung der gemessenen Goldproben sind, sollte die Goldprobe mit der höchsten Δ -Kurve die beste Qualität haben. Die blaue und die grüne Kurve sind frische Messungen an zwei selbstproduzierten Proben, die aus der gleichen Sputteringsanlage herkamen und deren Geburtsdaten neun Monaten auseinander liegen. Die rote Kurve entspricht ebenfalls einer Probe aus der gleichen Sputteringsanlage. Aber ihre Herstellung lag sechs Jahre zurück zum Zeitpunkt der Messung. Die erhebliche Senkung entspricht dem Alter der Probe. AFM Messungen haben die Vermutung bestätigt, dass die sechsjährige Goldprobe viel rauer ist als die übrigen (Abb. 3.3.6).



(b)

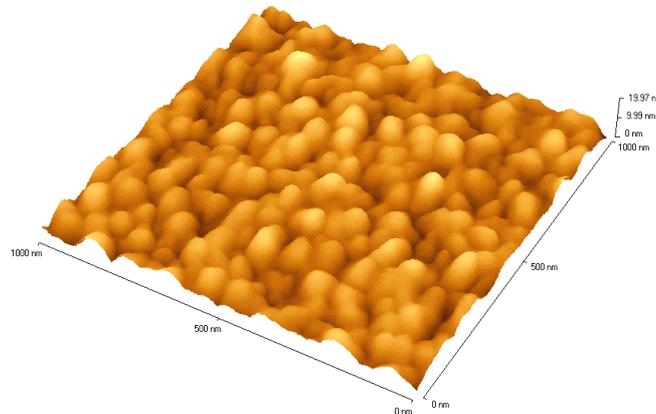


Abb. 3.3.6: AFM Messung an alter Goldprobe {02121294}.

Da die beträchtliche Senkung von jeglicher Rauheit unerreichbar ist, müssen Leerräume als eine Ursache eine größere Rolle spielen. Da sich die Existenz von Leerräumen nicht einfach untersuchen lässt, wurde die Abhängigkeit der Abwärtsverschiebung von natürlicher Alterung durch einen einfachen Versuch reproduziert. Die frisch hergestellte Goldprobe {0513a} wurde während zwei Monaten regelmässig gemessen. Die Δ -Kurve senkt allmählich im Lauf der Zeit. Abb. 3.3.7 zeigt den Vergleich der Anfangsmessung mit der Endmessung nach zwei Monaten, jeweils an vier willkürlichen Punkten. Die Gesamtherabsetzung ist deutlich signifikanter als die Abweichung wegen Unsicherheit im Messpunkt. Des weiteren wurden die vom Ellipsometerbauer zur Verfügung gestellten Goldproben (Abb.3.3.7 und Abb. 3.3.8) mitvergleichen. Die entsprechende Δ -Kurve ist bereits niedriger als diejenige unserer Goldprobe von niedrigster Qualität (Probe {0908a}). Offenbar hat die Alterung bei den vom Ellipsometerbauer zur Verfügung gestellten Goldproben ({au_ditt1} und {au_ditt2}) eine Rolle gespielt, während alle unsere Proben frisch hergestellt wurden.

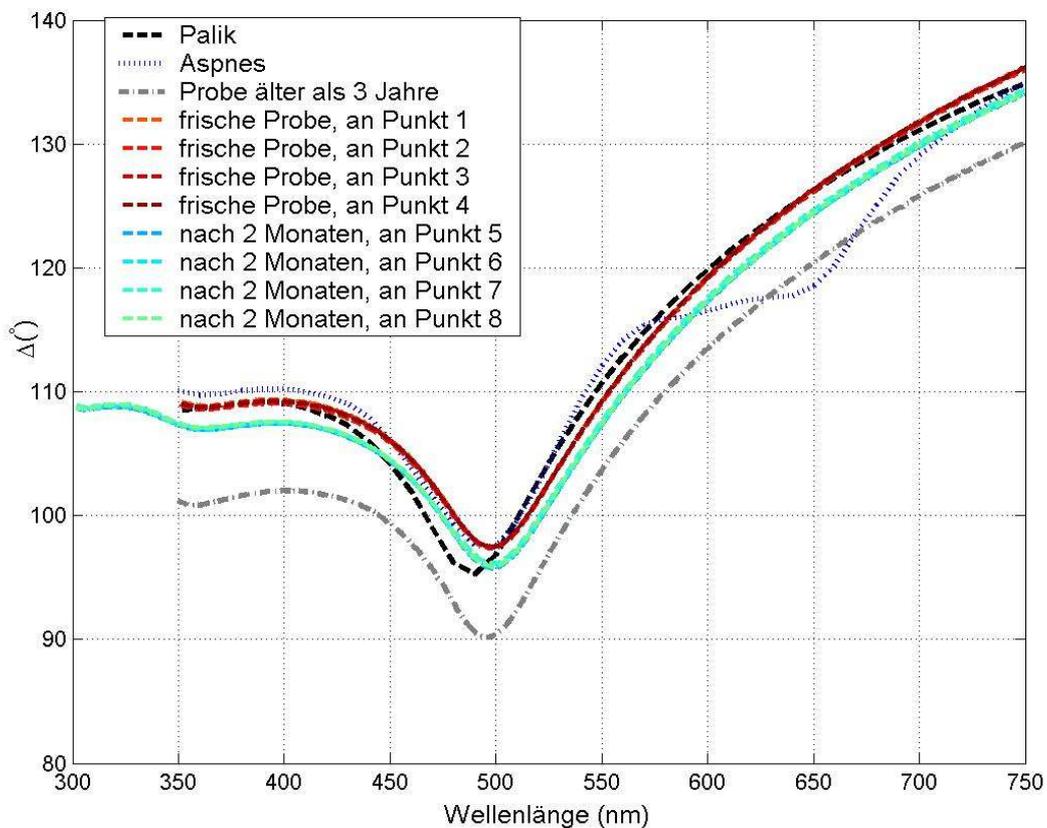


Abb. 3.3.7: Ein Alterungsversuch während zwei Monaten. Gezeigt sind nur Δ -Messungen unter $\varphi=65^\circ$ an Probe {0513a} am Anfang und am Ende des Versuchs, jeweils an vier willkürlichen Punkten der Goldprobe. Die Herabsetzung ist deutlich signifikanter als die Abweichung wegen Unsicherheit im Messpunkt.

Optische Messungen werden mehr an Gold durchführt als an irgend einem anderen Metall [Pal85, Seite 286]. Zugleich ist Gold wahrscheinlich das Metall mit der bekanntesten optischen Eigenschaft. Jedoch hat der obige Versuch gezeigt, dass dieses chemisch nicht-reaktive Material nicht optisch stabil ist. Als Referenzprobe zur optischen Messung und Eichung kann eine Goldprobe auch nur mit gewissen Vorbehalten angenommen werden. Überdies können die bisher zuverlässigsten Quellen unser Bedürfnis nicht befriedigen. Denn die höchste Δ -Kurve ist sogar besser als diejenige der zwei Autorenguppen. Daher ist unsere bisher beste optische Bestimmung der Goldprobe anhand der Probe {0513a}, als Referenz zur weiteren Charakterisierung und Entwicklung der goldbasierenden Filme und Systeme, glaubwürdiger.

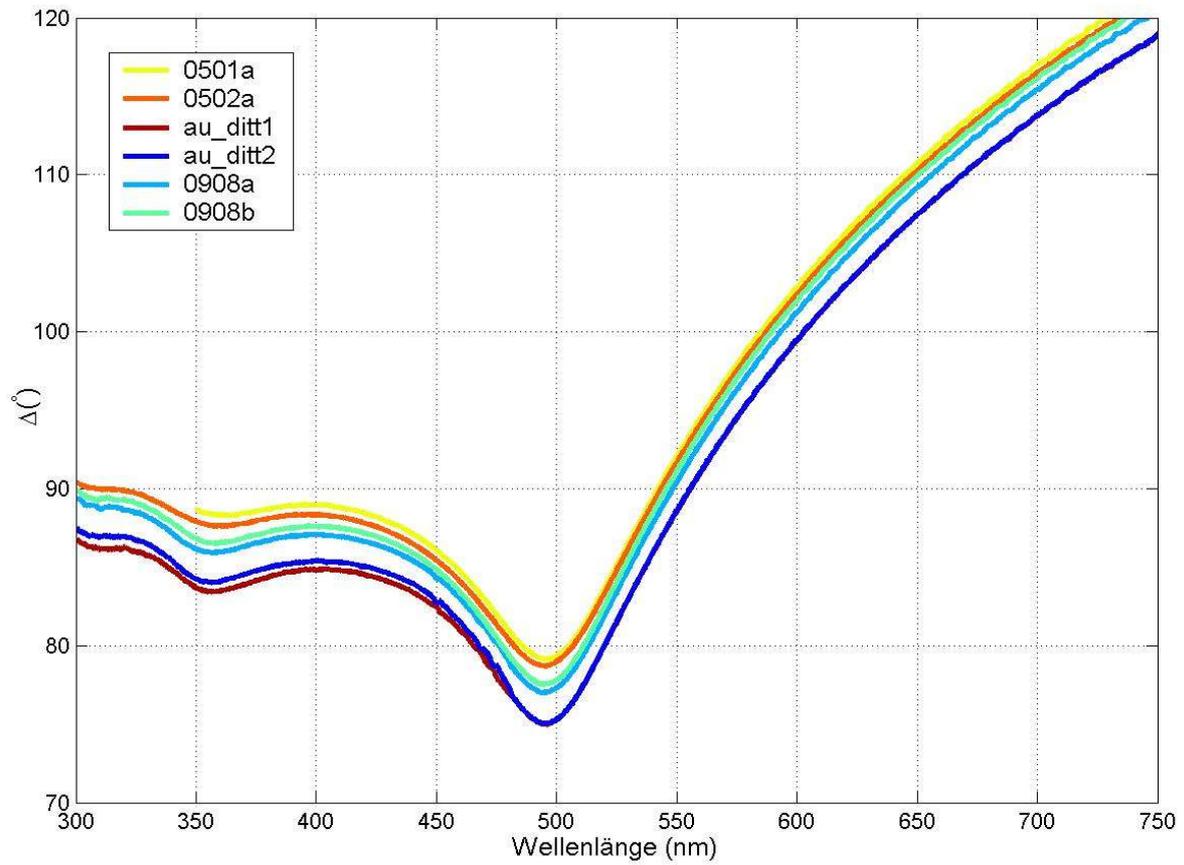


Abb. 3.3.8: Qualitätsvergleich unterschiedlicher dicken Goldproben anhand der Δ -Messung unter $\varphi=70^\circ$.

4 Anpassung anhand von Dispersionsformeln

Im Rahmen der Projekte [Bou03, Sch03] werden Beschichtungen für das Abdeckgläser von Sonnenkollektoren und für Fensterglas entwickelt, mit dem Ziel, der Glasoberfläche ein ästhetisch ansprechendes Aussehen zu verleihen und gleichzeitig die hohe Transparenz beizubehalten. Betrachtet wird eine Schichtfolge aus sich abwechselnden dielektrischen Materialien hoher und niedriger Brechzahlen und Schichtdicke. Das Mehrschichtsystem wird anhand der theoretischen Kenntnis von n - und k -Spektren mittels des Simulationsmoduls der *Spectraray* entworfen. Die Anzahl Schichten und ihre Dicken werden zunächst optimiert, um Licht lediglich aus einem schmalen VIS-Bereich selektiv zu reflektieren, damit das Glas farbig erscheint und trotzdem transparent bleibt für den üblichen Bereich.

Als Kandidaten der einzelnen Bausteine des Mehrschichtsystems sind zahlreiche Oxide geeignet. Als Bestandteil des höheren Brechungsindex wird vorzugsweise Titandioxid (TiO_2) berücksichtigt. Im Gegensatz zu anderen Oxiden zeichnet sich TiO_2 durch einen ausgesprochen hohen Brechungsindex [Bal97] (höher als Diamant) aus. TiO_2 ist chemisch nicht sehr beständig. Zur optischen Anwendung als Entspiegelungsschicht [The89], Schmalbandfilter [Mac01] und Lichtwellenleiter [Sie90, Har92] ist TiO_2 auch ein wertvolles Material [Rad93, Lee97]. Als Bestandteil mit niedrigerem Brechungsindex wird SiO_2 verwendet. Daher wird zuerst die Schichtfolge aus SiO_2 und TiO_2 [Ori97] betrachtet. Als nächstes werden Al_2O_3 und SiO_2 in Betracht gezogen [Bou03, Sch03].

Der optischen Charakterisierung eines Mehrschichtsystems liegt diejenige der Bestandteile zu Grunde. Die Genauigkeit der Charakterisierung hängt davon ab, wie gut einzelne Schichten und ihr Umfeld untersucht werden. Die Dispersionsrelationen der Bestandteile muss zuerst als einzelne Schichten auf Silizium-Substrat bestimmt werden. Mit Hilfe der begleitenden XPS- und UPS-Messungen werden Abscheidungsbedingungen experimentell bestimmt, um vollständige Oxidation der Schichten sicherzustellen. Anschliessend werden Einschicht-Oxidproben {air | Oxid a | Si} und {air | Oxid b | Si} hergestellt. Die Dicke der Oxidschichten wurde größer als 100nm gewählt. Denn es wurde gefunden, dass der Brechungsindex von SiO_2 Filme mit abnehmender Dicke zunimmt [Kal89, Cho90, Cha91], und dass eine Si- SiO_2 Übergangsschicht existiert [Cla75, Asp79]. Unter Annahme der Modelle $M_a = [L_{air}^\dagger L_a^\dagger L_{\text{Si}[\text{Pal}85]}^\dagger]^\dagger$ bzw. $M_b = [L_{air}^\dagger L_b^\dagger L_{\text{Si}[\text{Pal}85]}^\dagger]^\dagger$ werden sie mehrwinklig spektroskopisch ellipsometrisch unter $\vartheta = 50^\circ, 60^\circ$ und 70° charakterisiert. Danach werden die Dispersionsrelationen der Einzel-Schichten systematisch in 2-Schichtsysteme, 3-Schichtsysteme usw. eingesetzt und untersucht. Sie werden so hergestellt, dass die einzelnen Komponentenschichten gleich lang abgeschieden werden wie in

den zwei Einschichtsystemen. Somit wird bei ersten Versuchen angenommen, dass das Zweischichtsystem, Dreischichtsystem usw. durch $M_{ab}=[L_{air}^\dagger L_a^\dagger L_b^\dagger L_{Si[Pal85]}^\dagger]^\dagger$ bzw. $M_{bab}=[L_{air}^\dagger L_b^\dagger L_a^\dagger L_b^\dagger L_{Si[Pal85]}^\dagger]^\dagger$ usw. angenähert werden kann. Die Interferenzschicht als Endprodukt sollte nochmals auf Glas abgeschieden und charakterisiert werden. Die drei ausgewählten Materialien werden in der Literatur relativ häufig erforscht. Sie erweisen sich als ein gutes Beispiel für die Anpassung mit bekannten Dispersionsformeln oder -spektren. Hierbei werden die besten Ergebnisse erläutert.

Zur Charakterisierung der Einschichtsysteme wird zunächst der einfachste Ansatz ausprobiert, indem bekannte Dispersionsrelationen $n(\lambda)$ und $k(\lambda)$ aus dem Handbuch [Pal85] und der Datenbank [Sop01] unmittelbar in den Anpassungsversuch $F([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{Si[Pal85]}(\lambda) \ k_{Si[Pal85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ für eine Messung F_ϑ^{meas} eingesetzt werden, wobei $F=\Psi, \Delta$; $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei wird lediglich die Schichtdicke angepasst. Danach werden Anpassungen mit effektiven Medien versucht, die aus Mischungen von Materialien mit bekannten Dispersionsrelationen bestehen. Repräsentativ wird die Charakterisierung der Einschichtsysteme mit Berücksichtigung der einbezogenen Leerräume dargestellt. Dabei wird neben der Schichtdicke d auch noch der Mischanteil r angepasst. Mit diesem Ansatz wird die Anzahl Parameter auf zwei steigen. Zuletzt wird mit der Anpassung anhand von Dispersionsformeln experimentiert. Je nach Dispersionsformel ist die Anzahl der anzupassenden Parameter unterschiedlich. Da es sich lediglich um ein paar freie Parameter für ein paar tausend Messpunkte im gesamten spektralen Bereich handelt, wird der angemessenste Anfangsdickenbereich, von dem aus der Anfangswert schnell zu einer Nullstelle konvergiert, nach schnellem Ausprobieren gefunden. Anhand der Anzahl Gipfel und Täler der Wellenstruktur in den Messspektren ist es relativ einfach, visuell zu beurteilen, ob die Theorie der Messung passt und ob die Anpassung sich verbessert.

4.1 Simulation

Als Vorarbeit werden Studien über die Abhängigkeit der Gestalt der Messkurven vom Dickenbereich anhand von simulierten Messungen vorgenommen. Eine vollständige Untersuchung sollte einen umfangreichen Bereich von Schichtdicken abdecken. Dieser Schritt ist für die Planung eines Versuchs unerlässlich, aber auf ihn wird in der Literatur wenig eingegangen. Dort werden Simulationen nur repräsentativ dargestellt. Zur Referenz wird ein Vergleich der Literaturwerte für Dispersionsrelationen von Oxiden und ihren unoxidierten Ausgangsmaterialien (Abb. 4.1.1a, 4.1.1b und 4.1.1c) dargestellt. Im Allgemeinen werden die Dispersionsrelationen nach Oxidation nahezu konstant im gesamten sichtbaren Bereich, abgesehen von der Resonanzstelle des TiO_2 um $\lambda=300\text{-}400\text{nm}$ (Abb. 4.1.1c). Beim SiO_2 und Al_2O_3 gehören die sichtbaren Bereiche zur Zone I bzw. IV des Lorenzschen Oszillatormodells. Ihre Resonanzstellen liegen weit unter 300nm . Beim TiO_2 taucht die Zone II gerade bei kleinen Wellenlängen auf. Besonderen Wert wird auf Titandioxid gelegt.

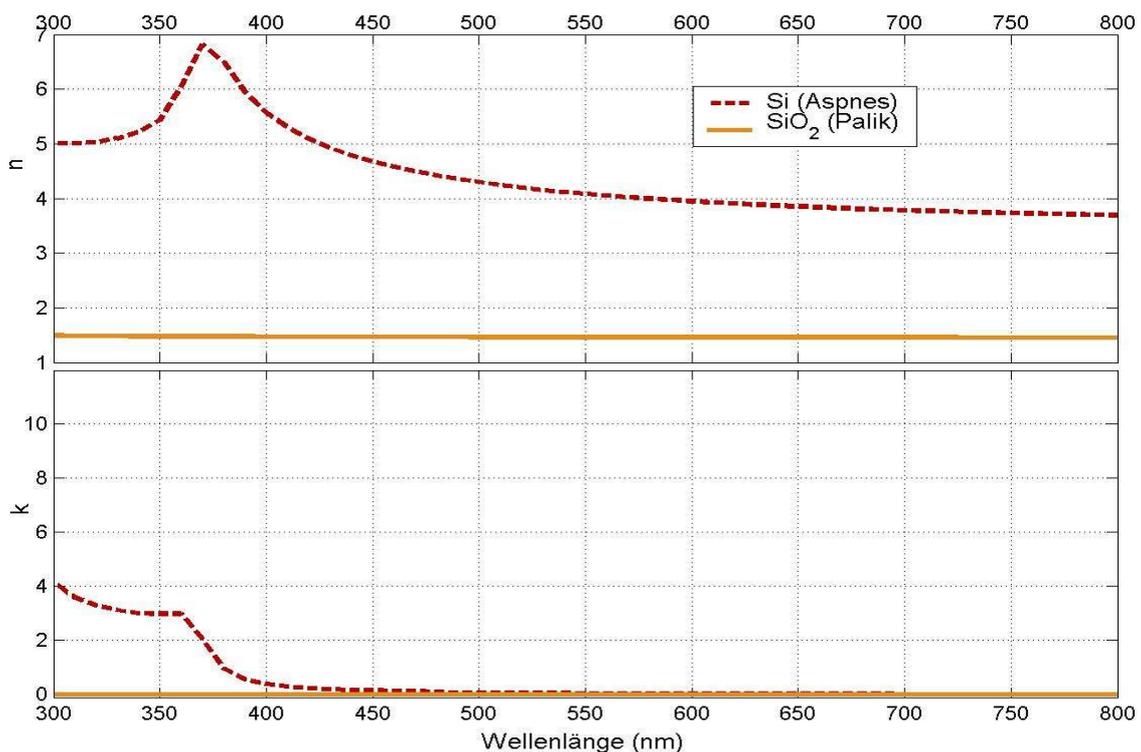


Abb. 4.1.1a: Vergleich von Dispersionsrelationen von Si und SiO_2 , $\tilde{n}_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda)$ bzw. $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$, aus dem Handbuch von Palik [Pal85].

Abgesehen von einem kleinen Bereich (300-350nm) auf der Seite der kleinen Wellenlängen ist TiO_2 vorwiegend nicht-absorbierend. Cauchy-Anpassung ist nur bei höheren Wellenlängen gültig, d.h. von 800nm herab bis etwa 400nm

(Abb. 4.1.3a). Während $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ und $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)$ fast konstant bei 1.5 bzw. 1.7 bleiben, steigt $n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ von 800nm aus mit abnehmender Wellenlänge allmählich und langsam an. Ausser dem Bereich $\lambda=300\text{-}400\text{nm}$ von $k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ ist die k -Kurve gleich Null und nicht-absorbierend. Sowohl $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ als auch $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)$ können mit einer konstanten Dispersionsfunktion, einem Polynom zweiten Grades oder einer Cauchy-Formel angepasst werden.

Nun kommt man auf die entsprechenden nicht-oxidierten Elemente. $n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ weist ein scharfes Absorptionspeak bei $\lambda=375\text{nm}$ auf, während $n_{\text{Ti}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ und $n_{\text{Al}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ beide mit abnehmenden Wellenlängen sinken. Man kann sich vorstellen, dass eine breite Zone I fast den ganzen VIS-Bereich abdeckt. Nach vollständiger Oxidation werden die Extinktionskoeffizienten alle auf Null sinken, bis auf $k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda=300\text{-}400\text{nm})$. Die n -Spektren entwickeln sich nach Oxidation nicht in die gleiche Richtung: Während $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ kleiner als $n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ wird, wird $n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ größer als $n_{\text{Ti}[\text{Pal85}]}(\lambda)$. $\Psi([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{Oxid}}(\lambda) \ k_{\text{Oxid}}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ und $\Delta([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{Oxid}}(\lambda) \ k_{\text{Oxid}}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ werden simuliert für den Bereich $\lambda=300\text{-}800\text{nm}$, $d=100\text{nm}$, 300nm , 500nm , 700nm , 900nm , wobei das Oxid jeweils für $\text{SiO}_2[\text{Pal85}]$, $\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]$ bzw. $\text{TiO}_2[\text{Pal85}]$ steht. Ausser dem Bereich $\lambda=300\text{-}400\text{nm}$ nimmt die Anzahl der Gipfel und Täler (Abb. 4.1.2a, 4.1.2b und 4.1.2c) wegen mehrfacher Reflexionen des Lichts zwischen den Schichtgrenzen mit steigender Schichtdicke zu.

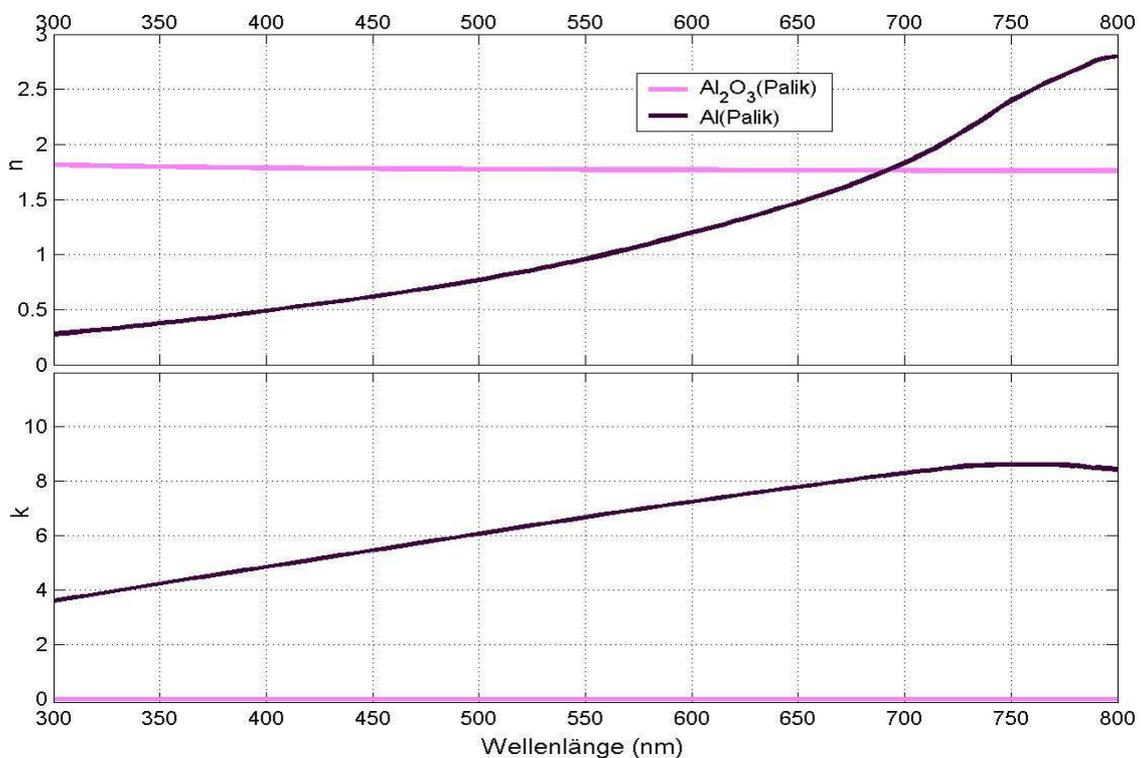


Abb. 4.1.1b: Vergleich von Dispersionsrelationen von Al und Al_2O_3 , $\tilde{n}_{\text{Al}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ bzw. $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)$, aus dem Handbuch von Palik [Pal85].

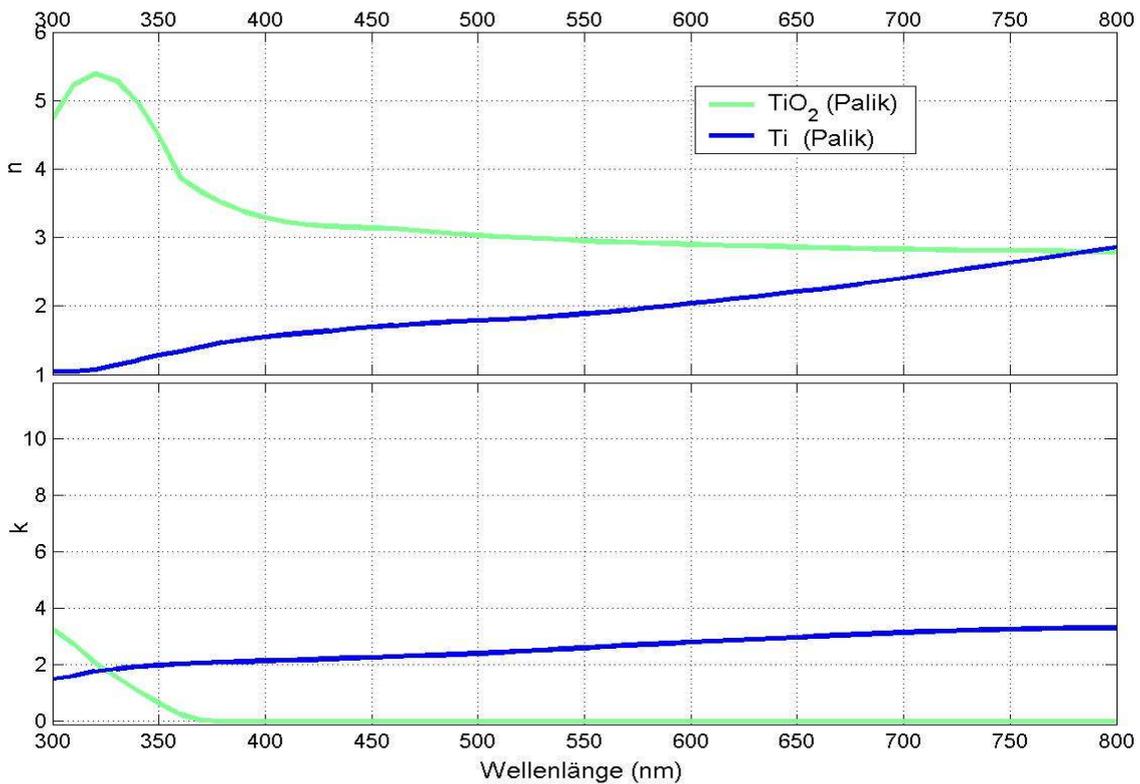


Abb. 4.1.1c: Vergleich von Dispersionsrelationen von Ti und TiO_2 , $\tilde{n}_{\text{Ti[Pal85]}}(\lambda)$ bzw. $\tilde{n}_{\text{TiO2[Pal85]}}(\lambda)$, aus dem Handbuch von Palik [Pal85].

Anhand der Wellenstruktur wird das Abschätzungsverfahren der Anfangswerte der anzupassenden Parameter erheblich erleichtert. Je dichter die Wellenstruktur, desto kann eindeutiger eine Anpassung sein. Mit zunehmenden Schichtdicken vom SiO_2 bleibt der Peak von Ψ um $\lambda=450\text{nm}$ bei der gleichen Wellenlänge. Der Peak wird deutlicher, wenn sich mehr Peaks von beiden Seiten der höheren und niedrigeren Wellenlängen zusammendrängen. Bei Δ -Kurven kann ein stationärer Punkt identifiziert werden. Statt eines Peaks befindet sich ein starker Abfall am stationären Punkt. Bei TiO_2 ist dieser Punkt, der sich bei $\lambda>400\text{nm}$ befindet, weniger auffallend. Bei $\lambda<360\text{nm}$ ist die Änderung an Ψ und Δ von TiO_2 wegen Absorption geringfügig.

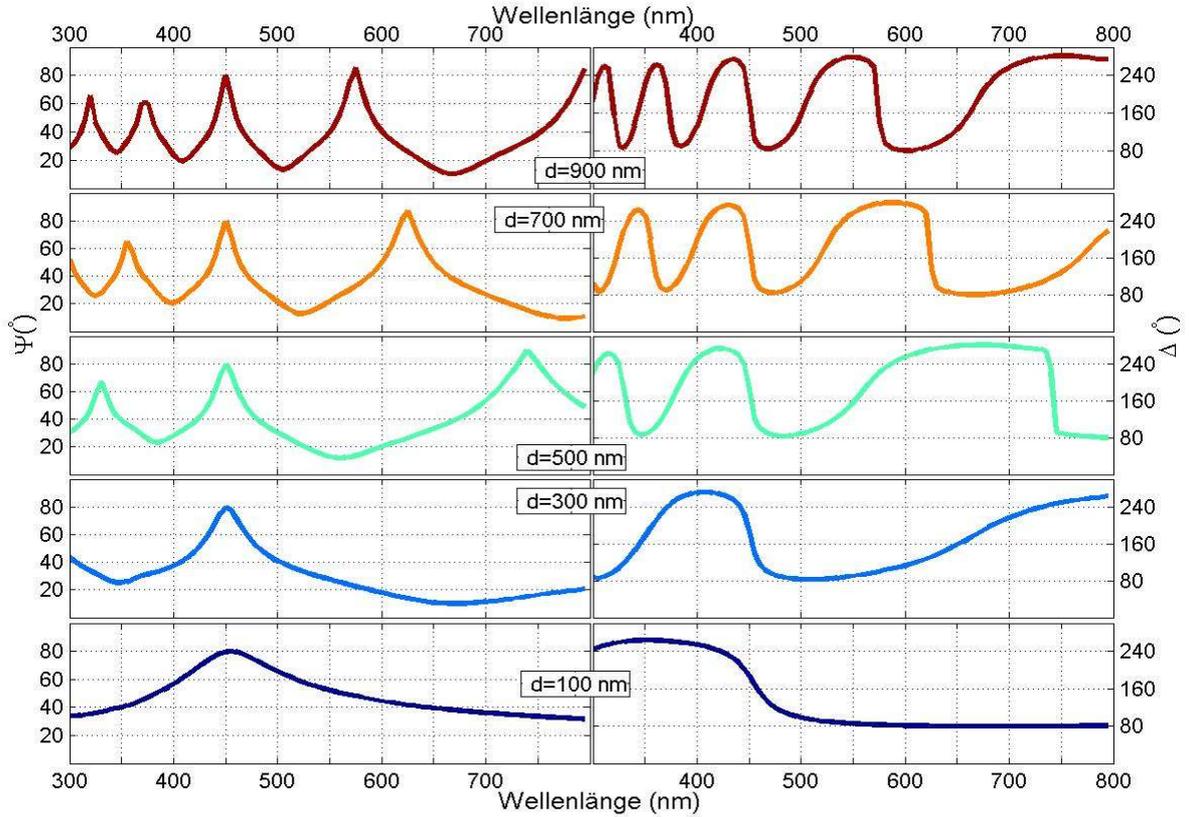


Abb. 4.1.2a: Simulation $\Psi([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, 70^\circ)$ und $\Delta([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, 70^\circ)$ für den Bereich $\lambda=300\text{-}800\text{nm}$, $d=100\text{nm}$, 300nm , 500nm , 700nm , 900nm .

In der Versuchsphase der Suche nach Abscheidungsbedingungen ist es zu erwarten, dass man auf unvollständig oxidierte Schichten stoßen wird. Ihre Dispersionsrelation sollte irgendwo zwischen derjenigen des Ausgangsmaterials und derjenigen des Zielmaterials liegen. Dies gilt ebenso für die Ψ - und Δ -Spektren. Da die Wirkung nicht direkt abgelesen werden kann, muss eine umfangreiche Simulation durchgeführt werden, um den Entwicklungstrend zu untersuchen. $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{X}}^2(\lambda), r))^{1/2} \ \text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{X}}^2(\lambda), r))^{1/2} \ 300\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ werden simuliert, mit $F=\Psi, \Delta$; $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$; $r=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ (Abb.4.1.3a, 4.1.3c, 4.1.3e) bzw. $r=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1$ (Abb.4.1.3b, 4.1.3d, 4.1.3f). Ausgegangen von $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$, $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)$ bzw. $\tilde{n}_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ werden sich $\tilde{n}_{\text{SiO}_2}(\lambda)$, $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda)$ und $\tilde{n}_{\text{TiO}_2}(\lambda)$ mit vermehrter Einbettung des Ausgangsmaterials in die Oxidschichten allmählich zu $\tilde{n}_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)$, $\tilde{n}_{\text{Al}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ und $\tilde{n}_{\text{Ti}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ umwandeln. Das Modell $[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{XO}}(\lambda) \ k_{\text{XO}}(\lambda) \ 300\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger$ wird sich zu $[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{X}}(\lambda) \ k_{\text{X}}(\lambda) \ 300\text{nm}]^\dagger)^\dagger$ umwandeln, wobei X für $\text{Si}[\text{Pal85}]$, $\text{Al}[\text{Pal85}]$ bzw. $\text{Ti}[\text{Pal85}]$ steht und XO für deren vollständiges Oxid, nämlich $\text{SiO}_2[\text{Pal85}]$, $\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]$ bzw. $\text{TiO}_2[\text{Pal85}]$.

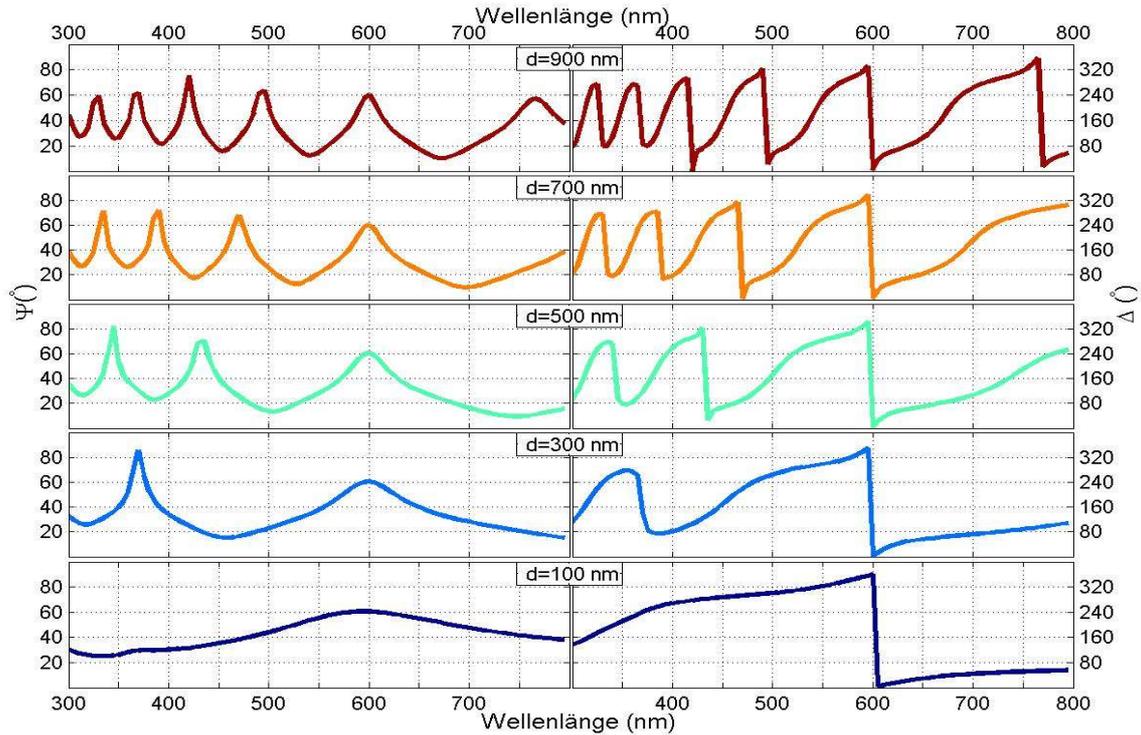


Abb. 4.1.2b: Simulation $\Psi([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, 70^\circ)$ und $\Delta([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, 70^\circ)$ für den Bereich $\lambda=300\text{-}800\text{nm}$, $d=100\text{nm}, 300\text{nm}, 500\text{nm}, 700\text{nm}, 900\text{nm}$.

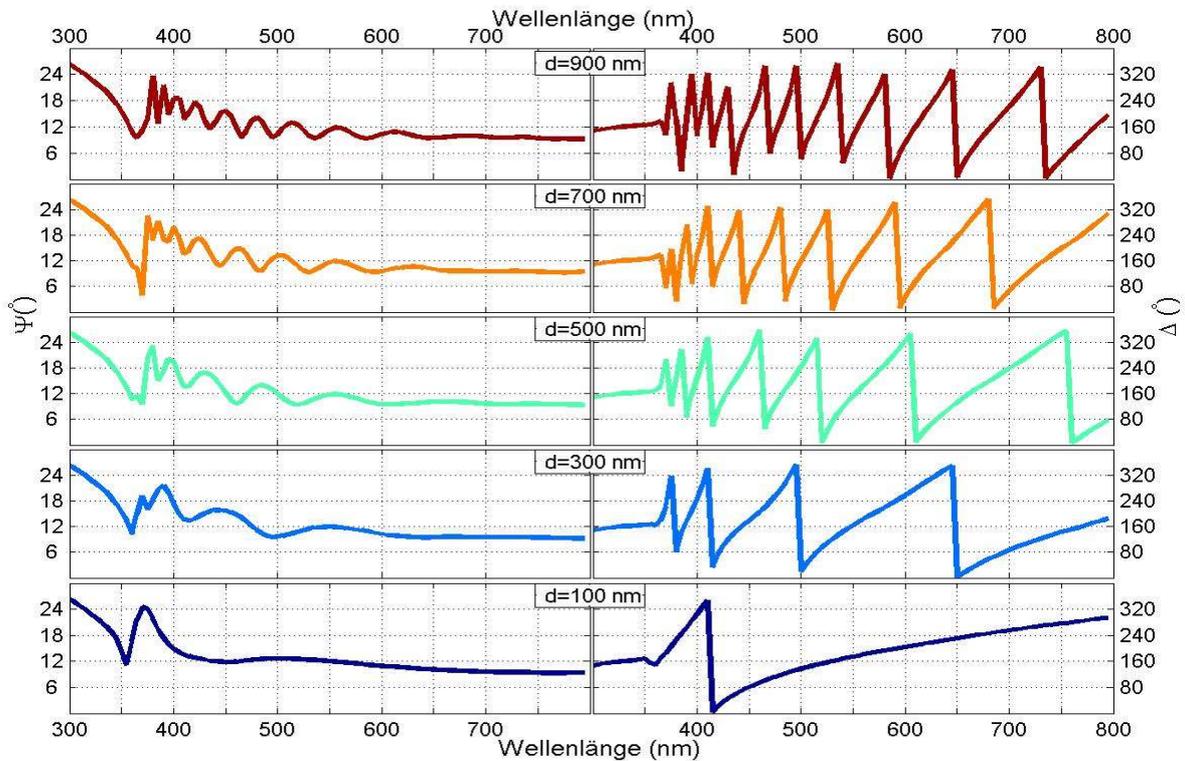
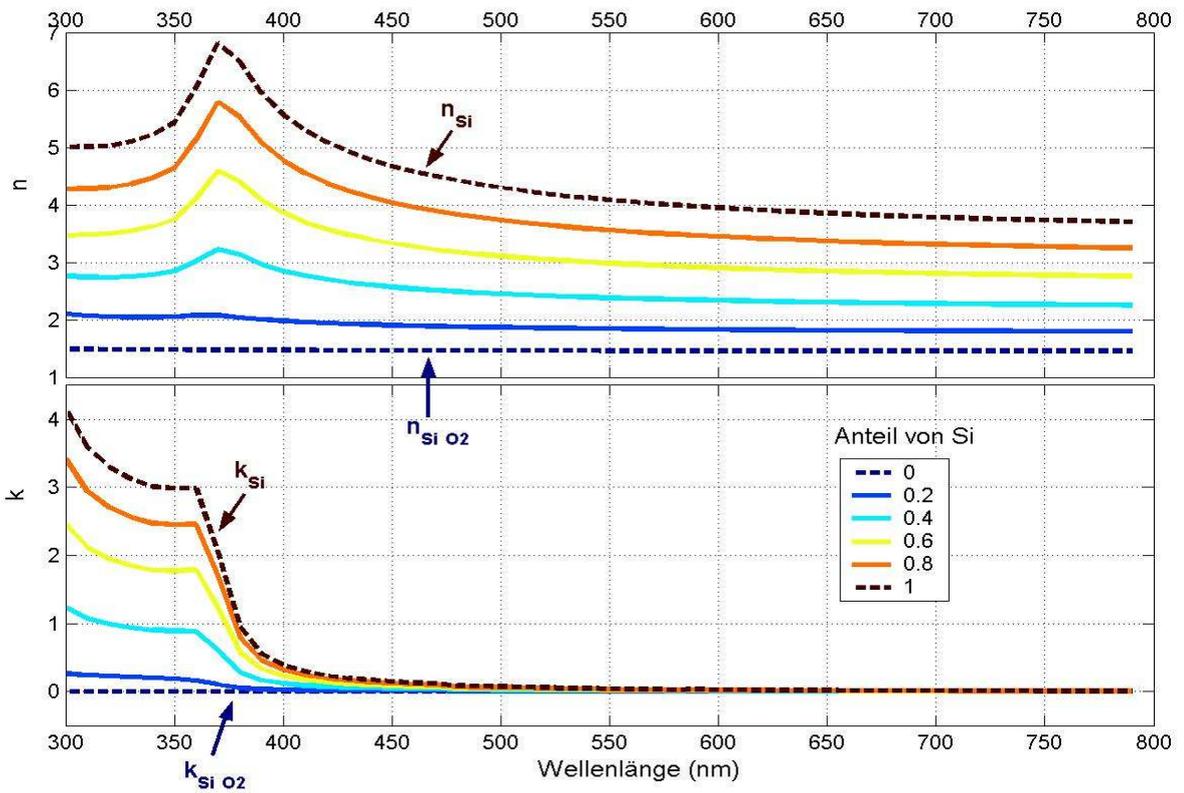
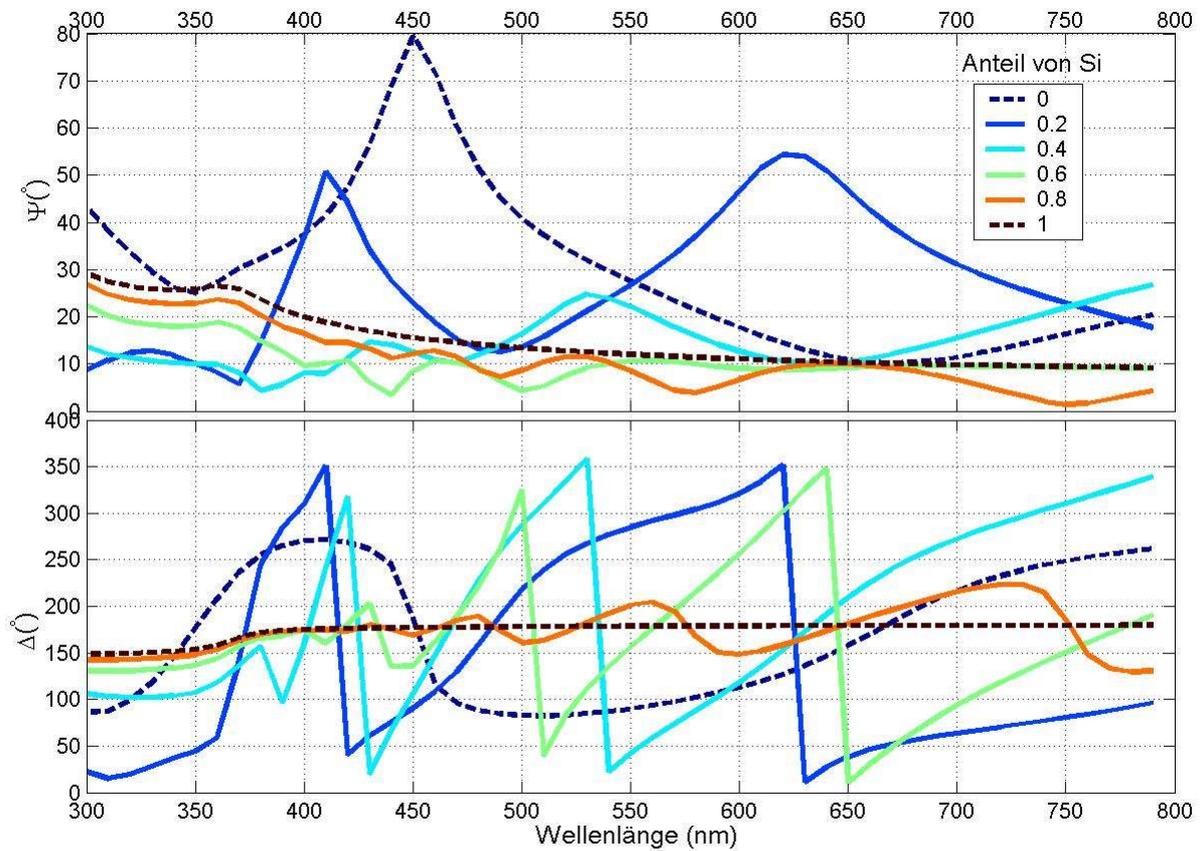


Abb. 4.1.2c: Simulation $\Psi([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, 70^\circ)$ und $\Delta([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, 70^\circ)$ für den Bereich $\lambda=300\text{-}800\text{nm}$, $d=100\text{nm}, 300\text{nm}, 500\text{nm}, 700\text{nm}, 900\text{nm}$.

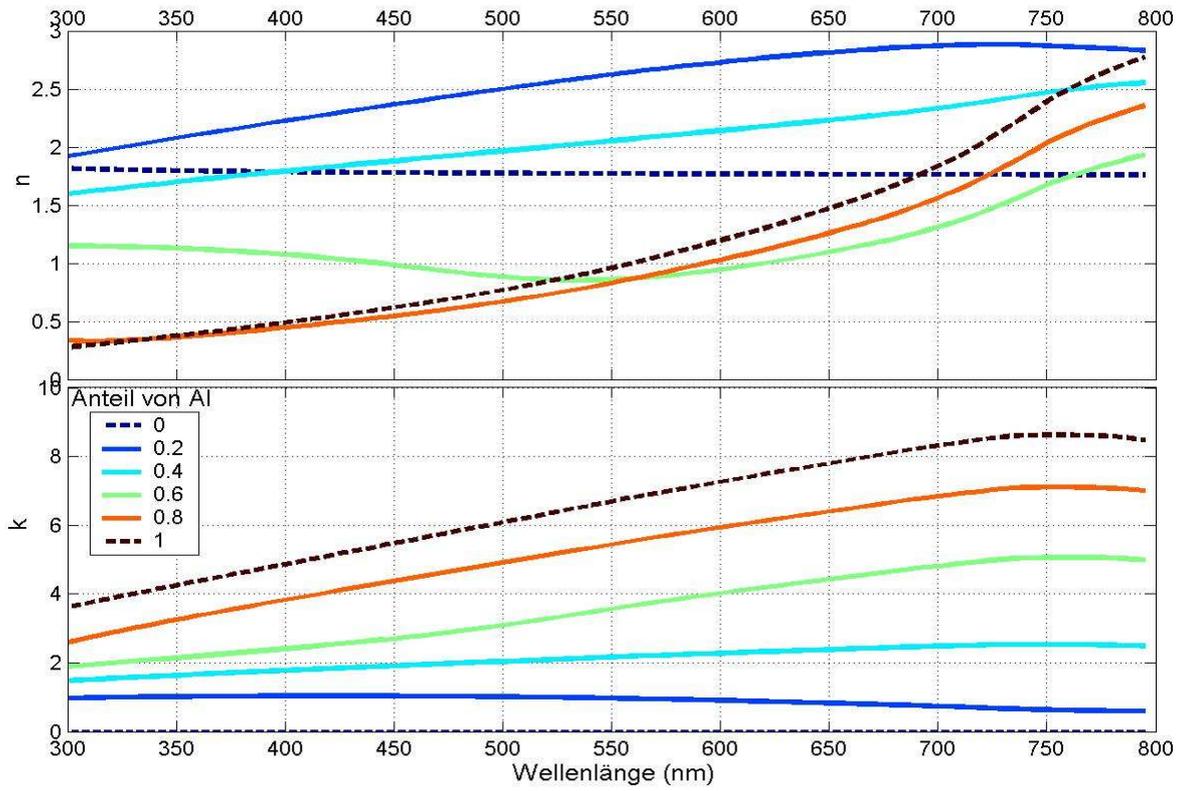
(a)



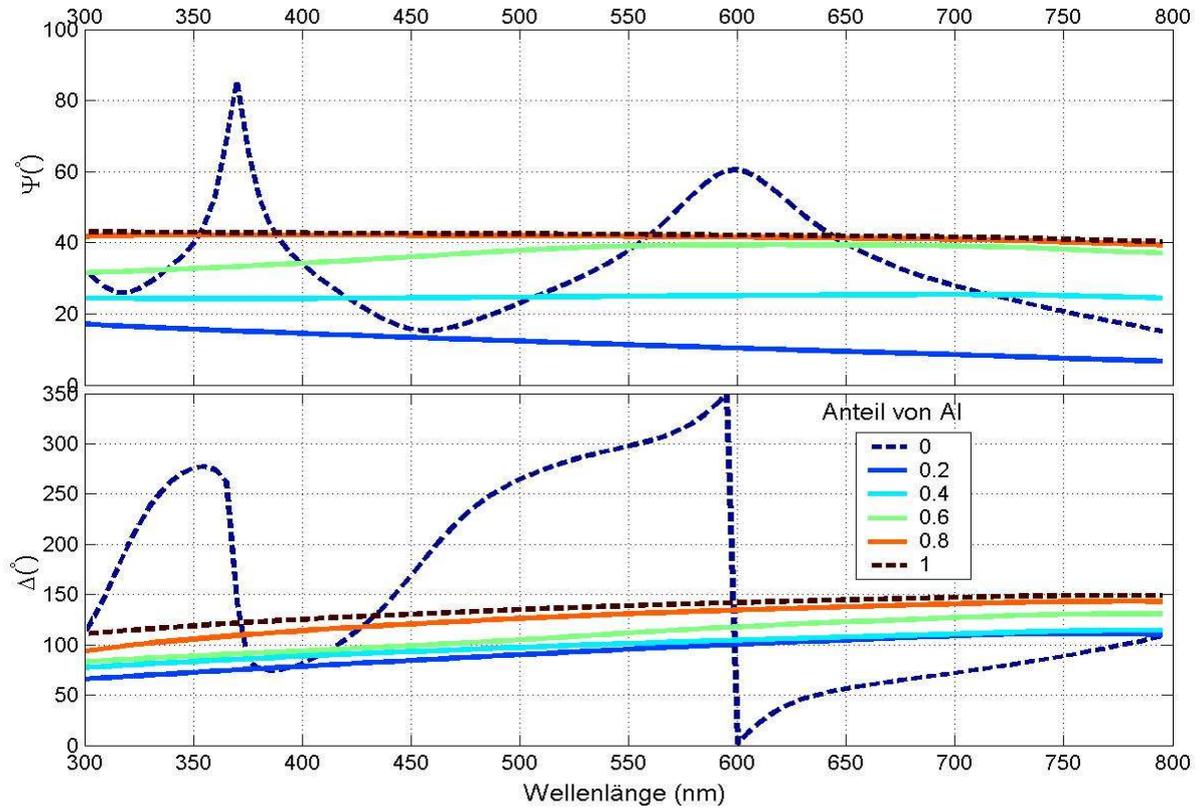
(b)



(c)



(d)



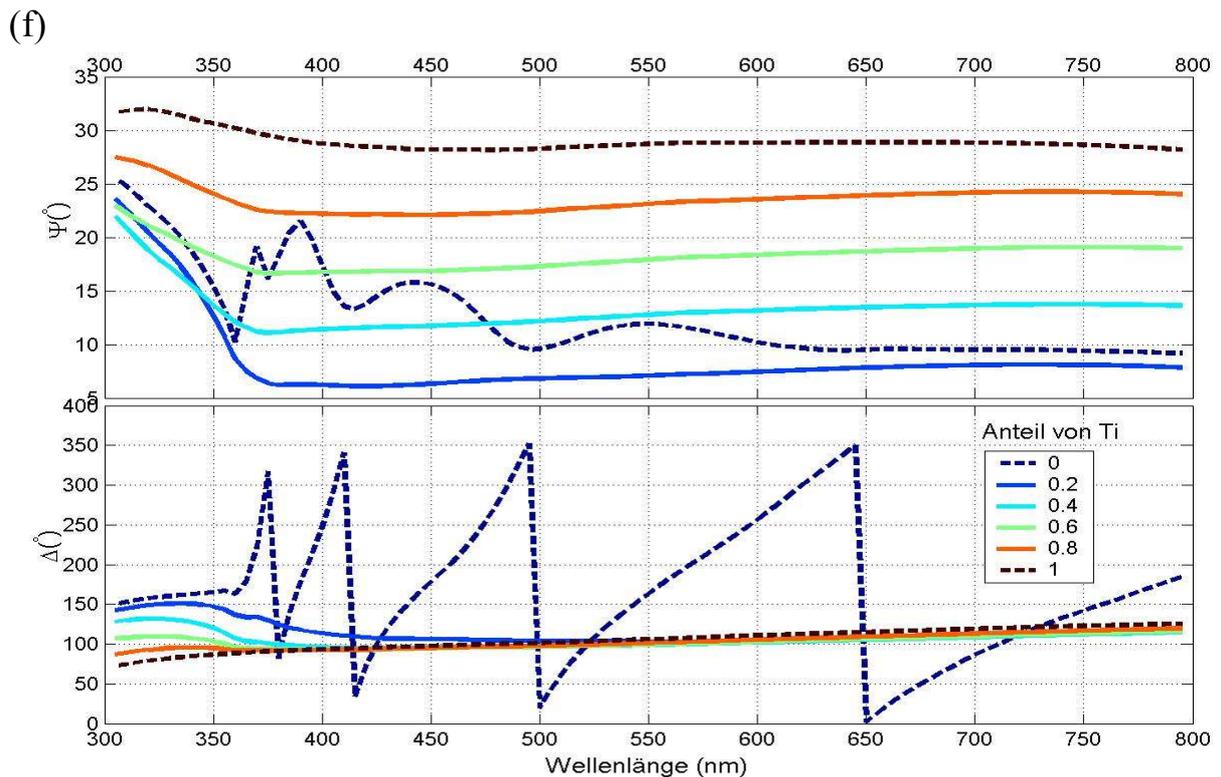
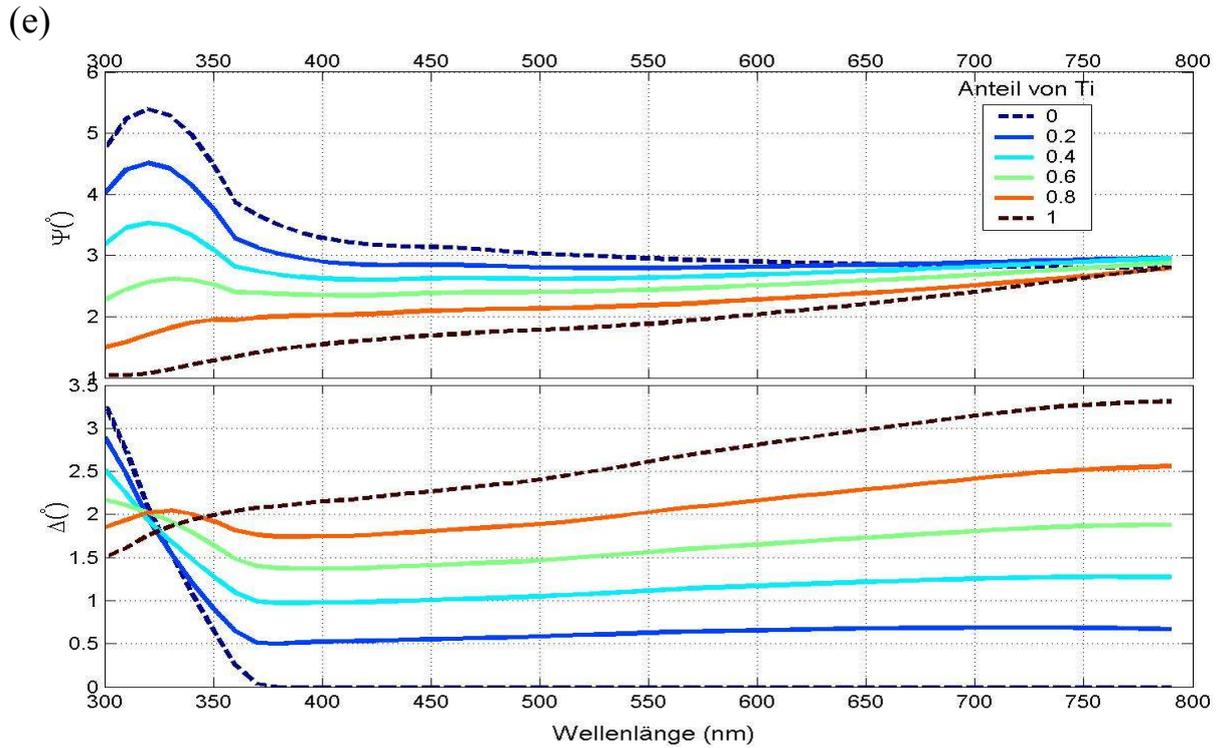
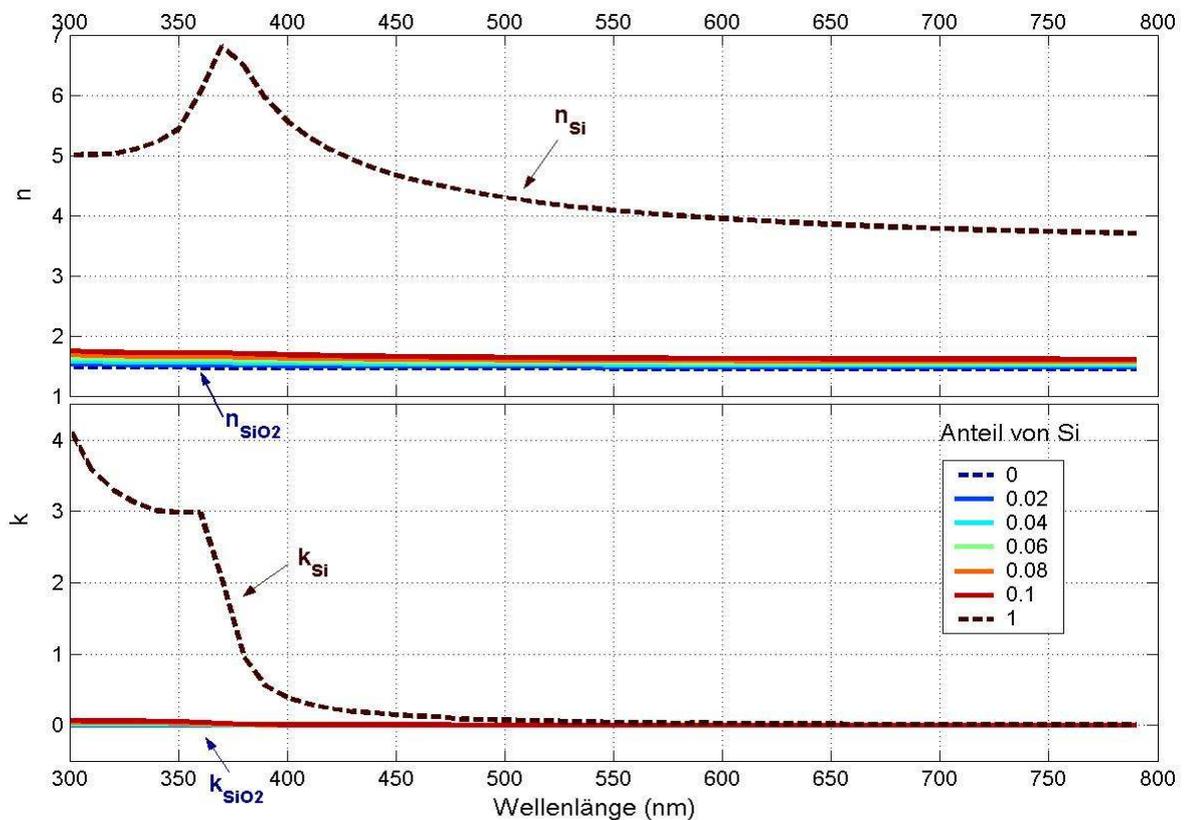
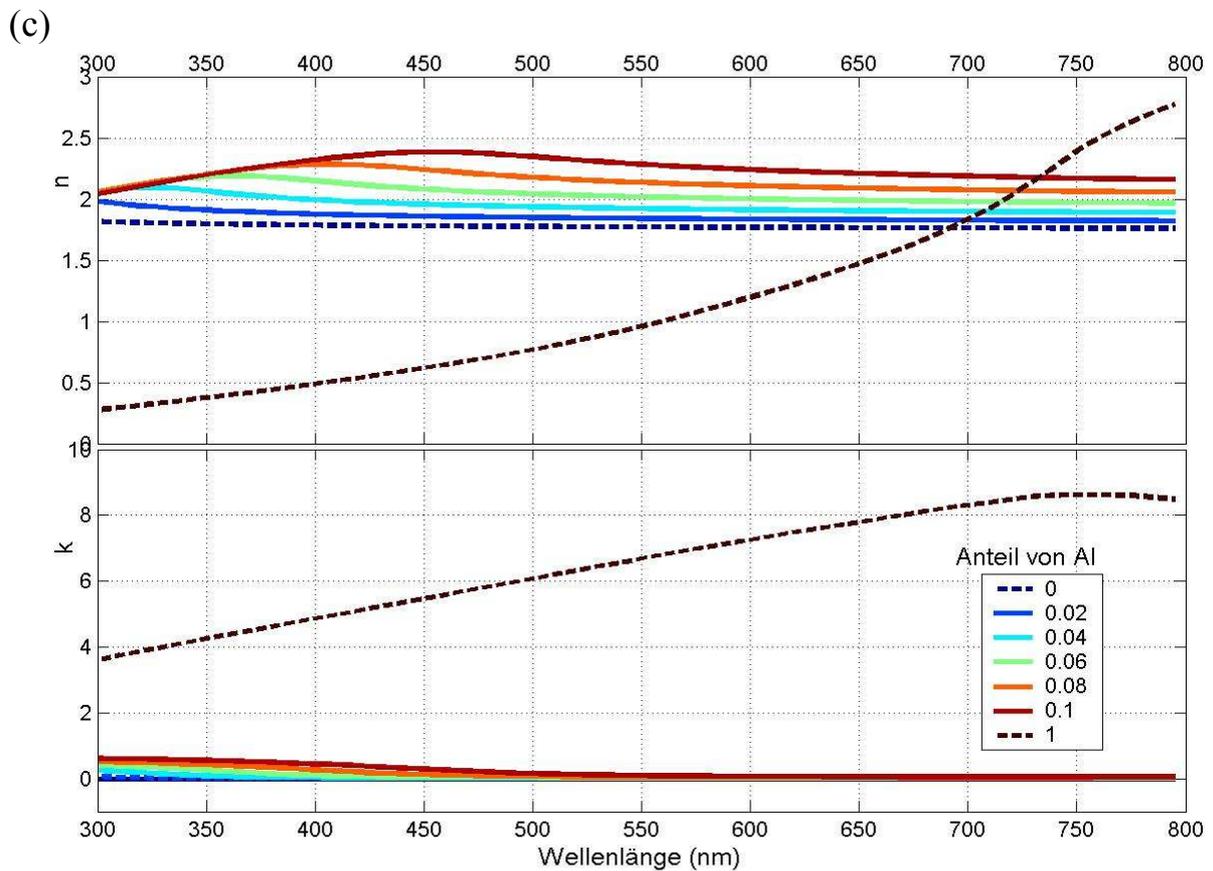
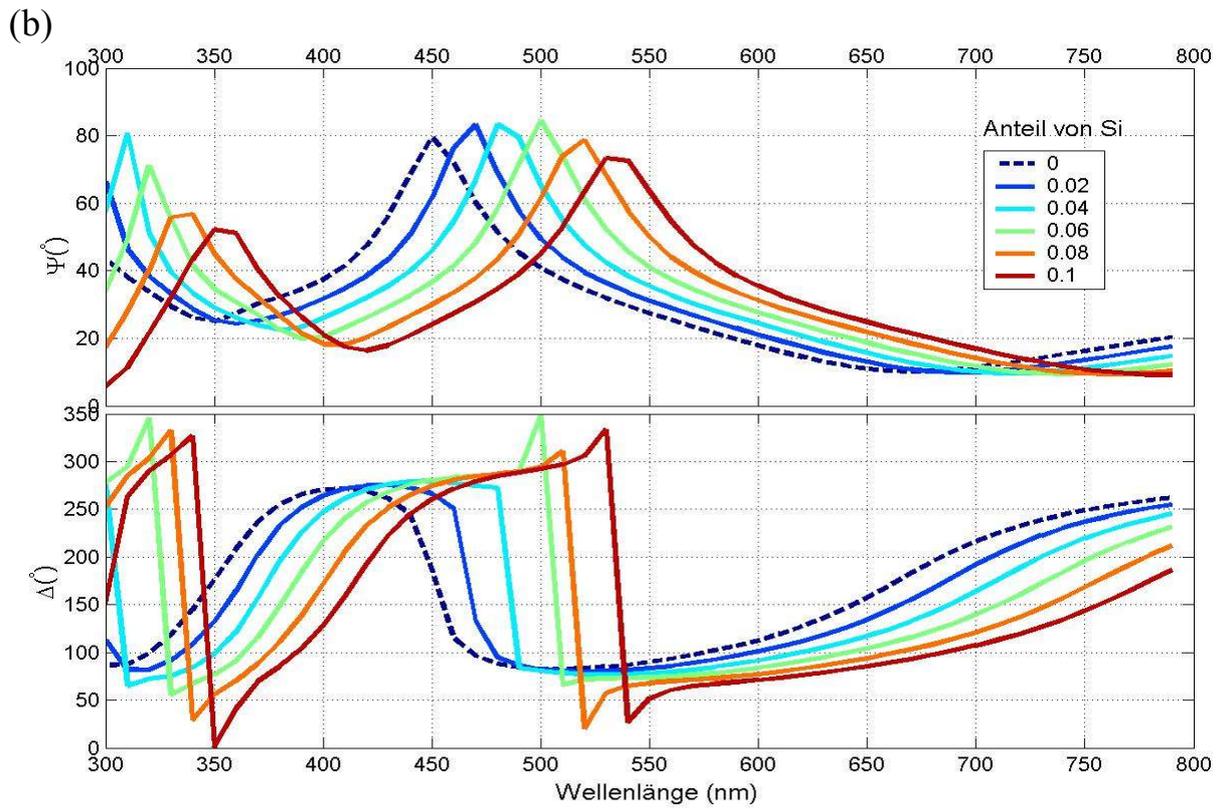


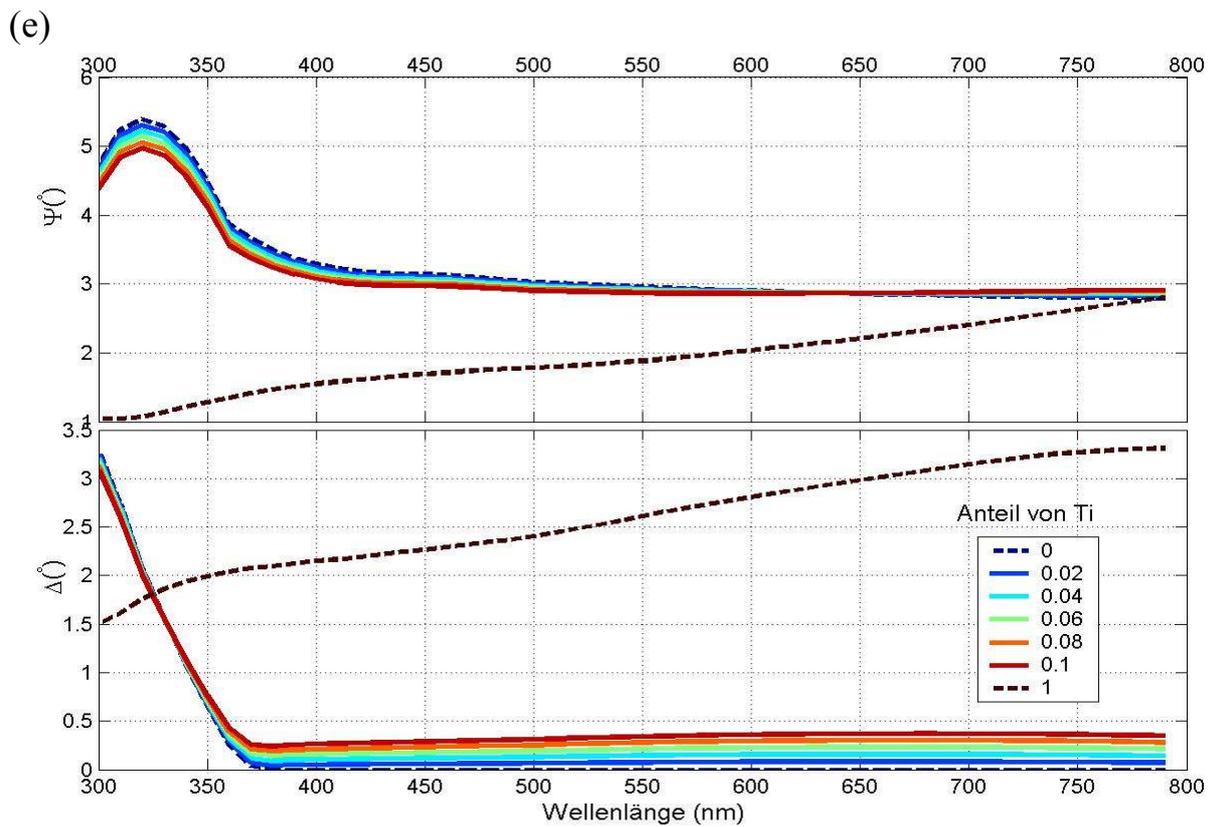
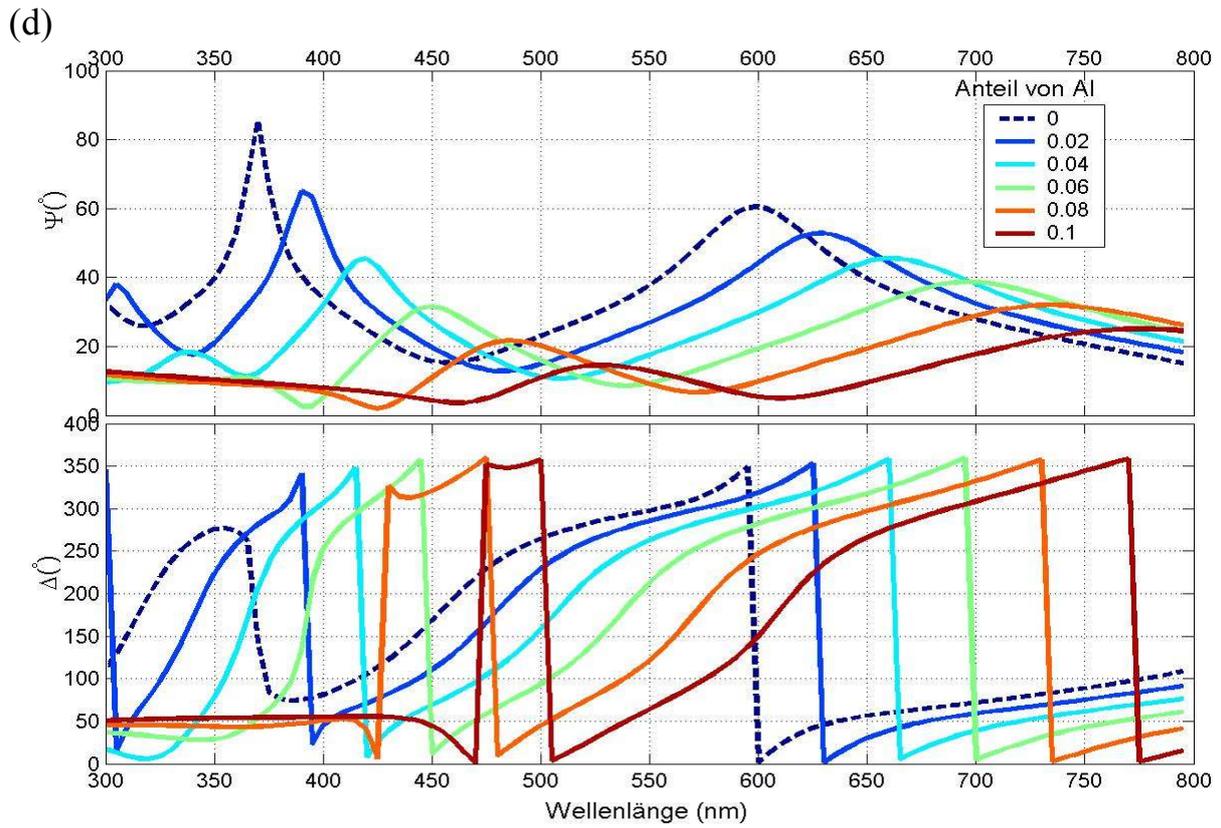
Abb. 4.1.3: Simulierte optische Konstanten $\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2}$ und $\text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2}$ von drei Oxidschichten mit Einbettung (Volumenanteile $r=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$) entsprechender unoxidierten Ausgangsmaterialien (Abb. a,c,e). Abb. b,d,f stellen die entsprechenden optischen Funktionen $F([\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix}]^{\dagger} \text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2} \text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2} 300\text{nm}]^{\dagger} [n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ \infty]^{\dagger}]^{\dagger}, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^{\circ}, 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$ dar.

Ausserdem wird die Wirkung der Einbeziehung von Leerräumen simuliert. $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix}\right]^{\dagger} \left[\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} 300\text{nm}\right]^{\dagger} \left[n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \infty\right]^{\dagger}\right]^{\dagger}, \vartheta)$ werden simuliert, wobei $F = \Psi$, Δ ; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$; $r = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ (Abb.4.1.4a,-c,-e) bzw. $r = 0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1$ (Abb.4.1.4b,-d,-f). Mit vermehrter Einbettung des Ausgangsmaterials in die Oxidschichten werden $\tilde{n}_{\text{SiO}_2}(\lambda)$, $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda)$ und $\tilde{n}_{\text{TiO}_2}(\lambda)$, $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$, $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)$ bzw. $\tilde{n}_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ annehmen und von da aus sich allmählich zu $\tilde{n}_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)}$, $\tilde{n}_{\text{Al[Pal85]}(\lambda)}$ und $\tilde{n}_{\text{Ti[Pal85]}(\lambda)}$ umwandeln. Das Modell $\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix}\right]^{\dagger} \left[n_{\text{XO}}(\lambda) k_{\text{XO}}(\lambda) 300\text{nm}\right]^{\dagger} \left[n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \infty\right]^{\dagger}\right]^{\dagger}$ wird sich zu $\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix}\right]^{\dagger} \left[n_{\text{X}(\lambda)} k_{\text{X}(\lambda)} 300\text{nm}\right]^{\dagger}\right]^{\dagger}$ umwandeln, wobei X für Si_[Pal85], Al_[Pal85] bzw. Ti_[Pal85] steht und XO für deren vollständiges Oxid steht, nämlich SiO_{2[Pal85]}, Al₂O_{3[Pal85]} bzw. TiO_{2[Pal85]}.

(a)







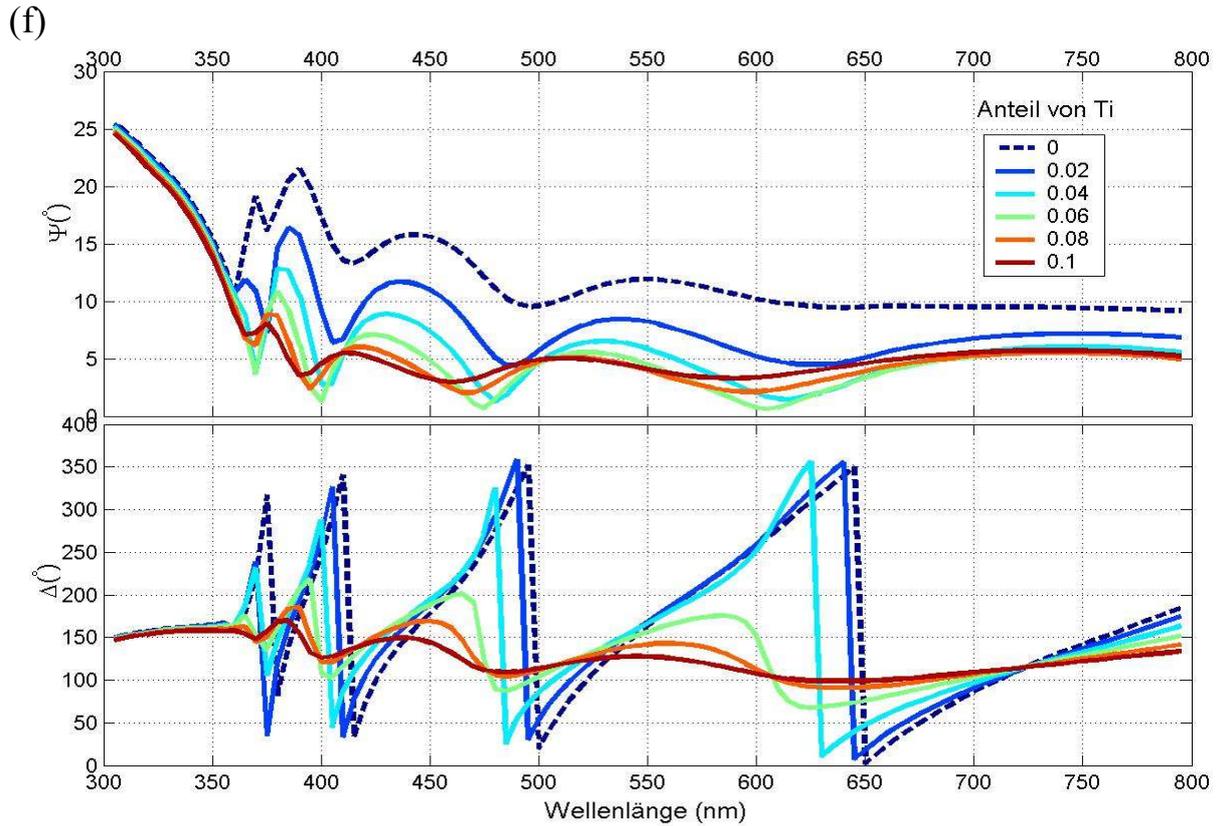
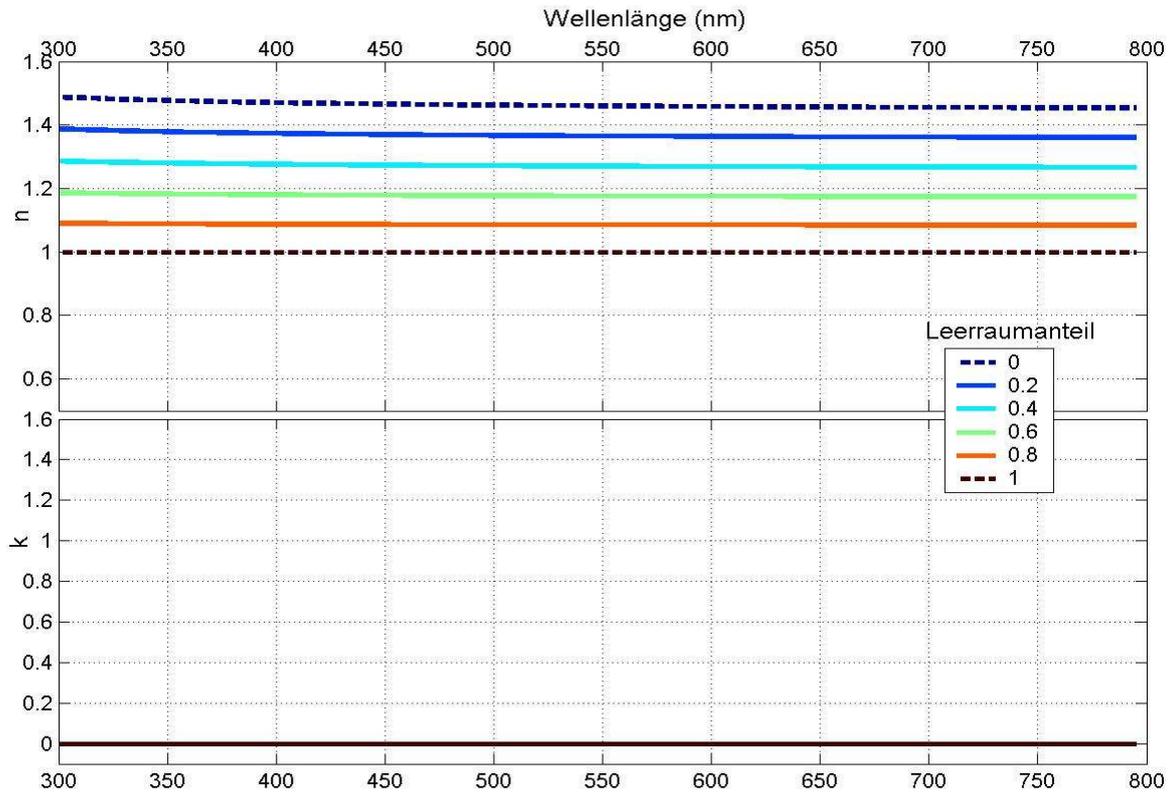
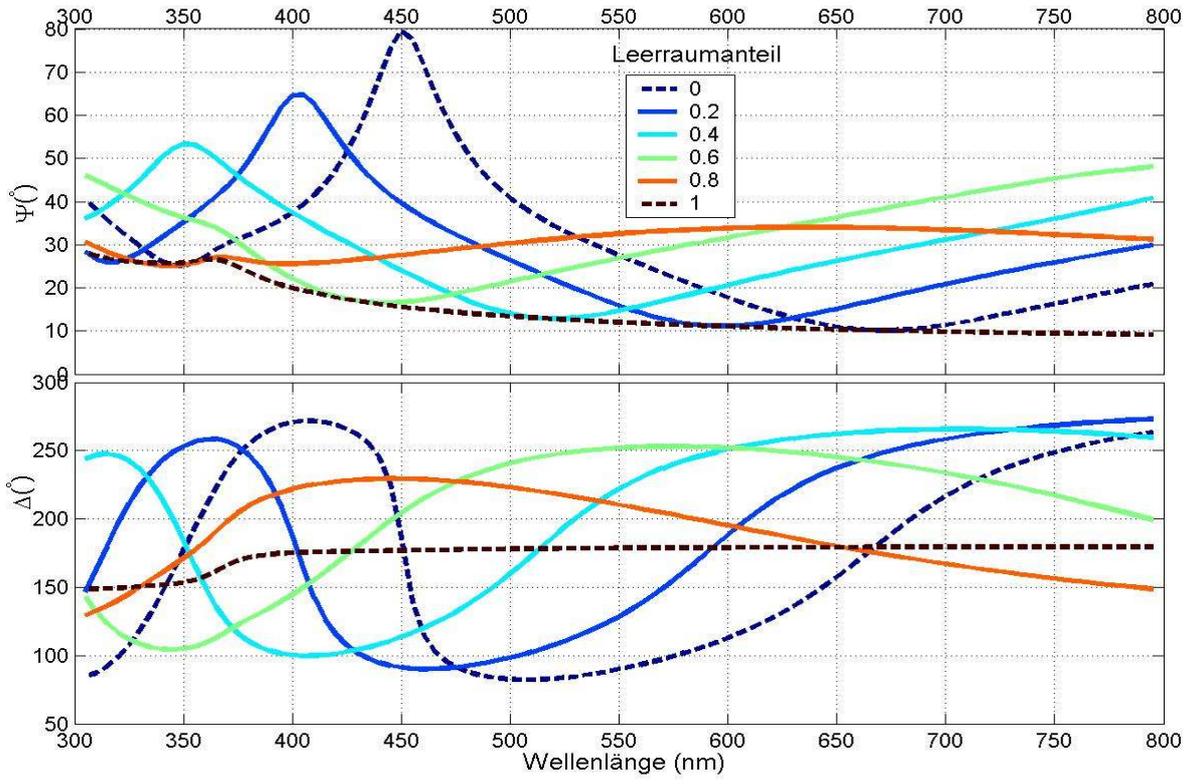


Abb. 4.1.4: Simulierte optische Konstanten $\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2}$ $\text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2}$ von drei Oxidschichten mit Einbettung (Volumenanteile $r=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 1$) entsprechender unoxidierten Ausgangsmaterialien (Abb.4.1.3a,-c,-e). Abb. 4.1.3b,-d,-f stellen die entsprechenden optischen Funktionen $F([[1 \ 0 \ \infty]^{\dagger} [\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2} \ \text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{xO}}^2(\lambda), \tilde{n}_{\text{x}}^2(\lambda), r))^{1/2} \ 300\text{nm}]^{\dagger} [n_{\text{Si[Pa185]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pa185]}(\lambda)} \ \infty]^{\dagger}]^{\dagger}, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^{\circ}, 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$, dar.

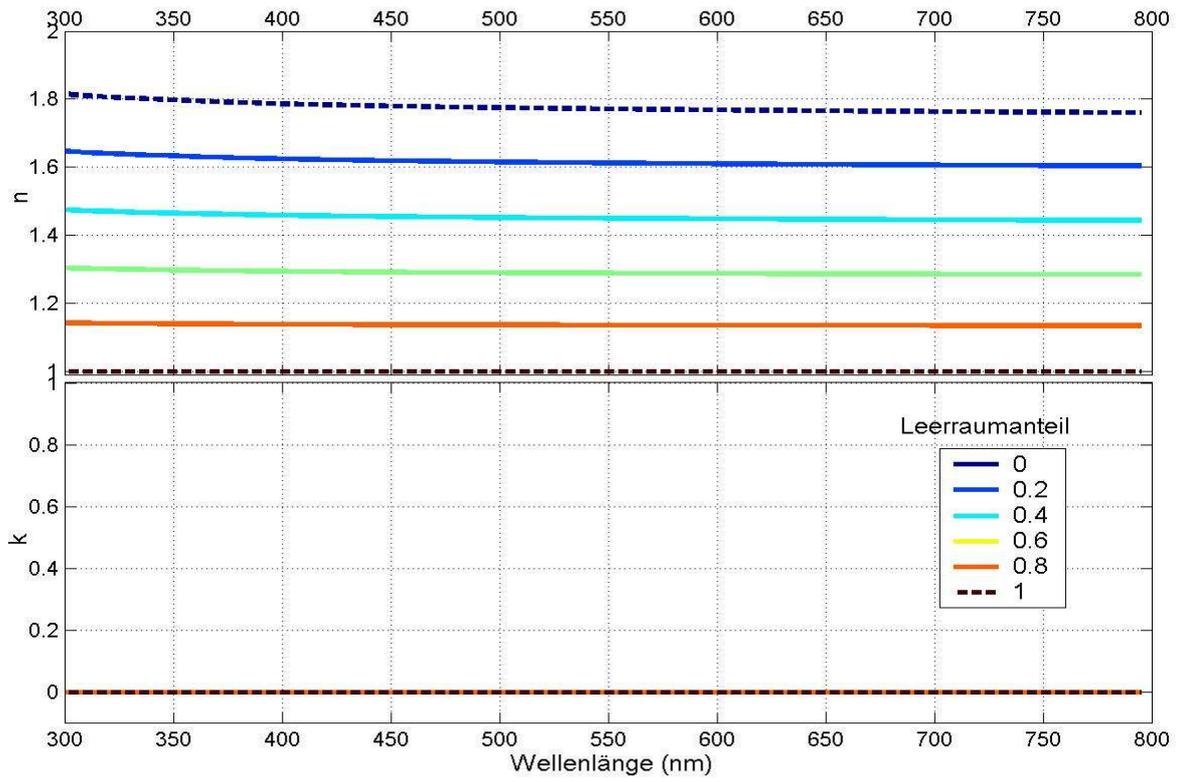
(a)



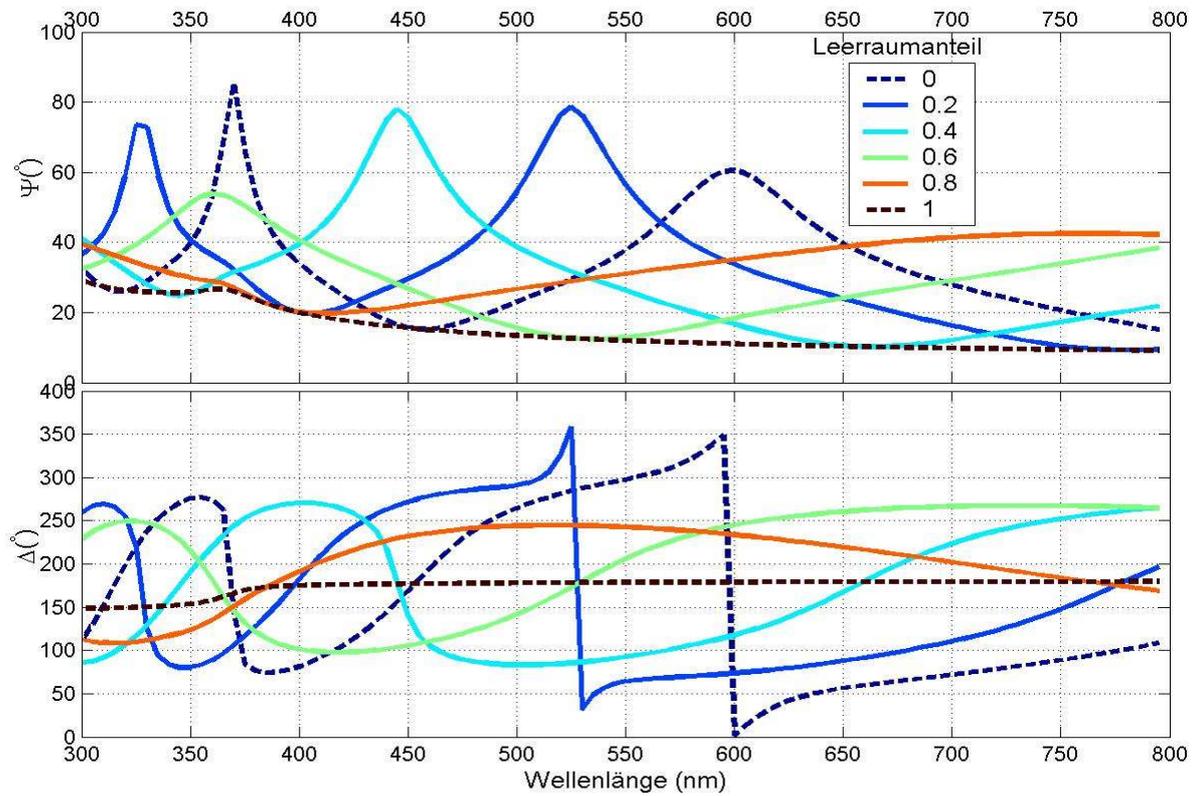
(b)



(c)



(d)



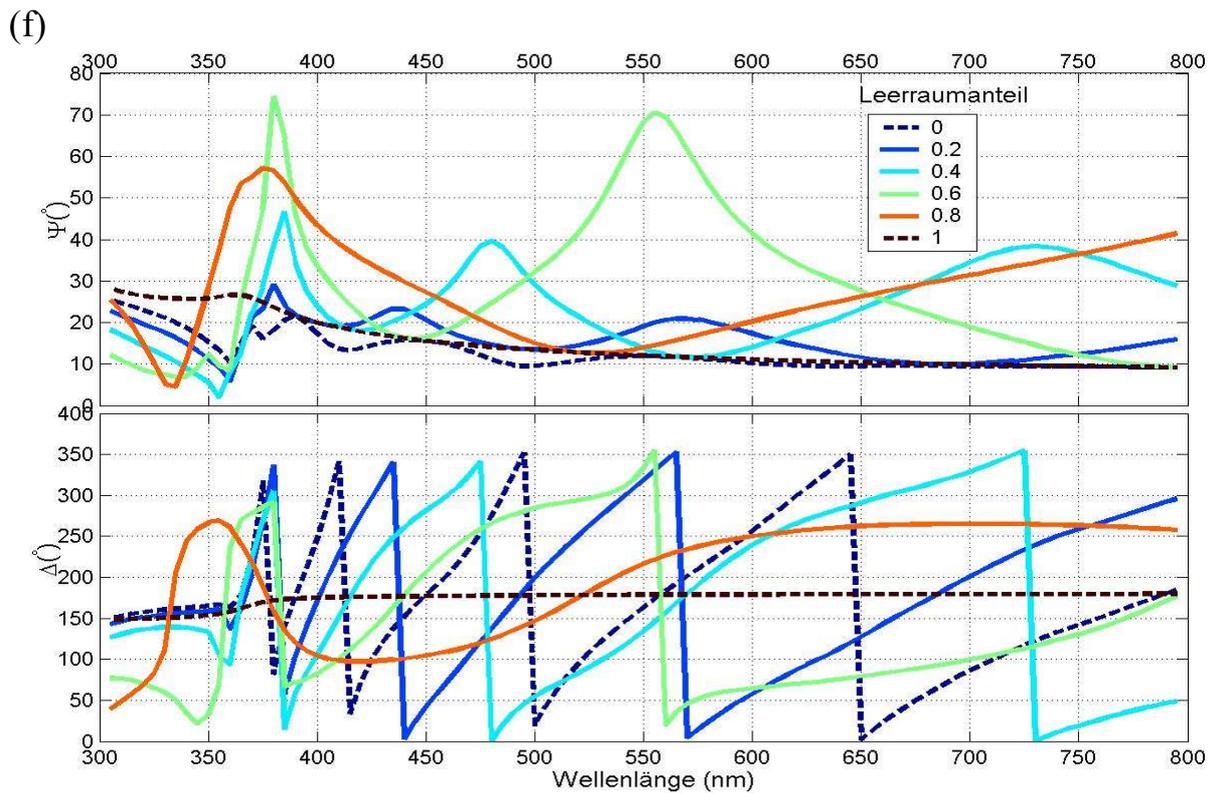
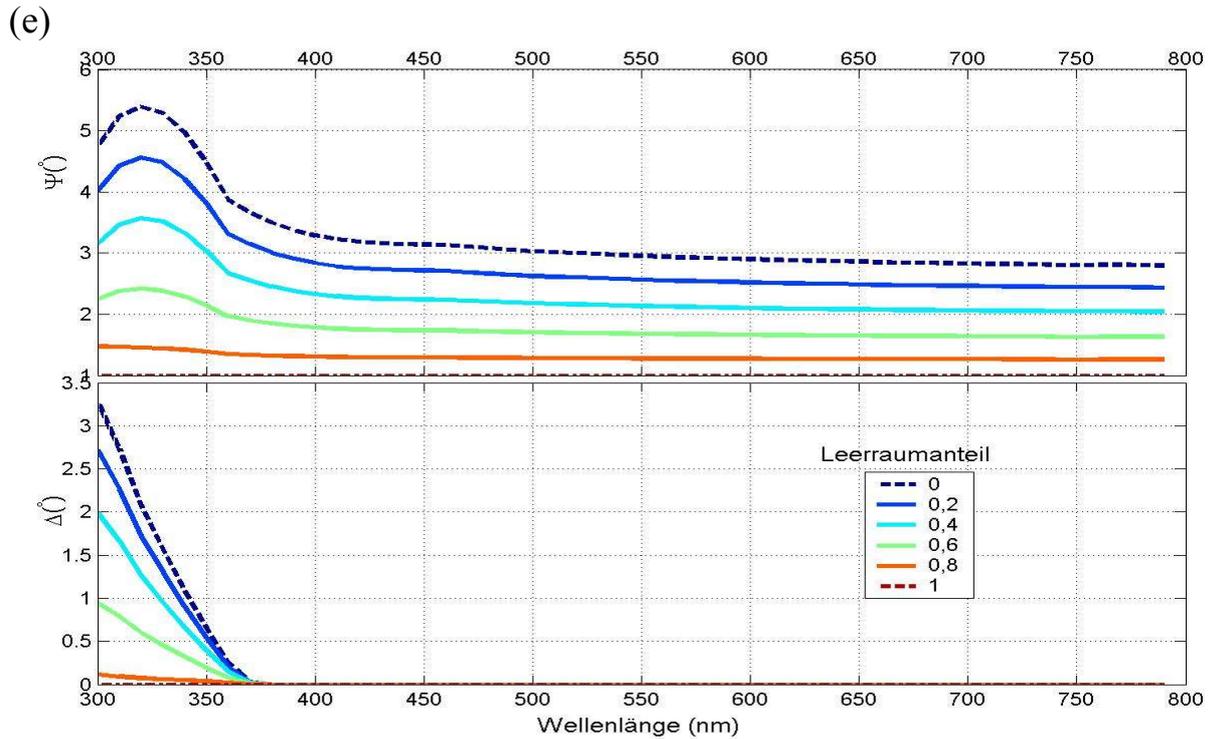
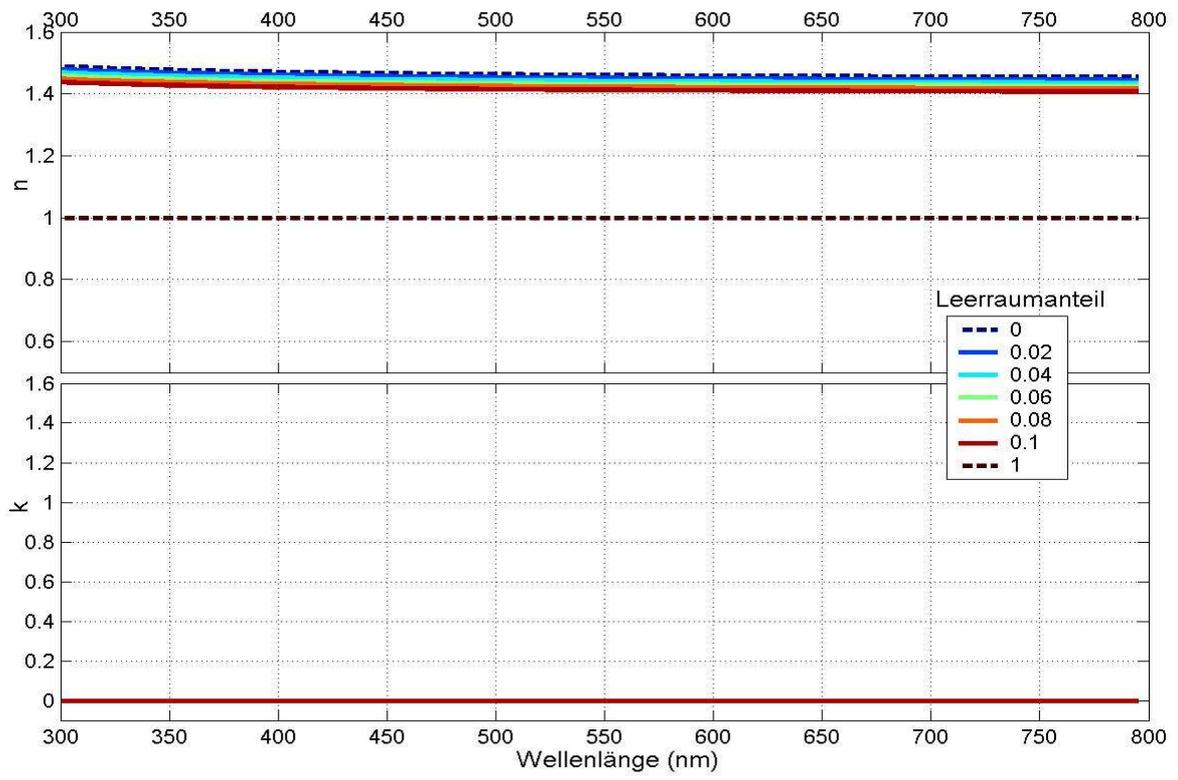
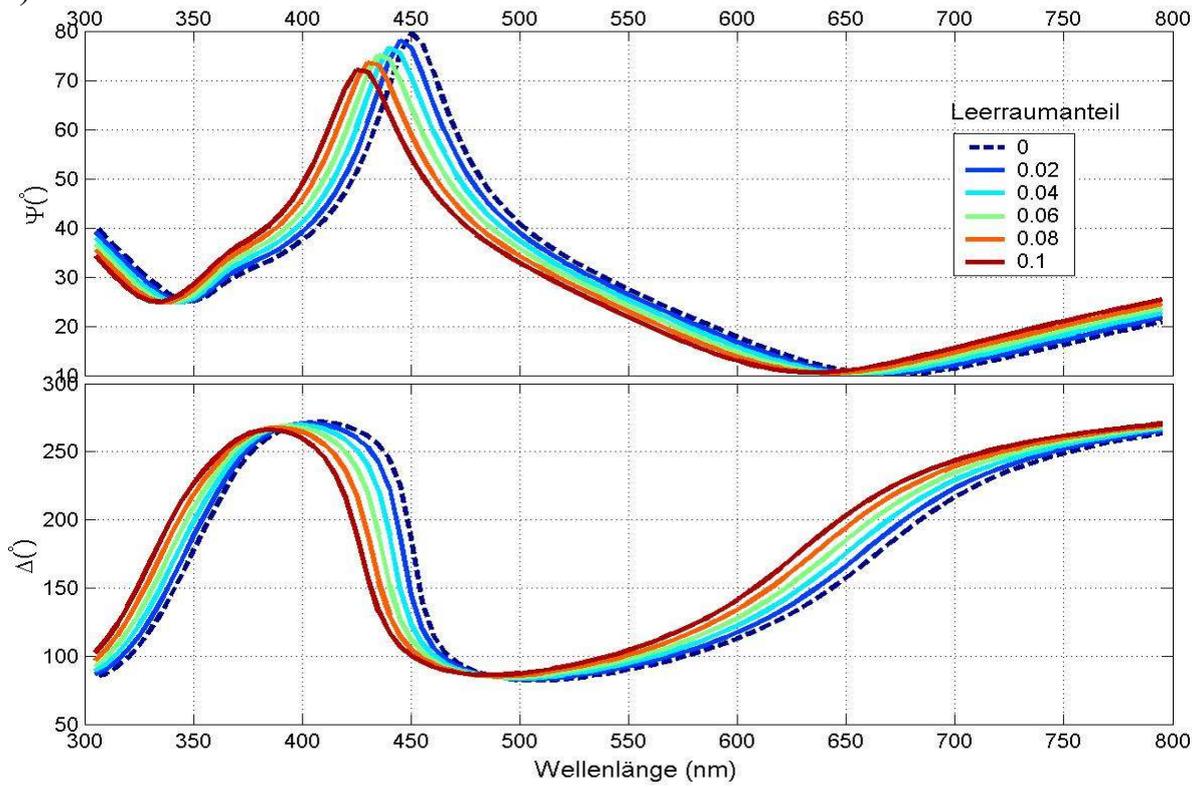


Abb. 4.1.5: Simulierte optische Konstanten $\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2}$ $\text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2}$ von drei Oxidschichten mit Einbettung (Volumenanteile $r=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$) von Leerräumen (Abb. a,c,e). Abb. b,d,f stellen die entsprechenden optischen Funktionen $F([1 \ 0 \ \infty]^{\dagger} [\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \ \text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \ 300\text{nm}]^{\dagger} [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^{\dagger}]^{\dagger}, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta$; $\vartheta=40^{\circ}, 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$, dar.

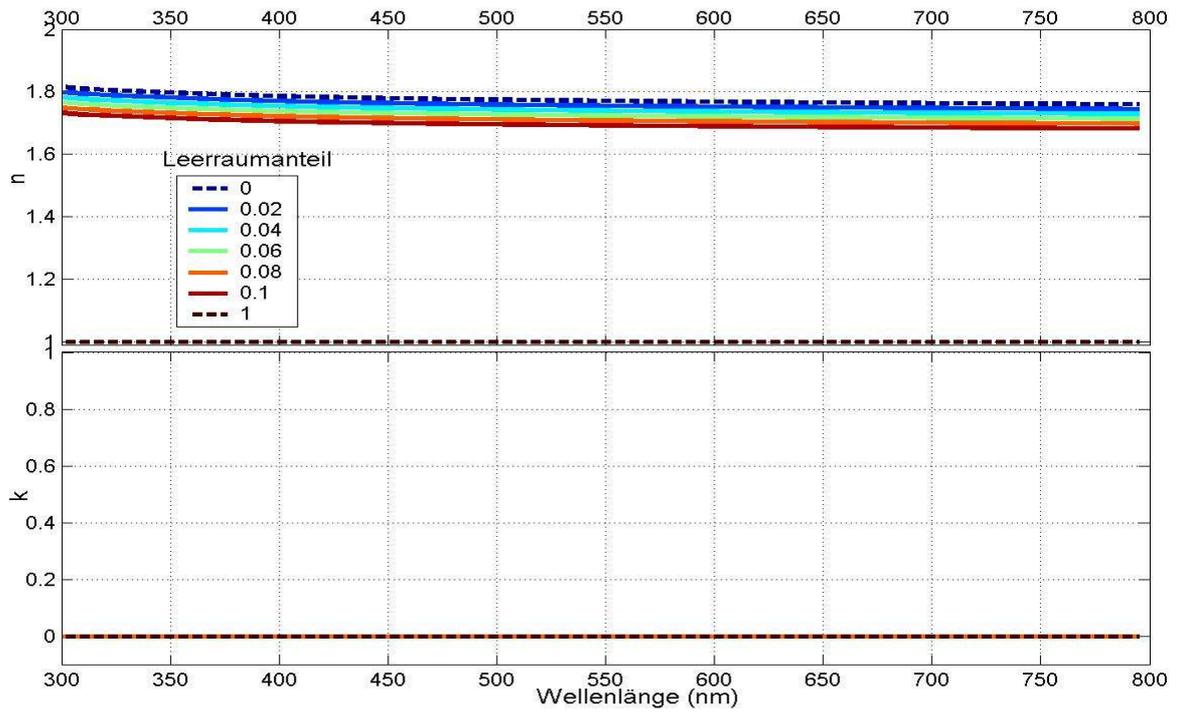
(a)



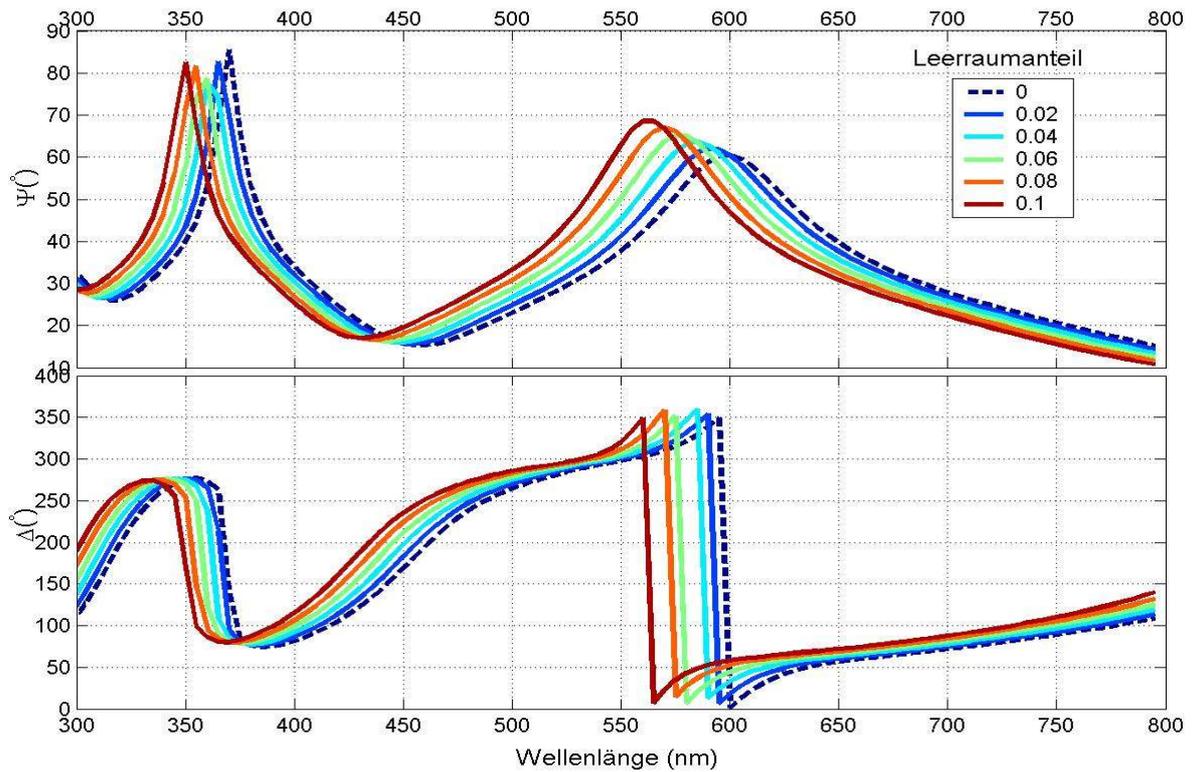
(b)



(c)



(d)



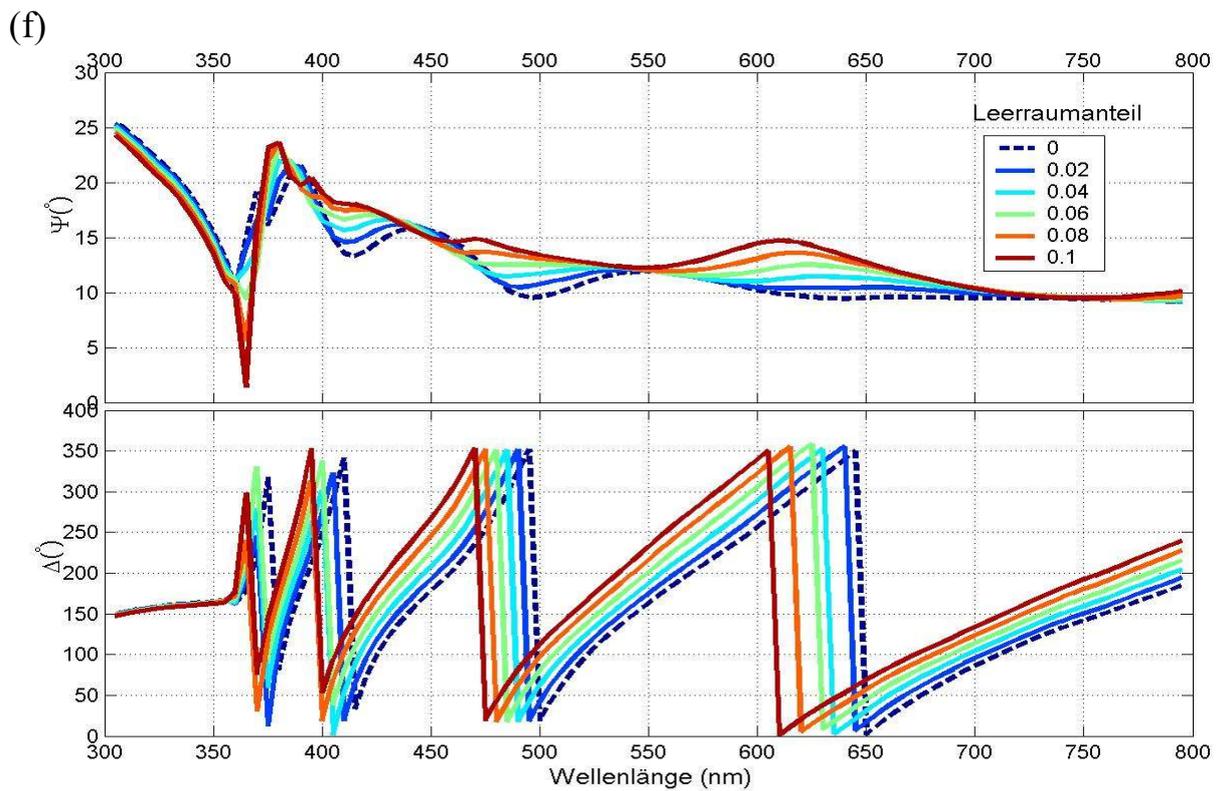
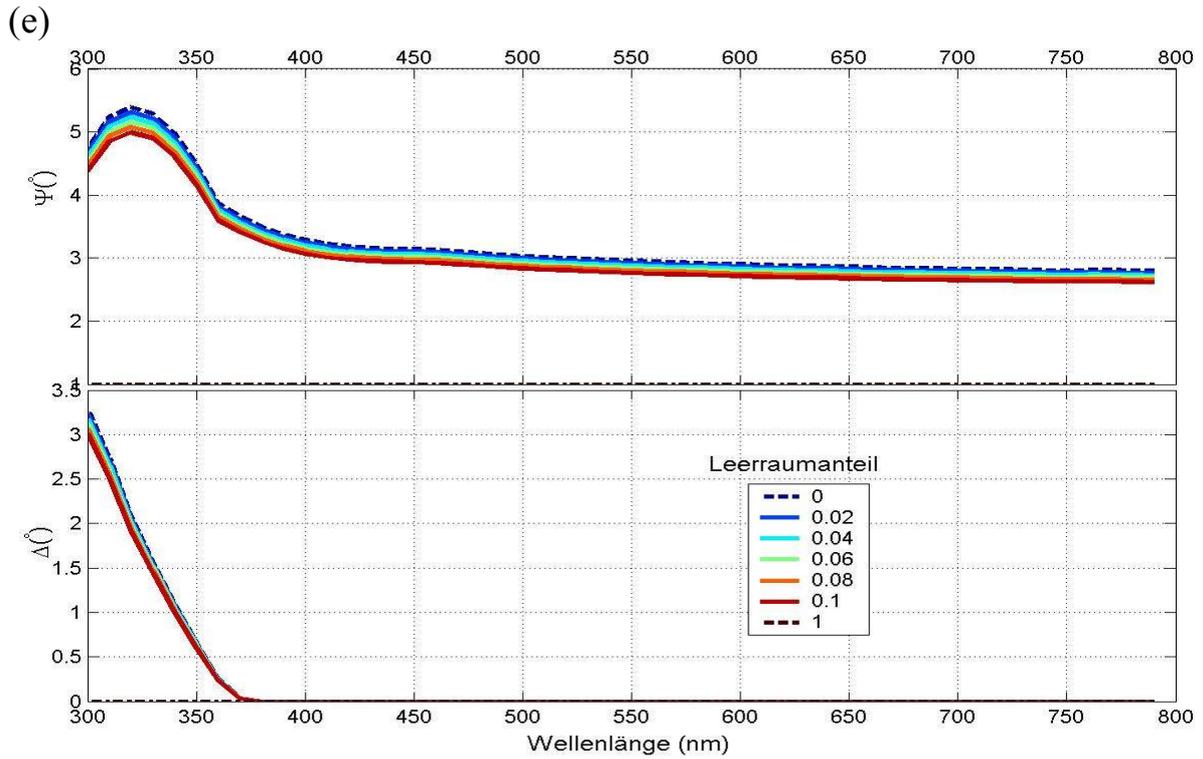


Abb. 4.1.6: Simulierte optische Konstanten $\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^2$ $\text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2}$ von drei Oxidschichten mit Einbettung (Volumenanteile $r=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1$) von Leerräumen (Abb. a,c,e). Abb. b,d,f stellen die entsprechenden optischen Funktionen $F([\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ \dagger & & \end{smallmatrix}] [\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{XO}}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} 300\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, dar.

Die von geringer Einbettung von Leerräumen verursachte Verschiebung der Ψ -Spektren und den Δ -Spektren ist weniger markant als jene von geringer Einbettung von unoxidierten Ausgangsmaterialien. Die geringe Einbettung von Leerräumen verschiebt die Spektren linear in die vertikale Richtung, während die geringe Einbettung von unoxidierten Ausgangsmaterialien die Spektren in die Richtung der kleinen Wellenlängen verschiebt und nicht-lineare Struktur erzeugt.

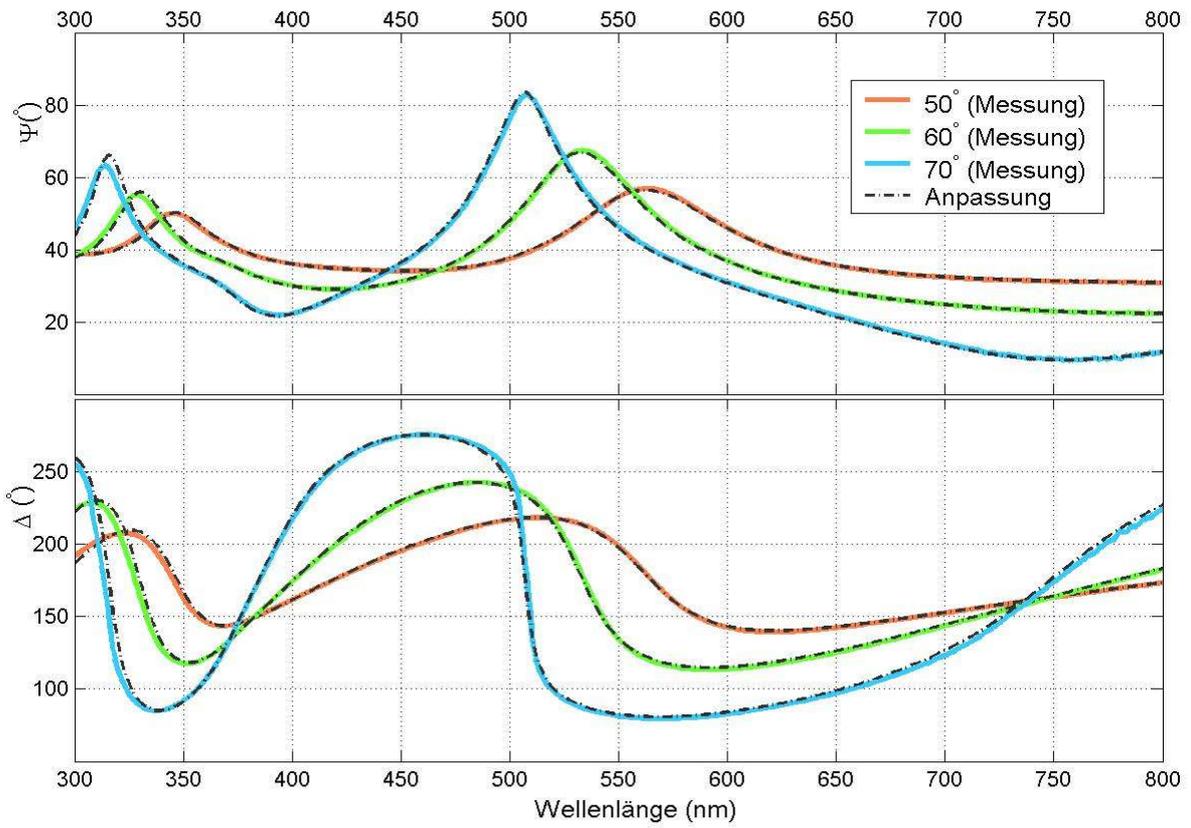
4.2 Siliziumoxid

Siliziumoxid ist eines der am meisten untersuchten und verwendeten Oxide in der Forschung. In der Form des Quarzglas wird es als Linsen, Prismen, usw. verwendet. In der Mikro- oder Nanosystemtechnik wird es häufig auch als Maskenträger, als Gateoxid im MOSFET und als Isolierschicht in integrierten Schaltkreisen. Synthetisches SiO_2 , welches meist amorph vorliegt, wird technisch in unterschiedlichen Prozessen in großen Mengen erzeugt. Um optische und physikalische Beeinträchtigungen zu vermeiden, eignet sich Siliziumoxid wegen seiner niedrigen Brechzahl (1.45) und Absorptionsfreiheit bis weit in den ultravioletten Spektralbereich und hoher chemischer Resistenz als transparente Schutzschicht auf Gegenständen.

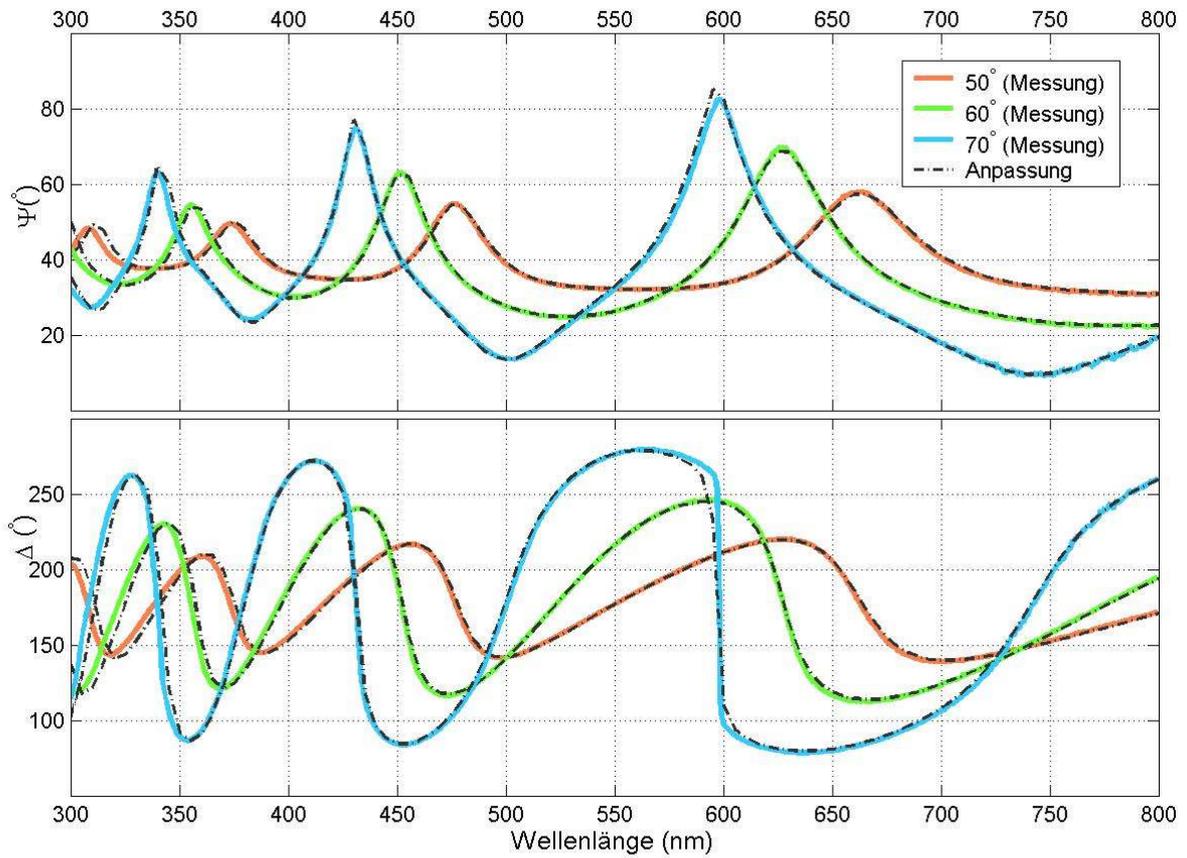
Anpassung anhand von Dispersionsrelation aus der Literatur

Abbildung 4.2.1 zeigt die Ergebnisse des Anpassungsversuchs $F_\theta^{\text{meas}} = F([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{SiO}_2}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \theta)$ für 5 {Luft | Siliziumoxid | Si}-Proben, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\theta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei wird nur die Schichtdicke als einzige unbekannt Variable angepasst. Die Resultate zeigen einstimmig hervorragende Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung. Dies ist nicht ganz überraschend, da SiO_2 ein Material ist, das gut erforscht ist. Seine optischen Eigenschaften sind wohl bekannt und reproduzierbar unter unterschiedlichen Herstellungsbedingungen. Aus den Anpassungsversuchen kann man darauf schliessen, dass das mit Magnetron Sputtering abgeschiedene SiO_2 den Literatur-Standard bezüglich optischer Konstanten erreicht.

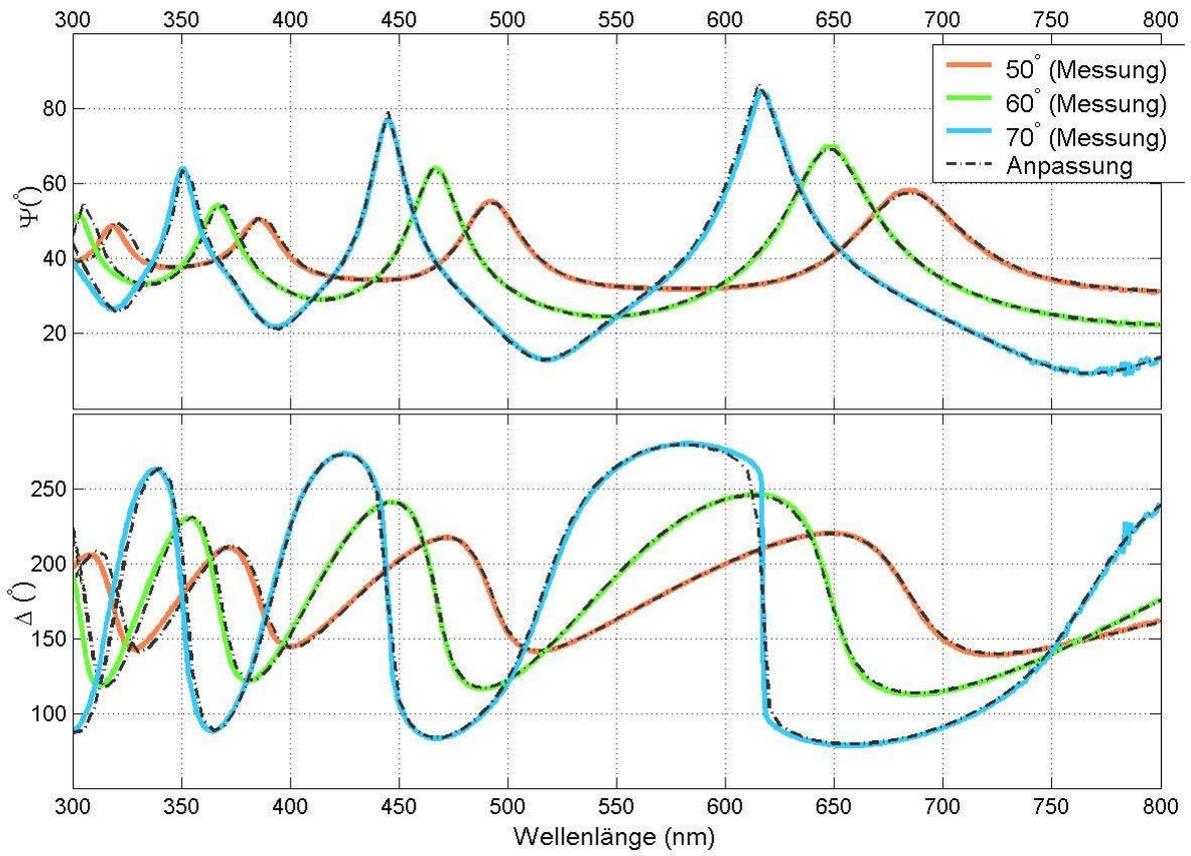
(a)



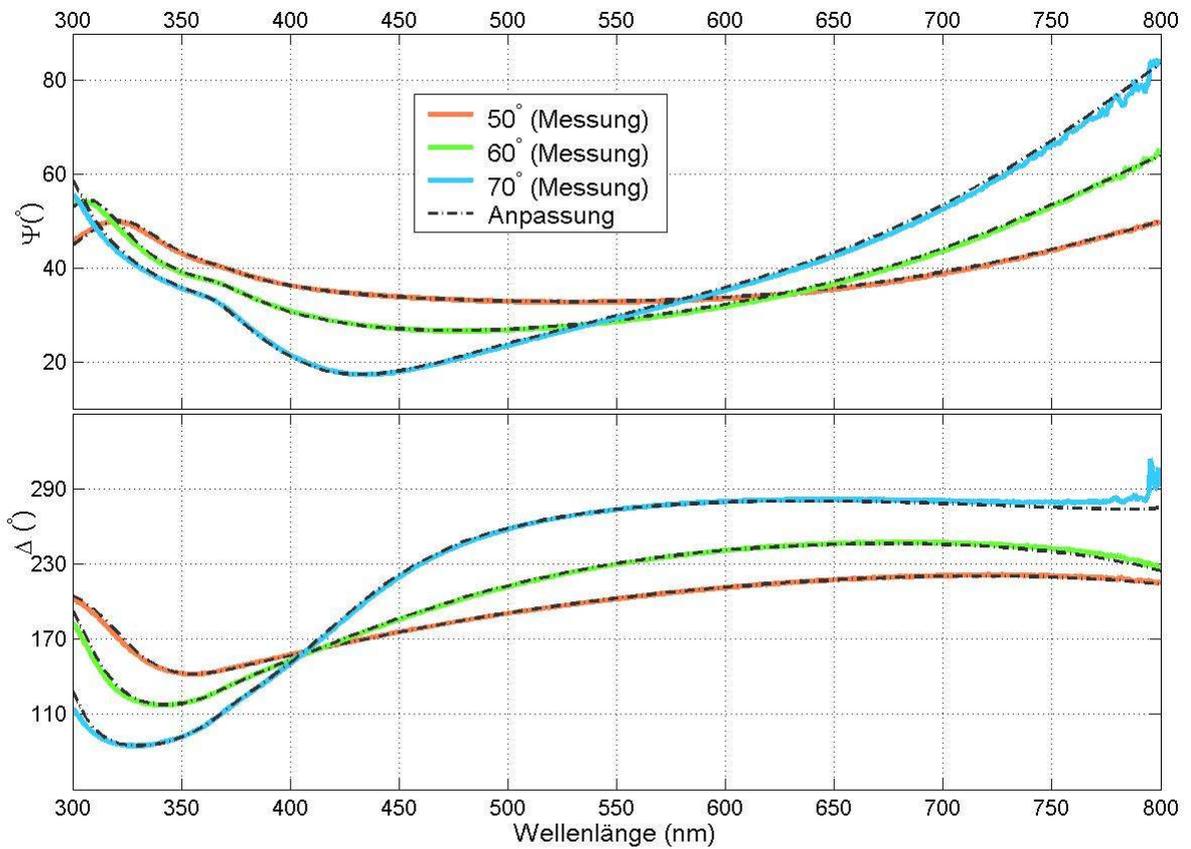
(b)



(c)



(d)



(e)

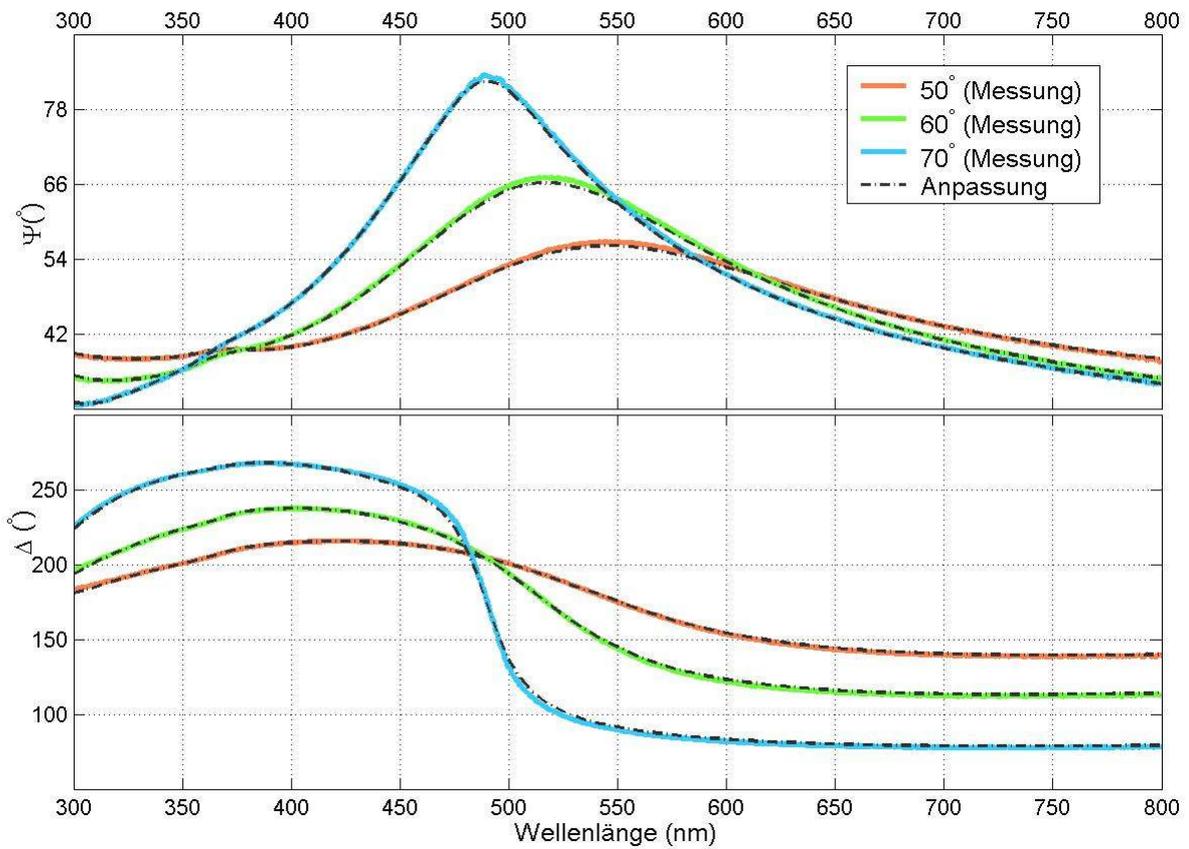


Abb. 4.2.1: Ergebnisse des Anpassungsversuchs $F(\begin{bmatrix} 1 & 0 & \infty \end{bmatrix}^\dagger [n_{\text{SiO}_2|\text{Pal85}}(\lambda) k_{\text{SiO}_2|\text{Pal85}}(\lambda) d]^\dagger [n_{\text{Si}|\text{Pal85}}(\lambda) k_{\text{Si}|\text{Pal85}}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{\text{Luft} | \text{Siliziumoxid} | \text{Si}\}$ für 5 Proben (a) {2826d}, (b) {2820e}, (c) {2821a}, (d) {2827b}, (e) {2912g}, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei wird die Schichtdicke angepasst und auf (a) $d = 338.85 \text{ nm}$, (b) $d = 668.80 \text{ nm}$, (c) $d = 691.05 \text{ nm}$, (d) $d = 184.83 \text{ nm}$, (e) $d = 108.53 \text{ nm}$ (Tabelle 4.5.2) gelangen.

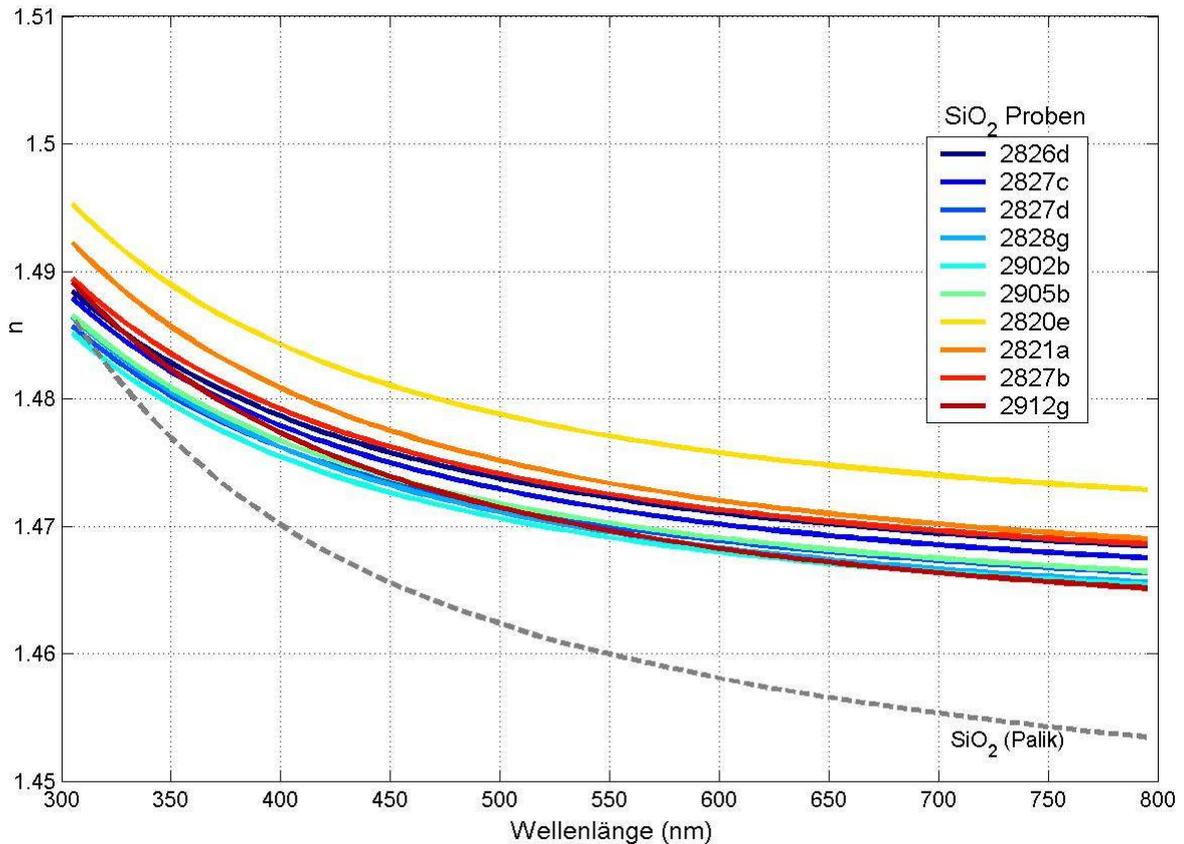


Abb. 4.2.2: Vergleich der $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ mit $n(\lambda)$ = Cauchy-Annäherungen für 10 {Luft | Siliziumoxid | Silizium } SiO_2 -Proben.

Da die Dispersionsrelationen der Siliziumoxidschichten sich ziemlich gut, aber nicht völlig perfekt von $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ beschreiben lassen, ist nur eine leichte Korrektur zu erwarten. Im Vergleich zur Anpassung mit $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ nehmen die Schichtdicken bei der Cauchy-Anpassung ab, und zwar leicht um weniger als 2% (Tabelle 4.5.2), während die entsprechenden n_{SiO_2} um 1 % zunehmen (Abb. 4.2.2). Im Gegensatz zum Aluminiumoxid lässt sich die spektroskopisch ungleichmässige Aufwärtsverlegung gegenüber $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ nicht mit der Anwesenheit von Leerräumen erklären.

4.3 Titanoxid

i. Anpassung anhand von Dispersionsrelationen aus der Literatur

Abbildung 4.3.1 zeigt ein typisches Anpassungsergebnis für die Probe $\{2123c\}=\{\text{Luft} \mid \text{Titanoxid} \mid \text{Si}\}$. Bei allen Versuchen ist der Ansatz mit Literaturwert der Dispersionsrelationen schlechthin ungeeignet. Wie man im Beispiel ersieht, verschlechtert sich die Übereinstimmung zwischen Messung und Theorie mit steigendem Winkel. Die Unstimmigkeit nimmt selbst bei dem am wenigsten empfindlichen Winkel $\vartheta=40^\circ$ mit steigender Wellenlänge zu, bei $\lambda < 400\text{nm}$ kommt sogar eine grobe Anpassung nicht in Frage. Beim nächsten Versuch wird die Dispersionsrelation des amorphen Titanoxids $\tilde{n}_{a\text{-TiO}_2}$ [Sop01] angenommen. Im Vergleich zur $\tilde{n}_{\text{a-TiO}_2}$ [Pal85], deren scharfe Resonanz um $\lambda=300\text{-}350\text{nm}$ liegt, hat $n_{\text{a-TiO}_2}$ ein breiteres und niedrigeres Maximum, das auf eine höhere Wellenlänge (etwa $\lambda=400\text{nm}$) verschoben ist (Abb. 4.3.2). Die Dämpfung spiegelt sich als Abschwächung der Wellenstruktur in den theoretischen Ψ - und Δ -Spektren wider (Abb. 4.3.3). Im Vergleich zu den Messspektren sind die theoretischen Spektren zu flach, vor allem im Wellenlängenbereich $\lambda=300\text{-}500\text{nm}$.

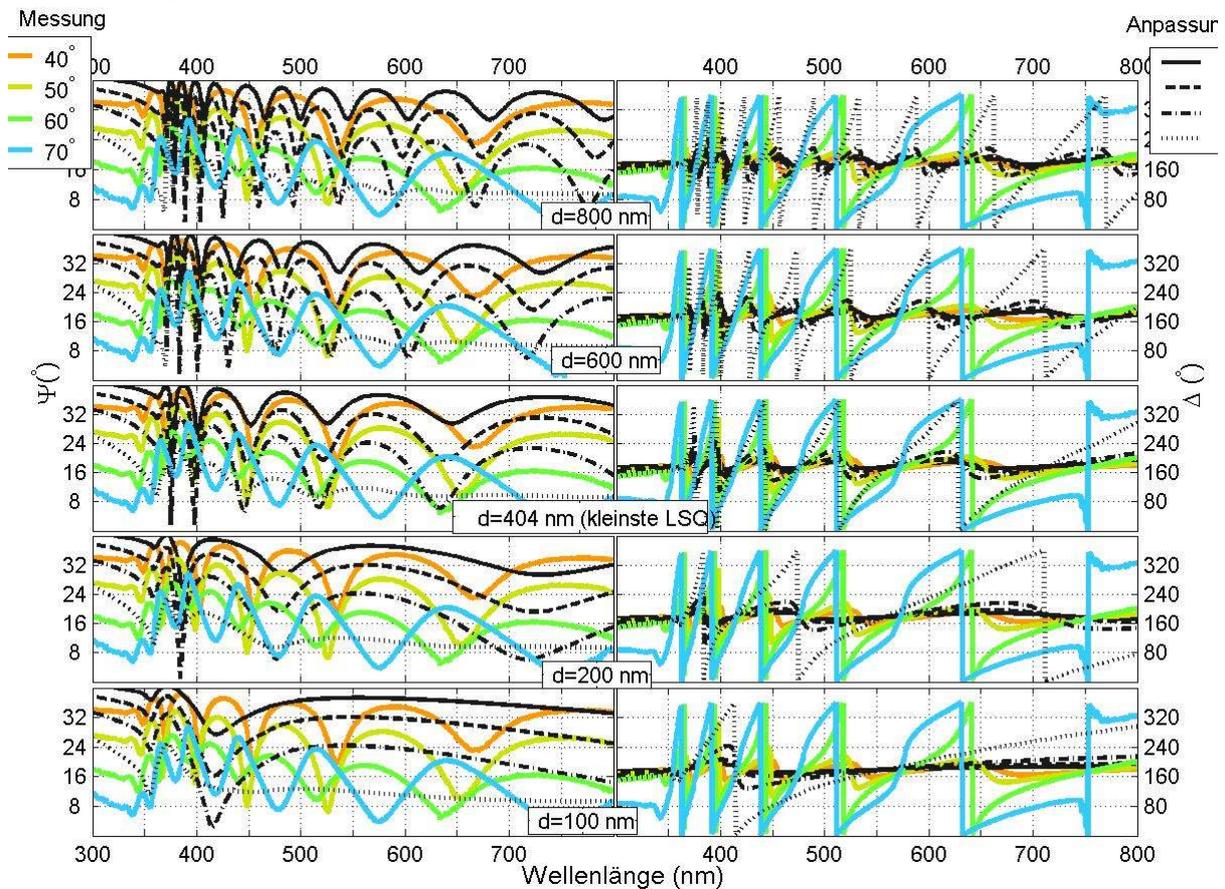


Abb. 4.3.1: Ergebnis des Anpassungsversuchs $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2123c\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei wird nur die Schichtdicke als die einzige unbekannte Variable angepasst und auf $d=404\text{nm}$ gelangen.

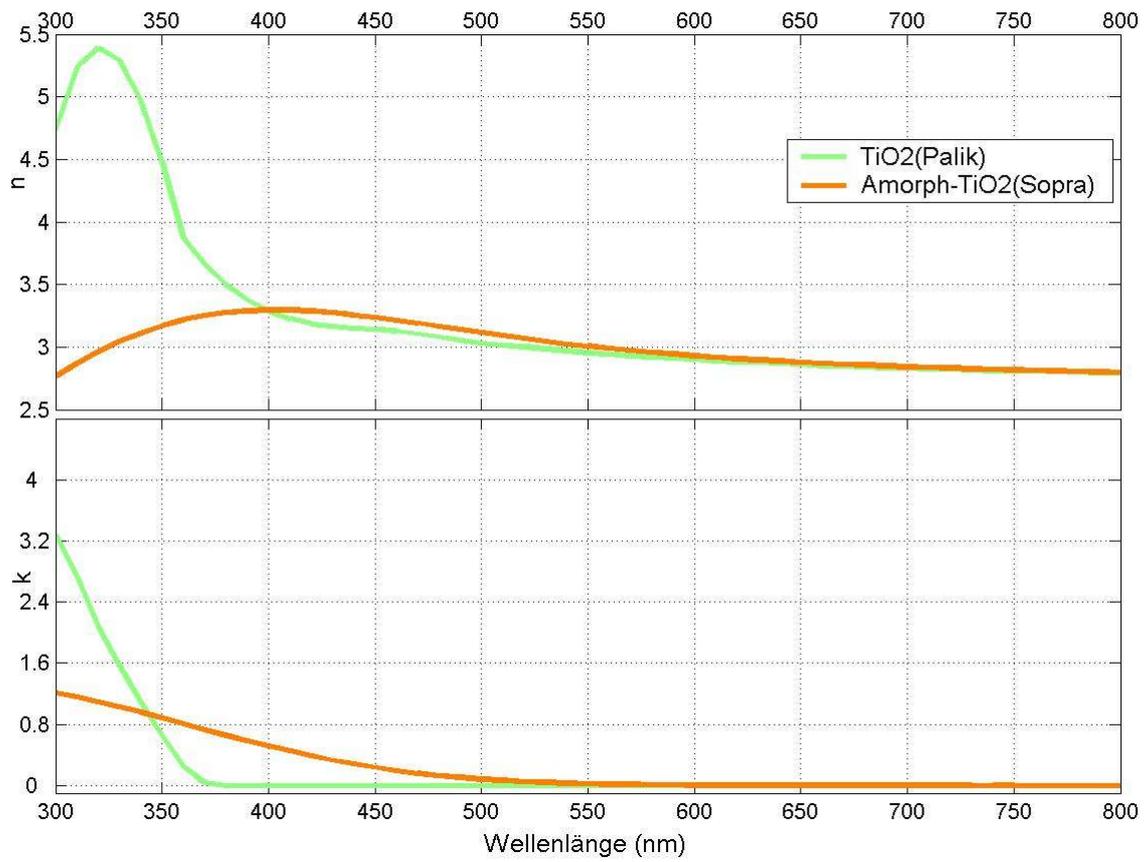


Abb. 4.3.2: Vergleich der Dispersionsrelation vom Titanoxid [Pal85] \tilde{n}_{TiO_2} und der Dispersionsrelation vom amorphen Titanoxid $\tilde{n}_{\text{a-TiO[Sop01]}}$.

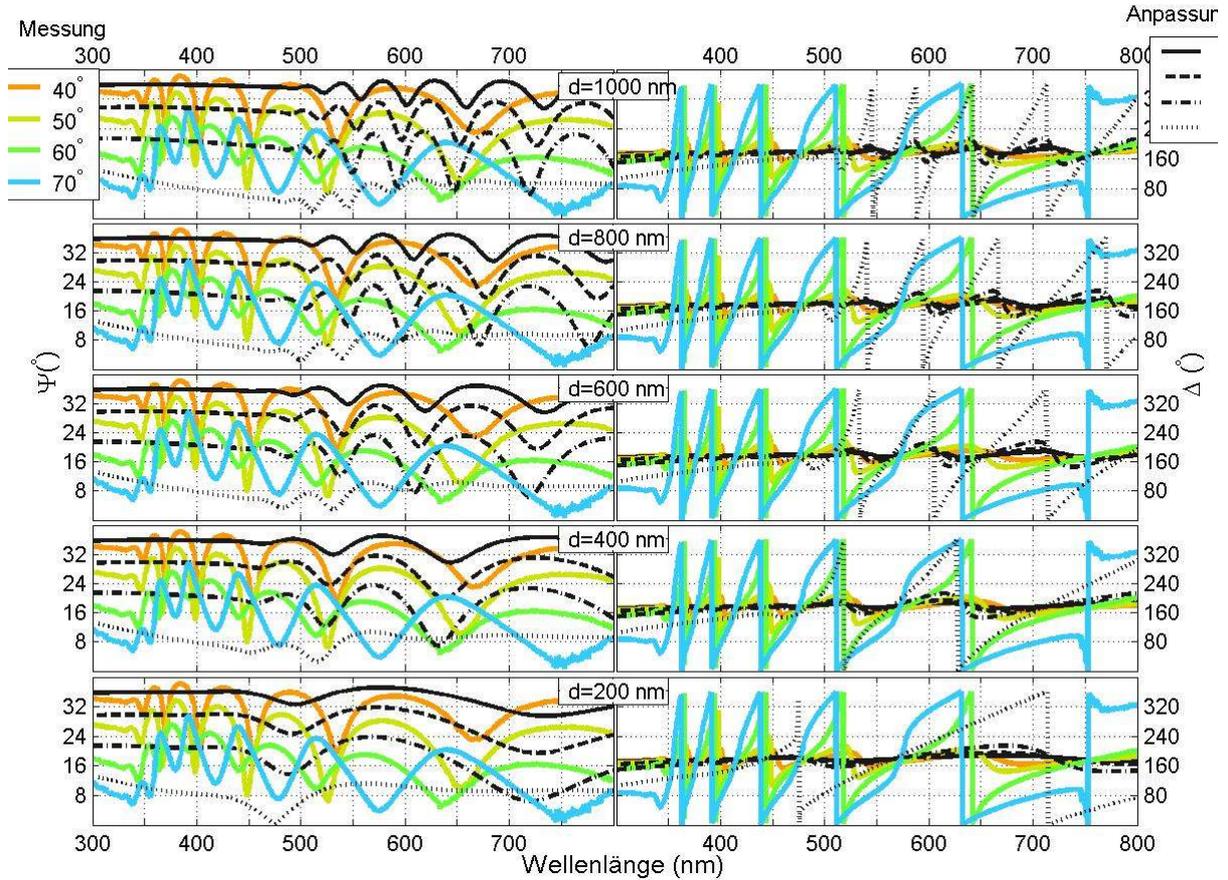


Abb. 4.3.3: Anpassungsversuch $F([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{a-TiO}_2}(\lambda) \ k_{\text{a-TiO}_2}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger}]^\dagger, 70^\circ)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2123\text{c}\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei wird die Schichtdicke angepasst und sie liegt um $d=400\text{nm}$.

ii. Anpassung anhand effektiver Medien ($\text{TiO}_2/\text{Leerraum}$)

In den folgenden Anpassungen $F_\vartheta^{\text{meas}} = F([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger}]^\dagger, \vartheta)$, mit $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, wird der im obenstehenden Abschnitt verwendete Ansatz für die Charakterisierung der Einschichtsysteme mit Berücksichtigung der einbezogenen Leerräume anhand der Mischfunktion $\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{\epsilon}_{\text{TiO}_2}, \tilde{\epsilon}_{\text{air}}, r)$ aus (2.8.1) modifiziert. Dabei wird der Mischanteil r zusätzlich neben der Schichtdicke d angepasst. Nach wie vor ist die Fehlerfunktion stark konvergent und der Anfangsdickenbereich lässt sich nach schnellem Ausprobieren finden. Die beste Anpassung befindet sich bei $d=479\text{nm}$ und $r=0.207$ (Abb. 4.3.5). Obwohl die Anpassung sich generell deutlich verbessert hat (Abb. 4.3.4), ist sie immer noch bei $\lambda < 400\text{nm}$ und $\vartheta = 70^\circ$ problematisch.

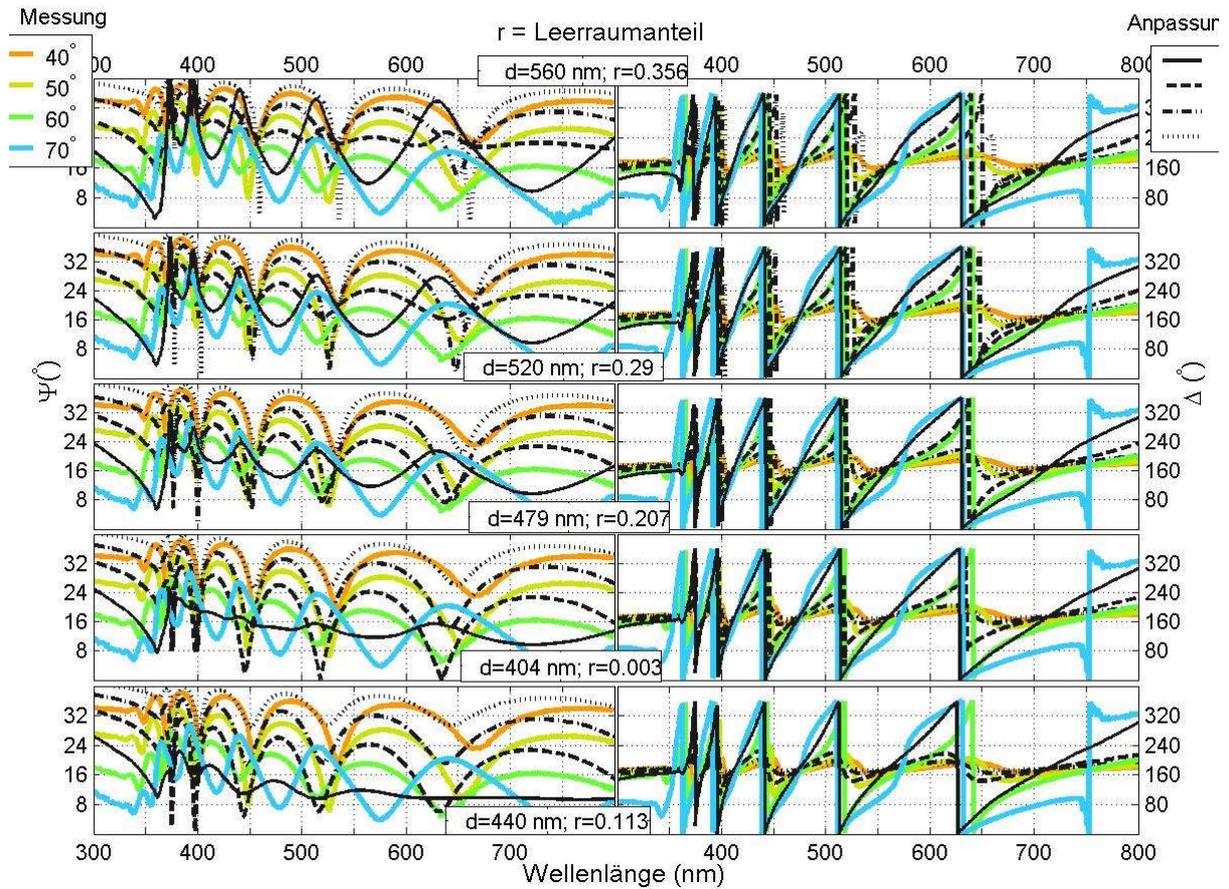


Abb. 4.3.4: Ergebnis des Anpassungsversuchs $F_{\theta}^{\text{meas}} = F([\![1 \ 0 \ \infty]^{\dagger} [\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{TiO}_2}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} [\text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{TiO}_2}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} d]^{\dagger} [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ \infty]^{\dagger}]^{\dagger}, \vartheta)$ für die Probe {2123c}, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei werden die Schichtdicke und der Leerraumanteil angepasst und auf $d=479 \text{ nm}$ bzw. $r=0.207$ gelangen.

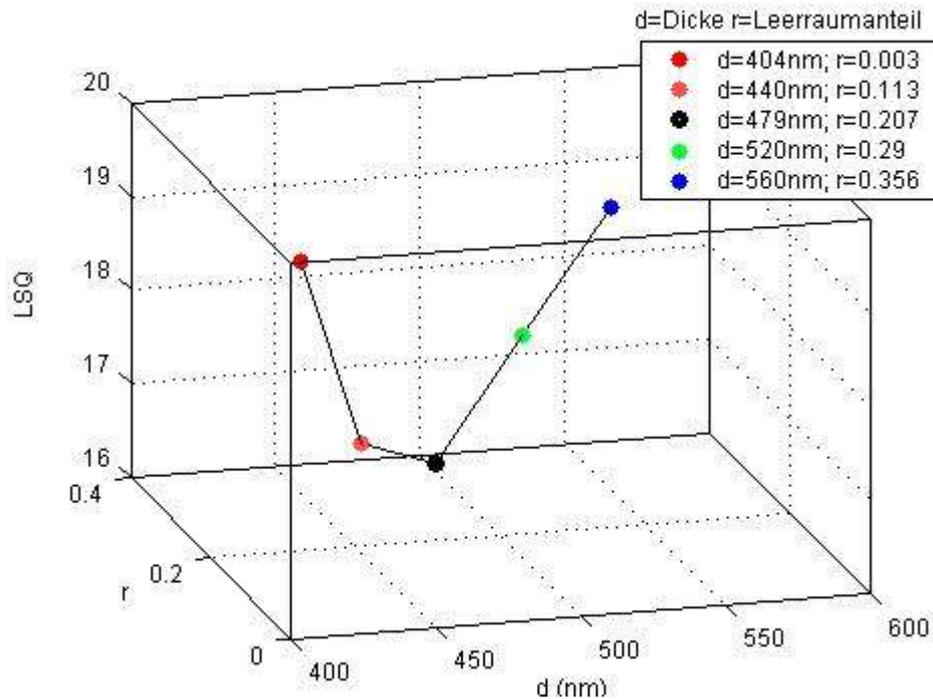


Abb. 4.3.5 Vergleich der LSQ für die verschiedene Werte der Dicke und des Leerraumanteils.

iii. Anpassung anhand effektiver Medien ($TiO_2/Leerraum$)

Die vorhergehenden Anpassungsversuche für Titanoxid weisen darauf hin, dass die Resonanz des hergestellten Titanoxids weniger markant ist als die Resonanz der kristallinen Form aus der Literatur, aber bedeutender als diejenige der amorphen Form. Hinsichtlich der stark schwankenden Interferenzstruktur der Messung (Ψ - und Δ -Kurven) sollte die Titanoxidschicht wesentlich nicht-absorbierend und relativ gleichförmig sein bei $\lambda > 400\text{nm}$. Für nicht absorbierende Materialien existieren in der Literatur mehrere Beziehungen, um die Dispersionsrelation mit wenigen Parametern zu beschreiben. Für Titanoxidschichten wurde die Parametrisierung beispielsweise nach Sellmeier angewendet [Jel03]. Der Geltungsbereich, zwischen 1.48eV (838nm) und 3.1eV (400.0nm), und die Annahme, $k=0$, entspricht gerade den vorigen Beobachtungen. Daher eignet sich der Sellmeier-Ansatz nur zur Abschätzung der Höhe der n -Kurve für den entsprechenden Wellenlängenbereich, in dem die Dispersionsrelation relativ flach ist.

Diesen Zweck erfüllt die rein empirisch aufgefundene Cauchy-Beziehung genau so gut. Zum Vergleich betrachten wir die Annäherung der Literaturwerte der Dispersionsrelation $n_{TiO_2[Pal85]}(\lambda)$ (Abb. 4.1.1c) mit der Cauchy-Dispersionsrelation. $n_{TiO_2[Pal85]}(\lambda)$ steigt von 800nm aus mit abnehmender Wellenlänge allmählich an. Ausserhalb des Bereiches $\lambda=300-400\text{nm}$ ist TiO_2 nicht absorbierend und $k_{TiO_2[Pal85]}(\lambda)$ ist gleich null. Innerhalb $\lambda=300-400\text{nm}$ steigt $n_{TiO_2[Pal85]}(\lambda)$ so rasch an, dass es sich nicht mit der Cauchy-Formel annähern lässt. Abbildung 4.3.6 zeigt

eine Sammlung von n -Kurven, die mit Cauchy-Parameter $N_0=2.8$ und verschiedenen N_1 erzeugt wurden. Die Anpassung ist nur bei höheren Wellenlängen, d.h. von 800nm herab bis etwa 400nm, zulässig. Bei folgenden Anpassungsversuchen $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pa185]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pa185]}(\lambda)} \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$, für $F_\vartheta^{\text{meas}}$ an {Luft | Titaniumoxid | Si Substrat}-Proben, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, wird der Wellenlängenbereich auf $\lambda=400\text{-}800\text{nm}$ beschränkt. Um den Vergleich zu ermöglichen, wird die Darstellung der Ergebnisse auf $\lambda=300\text{-}400\text{nm}$ extrapoliert (Abb. 4.3.7-9).

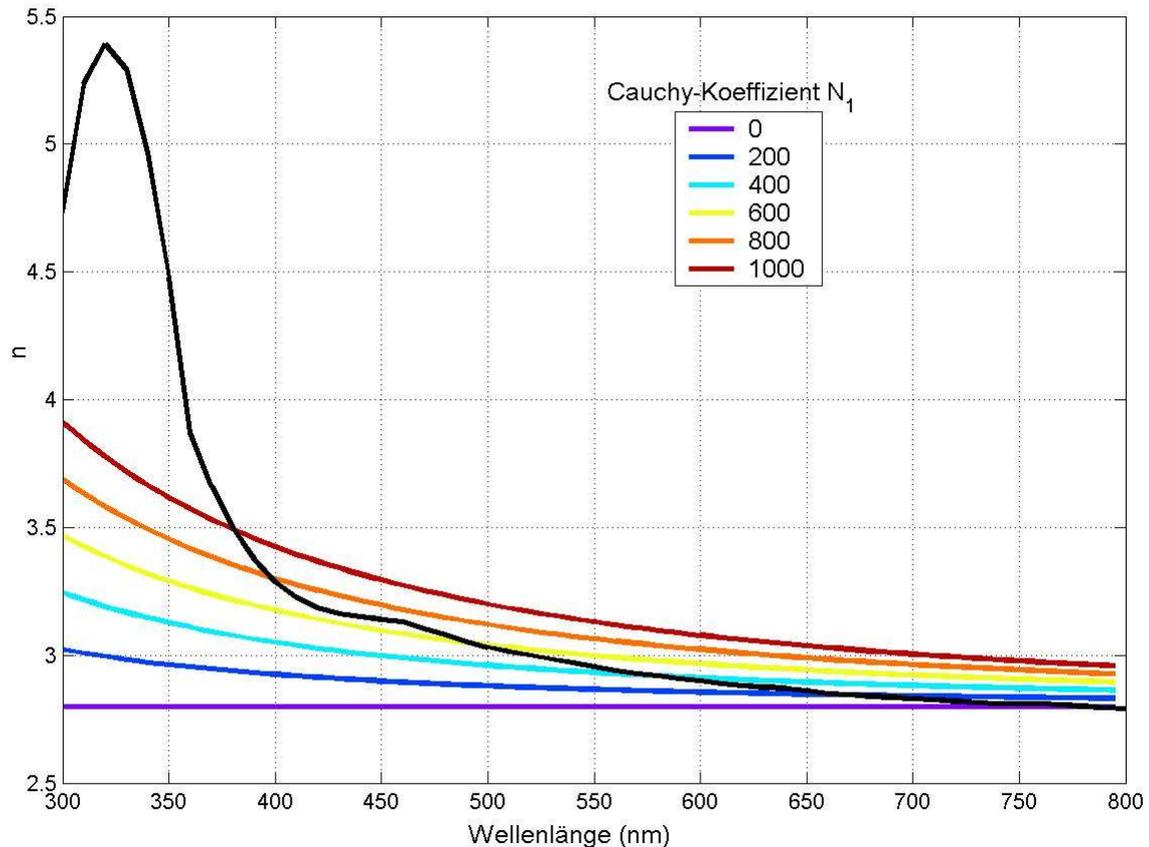


Abb. 4.3.6: Vergleich der $n_{\text{TiO}_2[\text{Pa185}]}(\lambda)$ mit zahlreichen n -Kurven, die mit Cauchy-Parameter $N_0=2.8$ und verschiedenen N_1 erzeugt wurden. $n_{\text{TiO}_2[\text{Pa185}]}(\lambda)$ lässt sich von der Cauchy-Formel nur bei höheren Wellenlängen, d.h. von 800nm herab bis etwa 400nm, annähern.

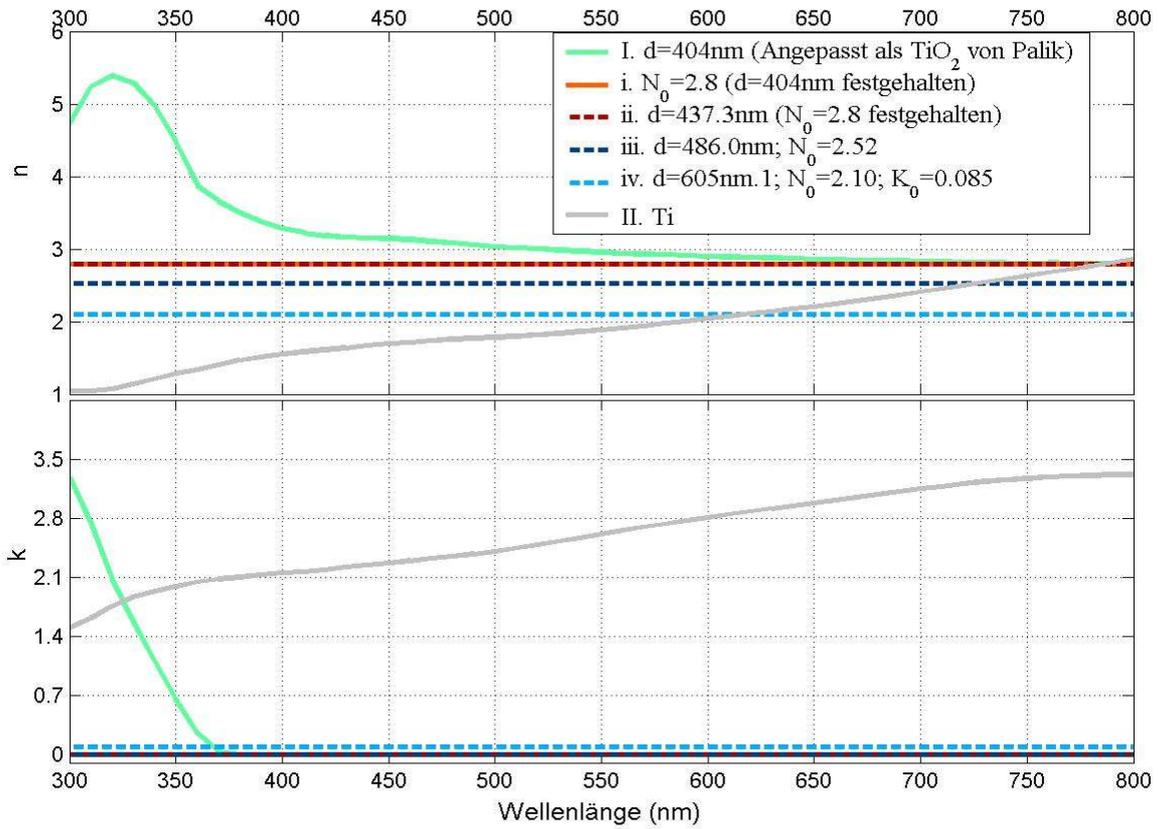


Abb. 4.3.7: Vergleich der $n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ (Kurve I) und $n_{\text{Ti}[\text{Pal85}]}(\lambda)$ (Kurve II) mit verschiedenen Cauchy-Annäherungen (Kurve i, ii, iii, iv).

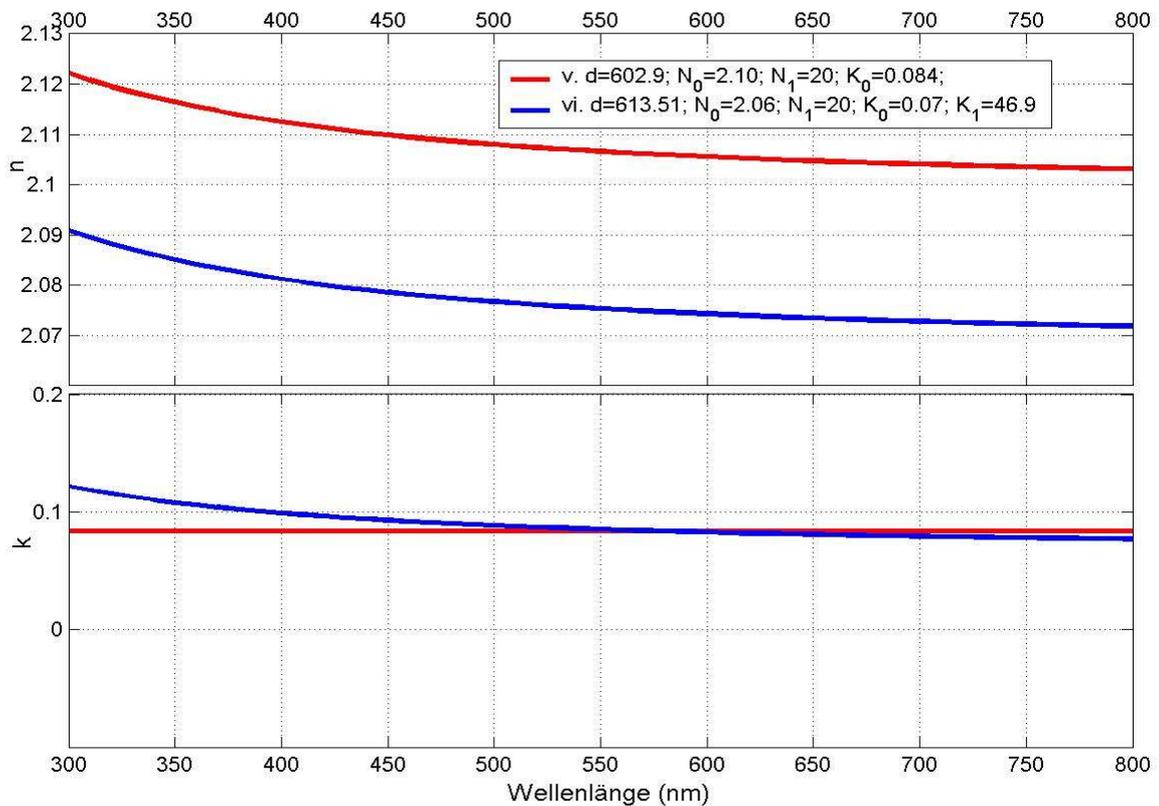


Abb. 4.3.8: Zwei Cauchy-Annäherungen (Kurve v und vi) der $n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$.

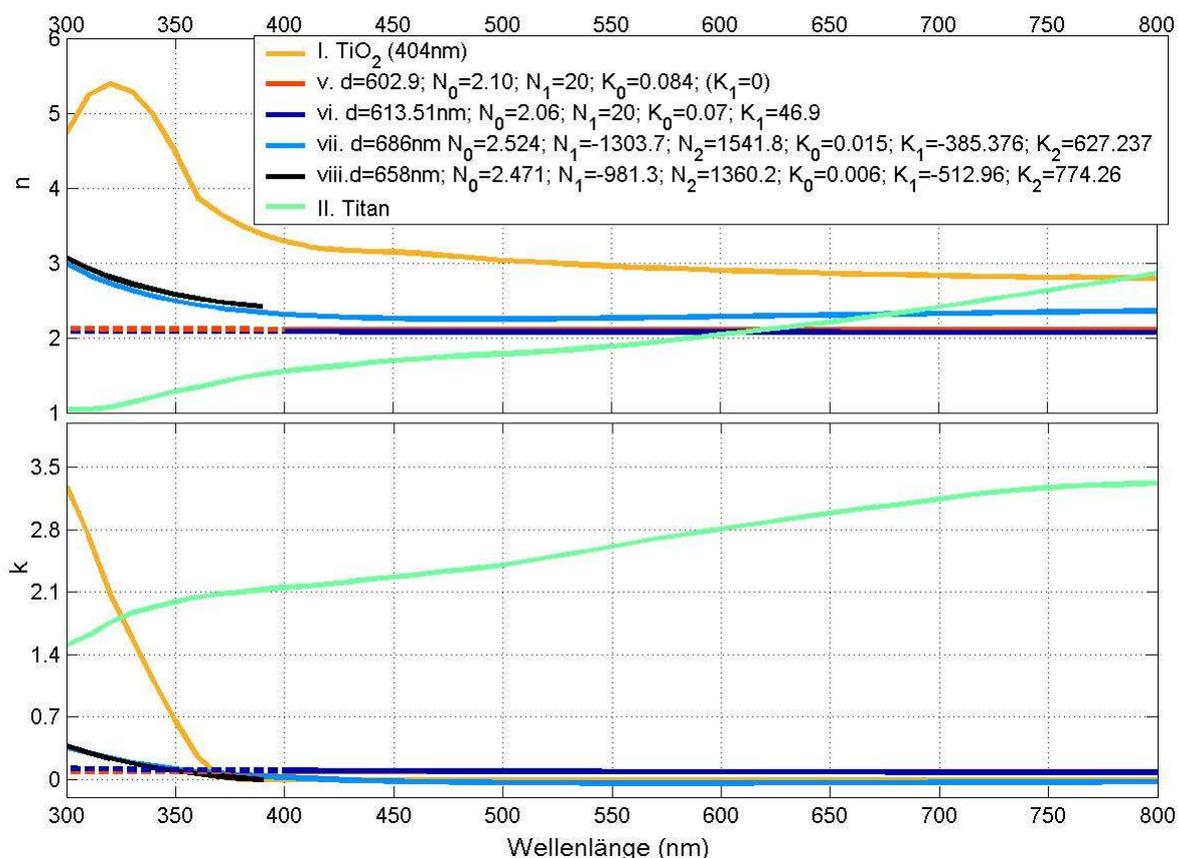


Abb. 4.3.9: Vergleich der $n_{\text{TiO}_2[\text{Pa}185]}(\lambda)$ (Kurve I) und $n_{\text{Ti}[\text{Pa}185]}(\lambda)$ (Kurve II) mit verschiedenen Cauchy-Annäherungen (Kurve v, vi, vii, viii).

Man fängt mit dem Anpassungsergebnis aus der ersten groben Annahme [$n_{\text{TiO}_2[\text{Pa}185]}(\lambda)$ $k_{\text{TiO}_2[\text{Pa}185]}(\lambda)$ 404nm] (Kurve I in Abb. 4.3.7 und 4.3.8) an. Unter Annahme dieser Dicke wird der Cauchy-Parameter N_0 angepasst für $\lambda=400-800\text{nm}$. Es ergibt sich eine konstante Dispersionsrelation bei $n=2.8$ (Abb. 4.3.7, Kurve i). Anpassung unter Annahme dieser konstanten Dispersionsrelation ergibt $d=437\text{nm}$ (Abb. 4.3.7, Kurve ii). Wenn beide Parameter gleichzeitig angepasst werden, erhöht sich die Dicke auf $d=486\text{nm}$ während die Dispersionsrelation auf $n=2.52$ (Abb. 4.3.7, Kurve iii) sinkt. Rechnet man die Absorption durch Berücksichtigung des Parameters K_0 ein, verbessert sich die Anpassung erheblich (Abb. 4.3.10), obwohl K_0 nur 0.085 (Abb. 4.3.7, Kurve iv) beträgt. Abgesehen von den Beträgen ist die Stelle des Maximums bzw. Minimums angebracht. Die Dicke nimmt wesentlich auf $d=605\text{nm}$ zu, während n weiter auf $n=2.1$ fällt, sogar tiefer als $n_{\text{Ti}[\text{Pa}185]}$ (Abb. 4.3.7 Kurve II) bei $\lambda < 600\text{nm}$. Wenn N_1 in der Anpassung eingerechnet wird, fängt n an, sich mit abnehmender Wellenlänge aufwärts zu biegen. (Abb. 4.3.8, Kurve v).

Mit Berücksichtigung von K_1 verschiebt sich die n -Kurve leicht aufwärts, ohne dass sich die Grundform der Krümmung ändert (Abb. 4.3.8, Kurve vi). Jedoch ist die Krümmung zu flach, um eine signifikante Verbesserung der Anpassung zu erreichen (Abb. 4.3.10, vi.). Kurve vii (Abb. 4.3.9) entspricht der Anpassung mit allen Cauchy-Parametern: N_0 , N_1 , N_2 , K_1 , K_2 und K_2 für den ganzen Wellenlängenbereich. Die optimale Dicke nimmt auf $d=686\text{nm}$ zu (Abb. 4.3.11). Die Aufwärtsverbiegung von n und k geht weiter und sie ist viel stärker als die Krümmung von Kurve v und vi. Aber wie in Abb. 4.3.10 bleibt die Unstimmigkeit bei $\lambda < 380\text{nm}$ und besonders bei $\vartheta = 70^\circ$ (Abb. 4.3.11) problematisch trotz der Verbesserung bei höheren Wellenlängen. Es muss darauf aufmerksam gemacht werden, dass k für $\lambda < 400\text{nm}$ tiefer als Null sinkt. Unsere kommerzielle Software verbietet diese unphysikalische Annahme nicht. Kurve viii (Abb. 4.3.9) entspricht der gleichen Anpassungsbedingung bis auf den Wellenlängenbereich, der nur auf $\lambda = 300\text{-}400\text{nm}$ beschränkt ist. Die Parameter der Annahme und Ergebnisse der verschiedenen Anpassungen sind in Tabelle 4.3.1 aufgelistet. Die angepassten Parameter sind mit kursiver Schrift angegeben, während die festgelegten Parameter normal geschrieben sind.

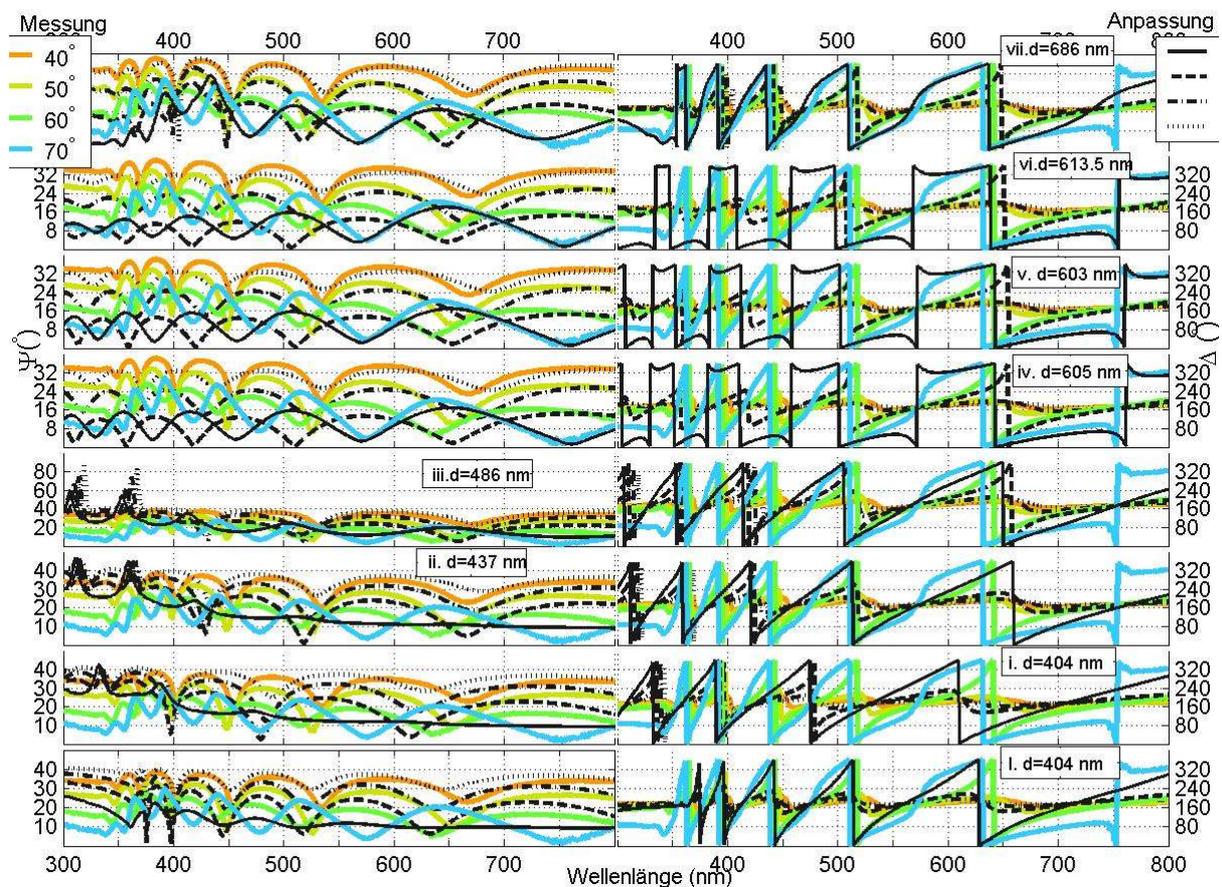


Abb. 4.3.10: Verschiedene Versuche der Anpassung $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2123c\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, mit den in Tabelle 4.3.1 aufgelisteten Annahmen, deren Bezeichnungen der vorliegenden Darstellung I, i, ii, iii, iv, vi, vii. entsprechen und den Dispersionsrelationen I, i, ii, iii, iv, vi, vii. in den Abb. 4.3.7 bis 4.3.9.

Bezeichnung	Parameter						
	d (nm)	N_0	N_1	N_2	K_0	K_1	K_2
I.	404	0	0	0	0	0	0
i.	404	2.8	0	0	0	0	0
ii.	437	2.8	0	0	0	0	0
iii.	486.0	2.52	0	0	0	0	0
iv.	605	2.1	0	0	0.085	0	0
V	602.9	2.1	20	0	0.084	0	0
vi.	613.51	2.06	20	0	0.07	46.9	0
vii.	686	2.524	1303.7	1541.8	0.015	385.376	627.237
viii.	658	2.471	981.3	1360.2	0.006	512.96	774.26

Tabelle 4.3.1 Die Schichtdicke d und die Cauchy-Parameter N_0 , N_1 , N_2 , K_1 , K_2 und K_2 als Annahme und Ergebnisse, die in verschiedenen Versuchen der Anpassung $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger L^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2123c\}$ benutzt bzw. bekommen werden, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Die Bezeichnungen entsprechen den Kurven in den Abb. 4.3.7 bis 4.3.9 und den Ergebnissen in Abb. 4.3.10. Die angepassten Parameter sind mit kursiver Schrift angegeben, während die festgelegten Parameter normal geschrieben sind.

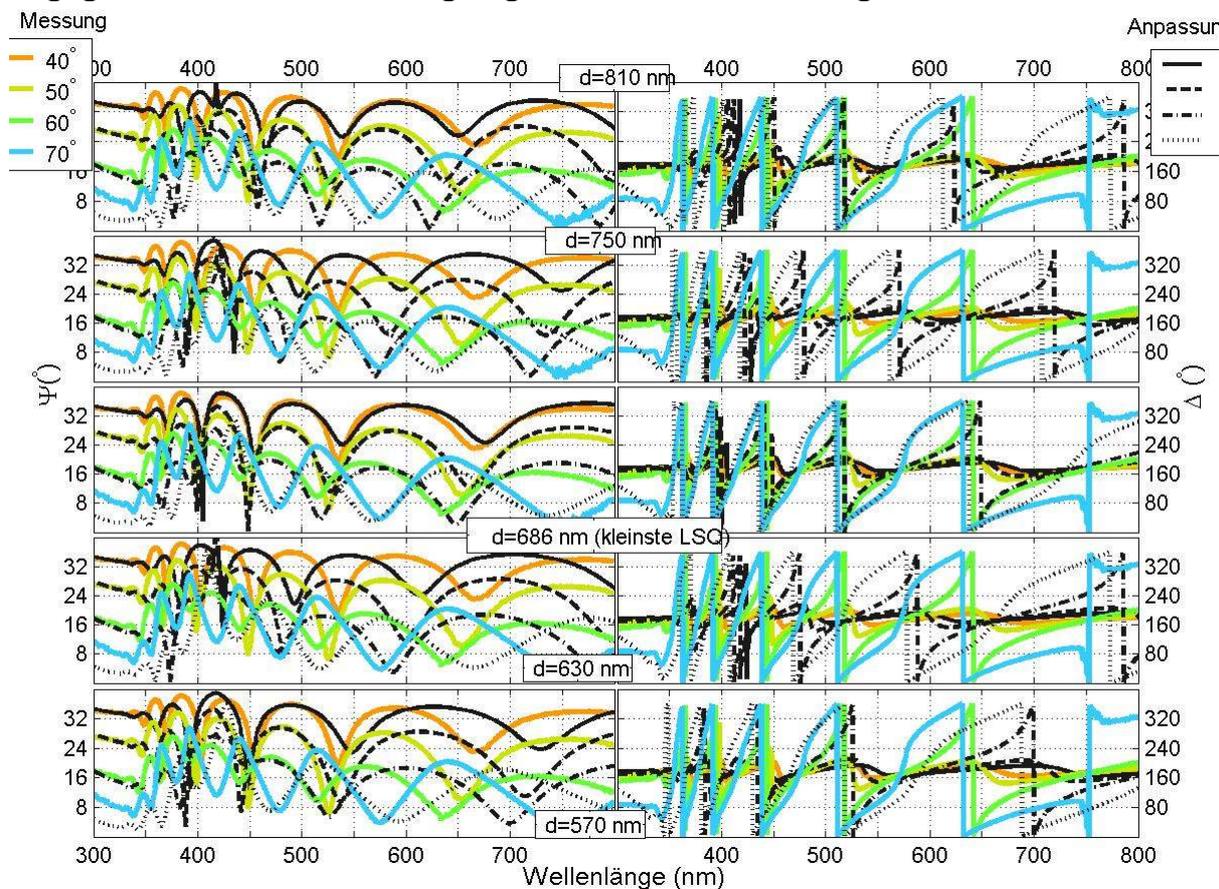


Abb. 4.3.11: Anpassungsversuch $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2123c\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. $n(\lambda) = N_0 + N_1 C_1 / \lambda^2 + N_2 C_2 / \lambda^4$, $k(\lambda) = K_0 + K_1 C_1 / \lambda^2 + K_2 C_2 / \lambda^4$. Angepasst sind die

Cauchy-Parameter N_0 , N_1 , N , K_0 , K_1 , K_2 und die Schichtdicke d . Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.3.1 unter der Zeile mit Bezeichnung vii. zu finden. Die entsprechenden n - und k -Kurven sind in Abbildungen 4.3.8 und 4.3.9 aufgetragen, unter der gleichen Bezeichnung.

Mit dem verwendeten Cauchy-Ansatz führt die Anpassung nur zu einer mässigen Verbesserung der Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung. Im Allgemeinen bereitet die Anpassung ellipsometrischer Messungen an TiO_2 Schwierigkeiten. Die Ursachen liegen in vielen Faktoren. Eine vollständige Interpretation des optischen Modells muss Schichtdicke, Rauheit der Oberfläche, Dichte, Zwischenschicht, usw. berücksichtigen. Die chemische Zusammensetzung der Titandioxidschicht ist an sich eine Herausforderung. In der Natur tritt TiO_2 hauptsächlich in den polymorphen Phasen Rutil (tetragonal) und Anatas (tetragonal) auf, daneben existiert noch das seltenere Brookit (rhombisch). Die Titanoxidschicht kann in stöchiometrisch unterschiedlicher Form (TiO , TiO_2 , Ti_2O_3 , Ti_3O_5 , usw.) [Sit98] und Struktur (amorph oder kristallin) vorliegen [Fel89, Mel89]. Zum einen fehlen Dispersionsformeln für die kristallinen Formen und zum anderen sind optische Eigenschaften der amorphen TiO_2 schlecht definiert [Jel93]. Von den kristallinen Strukturen treten allerdings vorwiegend Anatas und Rutil auf. Allgemein sind die dünneren Oxidschichten eher amorph, während bei dickeren Schichten der kristalline Anteil oft mit der Schichtdicke ansteigt [Gas94]. Rutil und Anatas weisen verschiedene optische Eigenschaften auf. Die Rutil-Phase hat eine höhere Brechzahl und weist ausgeprägte optische Anisotropie auf [Was30, Sch96, Hos97, Jel97, Tiw00]. Von Anatas ist auch optische Anisotropie, mit kleinerem Ausmass, zu erwarten. [Jel97, Vis01, Jel03]. Daher ist es notwendig, den Anteil von Anatas und Rutil und die jeweiligen Dispersionsrelationen zu bestimmen, um eine optische Aussage über die Dispersionsrelation einer Mischung von beiden Formen formelmässig zu machen. Ausserdem muss unterstöchiometrisches TiO_x , beispielsweise die Magnéli-Reihe von homologen TiO_{2n-1} mit $n \geq 4$ [Kof83, Kih97, Ard94], in Betracht gezogen werden.

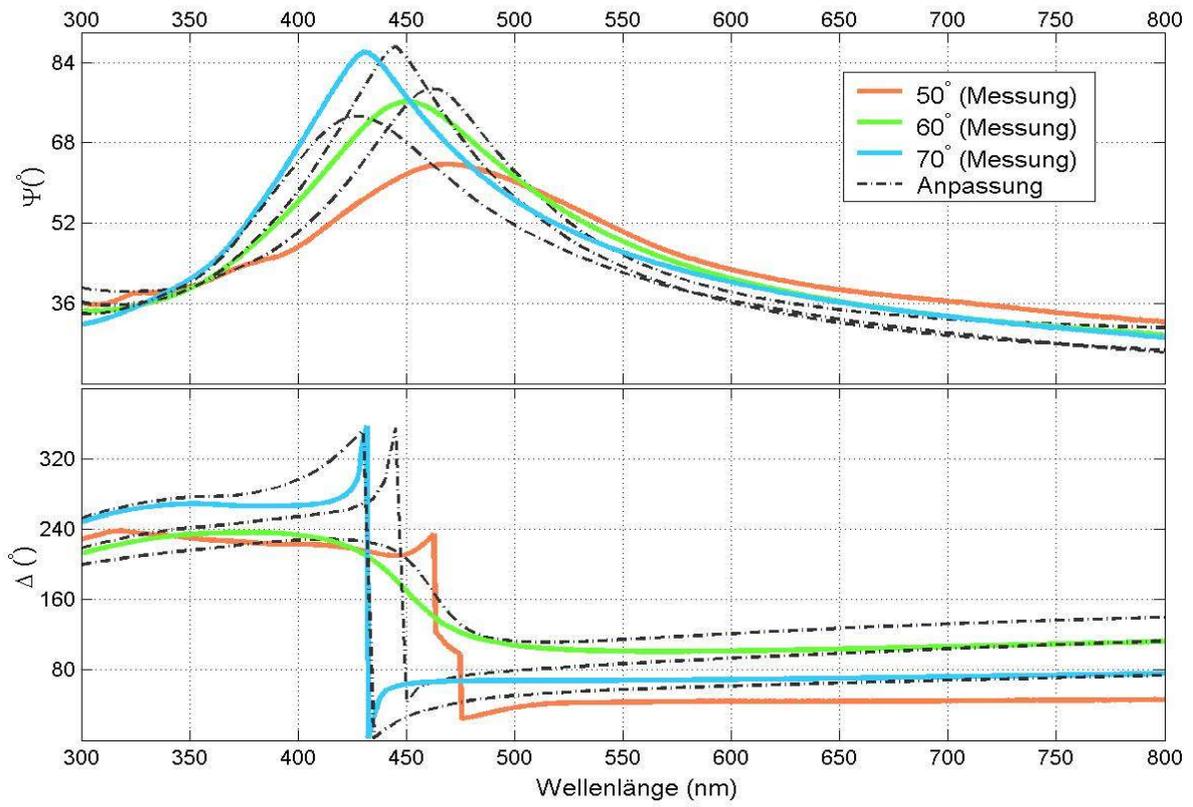
4.4 Aluminiumoxid

Alternativ zu TiO₂-Filme werden Al₂O₃-Filme als Bestandteile der Schichtfolge hergestellt und untersucht. Al₂O₃ ist chemisch außergewöhnlich beständig und völlig ungiftig. Als eines der härtesten Materialien zeigt Al₂O₃ extrem gute Eigenschaften für Schutzbeschichtungen. Dünnschichten von Aluminiumoxid finden auch viele optische Anwendungen dank seiner guten Eigenschaften [Edl93]. Allerdings hängt die Qualität der Aluminiumoxidschichten von den Abscheidungsparametern ab. Grundsätzlich sollten die zahlreichen Parameter einer nach dem anderen systematisch variiert werden, um einen Zusammenhang zwischen ihnen und der Schichtzusammensetzung zu ermitteln. Aufgrund von Zeitmangel wurden die Parameter nur soweit variiert, bis eine bestimmte Eigenschaft der Schichten reproduziert wurde. Als erstes Ziel wurde versucht, stöchiometrische Aluminiumoxidschichten herzustellen. Als Ausgangspunkt wurde eine hohe RF-Leistung bevorzugt, da es berichtet wurde [Cue95], dass eine hohe RF-Leistung für die Bildung von stöchiometrischen sowie kompakten Schichten günstiger ist. Zugleich hat die Änderung des Plasmadrucks bei einer hohen RF-Leistung weniger Einfluss auf die Schichtzusammensetzung.

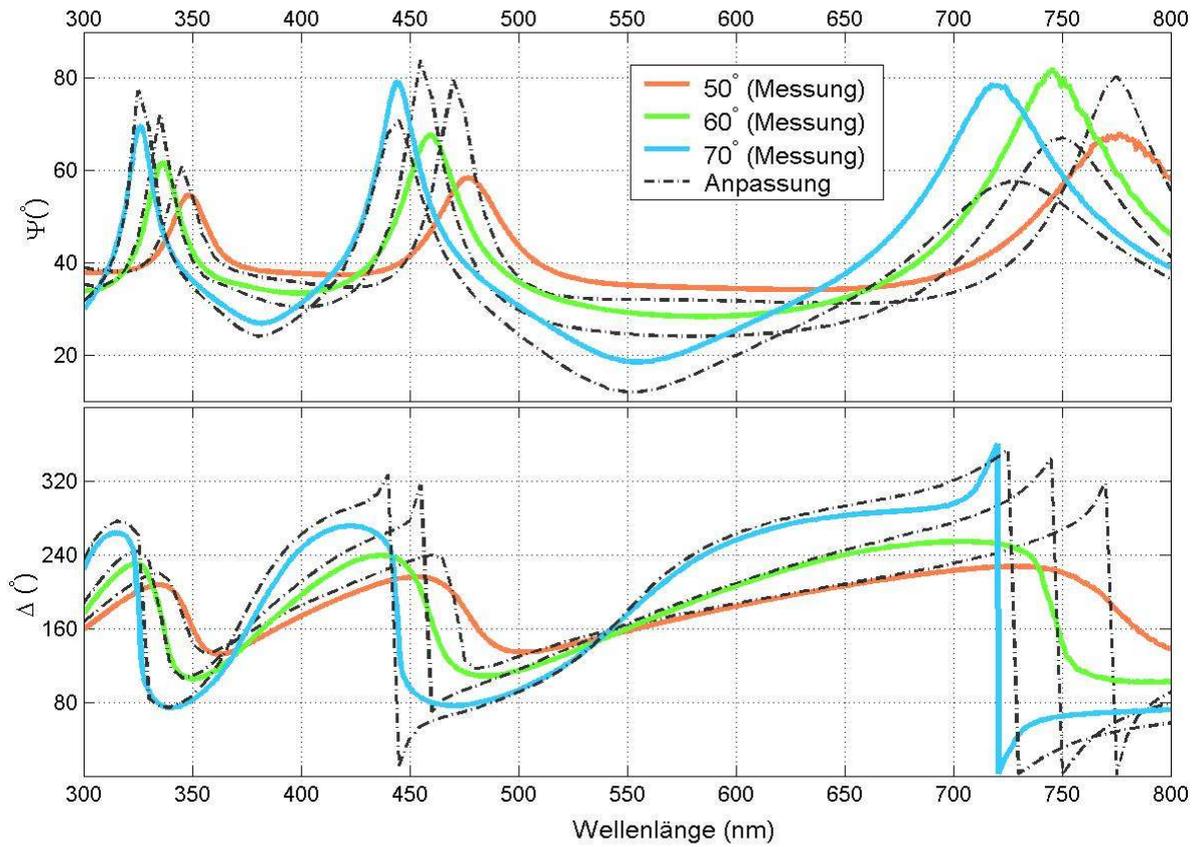
i. Anpassung anhand von Dispersionsrelationen aus der Literatur

Abb. 4.4.1 zeigt die Ergebnisse des Anpassungsversuchs $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pa}185]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pa}185]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für 5 {Luft | Aluminiumoxid | Si} Proben, wobei $F = \Psi, \Delta; \vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei wird nur die Schichtdicke als die einzige unbekannt Variable angepasst. Bezüglich der Anzahl und Position der Gipfel und Täler der dargestellten Kurven stimmen die Theorie und Messung zum größten Teil überein. Ob eine Anpassungsabweichung akzeptabel ist, hängt natürlich von der Anwendung ab. Zum Aufbau von Mehrschichtsystemen ist die jetzige bereits visuell auffallende Abweichung unbefriedigend. Die Abweichung muss behoben werden.

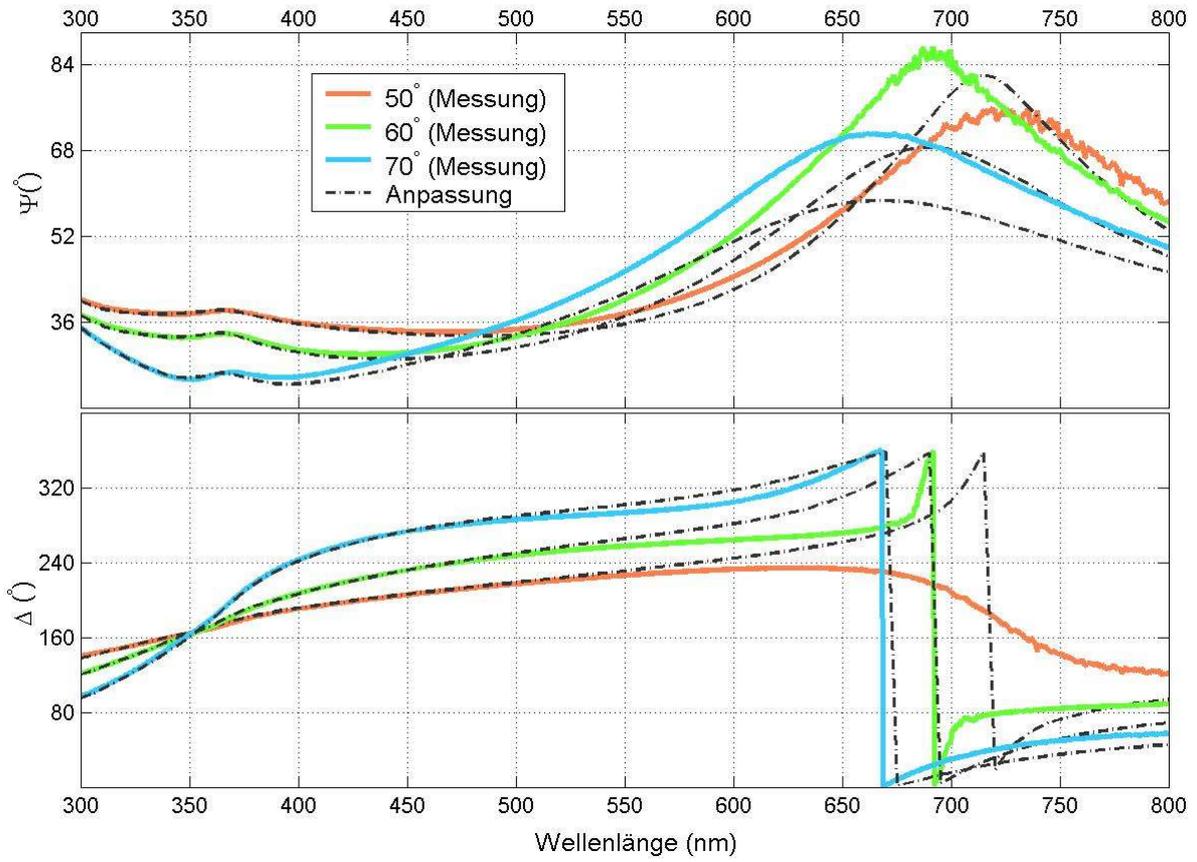
(a)



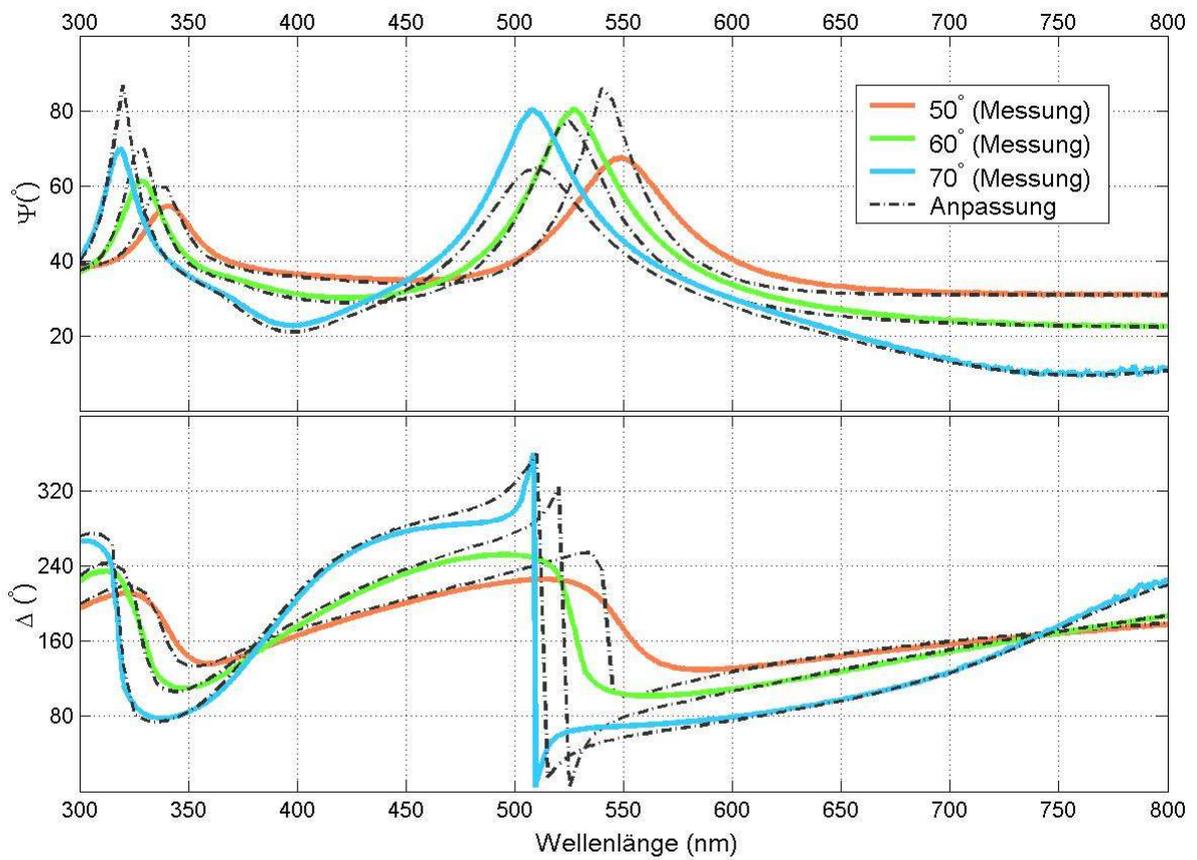
(b)



(c)



(d)



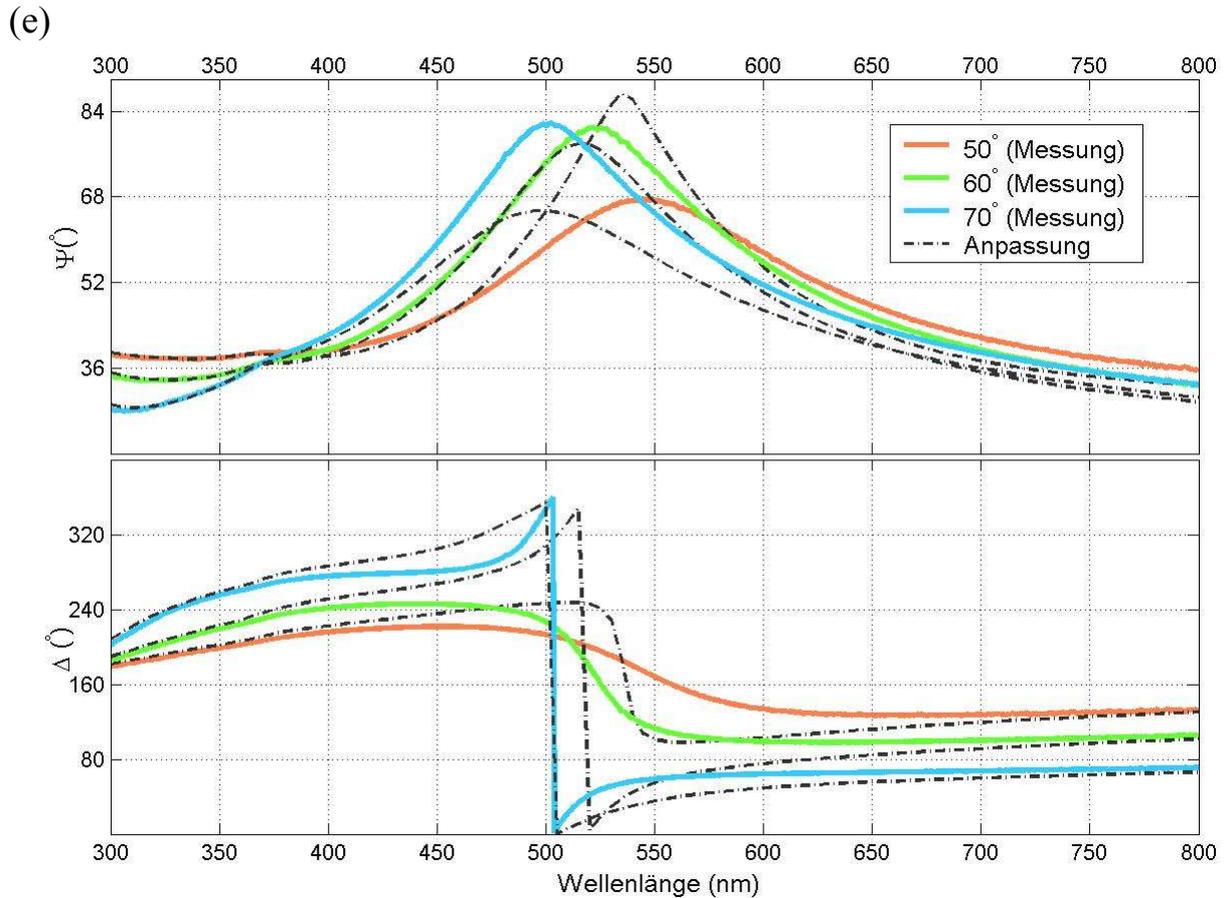
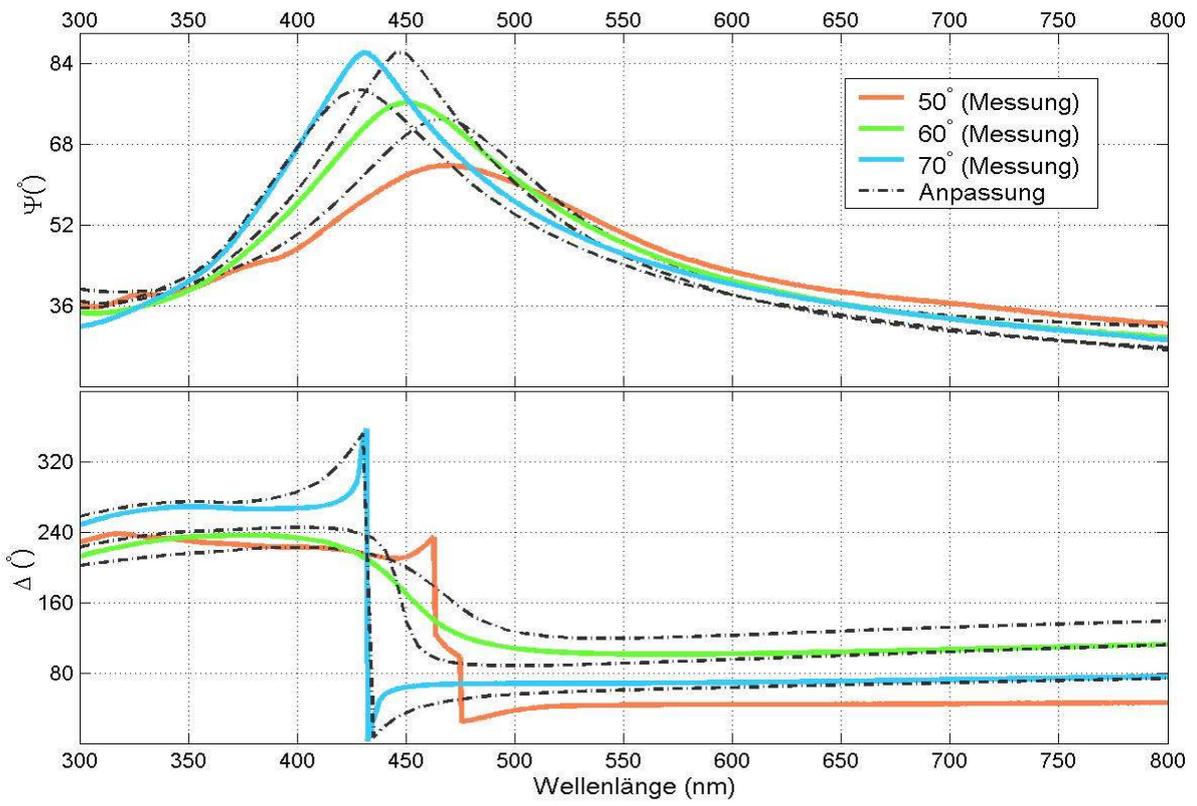


Abb. 4.4.1: Ergebnisse des Anpassungsversuchs $F([1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} = \{\text{Luft} \mid \text{Aluminiumoxid} \mid \text{Si}\}$ für 5 Proben, (a) {2523a}, (b) {2524a}, (c) {2822d}, (d) {2828c} und (e) {2912e} wobei $F = \Psi, \Delta; \vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei gelangen die Schichtdicken auf (a) $d=71.0\text{nm}$, (b) $d=366.5\text{nm}$, (c) $d=112.6\text{nm}$, (d) $d=254.0\text{nm}$ und (e) $d=83.5\text{nm}$.

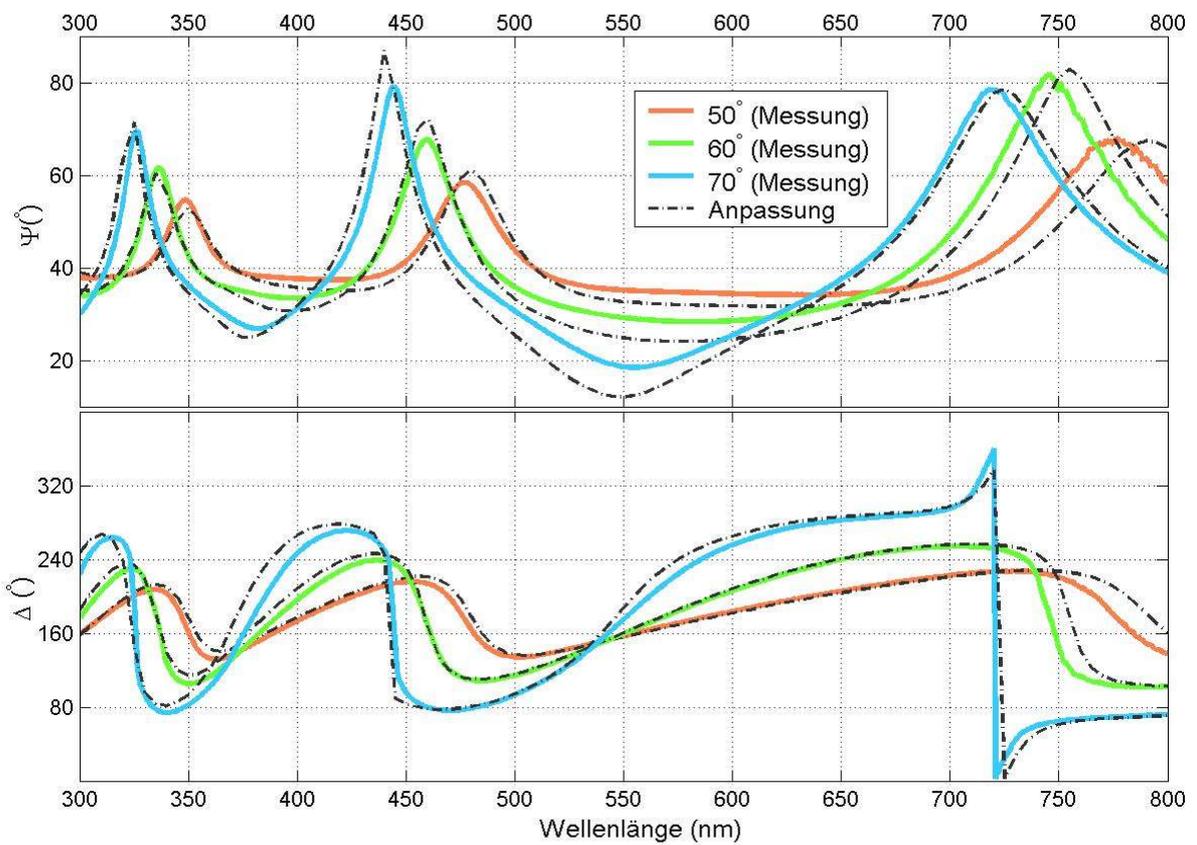
ii. $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Leerräume}$

Des weiteren betrachten wir eine Mischschicht. Wir gehen immer davon aus, dass die Aluminiumoxidschichten stöchiometrisch sind. Frühere Untersuchungen [Tho77] haben bereits gezeigt, dass undichte amorphe Aluminiumoxidschichten üblich sind. Die Variation der Dichte [Fie96, Van86, Gol94, Par95, Bha89] und Härte [Jun93, Cue95, Sch97, Fie96] lässt sich durch eine poröse Struktur erklären [Tho77, Cue95]. Darum wird eine Anpassung mit Einbettung von Leerräumen in Filme versucht. Die Anpassungsergebnisse für 5 Proben werden in Abbildung 4.4.2 selektiv gezeigt.

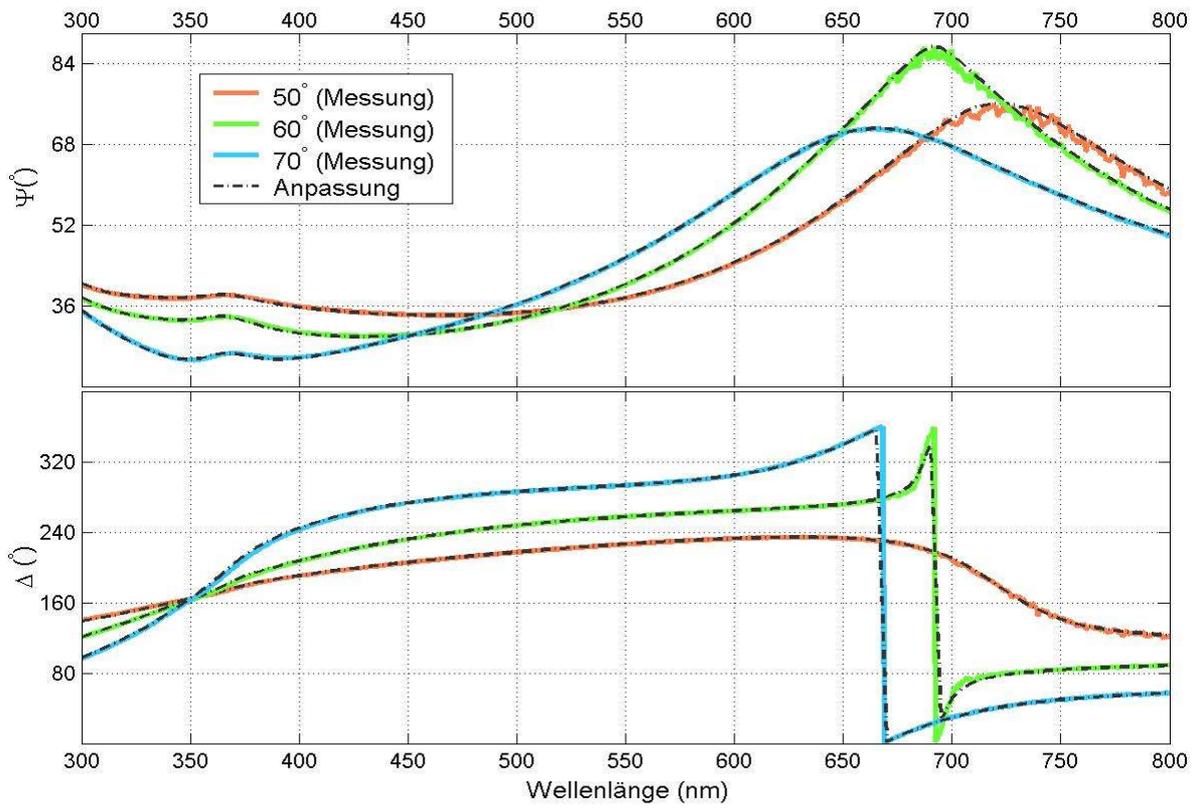
(a)



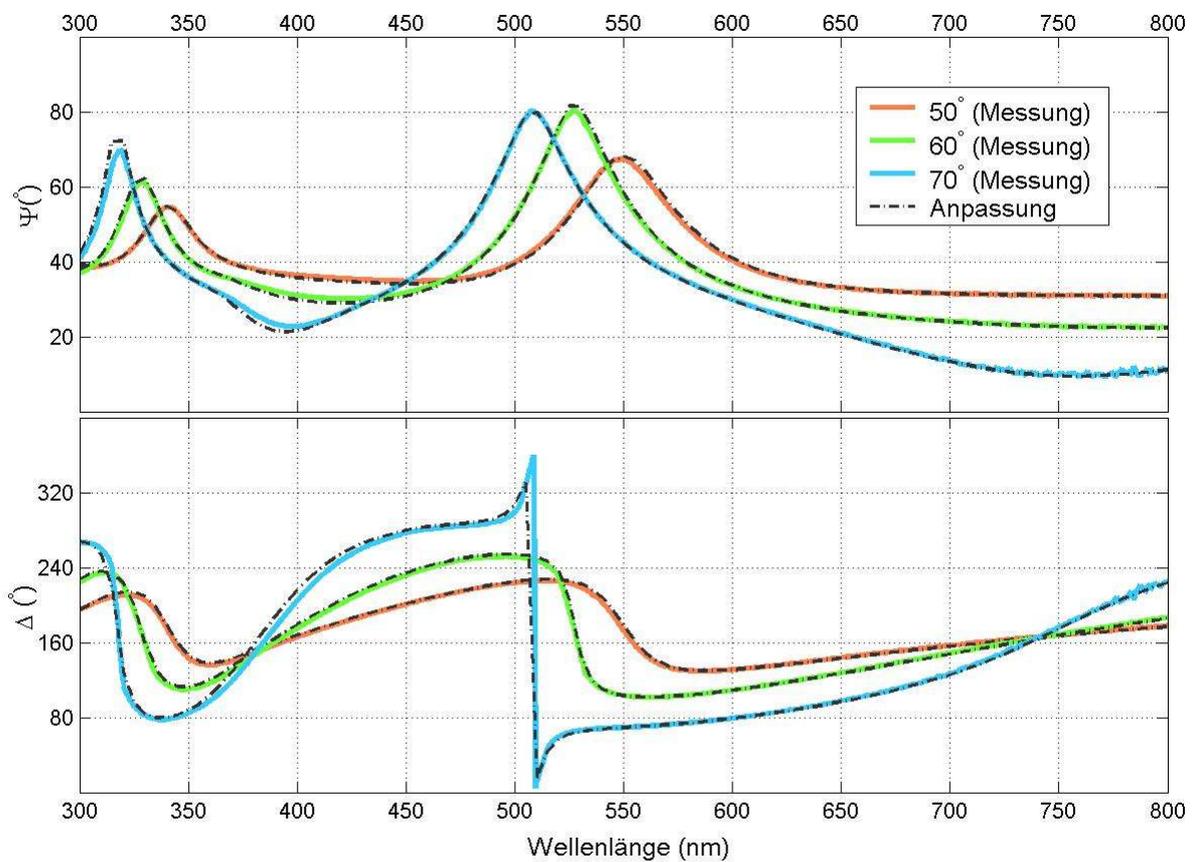
(b)



(c)



(d)



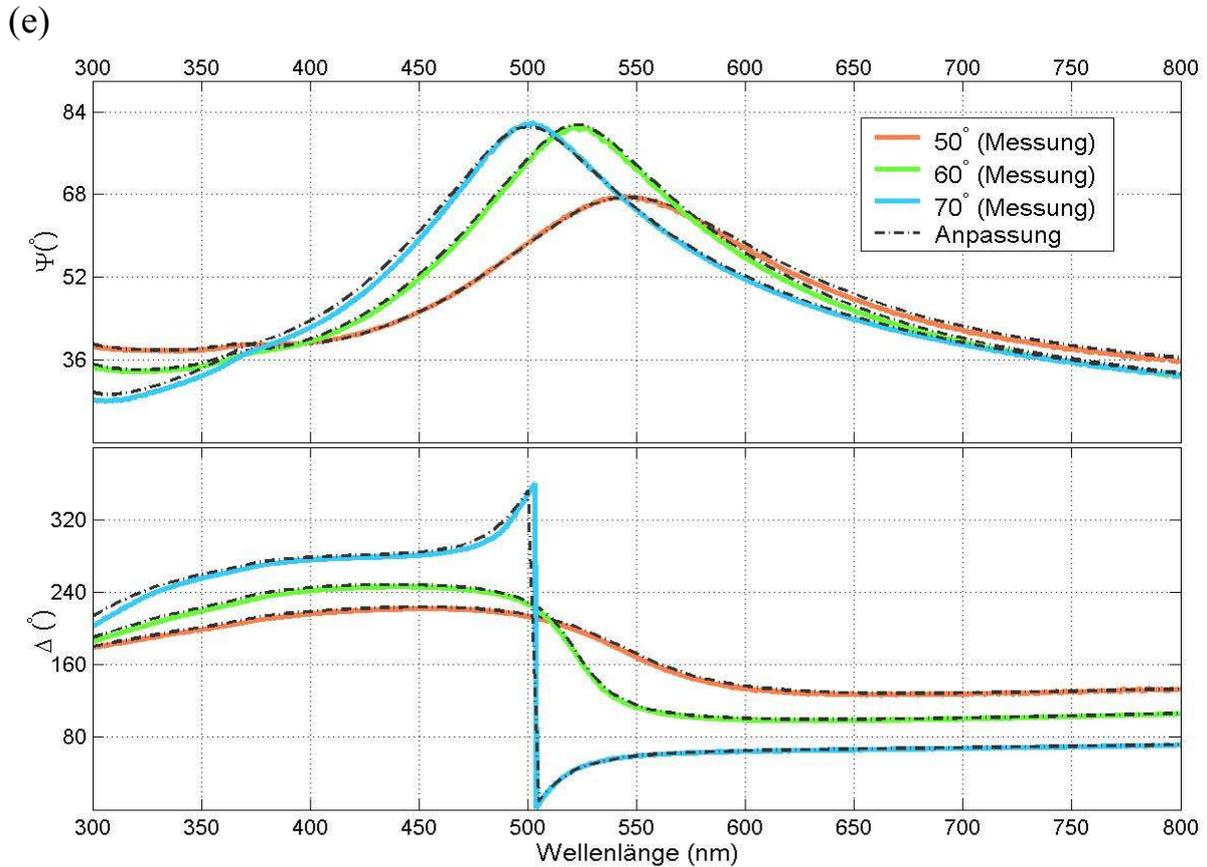


Abb. 4.4.2: Ergebnisse des Anpassungsversuchs $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [\text{Re}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} [\text{Im}(\tilde{\epsilon}_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{\text{Luft} | \text{Aluminiumoxid} | \text{Si}\}$ für 5 Proben: (a) {2523a}, (b) {2524a}, (c) {2822d}, (d) {2828c} und (e) {2912e}, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Dabei gelangen die angepasste Schichtdicke d und der Leerraumanteil r auf (a) $d=74.63\text{nm}$, $r=0.197$; (b) $d=440.283\text{nm}$, $r=0.268$; (c) $d=125.26\text{nm}$, $r=0.171$; (d) $d=291.65\text{nm}$, $r=0.207$ und (e) $d=96.18\text{nm}$, $r=0.213$.

Im Gegensatz zu den Titanoxidproben lassen sich die Aluminiumoxidproben erstaunlich gut durch Einbettung von Leerräumen in Filme modellieren. Während Abweichungen bei den zwei ersten Proben (Abb. a and b) noch sichtbar sind, ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung bei den letzten drei Proben (Abb. c, d und e) nahezu perfekt, und zwar bei allen Winkeln. Im Vergleich zum Ansatz ohne Annahme des Leerraums werden die angepassten Schichtdicken erheblich größer, wie die SEM-Aufnahmen bestätigen (Abb. 4.4.3). Die entsprechenden n -Kurven sind in Abbildung 4.4.4 zusammen mit $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]}$ aufgetragen. Im Vergleich zu $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]}$ korrigieren sich $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}$ erheblich um durchschnittlich 20% abwärts. Die Abwärtsverlegung ist spektroskopisch gleichmässig, da sie lediglich von einem Parameter gesteuert wird. Daher stehen die Kurven parallel zueinander. Ob der Leerraumanteil der Realität entspricht, muss noch untersucht werden. XPS- und UPS- Messungen können leider die Leerräume nicht detektieren. Eine andere Technik muss

verwendet werden. Bevor man eine Schlussfolgerung ziehen kann, ist die Charakterisierung durch einen Parameter vollkommen ökonomisch und phänomenologisch plausibel. Weitere Versuche sind zu empfehlen, um die Beziehung zwischen dem Leerraumanteil und der Abscheidungsbedingung zu etablieren.

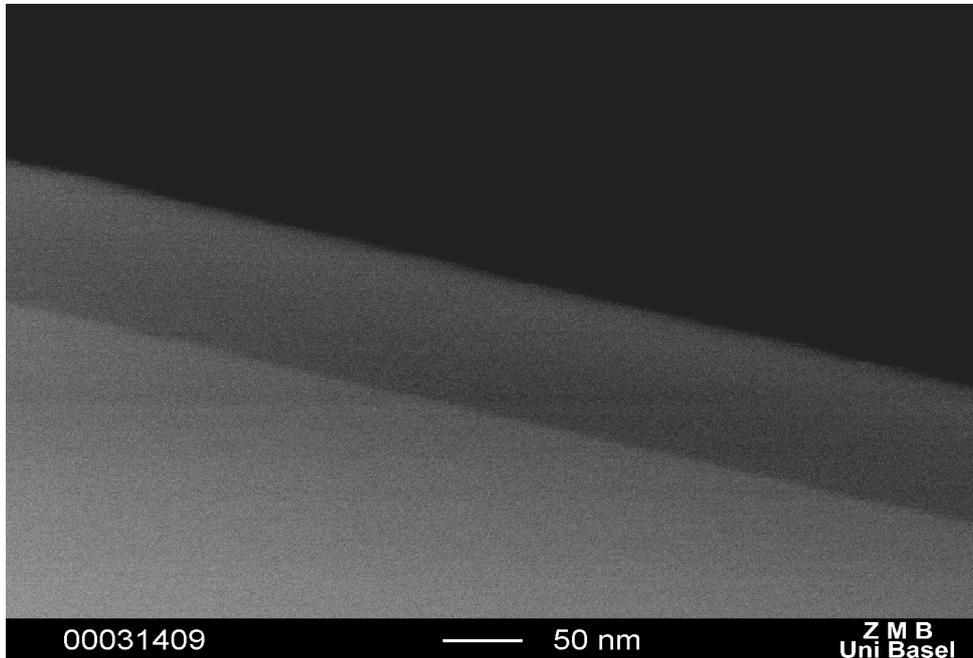


Abb. 4.4.3: SEM-Aufnahme für Probe {2912e} bestätigt die Schichtdicke.

Erwähnenswert ist, dass eine derartige Anpassung nicht Proben aus der ähnlichen Herstellungsbedingungen entspricht. Sie stammen aus der experimentellen Phase, während der Proben willkürlich unter unterschiedlichen Abscheidungsparametern hergestellt wurden.

Wie die Ergebnisse zeigen, haben die drei Proben unterschiedliche Schichtdicken und Leerraumanteile. Aus ungefähr zehn Proben, deren ellipsometrische Messungen sich lediglich durch die Einführung des Leerraumanteils als ein zusätzlicher Parameter ausgezeichnet anpassen lassen, schwankt der Leerraumanteil von 0.169 bis 0.23. Dies entspricht Brechungsindizes von 1.56 bis 1.64 bei $\lambda=550\text{nm}$. In der Literatur wurden Brechungsindizes von 1.52 bis 1.83 berichtet [Edl93, Jun93, Sch97, Fie96, Spr95, Pan89, Fra93, Cla94, Rob94, Smi86, Van86].

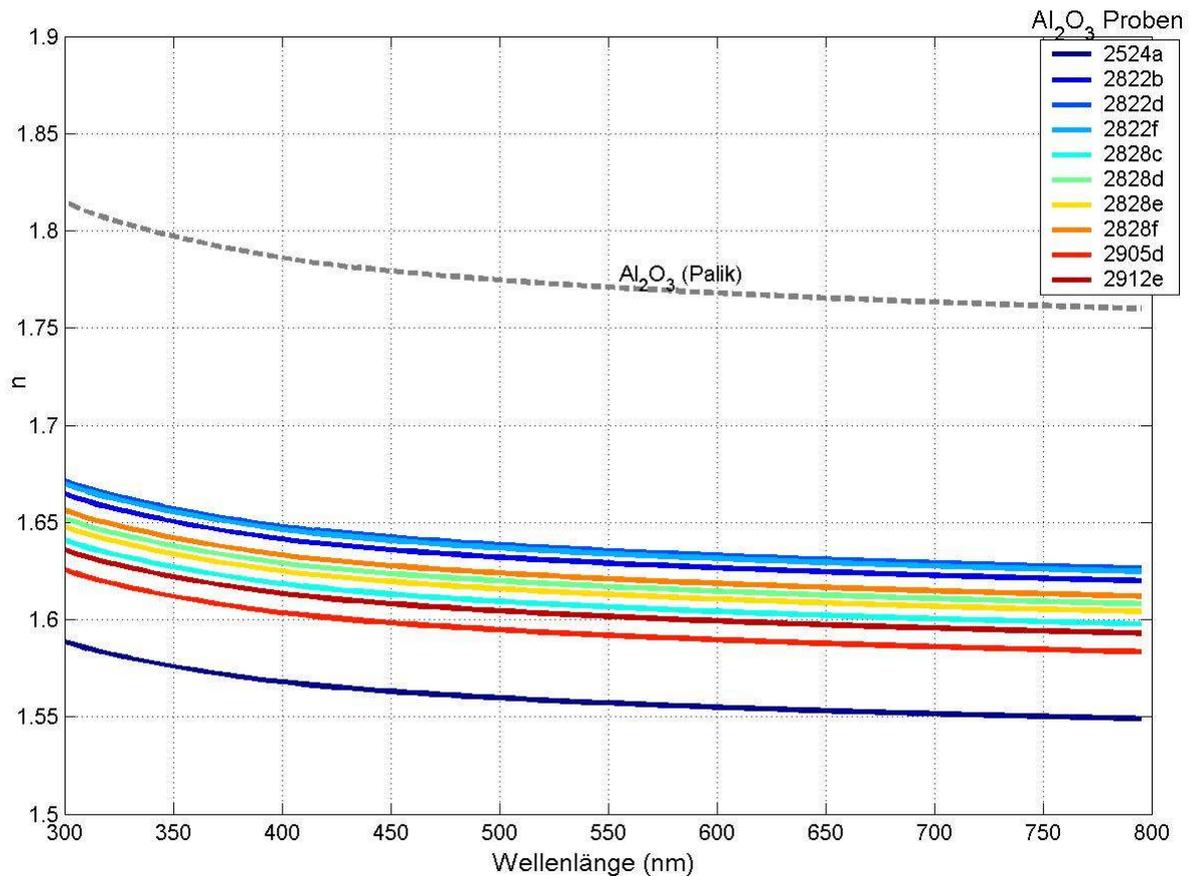


Abb. 4.4.4: Die n -Kurven von 10 Aluminiumoxidproben.

ii Siliziumoxid und Aluminiumoxid

Da der VIS-Bereich sowohl von $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ als auch von $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}$ in der Zone I liegt, und da sie nahezu konstant bei 1.46 bzw. 1.76 (Abb. 4.1.1a-b) sind, ist es zu erwarten, dass sie sich beide auch von der Cauchy-Formel gut annähern lassen. Die entsprechenden Cauchy-Parameter betragen $N_0=1.752$, $N_1=54.7$ (Tabelle 4.5.1) bzw. $N_0=1.448$, $N_1=35.2$ (Tabelle 4.5.2). Da sich die Dispersionsrelationen der Aluminiumoxidschichten durch gleichmässige Absenkung der $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ hervorragend modellieren lassen, ist eine ausgezeichnete Anpassung mit der Cauchy-Formel selbstverständlich. Im Vergleich zur Anpassung mit $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}$ ändern sich die Schichtdicken praktisch nicht. Mit den Schichtdicken sind die entsprechenden Cauchy-Parameter in der Tabelle 4.5.1 angegeben.

4.5 Einsatz in Mehrschichtsysteme

Bisher haben wir einschichtsysteme wie {Luft | Titanoxid | Si Substrat}, {Luft | Aluminiumoxid | Si Substrat} und {Luft | Siliziumoxid | Si Substrat} mit drei Ansätzen charakterisiert. Das Ergebnis für Titanoxid ist negativ. Wellenlänge-für-Wellenlänge-Anpassung wird im nächsten Kapitel verfolgt. Die Ergebnisse für Aluminiumoxid und Siliziumoxid werden in Tabelle 4.5.1 bzw. 4.5.2 zusammengefasst.

Abb.	Probe	Al ₂ O ₃ [Pal85]	Bruggemanns Effektives Medium Al ₂ O ₃ /Vakuum	Cauchy-Formel
a	{2523a}	$d=71.01\text{nm}$	$d=74.63\text{nm}; r=0.197$	$d=74.63\text{nm}; N_0=1.717 ; N_1=0$
b	{2524a}	$d=366.50\text{nm}$	$d=440.28\text{nm}; r=0.268$	$d=439.50\text{nm}; N_0=1.533; N_1=65.3$
c	{2822d}	$d=112.55\text{nm}$	$d=125.26\text{nm}; r=0.171$	$d=125.24\text{nm}; N_0=1.618; N_1=55$
d	{2828c}	$d=254.00\text{nm}$	$d=291.65\text{nm}; r=0.207$	$d=292.03\text{nm}; N_0=1.588; N_1=47.4$
e	{2912e}	$d=83.46\text{nm}$	$d=96.18\text{nm}; r=0.213$	$d=96.07\text{nm}; N_0=1.572; N_1=85.8$
	Al ₂ O ₃ [Pal85]			$N_0=1.752; N_1=54.7$

Tabelle 4.5.1: Zusammenfassung der Ergebnisse der im Abschnitt 4.2-4.4 durchgeführten Anpassungsversuche für das einschichtsystem {Luft | Al₂O₃ | Si Substrat}. Zum Vergleich werden auf der untersten Zeile die Cauchy-Parameter, $N_0=1.752$ und $N_1=54.7$, aufgeführt, die $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}$ am besten annähern.

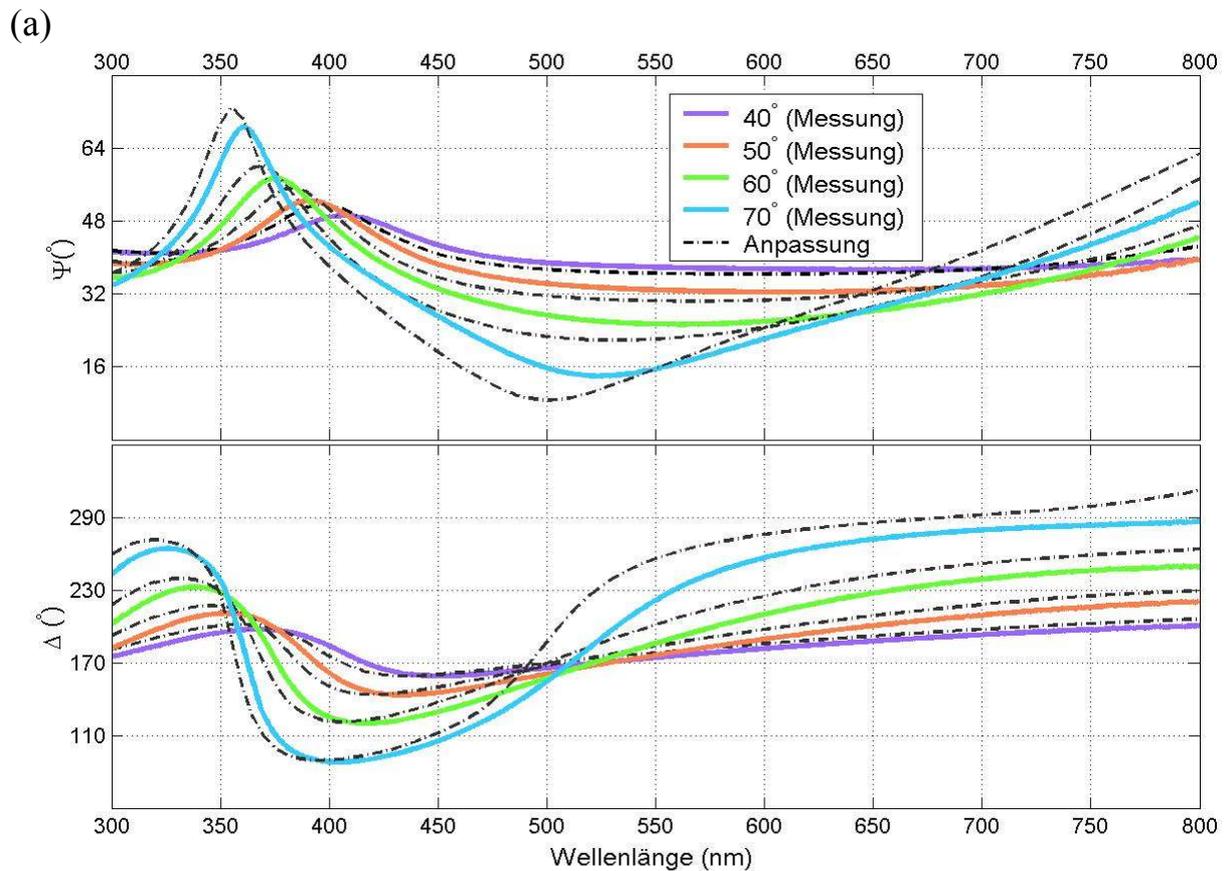
Abb.	Probe	SiO ₂ [Pal85]	Cauchy-Formel
a	{2826d}	$d=338.85\text{nm}$	$d=335.17\text{nm}; N_0=1.465; N_1=21.8$
b	{2820e}	$d=668.80\text{nm}$	$d=656.57\text{nm}; N_0=1.469; N_1=24.4$
c	{2821a}	$d=691.05\text{nm}$	$d=680.95\text{nm}; N_0=1.465; N_1=25.3$
d	{2827b}	$d=184.83\text{nm}$	$d=182.94\text{nm}; N_0=1.465; N_1=22.7$
e	{2912g}	$d=108.53\text{nm}$	$d=107.52\text{nm}; N_0=1.461; N_1=26.1$
	SiO ₂ [Pal85]		$N_0=1.448; N_1=35.2$

Tabelle 4.5.2: Zusammenfassung der Ergebnisse der im Abschnitt 4.2-4.4 durchgeführten Anpassungsversuche für das einschichtsystem {Luft | SiO₂ | Si Substrat}. Zum Vergleich werden auf der untersten Zeile die Cauchy-Parameter, $N_0=1.448$; $N_1=35.2$, aufgeführt, die $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ am besten annähern.

Auf Basis der Ergebnisse aus den Einschichtsystemen wird versucht, das Zweischichtsystem $\{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si Substrat}\}$ und das Vierschichtsystem, $\{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si Substrat}\}$ zu charakterisieren. Die SiO_2 - bzw. Al_2O_3 -Schichten werden gleich lang wie diejenigen in den Einschichtsystemen unter gleichen Herstellungsbedingungen ohne Unterbruch des Vakuums hergestellt. $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{SiO}_2}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2}(\lambda) \ d_{\text{SiO}_2}]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \emptyset)$ und $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) \ d_{\text{Al}_2\text{O}_3}]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \emptyset)$ werden für $F_\theta^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Si Substrat}\}$ bzw. $F_\theta^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si Substrat}\}$ angepasst. Die Schichten $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{SiO}_2}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2}(\lambda) \ d_{\text{SiO}_2}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) \ d_{\text{Al}_2\text{O}_3}]$ werden in $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \emptyset)$ und $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\theta^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si Substrat}\}$ bzw. $F_\theta^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si Substrat}\}$ eingesetzt, um zu überprüfen, inwiefern die optischen Modelle geeignet sind. Dabei sind d_{SiO_2} und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ Unbekannte. Dazu wird versucht $n_{\text{SiO}_2}(\lambda)$, $k_{\text{SiO}_2}(\lambda)$, $n_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda)$ und $k_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda)$ direkt zu modifizieren, um die Anpassung $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \emptyset)$ zu verbessern. Ihre Konsistenz und ihr physikalischer Sinn wird mit dem Einsetzen in die Anpassung $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \emptyset)$ überprüft. Zur Erläuterung werden die Ergebnisse aus den Versuchen mit den Proben $\{2912g\}$, $\{2912e\}$, $\{2911a\}$ und $\{2911e\}$ verwendet.

i. Ansätze mit $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ und $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}$

Aus der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) & d_{\text{SiO}_2} \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2912\text{g}\}$ im Abschnitt 4.2.3 (Abb. 4.2.3e) und aus der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) & d_{\text{Al}_2\text{O}_3} \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2912\text{e}\}$ im Abschnitt 4.2.2 (Abb. 4.2.2e) wird $d_{\text{SiO}_2}=108.53\text{nm}$ bzw. $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}=83.46\text{nm}$ erhalten. $L_{\text{SiO}_2}=[n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ 108.53\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3}=[n_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3}(\lambda) \ 83.46\text{nm}]$ werden als Ansätze in der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right]^\dagger, \vartheta)$ und $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2911\text{a}\}$ bzw. $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2911\text{e}\}$ überprüft. Die Anpassungen (Abb. 4.5.1.a-b) weisen darauf hin, dass man grundsätzlich in die richtige Richtung gegangen ist. Jedoch fällt die Unstimmigkeit schon visuell auf und zwar besonders beim heiligen Winkel $\vartheta=70^\circ$. Die beim Zweischichtsystem aufgetretenen Abweichungen häufen sich beim Vierschichtsystem (b) und führen zu einer differenzierten und markanten Verschiebung aller Gipfel. Die Einschichtmodelle müssen also verbessert werden.



(b)

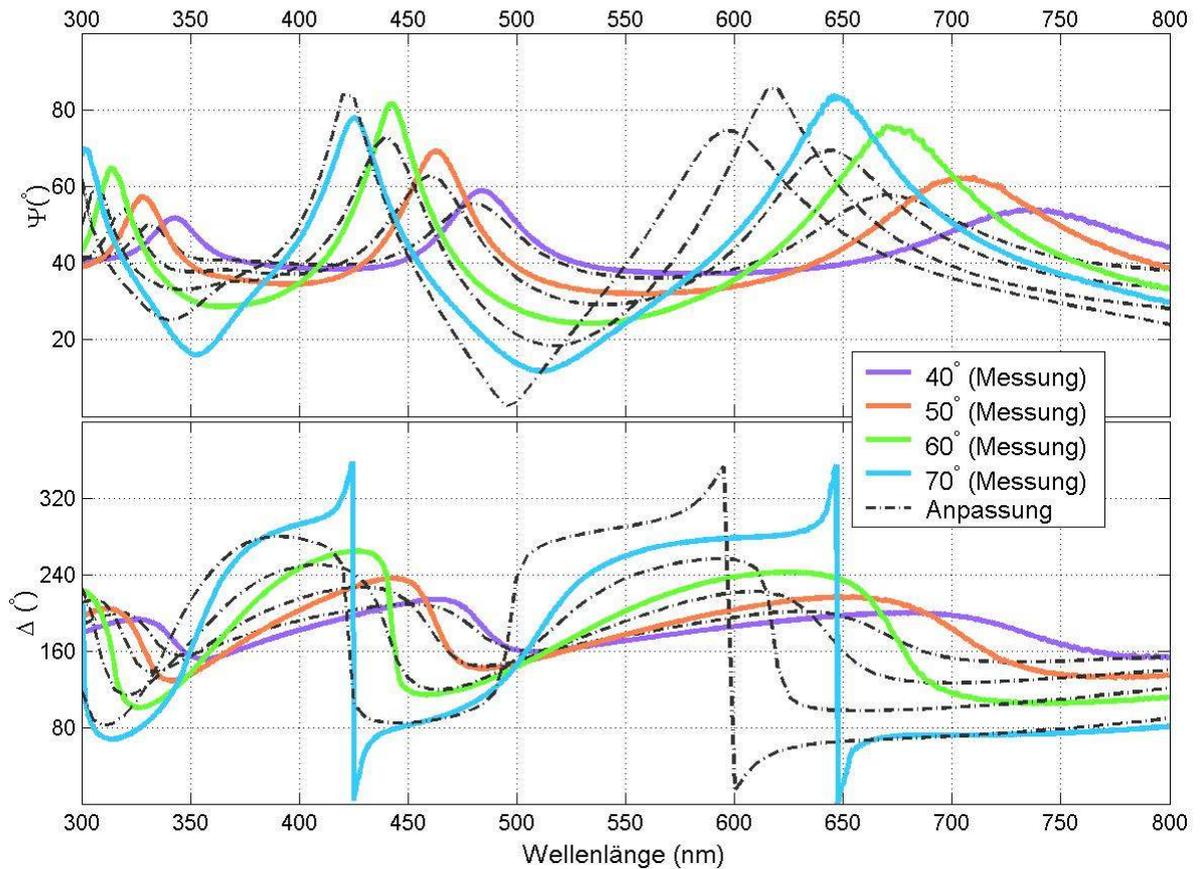
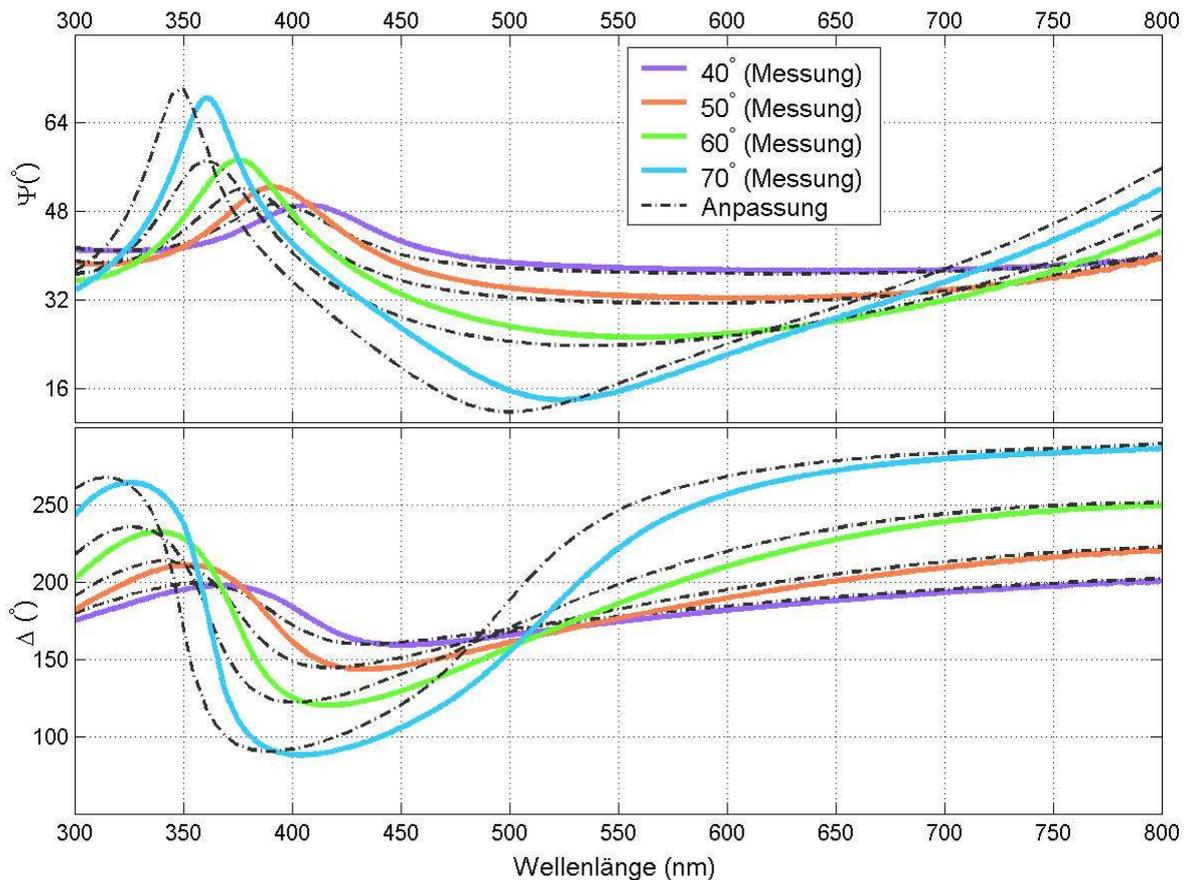


Abb. 4.5.1: Überprüfung der Ansätze $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ 108.53\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) \ 83.46\text{nm}]$ in der Anpassung (a) $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2911a\}$ und (b) $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2911e\}$, wobei die Schichtdicken sich als Anpassungsergebnisse aus der Anpassung $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2912g\}$ bzw. der Anpassung $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2912e\}$ ergeben.

ii. Ansätze mit $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ und $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}$

Wie in Abbildung 4.5.1 erhält man den Ansatz $L_{\text{SiO}_2}=[n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) 108.53\text{nm}]$. Statt $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}=83.46\text{nm}$ wird $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}=96.18\text{nm}$ aus der Anpassung mit Betrachtung der Leerräume, $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger [\text{Re}(f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} \text{Im}(f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}^2(\lambda), 1, r))^{1/2} d_{\text{Al}_2\text{O}_3}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}}\{2912e\}$, angenommen. Daher werden L_{SiO_2} und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3}=[n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) 96.18\text{nm}]$ in $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger, \emptyset)$ und $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}}\{2911a\}$ bzw. $F_\emptyset^{\text{meas}}\{2911e\}$ eingesetzt. In Abbildungen 4.5.2a-b sind die entsprechenden Anpassungen dargestellt. Obwohl die Anpassung mit Betrachtung der Leerräume bei Einschichtsystemen hervorragend ist, leistet dieser Ansatz nicht in gleichem Ausmass einen Beitrag zur Verbesserung der Anpassung für das Zweischicht- und Vierschichtsystem.

(a)



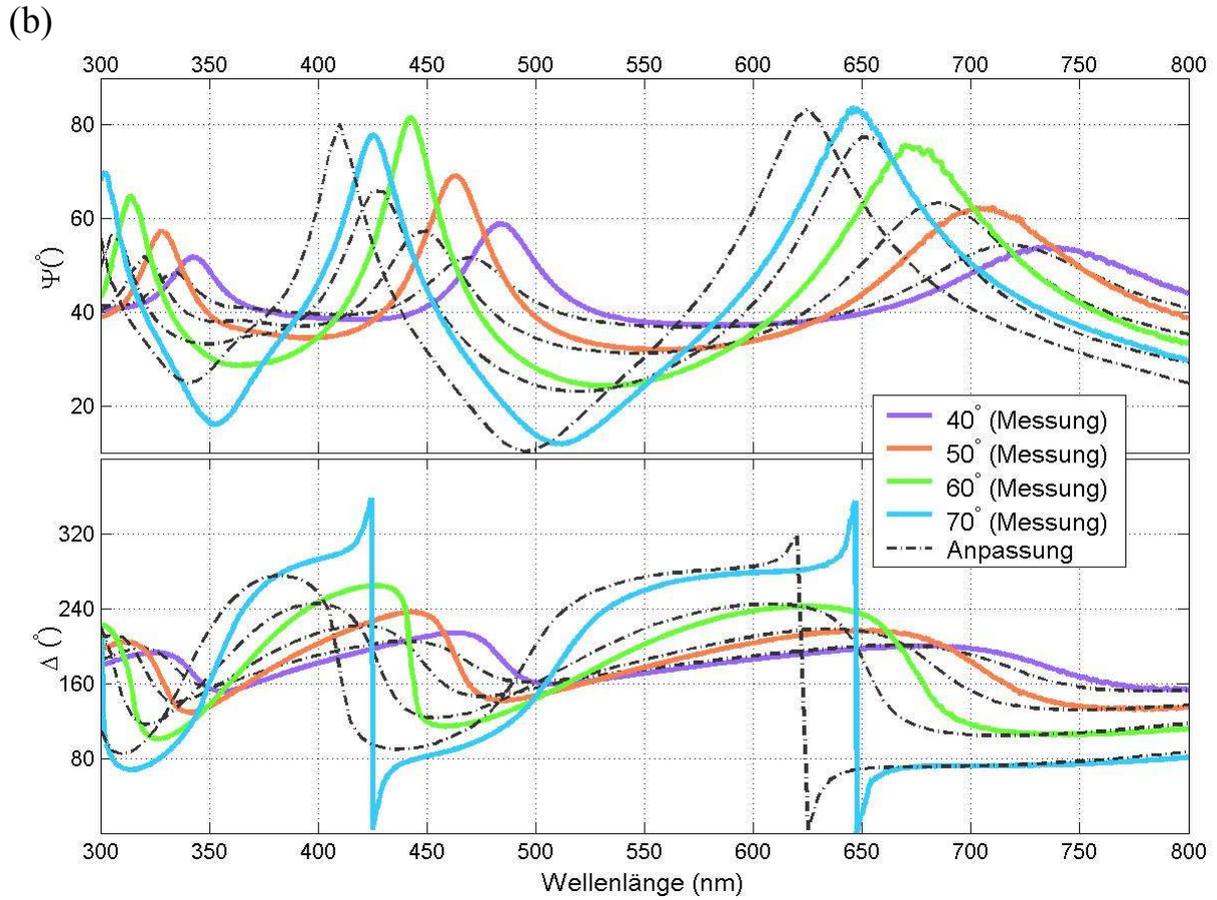
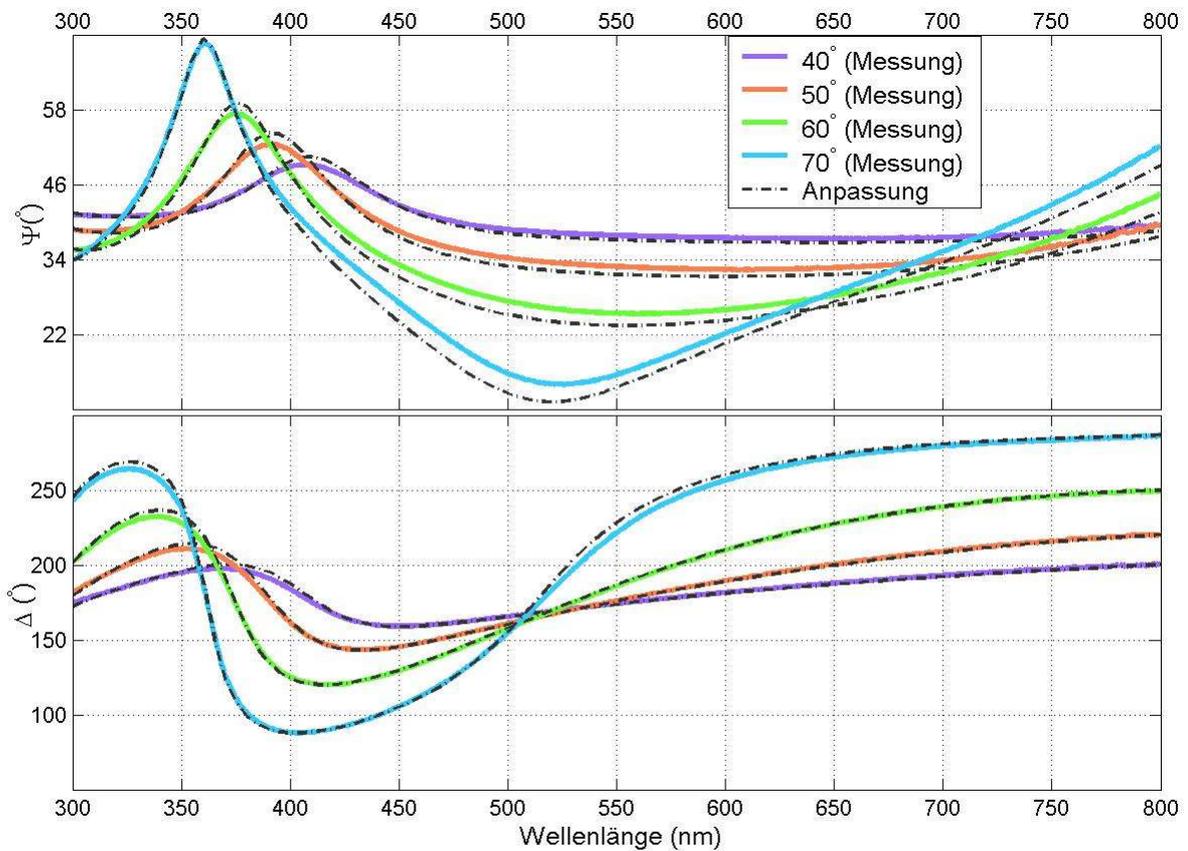


Abb. 4.5.2: Anpassungsversuche (a) $F([1\ 0\ \infty]^{\dagger} L_{\text{SiO}_2}^{\dagger} L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^{\dagger} [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ \infty]^{\dagger})^{\dagger}, \vartheta)$ für $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2911a\}$ und (b) $F([1\ 0\ \infty]^{\dagger} L_{\text{SiO}_2}^{\dagger} L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^{\dagger} L_{\text{SiO}_2}^{\dagger} L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^{\dagger} [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ \infty]^{\dagger})^{\dagger}, \vartheta)$ für $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2911e\}$, mit dem Einsatz der Ergebnisse $L_{\text{SiO}_2}=[n_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda)\ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda)\ 108.53\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}=[n_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}(\lambda)\ k_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}(\lambda)\ 96.18\text{nm}]$ aus der Anpassung $F([1\ 0\ \infty]^{\dagger} L_{\text{SiO}_2}^{\dagger} [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ \infty]^{\dagger})^{\dagger}, \vartheta)$ für $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2912g\}$ bzw. aus der Anpassung $F([1\ 0\ \infty]^{\dagger} L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^{\dagger} [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ \infty]^{\dagger})^{\dagger}, \vartheta)$ für $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2912e\}$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^{\circ}, 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$.

iii. Ansatz mit $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$, $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ und freier $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$

Um diese Abweichung zu beheben, werden die folgenden Überlegungen gemacht: Während die Al_2O_3 -Schicht im System $\{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si-Substrat}\}$ mit derjenigen in $\{\text{Luft} \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si-Substrat}\}$ gleichgestellt werden kann, hat die SiO_2 -Schicht in $\{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Al}_2\text{O}_3 \mid \text{Si-Substrat}\}$ ein nicht ganz identisches Umfeld wie diejenige im $\{\text{Luft} \mid \text{SiO}_2 \mid \text{Si Substrat}\}$. Denn im letzteren wird das Wachstum der SiO_2 -Schicht auf mit SiO_2 passivierter Oberfläche weiter fortgesetzt. Im ersten hingegen wird die SiO_2 -Schicht auf Al_2O_3 abgeschieden. Daher ist zu erwarten, dass die SiO_2 -Schicht im zweiten System nicht mit der gleichen Rate, zumindest nicht am Anfang, abgeschieden wird. Die Schichtdicke könnte abweichen. Wie im Versuch ii (Abb. 4.5.2) wird $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) 96.18\text{nm}]$ mit $r=0.213$ festgelegt. $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ und $k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda)$ bleiben gleich. Angepasst wird nur d_{SiO_2} . Demzufolge nimmt die Schichtdicke um 10% auf 118.09nm zu. Die Anpassung, vor allem bei Δ -Spektren, verbessert sich deutlich. Daher werden $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ und $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}(\lambda) 118.09\text{nm}]$ als Ansätze in der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ L_{\text{SiO}_2}^\dagger & L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger & L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911a\}$ überprüft.

(a)



(b)

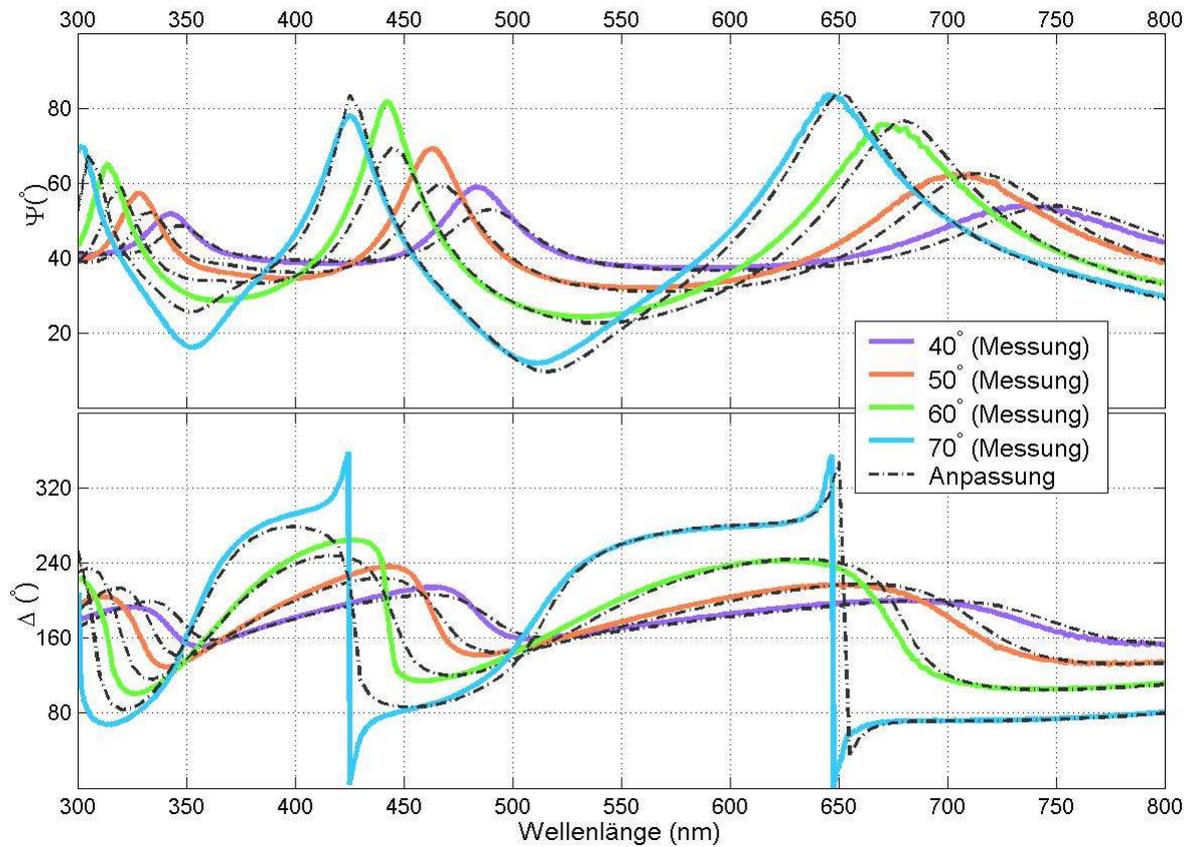
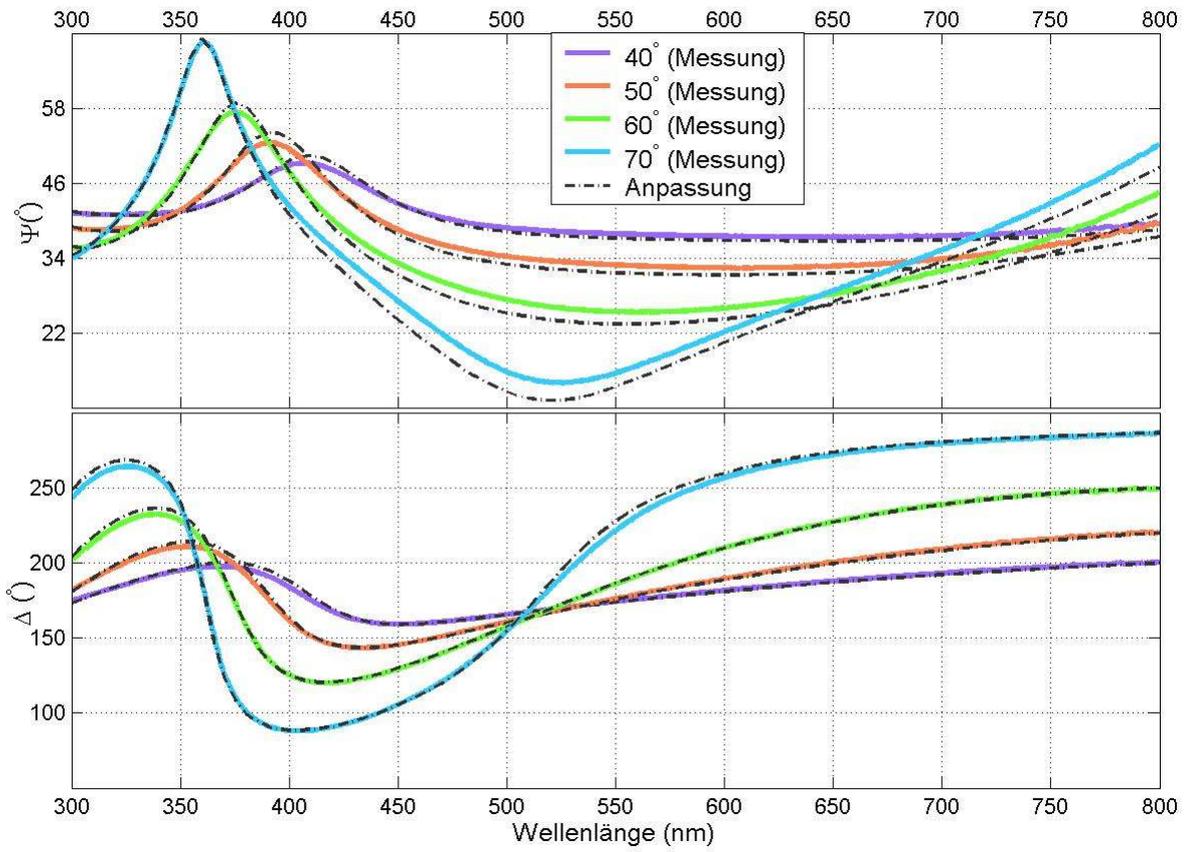


Abb. 4.5.3: (a) Anpassungsversuch $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) d_{\text{SiO}_2}]^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2911a\}$ mit dem Einsatz der Ergebnisse $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}(\lambda) 96.18\text{nm}]$ aus der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2912e\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Daraus ergibt sich $d_{\text{SiO}_2} = 118.09\text{nm}$. (b) Überprüfung der Ansätze $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) 118.09\text{nm}]^\dagger$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ in der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{2911a\}$.

(a)



(b)

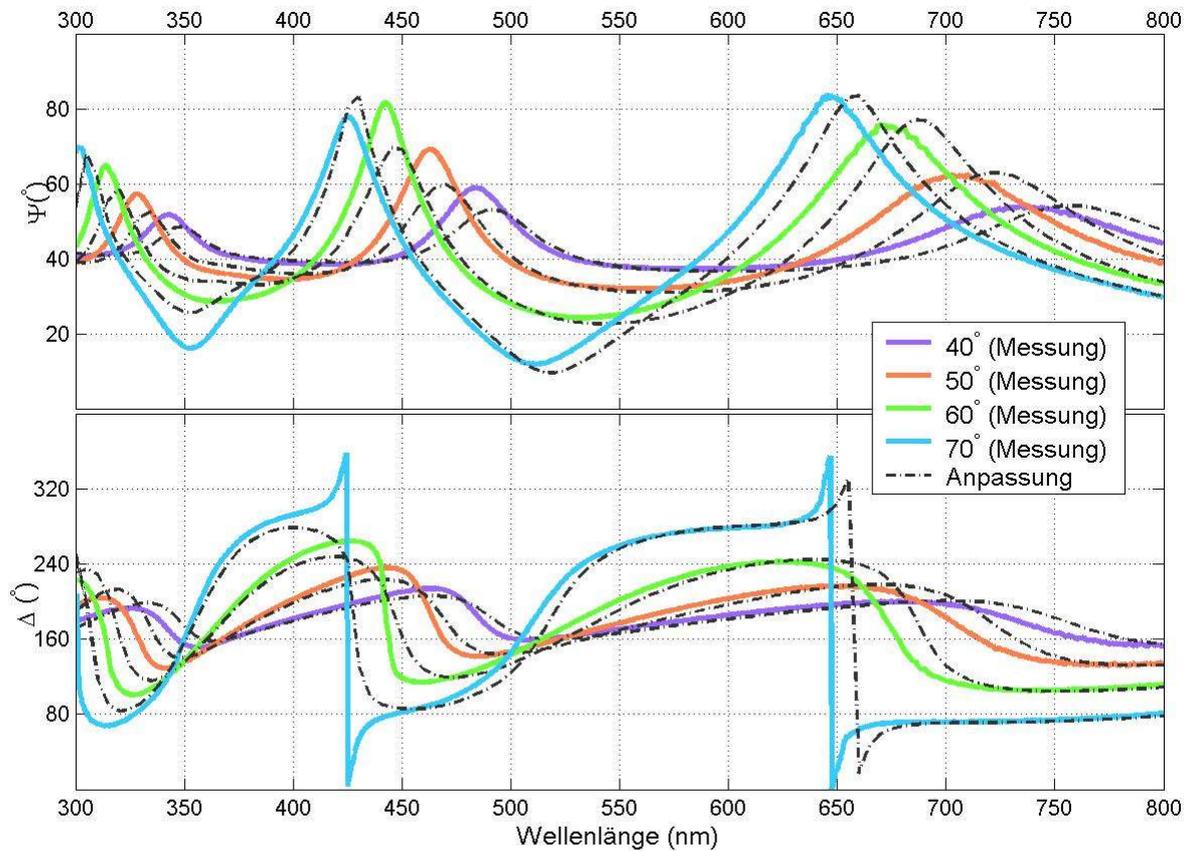


Abb. 4.5.4: (a) Anpassungsversuch $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[n_0 + 100N_1/\lambda & 0 & d_{\text{SiO}_2} \right]^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger \left[n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & \infty \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911a\}$ mit dem Einsatz der Ergebnisse $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) & k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) & 96.18\text{nm}]$ aus der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}^\dagger \left[n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & \infty \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2912e\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\emptyset = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Daraus ergibt sich $d_{\text{SiO}_2} = 118.91\text{nm}$. (b) Überprüfung der Ansätze $L_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}} = [n_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}}(\lambda) & 0 & 118.91\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ in der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger \left[n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & \infty \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911a\}$.

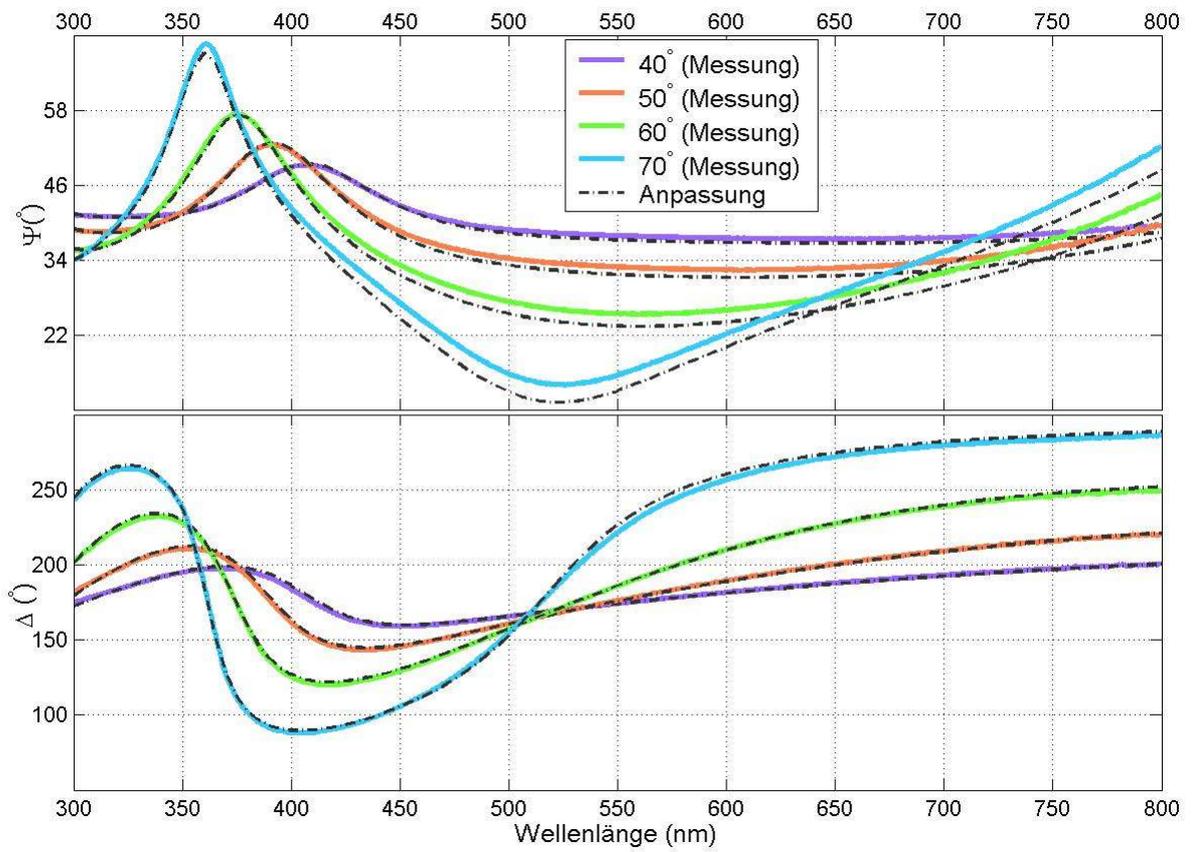
iv. Ansatz mit $\tilde{n}_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}}, \tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ und freier d_{SiO_2}

Es kann sein, dass sich n_{SiO_2} unter dem neuen Umfeld nicht mehr einfach von $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}$ beschreiben lässt. Der Cauchy-Ansatz könnte hier sinnvoller sein. Wie im Versuch iii (Abb. 4.5.3) bleibt $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ festgelegt. Angepasst werden die Cauchy-Parameter N_0, N_1 und d_{SiO_2} in $L_{\text{SiO}_2} = [N_0 + 100N_1/\lambda & 0 & d_{\text{SiO}_2}]$ (Abb. 4.5.4). Die Schichtdicke, 118.91nm , hat sich nicht wesentlich geändert. Ebenso gilt $n_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}}(\lambda) = 1.451 + 1660/\lambda$ und die Anpassungsfehler im Vergleich zum vorherstehenden Versuch. Nachher werden die Angemessenheit der Einsetzung der $L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}$ und $L_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}} = [n_{\text{SiO}_2\text{Cauchy}}(\lambda) & 0 & 118.91\text{nm}]$ in die Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Vak}}^\dagger \left[n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & \infty \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911a\}$ überprüft. Die Übereinstimmung der Theorie hat sich nicht wesentlich verbessert. Daher stammt der 10%-Unterschied der Schichtdicke im Versuch iii nicht wirklich von der falschen Annahme über die SiO_2 -Schicht.

v. Ansatz mit $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}, \tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]}$ und freien d_{SiO_2} und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$

Der Anpassungsversuch v. wird wie iii. (Abb. 4.5.3) durchgeführt, ausser dass $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ auch freigelassen wird. Daher wird $L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) & k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) & d_{\text{Al}_2\text{O}_3}]$ eingesetzt mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) = f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]}(\lambda), 1, 0.213)$. $n_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda)$ und $k_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda)$ bleiben gleich. Angepasst werden sowohl d_{SiO_2} als auch $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ (Tabelle 4.5.3). Während d_{SiO_2} von 118.09nm auf 104.33nm abnimmt, nimmt $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ von 96.18nm auf 108.33nm zu. Die Anpassung der Δ -Spektren an $\lambda = 650\text{nm}$ verbessert sich noch ein bisschen. Daher werden $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda) & k_{\text{SiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda) & 104.33\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) & k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal}85]/\text{Vak}}(\lambda) & 108.33\text{nm}]$ als Ansätze in der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger \left[n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) & \infty \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911e\}$ überprüft.

(a)



(b)

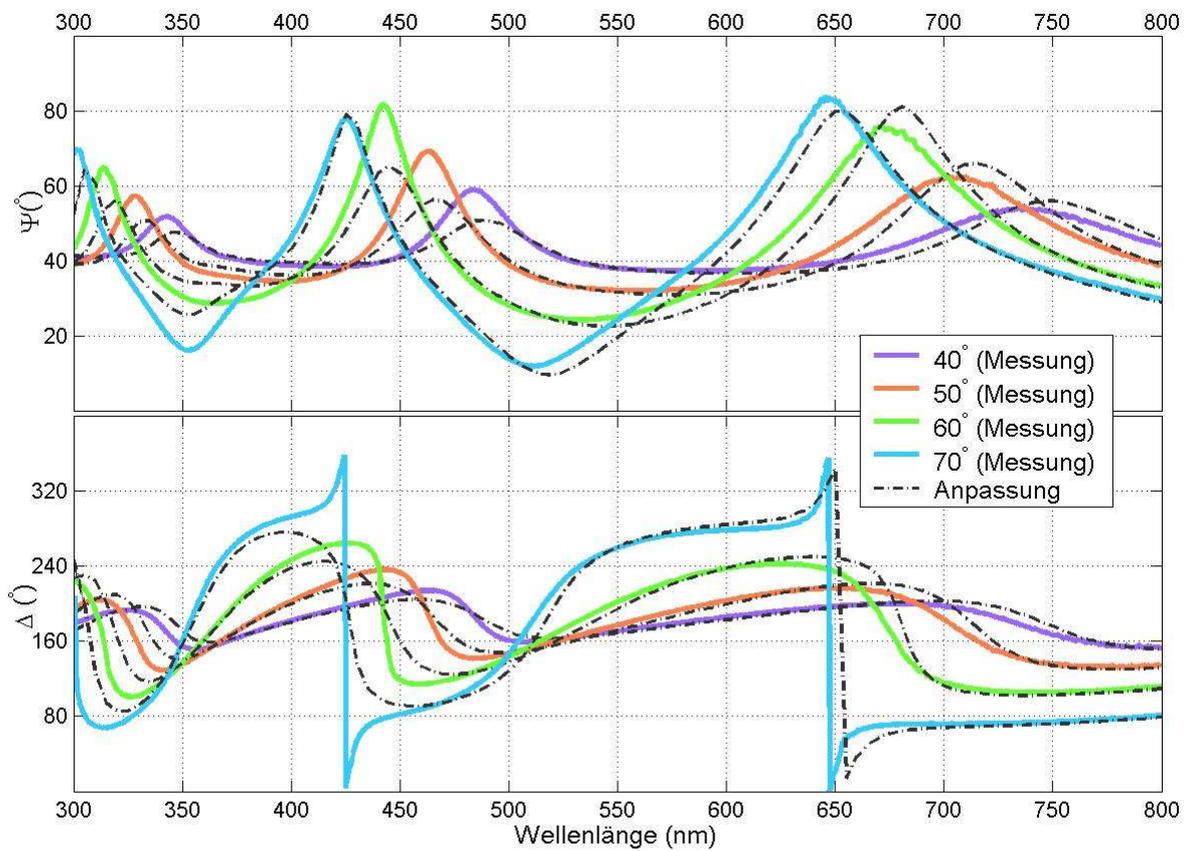
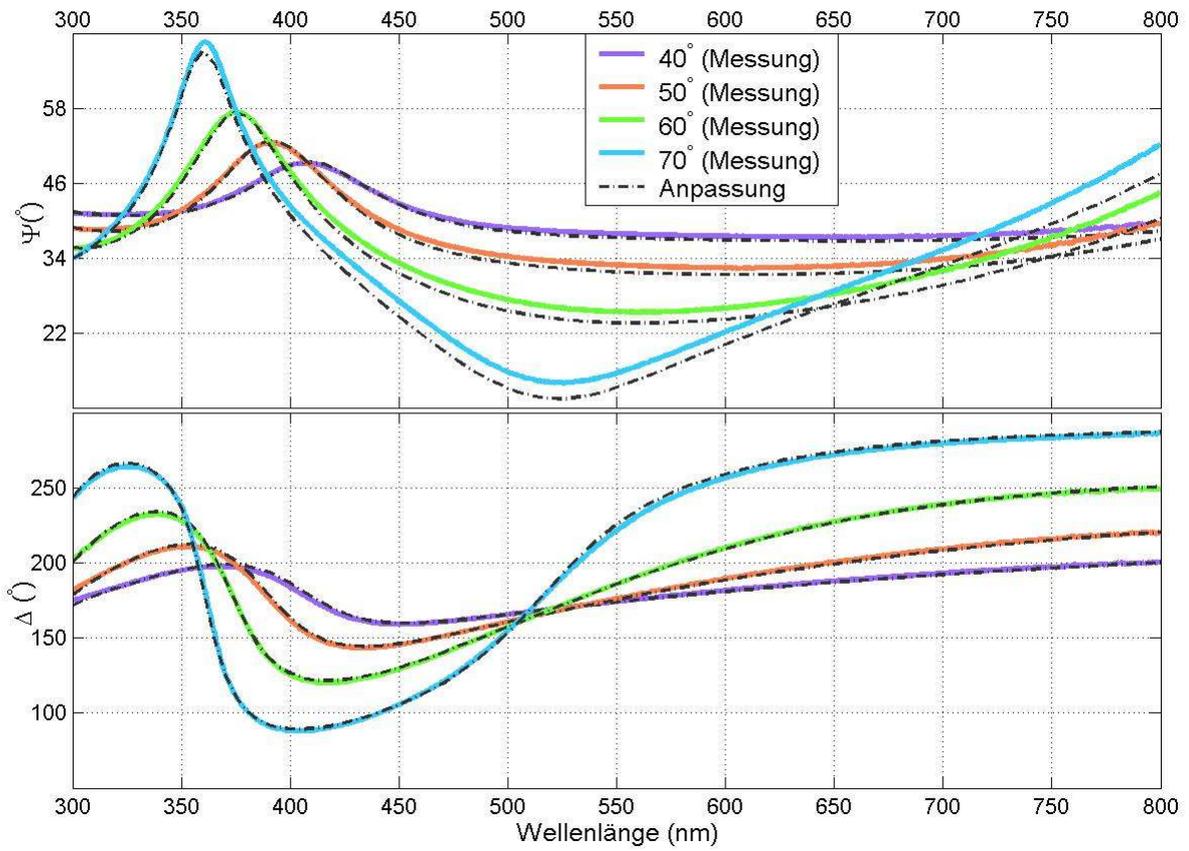


Abb. 4.5.5: (a) Anpassungsversuch $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911a\}$ mit dem Einsatz $L_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) d_{\text{SiO}_2}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) d_{\text{Al}_2\text{O}_3}]$ mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^2(\lambda) = f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}^2(\lambda), 1, 0.213)$, für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2912e\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\emptyset = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Daraus ergibt sich $d_{\text{SiO}_2} = 104.33\text{nm}$ und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 108.33\text{nm}$. (b) Überprüfung der Ansätze $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) 104.33\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) 108.33\text{nm}]$ mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^2(\lambda) = f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}^2(\lambda), 1, 0.239)$ in der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911e\}$.

vi. Ansatz mit $\tilde{n}_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$, $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}$ und freien d_{SiO_2} , $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ und r

Zuletzt wird der Anpassungsversuch vi. wie iii. (Abb. 4.5.5) durchgeführt, ausser dass r auch mitangepasst wird. Daher wird $L_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) d_{\text{SiO}_2}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) d_{\text{Al}_2\text{O}_3}]$ mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^2(\lambda) = f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}^2(\lambda), 1, r)$ in der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911a\}$ eingesetzt. Gesucht werden r , d_{SiO_2} und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ (Tabelle 4.5.3). d_{SiO_2} und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ korrigieren sich auf 106.42nm und 108.88nm . r gelangt auf 0.239 . Daher werden $L_{\text{SiO}_2} = [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) 106.42\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3} = [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) 108.88\text{nm}]$ als Ansätze in der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{2911e\}$ überprüft.

(a)



(b)

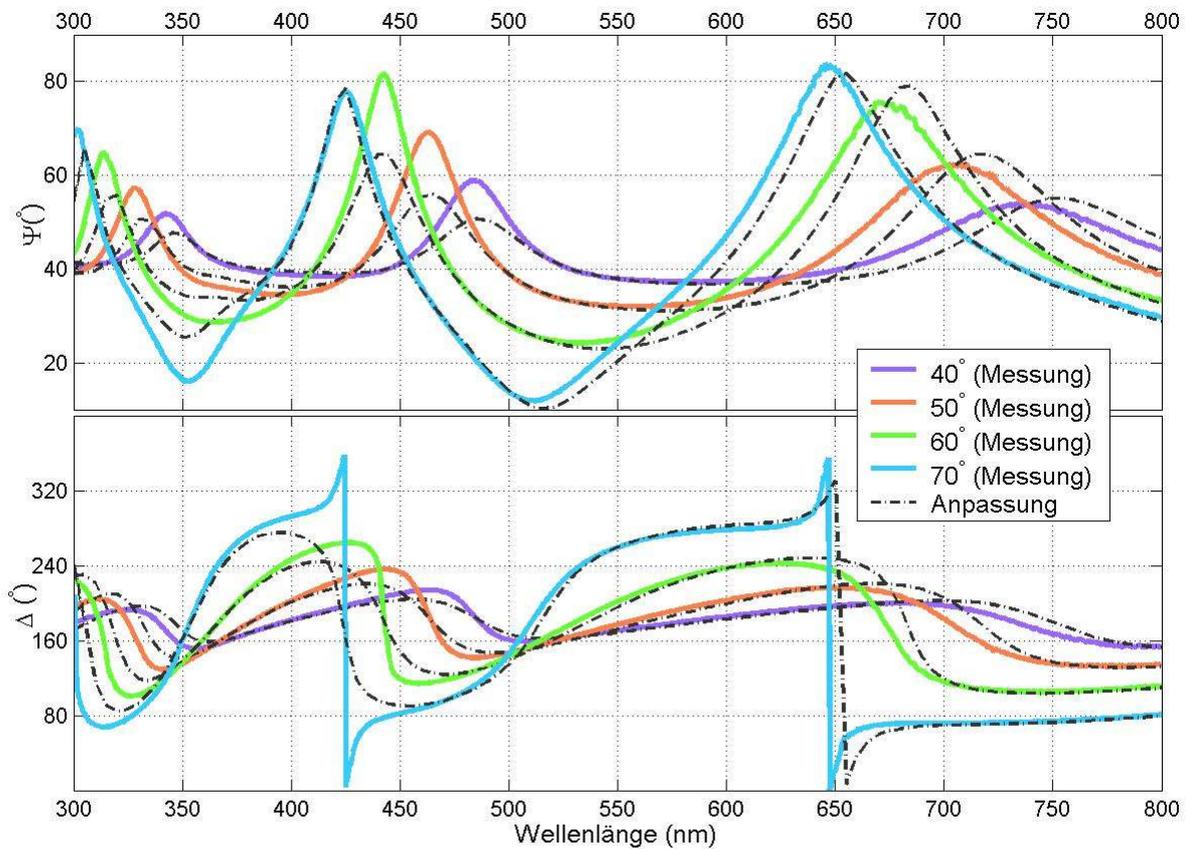


Abb. 4.5.6: (a) Anpassungsversuch $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset$ für $F_\emptyset^{\text{meas}}\{2911a\}$ mit dem Einsatz $L_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}=[n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) d_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}=[n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) d_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}$ mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda)=f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda),1,r)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \emptyset=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70$. Daraus ergibt sich $r=0.239$, $d_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}=106.42\text{nm}$, $d_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}=108.88\text{nm}$. (b) Überprüfung der Ansätze $L_{\text{SiO}_2}=[n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) 106.42\text{nm}]$ und $L_{\text{Al}_2\text{O}_3}=[n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) 108.88\text{nm}]$ mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda)=f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda),1,0.239)$ in der Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger L_{\text{SiO}_2}^\dagger L_{\text{Al}_2\text{O}_3}^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset$ für $F_\emptyset^{\text{meas}}\{2911e\}$.

Versuch	Schicht	Methode	Dicke (nm)	Volumenanteil der Leerräume (r); Cauchy-Parameter (N_0, N_I)	LSQ	
					2-schichtsystem {2911a}	4-schichtsystem {2911e}
i	SiO ₂	[Pal85]	108.53		6.665	20.221
	Al ₂ O ₃	[Pal85]	83.46			
ii	SiO ₂	[Pal85]	108.53		6.46	14.796
	Al ₂ O ₃	[Bru35]	96.18	<i>r=0.213</i>		
iii	SiO ₂	[Pal85]	<i>118.09</i>		1.271	7.842
	Al ₂ O ₃	[Bru35]	96.18	r=0.213		
iv	SiO ₂	Cauchy	<i>118.91</i>	$N_0=1.451 N_I=16.6$	1.244	7.633
	Al ₂ O ₃	[Bru35]	96.18	r=0.213		
v	SiO ₂	[Pal85]	<i>104.33</i>		1.143	8.706
	Al ₂ O ₃	[Bru35]	<i>108.33</i>	r=0.213		
vi	SiO ₂	[Pal85]	<i>106.42</i>		1.080	9.518
	Al ₂ O ₃	[Bru35]	<i>108.88</i>	<i>r=0.239</i>		

Tabelle 4.5.3: Zusammenfassung der Anpassungsergebnisse für Probe {2911a} und {2911e}. Die Beträge der festgehaltenen Parameter sind in normaler Schriftart gedruckt, während die Beträge der angepassten Parameter in kursiver Schriftart gedruckt sind.

Somit ist die Verbesserung der Anpassung auf eine Grenze gestossen. Wenn man die LSQs von Versuchen iv und vi vergleicht, ersieht man dass, beim Versuch vi die Anpassungsverbesserung bezüglich des 2-Schichtmodells nur auf Kosten jener bezüglich des 4-Schichtmodells gelingt. Die sich aus den Anpassungen ergebenden Schichtdicken schwanken um 10nm. Erwähnenswert ist, dass die LSQ einer ellipsometrischen Anpassung allein kein endgültiges Urteil liefert, ob eine Anpassung richtig ist. Ein visuelles Urteil auf Basis einer dargestellten Übereinstimmung ist eher intuitiv aber wird häufig in der Praxis gefallen. Bei anwendungsbezogenen Filmen könnte eine erwünschte Eigenschaft wie Reflexion oder Transmission als das endgültige Kriterium überprüft werden. Dementsprechend könnte eine obere Schranke gefordert werden, die die

Abweichung zwischen Theorie und Messung nicht überschreitet. Auf den ersten Blick ist die Anpassungsabweichung des 4-Schichtsystems höher als diejenige des 2-Schichtsystems. Offensichtlich muss die bereits beim 2-Schichtsystem auffallende Abweichung durch eine genauere Modellierung beseitigt werden, um komplexere Systeme aufzubauen.

Nicht im 2-Schichtsystem berücksichtigt worden ist der Aluminiumoxid-Siliziumoxid-Übergang, der bei den Einschichtsystemen nicht vorkommt. Es wurde vermutet, dass sich der Übergang durch eine zusätzliche Schicht modellieren liesse. Somit wird die Anpassung $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{SiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) \ d_{\text{SiO}_2}]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}(\lambda) \ d_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{2911a\}$ mit $\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}^2(\lambda) = f_{\text{brg}}(\tilde{n}_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda), 1, r)$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ versucht. Nicht nur alle drei Variablen der Übergangsschicht, $n(\lambda)$, $k(\lambda)$ und d , sondern auch d_{SiO_2} und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}$ müssen angepasst werden. Die Anzahl der zu modellierenden Parameter erweist sich bereits als ungünstig, um eine passende Formel effizient zu erproben. Eine Punkt-für-Punkt Anpassung musste durchgeführt werden. Anstatt d_{SiO_2} und $d_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]/\text{Vak}}$ als freie Parameter mit anzupassen, wurden sie, und somit auch d , jeweils festgelegt. Daraus entsteht eine lange Reihe von Kombinationen von zu überprüfenden Werten. Die ersten Ergebnisse sind zwar ermutigend. Jedoch kann eine abschliessende Beurteilung über die Dicke und Dispersionsrelation einer wohldefinierten Übergangsschicht nicht getroffen werden. Ihre exakten strukturellen und chemischen Eigenschaften muss noch mit anderen Techniken geklärt werden.

Im Gegensatz zum Aluminiumoxid-Siliziumoxid-Übergang bereitet der Aluminiumoxid-Siliziumoxid-Übergang keine wesentliche Schwierigkeit, wie die frühere Anpassungsergebnisse bei Einschichtsystemen gezeigt haben. Obwohl sich jede Aluminiumoxidschicht lediglich durch zwei Parameter, nämlich Schichtdicke und Volumenanteil der Leerräume, modellieren lässt, ist der Betrag des letzteren Parameters, und somit die Senkung der Dispersionsrelation bezüglich $n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}$, nicht vorhersagbar. Es wurde auch keine Korrelation zwischen den Parametern gefunden. Eine Beziehung zwischen der Dispersionsrelation und den Abscheidungsparametern wird noch nicht etabliert. Zahlreiche Parameter wurden früher von anderen Forschern untersucht. Beispielsweise berichten Cueff und seine Mitarbeiter [Cue95] von zunehmend porösen Schichten mit steigendem Prozessdruck und bestätigen die durch Leerräume getrennte säulenförmige Struktur [Tho77, Dir77, Tho86, Sro88, Tho89, Heu89, Win89]. Dies stimmt mit der Beobachtung an zerstäubten Aluminiumoxidschichten auf Metallsubstraten [Vuo89, Rot87] überein, dass die Schichtdicke mit zunehmendem Druck abnimmt.

Ausser Leerräumen könnten Argon- und Sauerstoffatome für die Senkung der Dispersionsrelation gegenüber derjenigen des kompakten Aluminiumoxides verantwortlich gemacht werden. Beispielsweise wurde Argon als eine übliche

Ursache der Verunreinigung in Aluminiumoxidschichten [Cue95] identifiziert. Andererseits führt eine Erhöhung des Prozessdruckes ab 1 Pa bei niedriger RF-Leistung zu einer Zunahme des Sauerstoffzuschusses [Cue95]. Je nach Abscheidungsbedingungen variiert das O- zu Al-Anteilverhältnis von 1.5 bis 1.83. Obwohl der Einbau von Leerräumen, Argon- und Sauerstoffzuschüsse, wegen ihrer konstanten Brechungsindizes, qualitativ zu gleichmässiger Senkung der Dispersionsrelation führen kann, ist das Ausmass unterschiedlich. Die jeweiligen quantitativen Beiträge und ihre Abhängigkeit von Abscheidungsparametern müssen zuerst etabliert werden.

Kapitel 5 Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Anpassung

Spektroskopische Invertierung durch Anpassung mit Dispersionsformeln funktioniert nur bei wohldefinierten Schichten. Selbst für die Dispersionsrelationen etablierter Schichten waren zu einer Zeit unbekannt. Neuartige Schichten müssen erst einmal Wellenlänge-für-Wellenlänge Charakterisierung unterzogen werden. Dennoch wird in der Literatur sehr wenig bis fast nichts darüber berichtet. Auch dann wurden die wesentlichen Implementierungsbegriffe und Arbeitsvorgänge, die die Invertierungsergebnisse stark beeinflussen, vor allem die Automatisierung, nicht behandelt. Automatisierung wurde beispielsweise heuristisch verwendet [Bos96, Bos98], aber ihre Gültigkeit wurde nicht nachgeprüft. Das vorliegende Kapitel wird die ungewöhnliche Problematik anhand des kommerziellen Programms *Spectraray* ans Tageslicht bringen.

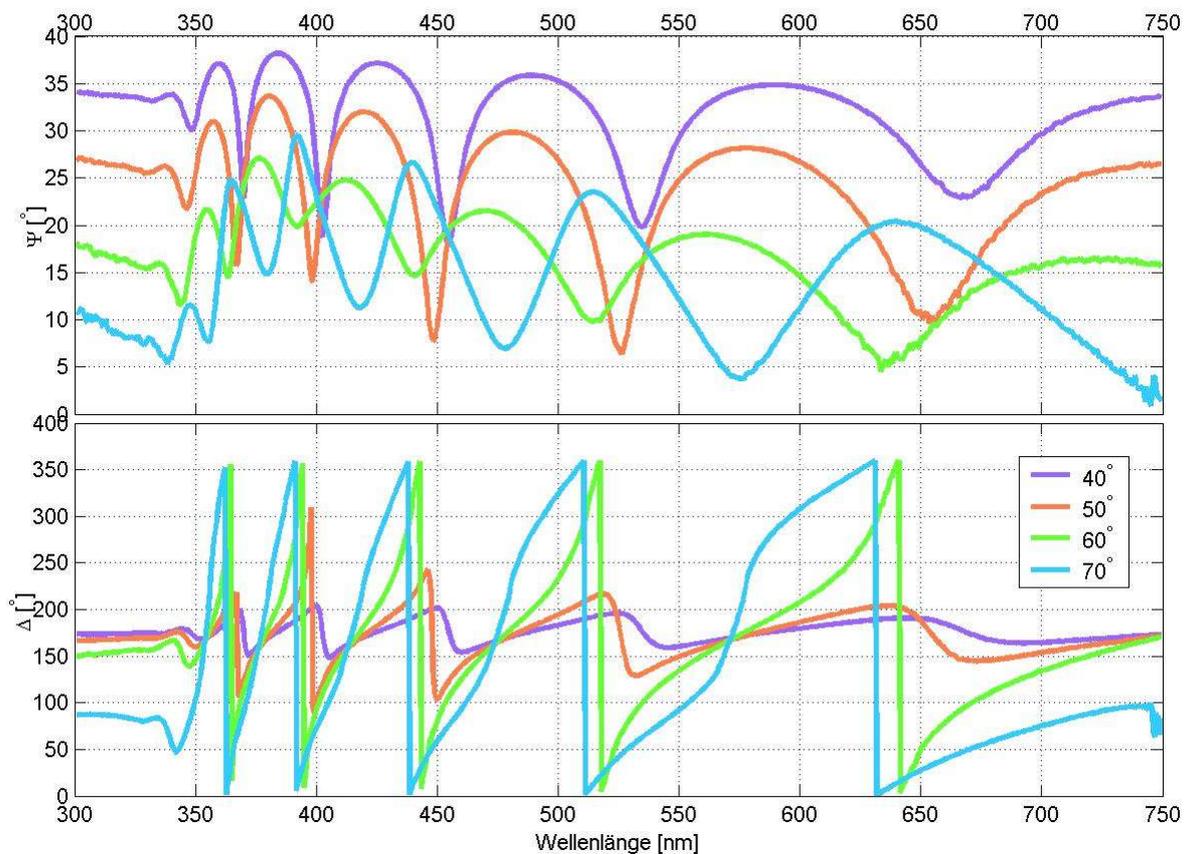
Das vom *Spectraray* angebotene Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassungsmodul arbeitet mit den folgenden Merkmalen. Die Suche nach der optimalsten Anpassung befolgt angeblich den Simplex-Algorithmus. Die Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Anpassung wird entweder in ansteigender oder absteigender Richtung automatisiert. Zum Starten gibt man die Anfangswerte der anzupassenden Variablen beim Messpunkt mit der kleinsten oder größten Wellenlänge ein. Zur Erläuterung werden wir mit dem fundamentalsten Modell $[[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Sub}}(\lambda) \ k_{\text{Sub}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger$ anfangen, wobei lediglich eine unbekannte Schicht zu charakterisieren ist. Zu diesem Ziel werden Einschichtsysteme {Luft | zu untersuchende Schicht | Si Substrat} hergestellt. Anhand Proben {2123c}, {2125a}, {2128c} und {2129b} des Schichtsystems {Luft | TiO_x | Si Substrat} werden die Anpassungsversuche erläutert. Mit drei Unbekannten, n , k und d , werden mindestens Messungen unter zwei Winkeln benötigt.

5.1 Spektroskopische Konsistenz der Schichtdicke

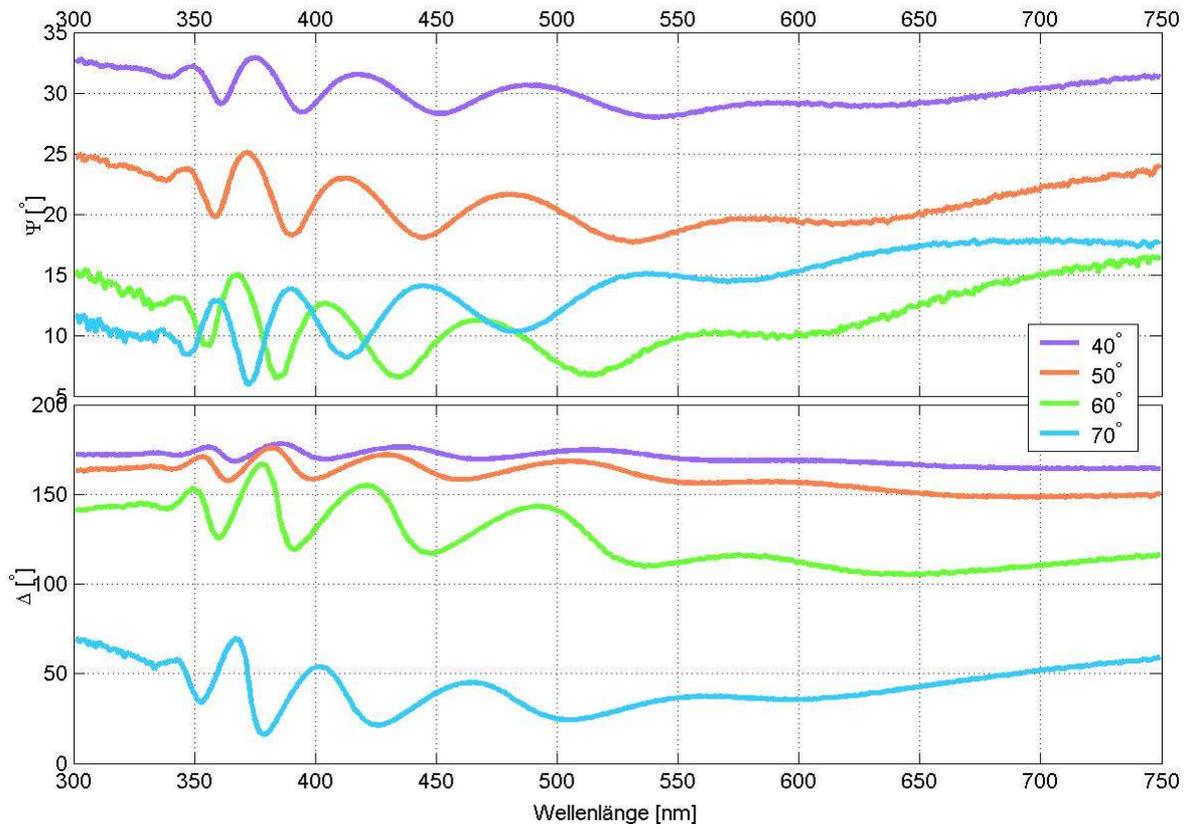
i. Anpassung für freie n , k , d

Zunächst wurde versucht, die d_{λ_i} 's als freie Parameter unabhängig für jede Wellenlänge zusammen mit n_{λ_i} und k_{λ_i} anzupassen. Die mehrwinkligen Messungen $\Psi_{\theta}^{\text{meas}}$ und $\Delta_{\theta}^{\text{meas}}$ mit $\theta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, die in Abbildung 5.1.1a-d dargestellt sind, wurden durchgeführt. Die Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger [n_{\lambda_i} \ k_{\lambda_i} \ d_{\lambda_i}]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) \ \infty]^\dagger, \theta)$ wurde Wellenlänge-für-Wellenlänge von der Seite der höchsten Wellenlänge aus rückwärts durchgeführt. Rückwärtsanpassung wird bevorzugt, da die Hintergrundrauschen im höheren Wellenlängenbereich geringer sind, und dort n_{TiOx} erwartungsgemäss flacher ist aufgrund der weniger dichten Wellenstruktur der Messungen (Abb. 5.1.1a-d). Die entsprechenden Anpassungsergebnisse werden in Abbildungen 5.1.2a-d dargestellt.

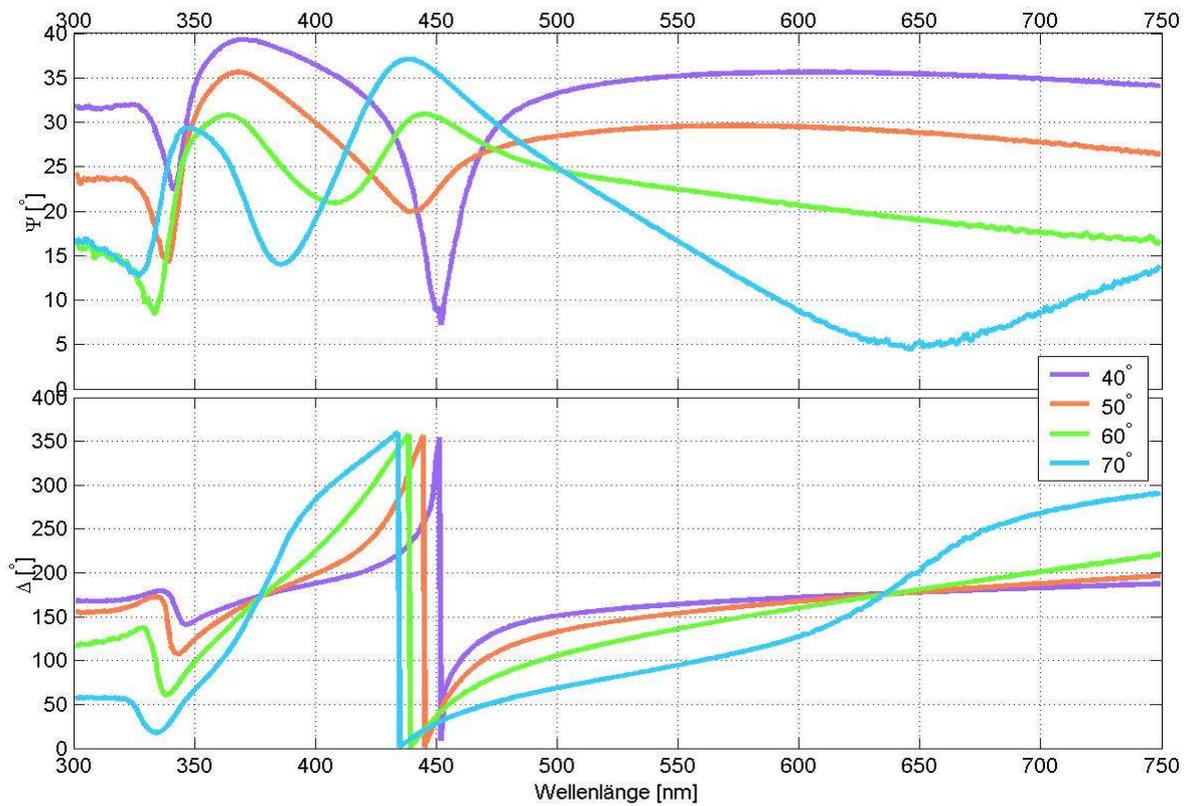
(a)



(b)



(c)



(d)

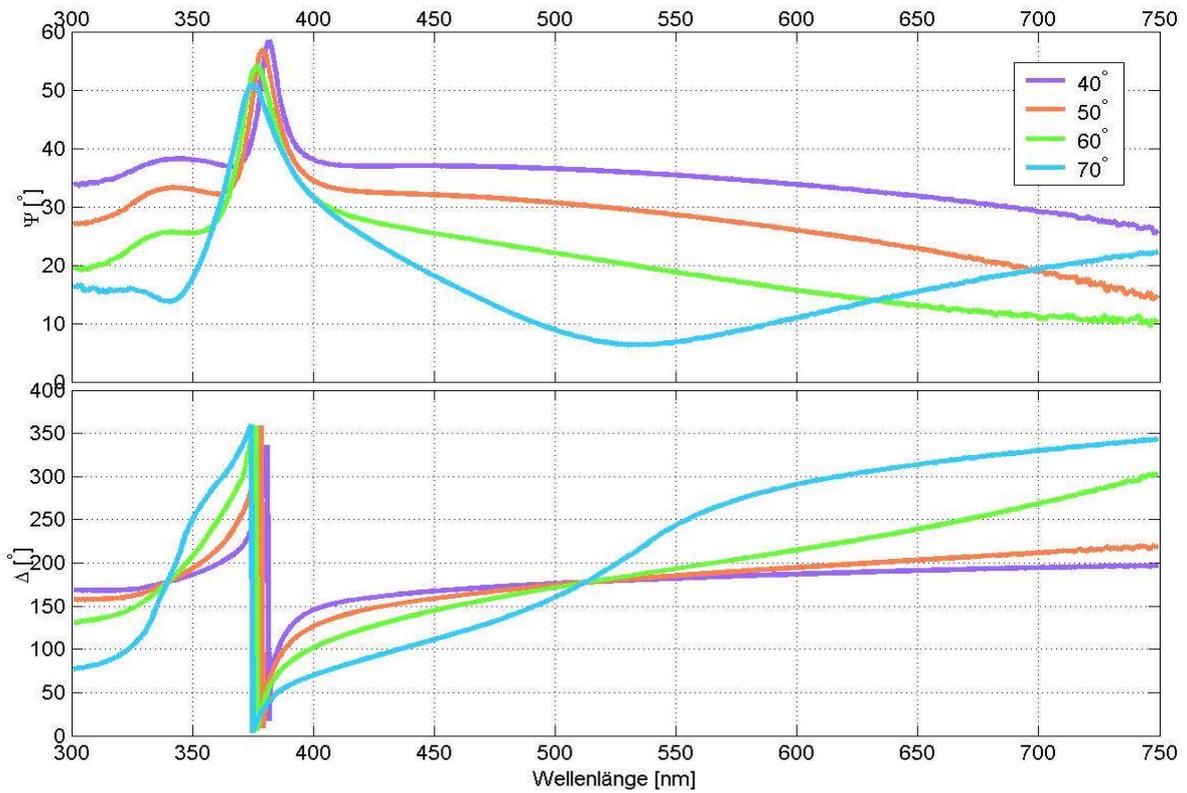
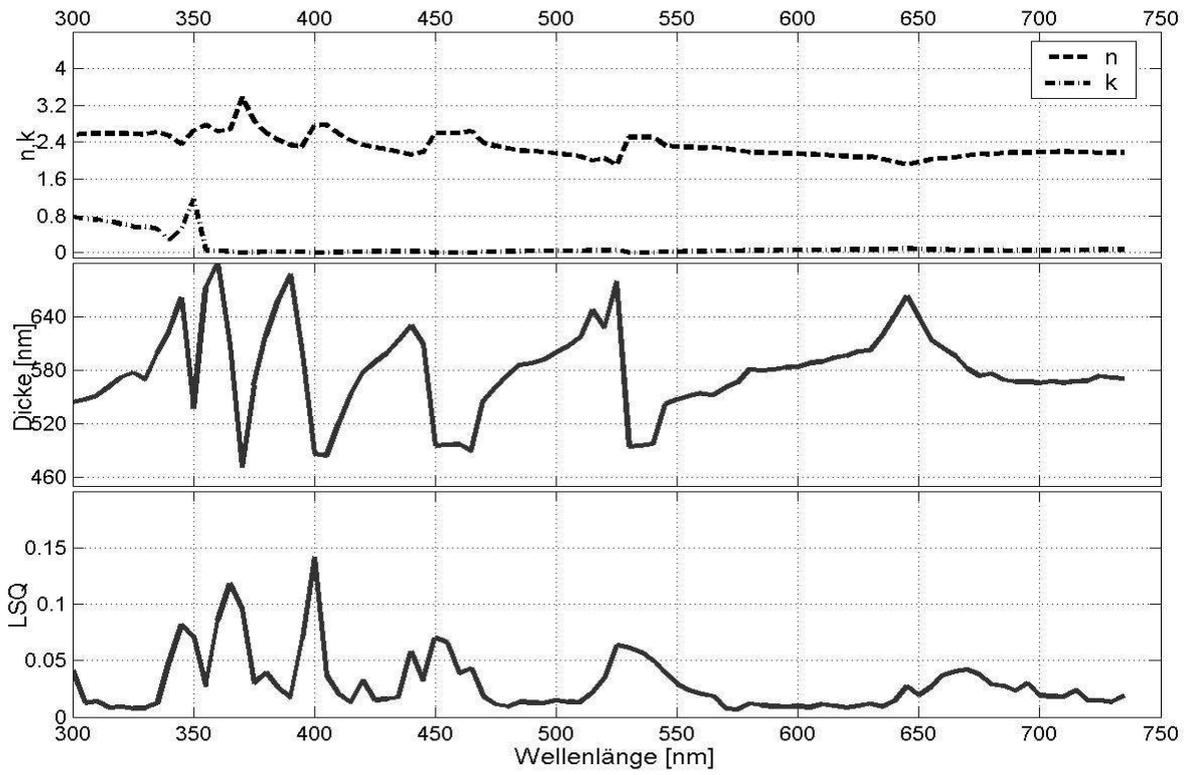
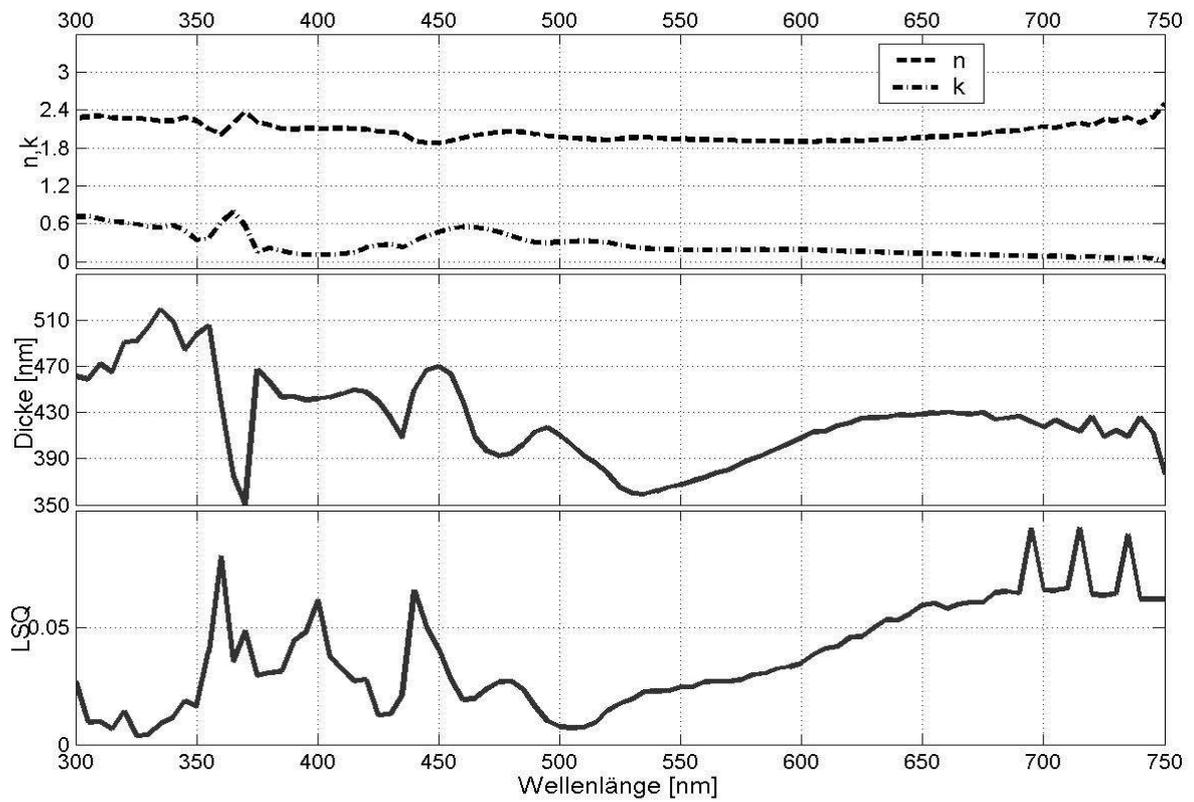


Abb. 5.1.1: Mehrwinklige spektroskopische ellipsometrische Messungen (a) $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2123c\}$, (b) $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2125a\}$, (c) $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2128c\}$ und (d) $F_{\vartheta}^{\text{meas}}\{2129b\}$, wobei F jeweils für Ψ bzw. Δ steht und $\vartheta=40^{\circ}, 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$.

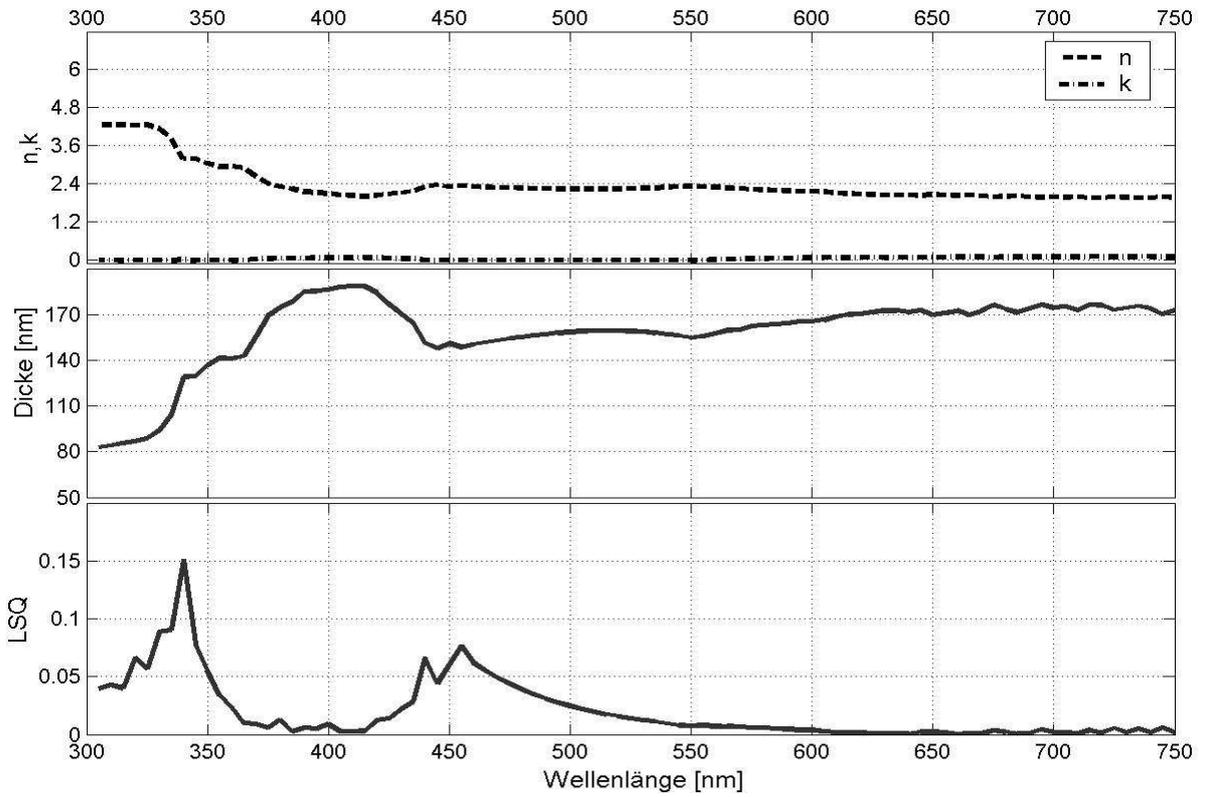
(a)



(b)



(c)



(d)

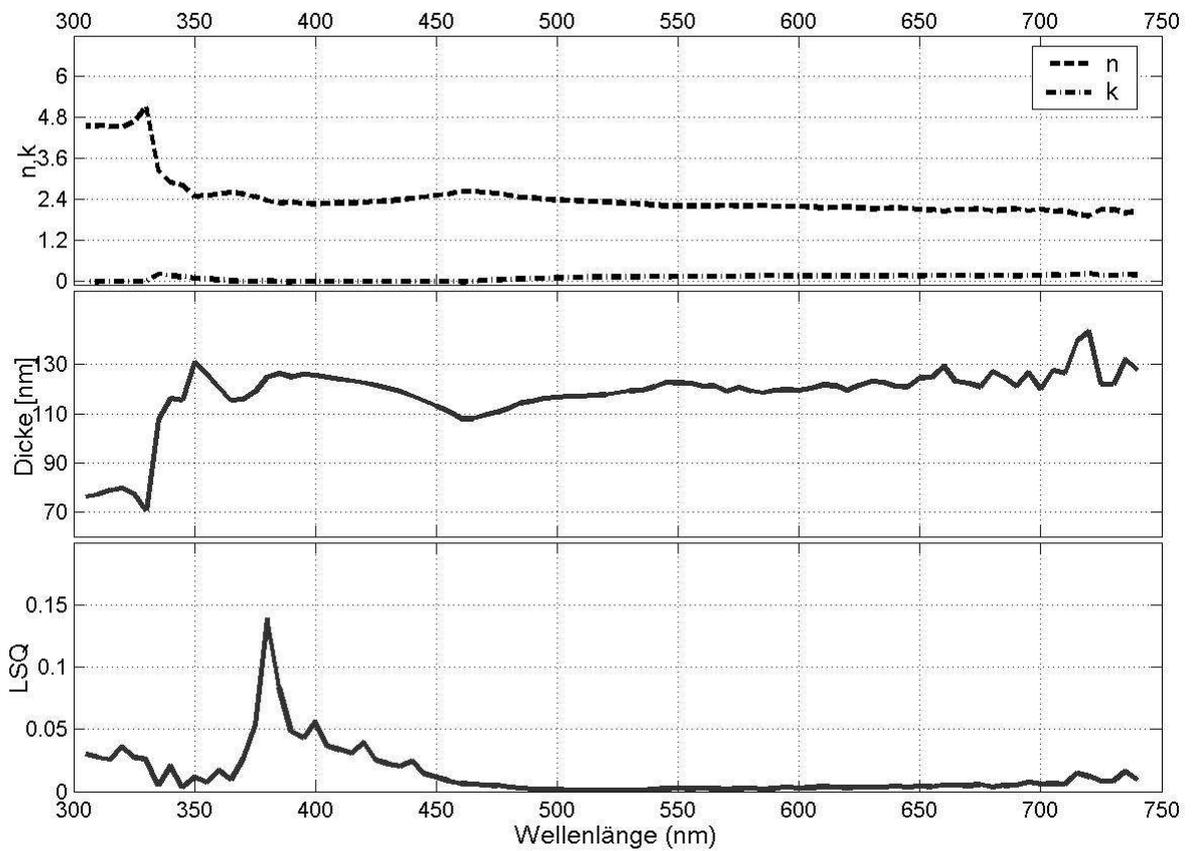


Abb. 5.1.2: Ergebnisse der Wellenlänge-für-Wellenlänge Rückwärtsanpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\lambda_i} & k_{\lambda_i} & d \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) & k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right)^\dagger, \varnothing$ für die in Abbildung 5.1.1a-d dargestellten Messungen (a) $F_\varnothing^{\text{meas}} \{2123c\}$, (b) $F_\varnothing^{\text{meas}} \{2125a\}$, (c) $F_\varnothing^{\text{meas}} \{2128c\}$ und (d) $F_\varnothing^{\text{meas}} \{2129b\}$, wobei F jeweils für Ψ bzw. Δ steht und $\varnothing=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$.

Die Anpassungsergebnisse für die zwei Proben in Abbildung 5.1.2a und 5.1.2b sind holperig. Plötzliche Sprünge kommen bei Wellenlängen vor, bei denen d sich erheblich verändert. Im Vergleich sind diejenigen in Abbildung 5.1.2c und 5.1.2d am Anfang (von der hohen Wellenlänge aus) der Spektren relativ stabil. Ein physikalisch sinnvolles Modell setzt voraus, dass d das ganze Spektrum hindurch konstant bleibt. Die spektralen Schwankungen und die Widersprüchlichkeit der Beträge von d sind typisch für die Anpassung mit freiem d . Um ein spektroskopisch konsistentes d zu erhalten, gibt es viele mögliche mathematische Verfahren. Ein einfacher Weg ist, d so zu bestimmen, dass die Standardabweichung

$$\sigma = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{j=1}^N (d(\lambda_j) - d)^2} \quad (5.1.1)$$

am geringsten ist. Dies geschieht gerade beim arithmetischen Durchschnitt

$$d = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{j=1}^N d(\lambda_j)} \quad (5.1.2),$$

wobei die Abweichung genau gleich Null ist. Ferner könnte die Abweichung durch spektrale Gewichtung angereichert werden, damit

$$\sigma = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{j=1}^N w(\lambda_j) (d(\lambda_j) - d)^2} \quad (5.1.3)$$

ein Minimum bei

$$d = \left(\sum_{j=1}^N w(\lambda_j) d(\lambda_j) \right) / \left(\sum_{j=1}^N w(\lambda_j) \right) \quad (5.1.4)$$

wird, da die Abbildungen 5.1.2a, c und d nahe legen, dass die Schwankungen von d mit LSQ verknüpft sind. Es könnte sein, dass sich die Abweichung von $d(\lambda_j)$ an jeder Wellenlänge durch den gewichteten Faktor $w(\lambda_j)=1/LSQ(\lambda_j)$ korrigieren lässt. Auf diese Weise wird die optimale d gegeben durch

$$d = \frac{\left(\sum_{j=1}^N d(\lambda_j) / \text{lsq}(\lambda_j) \right)}{\left(\sum_{j=1}^N \text{lsq}(\lambda_j) \right)} \quad (5.1.5)$$

Jedoch ist in den meisten Fällen die Beziehung von LSQ und d , wie in Abbildung 5.1.2b dargestellt, komplizierter. Somit lässt sich die Abweichung nicht durch einen solchen einfachen Einsatz korrigieren.

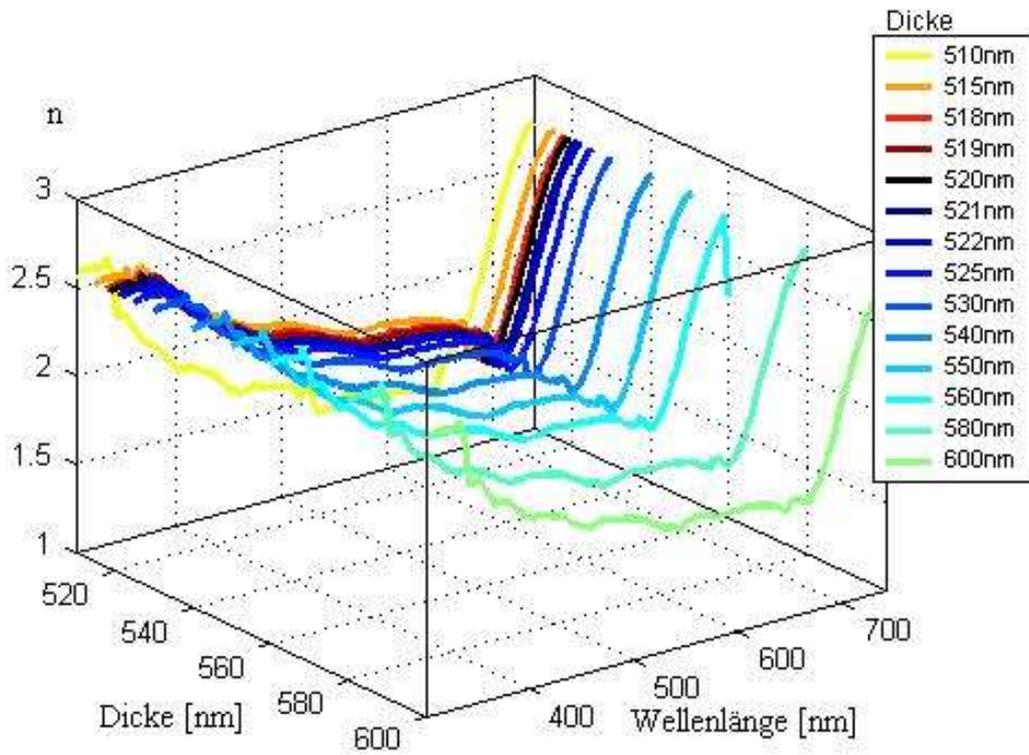
ii. Anpassung mit freien n und k sowie konstantem d

Da $d(\lambda)$ nur dann physikalisch sinnvoll ist, wenn sie spektral unveränderlich bleibt, ist es zweckmässiger, alle d_{λ_i} vor der Anpassung gleichzusetzen, nämlich $d_{\lambda_i} = d_{\lambda_j} = d \quad \forall i \neq j$. d wird jeweils einen Wert aus der Menge $\{d_1, d_2, \dots\}$ annehmen und bei einem spektroskopischen Anpassungsvorgang festgehalten. Bei jedem festgelegten $d_i \in \{d_1, d_2, \dots\}$ ergeben sich drei Spektren: $n_{d_i}(\lambda)$, $k_{d_i}(\lambda)$ und $LSQ_{d_i}(\lambda)$. Abbildung 5.1.3 zeigt die entsprechenden Ergebnisse der spektroskopischen Invertierung auf Basis der iterativen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F([\![1 \ 0 \ \infty]\!]^\dagger [n_{d_i, \lambda_i} \ k_{d_i, \lambda_i} \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{Titanoxid} \mid \text{Si Substrat}\}_{2123c}$, wobei F jeweils für Ψ bzw. Δ steht und $\emptyset = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. d nimmt jeweils einen Wert aus dem Bereich $510\text{nm} < d < 600\text{nm}$ an. Die den verschiedenen d_i angehörigen $LSQ_{d_i}(\lambda)$ werden gegenübergestellt, um die optimale $d = d^*$ zu bestimmen. Im Idealen Fall wird das Kriterium

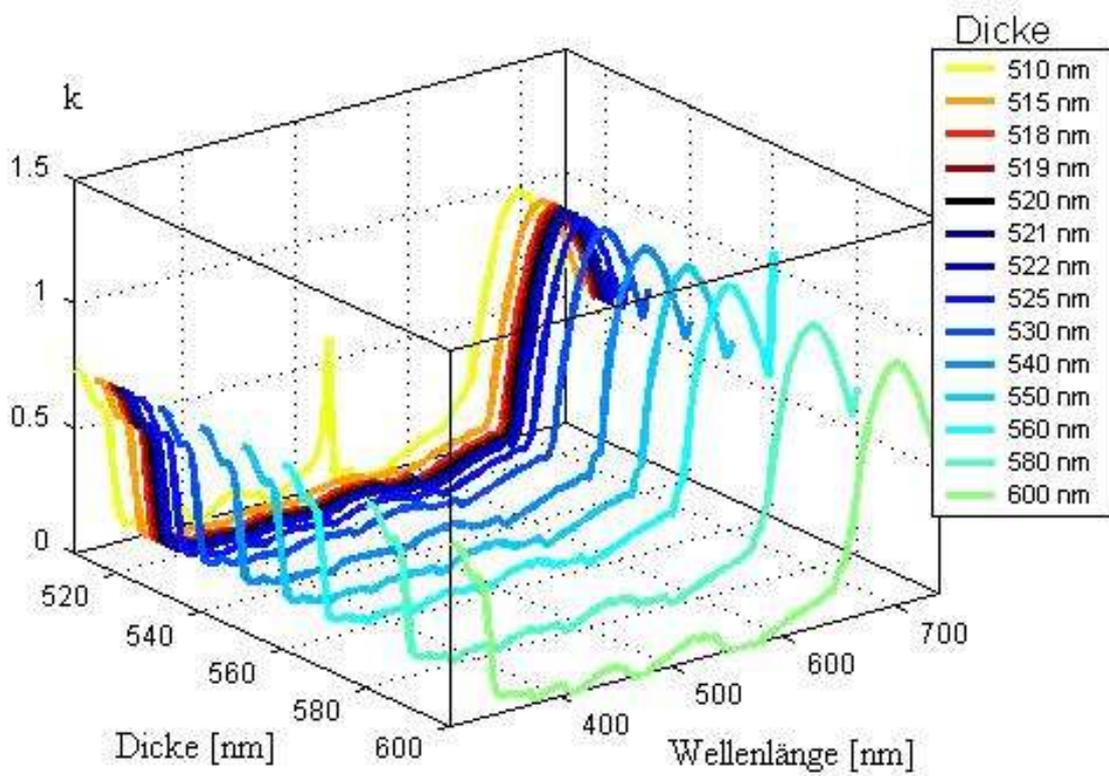
$$LSQ_{d^*}(\lambda) \leq LSQ_{d_j}(\lambda) \quad \forall j \ \& \ \lambda \quad (5.1.6)$$

bei $d = d^*$ erfüllt. In vorliegendem Beispiel befindet sich die optimale Schichtdicke bei $d = 520\text{nm}$.

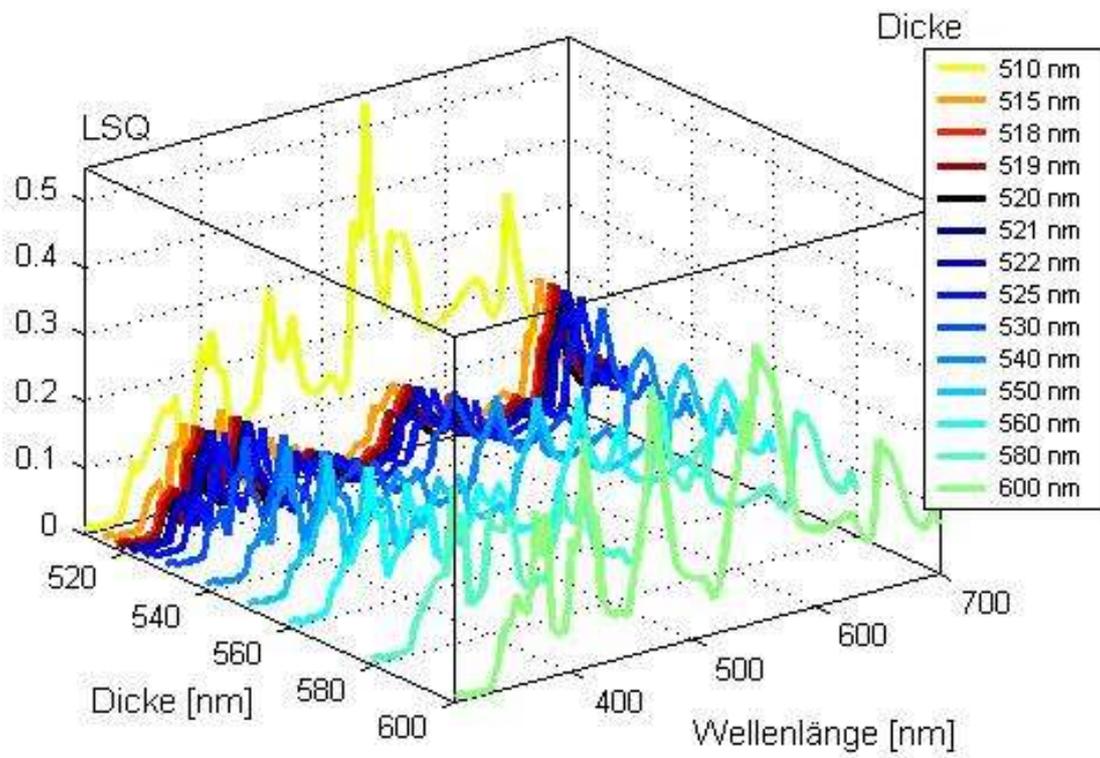
(a)



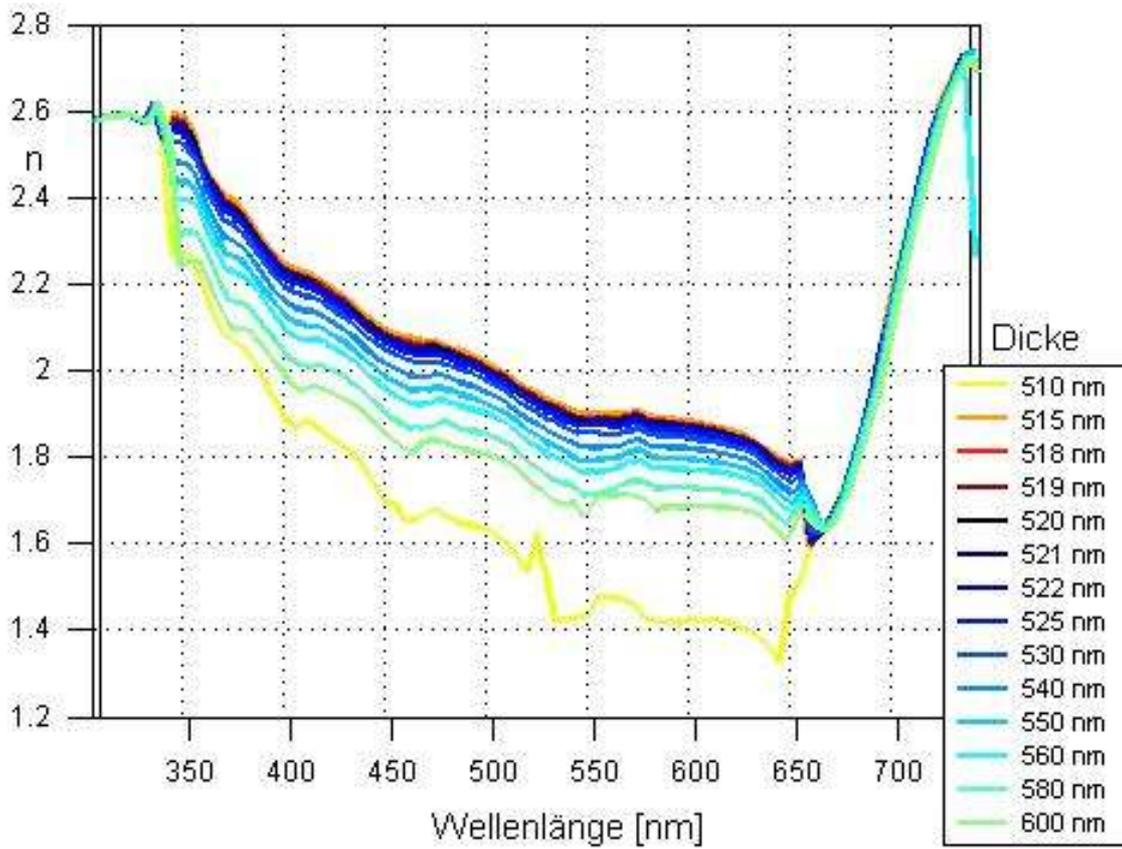
(b)



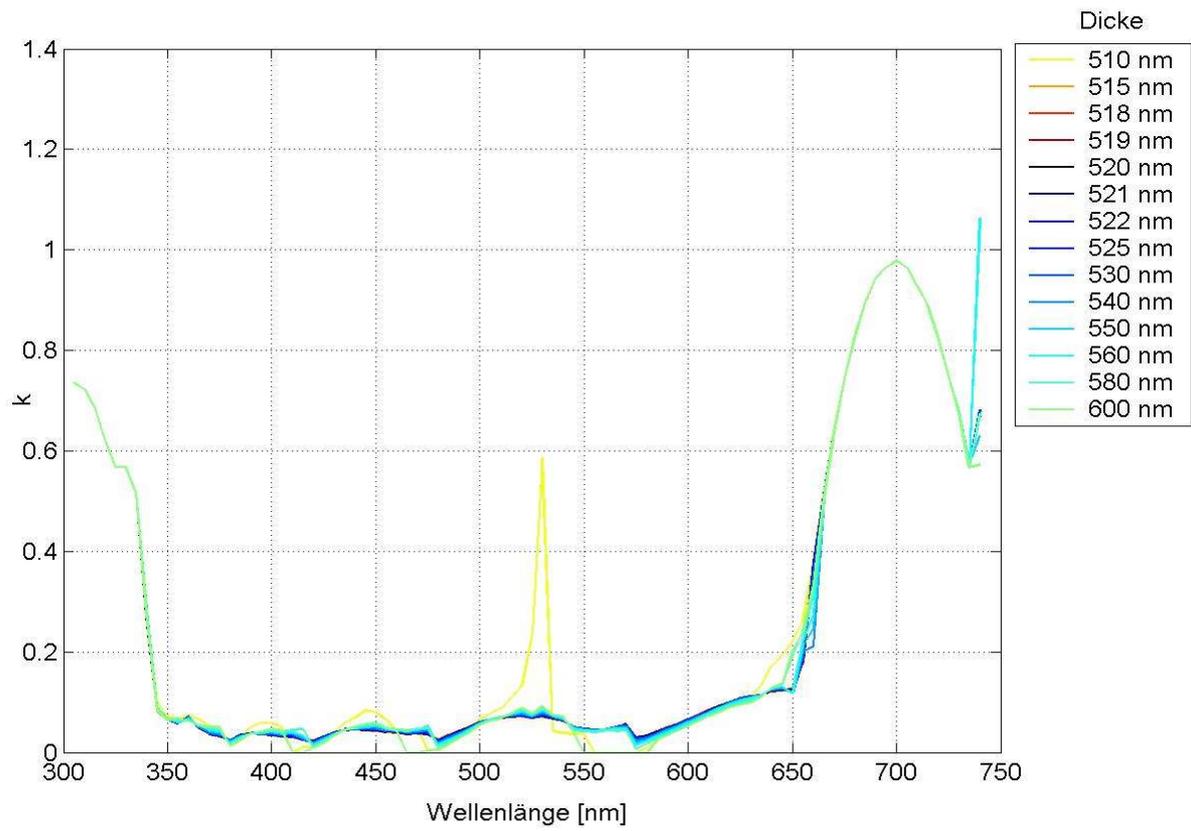
(c)



(d)



(e)



(f)

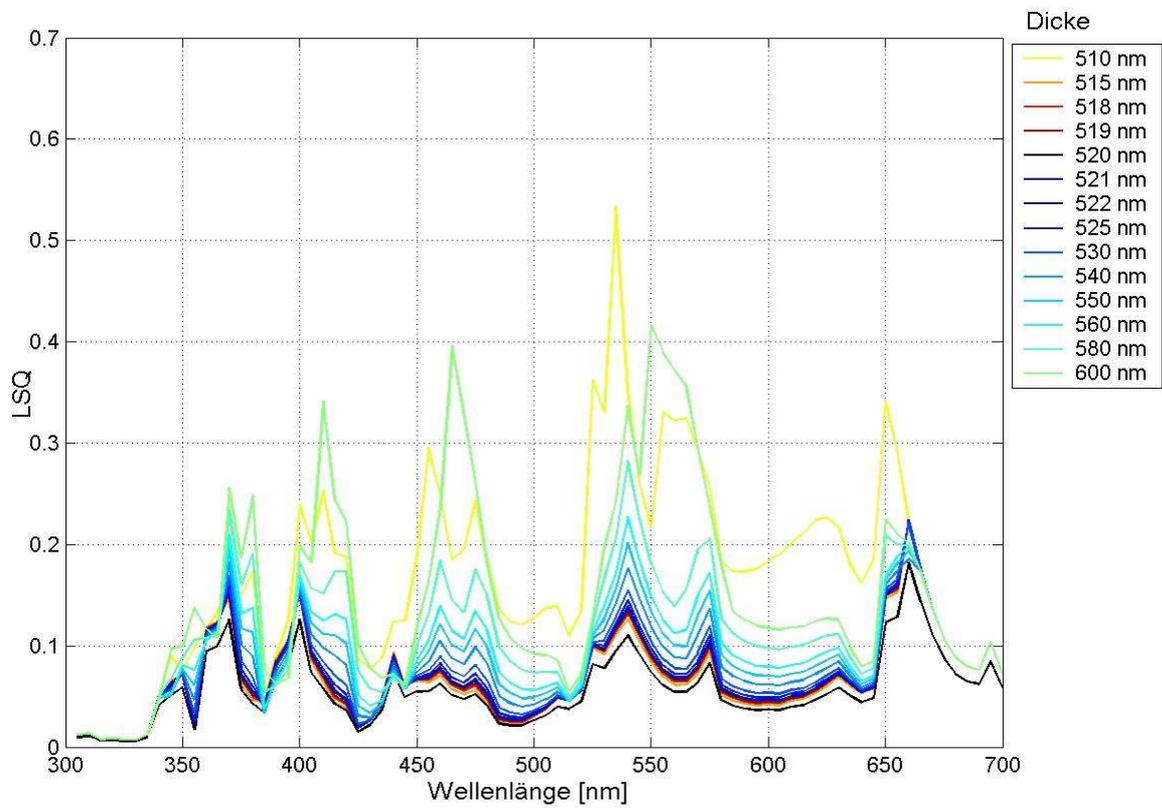


Abb. 5.1.3: Ergebnisse der spektroskopischen Rückwärtsinvertierung auf Basis der iterativen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\llbracket [1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\lambda_i} \ k_{\lambda_i} \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ \infty]^\dagger \rrbracket, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{\text{Luft} | \text{Titanoxid} | \text{Si Substrat}\}_{2123\text{c}}$, wobei F jeweils für Ψ bzw. Δ steht und $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. d nimmt jeweils einen Wert aus dem Bereich $510\text{nm} < d < 600\text{nm}$ in Schritten von 1nm bis 5nm an. Die optimale Schichtdicke befindet sich an $d=520\text{nm}$. (a), (b) und (c) zeigen die $n_{\text{di}}(\lambda)$, $k_{\text{di}}(\lambda)$ und $LSQ_{\text{di}}(\lambda)$.

In der Praxis kommen die Minima von LSQ an verschiedenen Wellenlängen nicht bei einer eindeutigen d^* vor. Stattdessen konkurrieren sich die Minima in verschiedenen Wellenlängenbereichen, d.h. $\exists d_*, d_*' \ \& \ \lambda_1, \lambda_2$ s.t.

$$LSQ_{d_*}(\lambda_i) \leq LSQ_{d_*'}(\lambda_i) \quad (5.1.7)$$

und

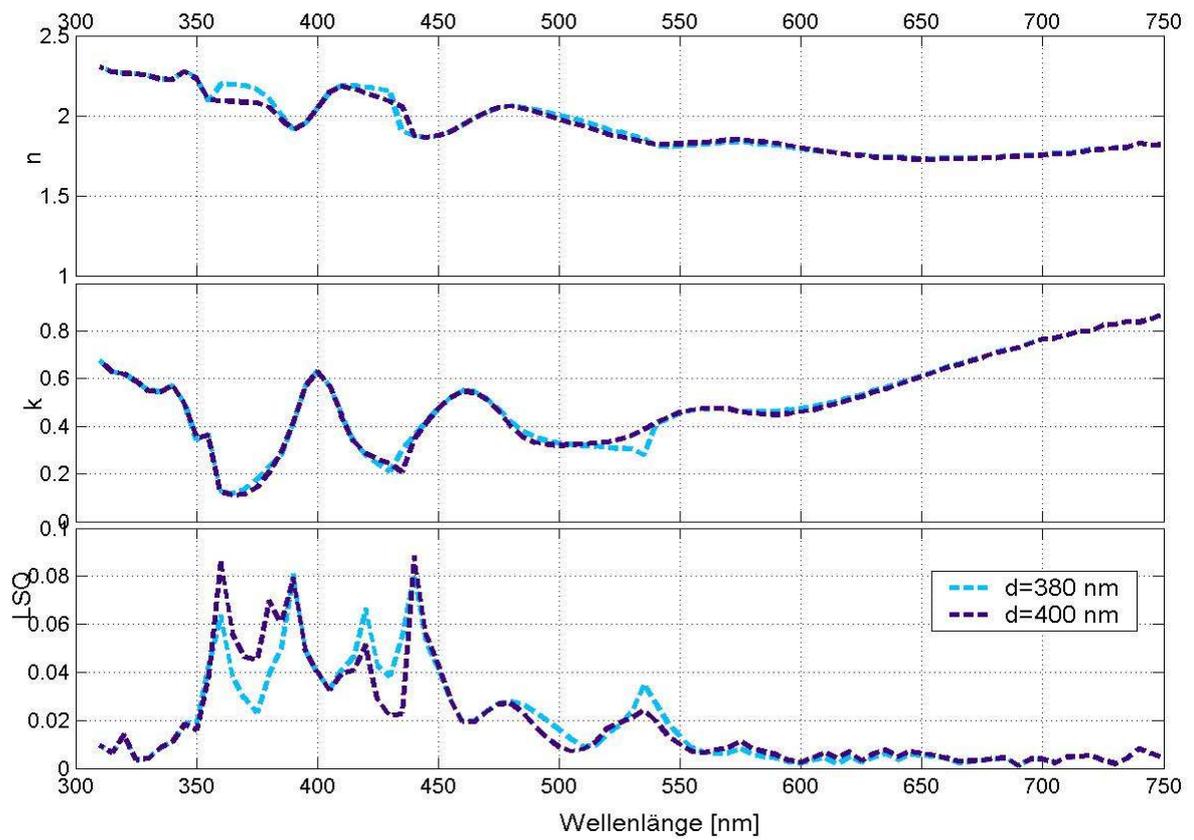
$$LSQ_{d_*}(\lambda_j) \geq LSQ_{d_*'}(\lambda_j) \quad (5.1.8).$$

Diese strenge Kriterien müssen entschärft werden, um die Ungewissheit von d einzubeziehen. Ein Anpassungsergebnis wird für positiv gehalten, wenn für eine vorgeschriebene Dickschranke δd , d^* gefunden werden kann, damit $\forall d_j < d_{\text{low}}, d_j > d_{\text{up}} \ \& \ d_{\text{low}} < d < d_{\text{up}}$, gilt

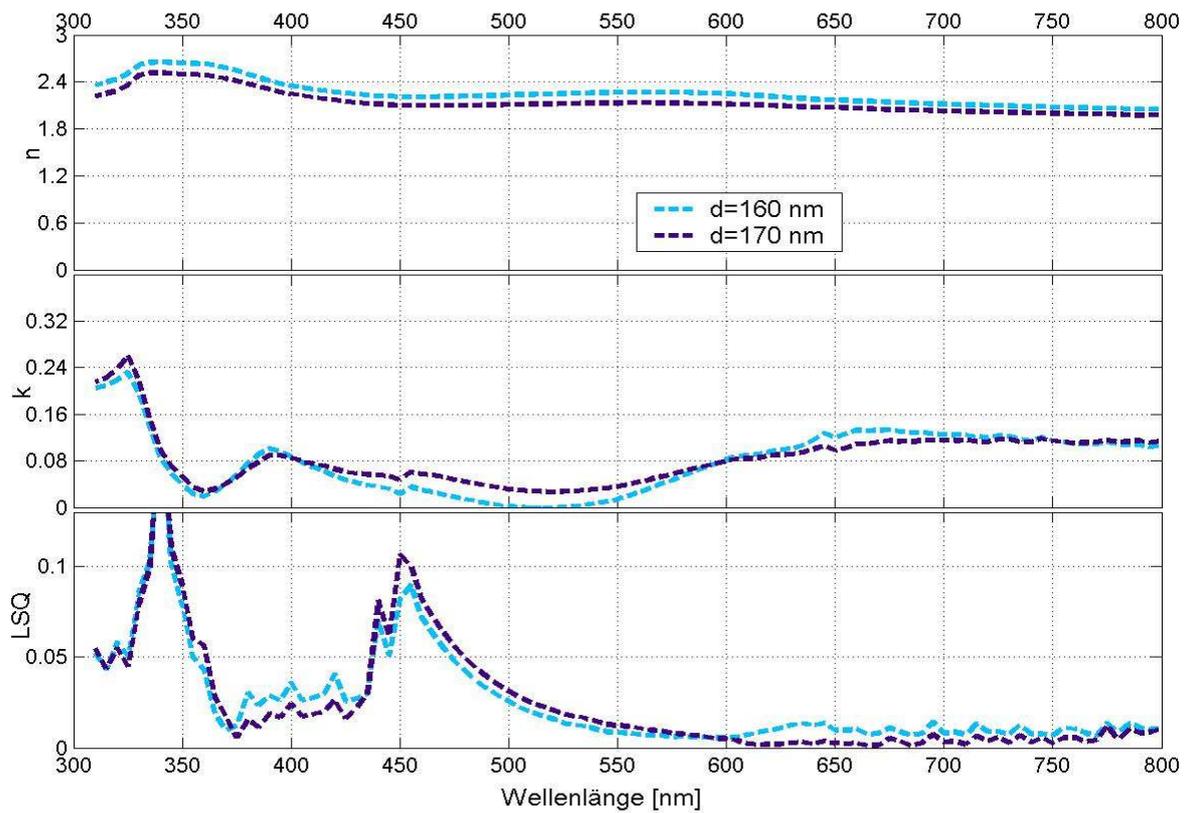
$$LSQ_d(\lambda) \leq LSQ_{d_j}(\lambda) \quad \forall \lambda \quad (5.1.9),$$

wobei $d_{\text{low}} = d^* - \delta d$ und $d_{\text{up}} = d^* + \delta d$. Dementsprechend ergeben sich die Untergrenze $n_{\text{low}}(\lambda)$ und $k_{\text{low}}(\lambda)$, bzw. die Obergrenze $n_{\text{up}}(\lambda)$ und $k_{\text{up}}(\lambda)$, durch die die Ergebnisse $n(\lambda)$ und $k(\lambda)$ als $n_{\text{low}}(\lambda) < n(\lambda) < n_{\text{up}}(\lambda)$, bzw. $k_{\text{low}}(\lambda) < k(\lambda) < k_{\text{up}}(\lambda)$ anzugeben sind mit der Angabe der Schwankung $\delta n(\lambda) = n_{\text{up}}(\lambda) - n_{\text{low}}(\lambda)$, bzw. $\delta k(\lambda) = k_{\text{up}}(\lambda) - k_{\text{low}}(\lambda)$.

(a)



(b)



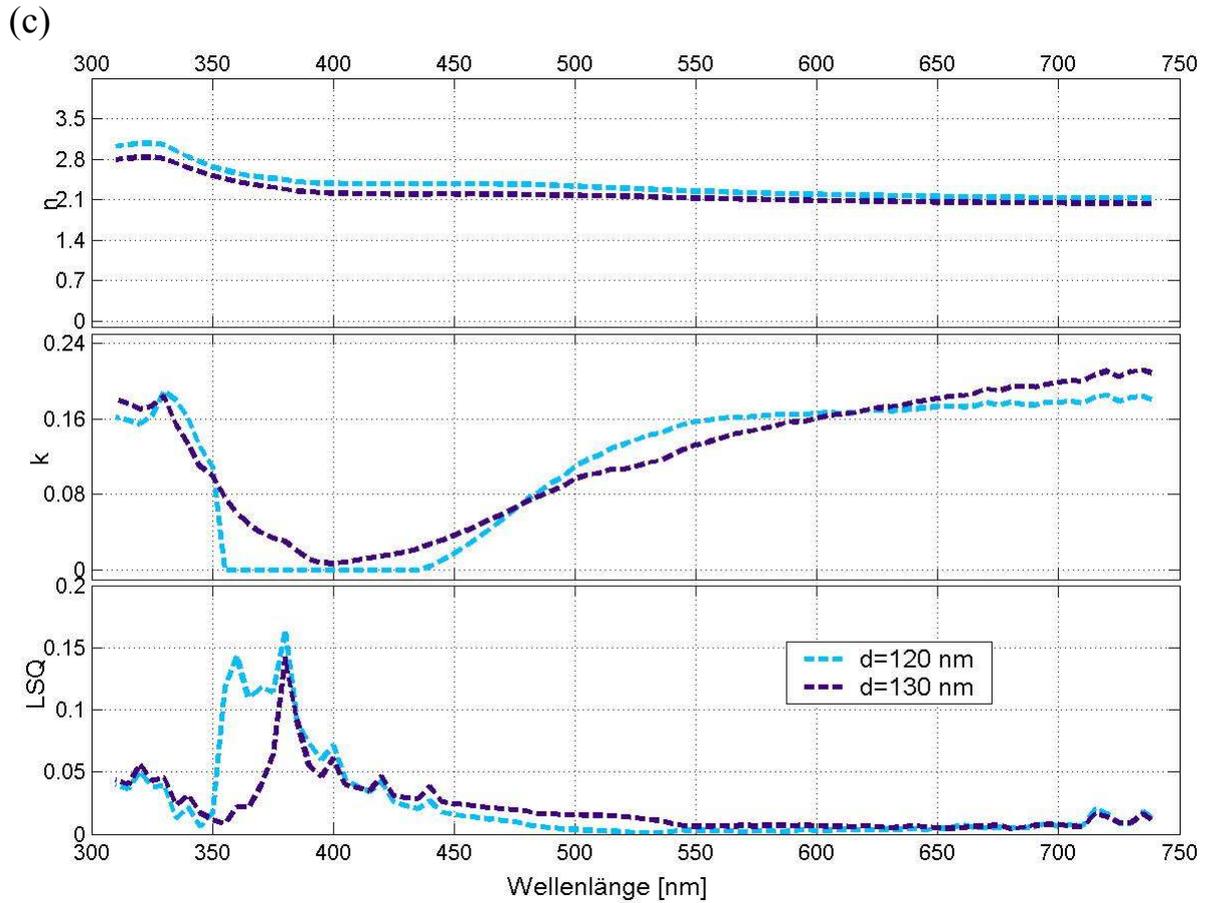


Abb. 5.1.4: Ergebnisse der spektroskopischen Rückwärtsinvertierung auf Basis der iterativen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\llbracket [1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\lambda_i} \ k_{\lambda_i} \ d]^\dagger [n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{\text{Luft}|\text{Titanoxid}|\text{Si Substrat}\}$ für die Proben (a) {2125a}, (b) {2128c} und (c) {2129b}, wobei $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Der untere Kasten zeigt die konkurrierenden Anpassungsfehler (LSQ_{λ_i}), während der mittlere und der obere Kasten die aus den Fehlergrenzlinien definierte Ober- und Untergrenze von n_{λ_i} und k_{λ_i} zeigen. Die entsprechende Ungenauigkeit der angepassten Schichtdicke beträgt (a) 380-400nm, (b) 160-170nm bzw. (c) 120-130nm.

5.2 Automatisierung der spektroskopischen Anpassung

Eine auf Iteration basierende Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Anpassung im wirklichen Sinn setzt voraus, dass die spektralen Messdaten bei jedem Wellenlängenmesspunkt monochromatisch betrachten werden sollten. Geeignete Anfangswerte für die anzupassenden Variablen müssen jeweils unabhängig von den anderen Wellenlängen gesucht werden, mit denen die Anpassung gestartet wird. Mit ein paar hundert bis eintausend Messpunkten ist das Verfahren allerdings zu aufwendig und praktisch unbrauchbar. Automatisierung ist notwendig, sowohl für kommerzielle als auch für selbstentwickelte Anpassungsprogramme.

i. Vorwärtsanpassung vs. Rückwärtsanpassung

Für Spectraray werden zwei Varianten angeboten. Als Input dienen lediglich die Anfangswerte der anzupassenden Variablen entweder beim Messpunkt der kleinsten oder größten Wellenlänge. Von da aus wird die Anpassung Wellenlänge-für-Wellenlänge mit ansteigender bzw. absteigender Wellenlänge vorgenommen. Was dazwischen genau geschieht, muss noch untersucht werden. Vor dem Start der automatisierten Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Anpassung werden einige Massnahmen gegen voraussichtliche Divergenz ergriffen. Zunächst handelt es sich um die Wahl zwischen Vorwärts- und Rückwärtsinvertierung. Die Entscheidung liegt darin, dass man den automatisierten Invertierungsvorgang von derjenigen Seite des Wellenlängenbereichs aus angeht, an der die Messung von weniger Rauschen beeinträchtigt wird, und an der die Steigung der gesuchten Dispersionsrelation flacher ist. Was das Messsignal betrifft, ist dies systembedingt auf der Seite der kleinen Wellenlängen intensiver. Gerade dort treten die größte Resonanzdichte der Materialien auf. Die meisten untersuchten Dispersionsrelationen sind hingegen auf der anderen Seite des Wellenlängenbereichs relativ flach. Beide Faktoren begünstigen die Rückwärtsinvertierung. Aus der Ansicht der Messspektren kann man jedoch nicht sofort ablesen, welcher Variante der Vorzug gegeben werden soll. Dies muss ausprobiert werden, auch weil Siliziumsubstrat selber eine Resonanz in der Nähe von 300nm hat.

Vor dem Start der Invertierung müssen manuell geeignete Startwerte lokal gesucht werden, damit die Iteration konvergierend bleibt. Mit drei anzupassenden Variablen besteht schon eine erhebliche Anzahl auszuprobierende Kombinationen der Startwerte im (n, k, d) -Raum. Statt mit einem Messpunkt zu probieren, wird ein sehr kleiner Ausschnitt an der Ober- bzw. Untergrenze betrachtet. Abbildung 5.2.1 zeigt die entsprechende Voranpassung anhand der Probe {Luft |Titanoxid| Si Substrat}_{2213b}. Die gesuchte Dispersionsrelation wird als konstant angenommen. Einerseits sollte die Anzahl

der Messpunkte genügend klein sein, weil die unbekannt Variablen im Prinzip nur für einen Messpunkt gelten. Andererseits sollte die Anzahl genügend groß sein, um den

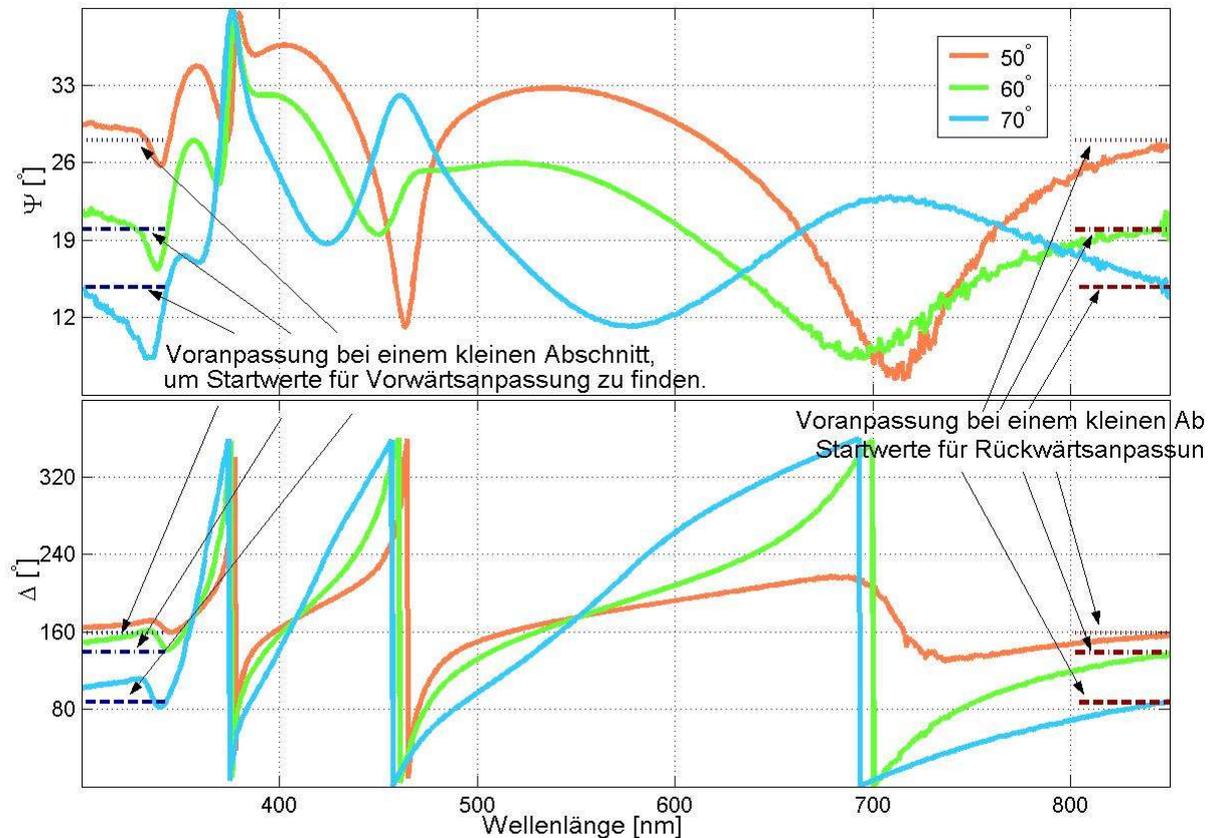


Abb. 5.2.1: Vorbereitungsphase für die automatisierte spektroskopische Wellenlänge-für-Wellenlänge Vorwärts- und Rückwärtsanpassung $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\lambda_i} \ k_{\lambda_i} \ d]^\dagger [n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{\text{Luft}|\text{Titanoxid}|\text{Si Substrat}\}_{2213b}$, wobei $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$.

Einfluss des Hintergrundrauschens auf einzelne Messpunkte zu kompensieren. Anfangswerte werden ausprobiert, bis eine zufriedenstellende Anpassung in den Grenzbereichen herrscht. Die Endwerte werden als Anfangswerte der entsprechenden Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung eingesetzt. Die Vorwärts- und Rückwärtsanpassung des Beispiels werden in Abbildung 5.2.2 gegenübergestellt. Diese eigentümliche Abhängigkeit der automatisierten Anpassung von der Ablauffolge der Messpunkte wird bei den meisten Proben beobachtet. In den meisten Fällen schneidet die Vorwärtsanpassung bei der *LSQ* wesentlich schlechter ab. Während es naheliegt, die Vorwärtsanpassung abzulehnen, ist man nicht in der Lage zu beurteilen, ob die Rückwärtsanpassung an und für sich akzeptabel ist. Allgemeine Kriterien wie

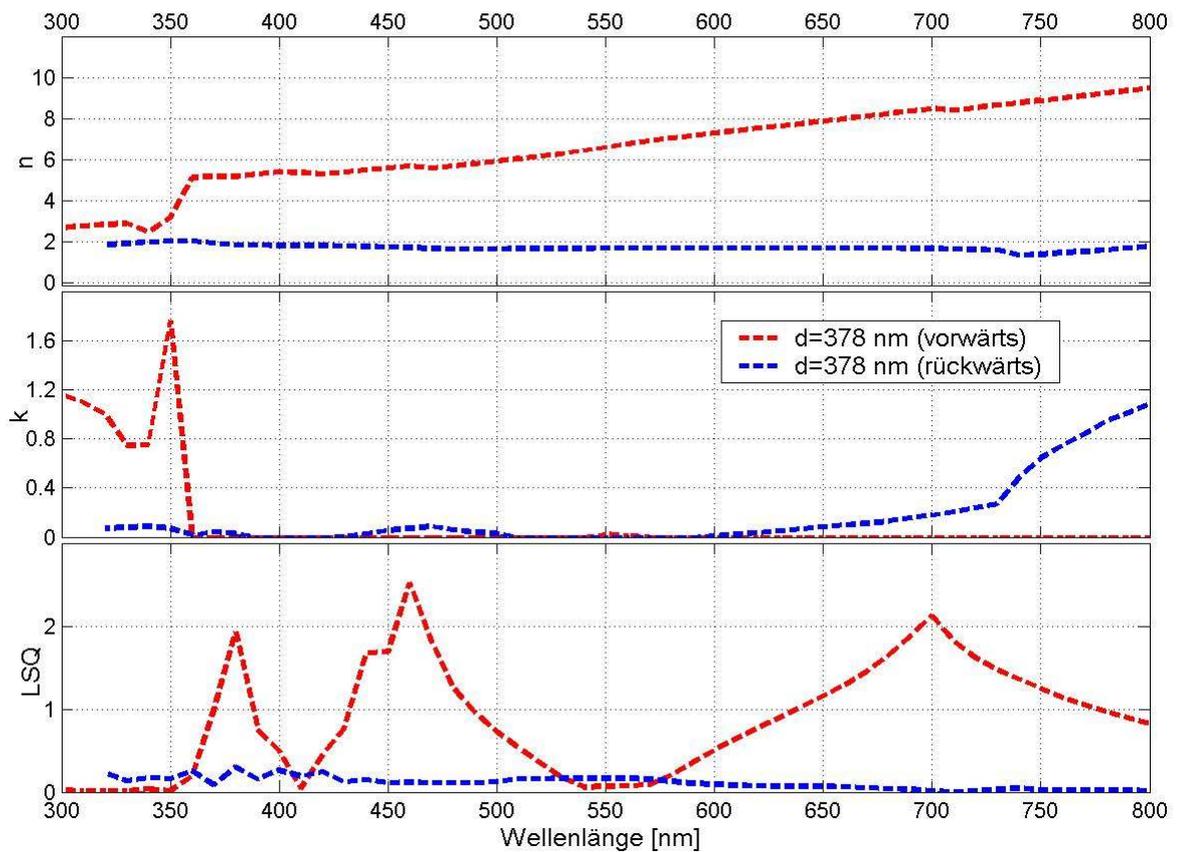


Abb. 5.2.2: Ergebnisse der automatisierten spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Vorwärts- bzw. Rückwärtsanpassung $F([\![1\ 0\ \infty]^{\dagger} [n_{\lambda_i} k_{\lambda_i} d]^{\dagger} [n_{Si/Pa/Si}(\lambda) k_{Si/Pa/Si}(\lambda) \infty]^{\dagger}]^{\dagger}, \vartheta)$ für $F_{\vartheta}^{meas}\{\text{Luft}|\text{Titanoxid}|\text{Si Substrat}\}_{2213b}$, wobei $\vartheta=40^{\circ}, 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$.

Stetigkeit und Differenzierbarkeit werden berücksichtigt, sind jedoch sind rein mathematischer Natur. Weiter müssen die resultierenden Ergebnisse zurück in die Anpassung eingesetzt werden, um sie mit der Messung zu vergleichen. Wie Abbildung 5.2.3 zeigt, ist die Vorwärtsanpassung nicht sinnvoll. Bei der Rückwärtsanpassung stimmt die Theorie nur teilweise mit der Messung überein. Die Bereiche mit schlechter Anpassung müssen herausgenommen und unabhängig von neuem angepasst werden. Eventuell müssen die Messspektren Abschnitt-für-Abschnitt angepasst werden. Dazu werden bei jedem Abschnitt verschiedene Anpassungsparameter verwendet. Zur Korrektur weiterer Abweichungen müssen wieder kleinere Spektrenteile ausgeschnitten werden. Schliesslich ist die Anpassung nicht mehr ein automatisiertes, sondern ein gemischtes Verfahren von Automatisierung und manueller Anpassung, wie dies häufig der Fall ist.

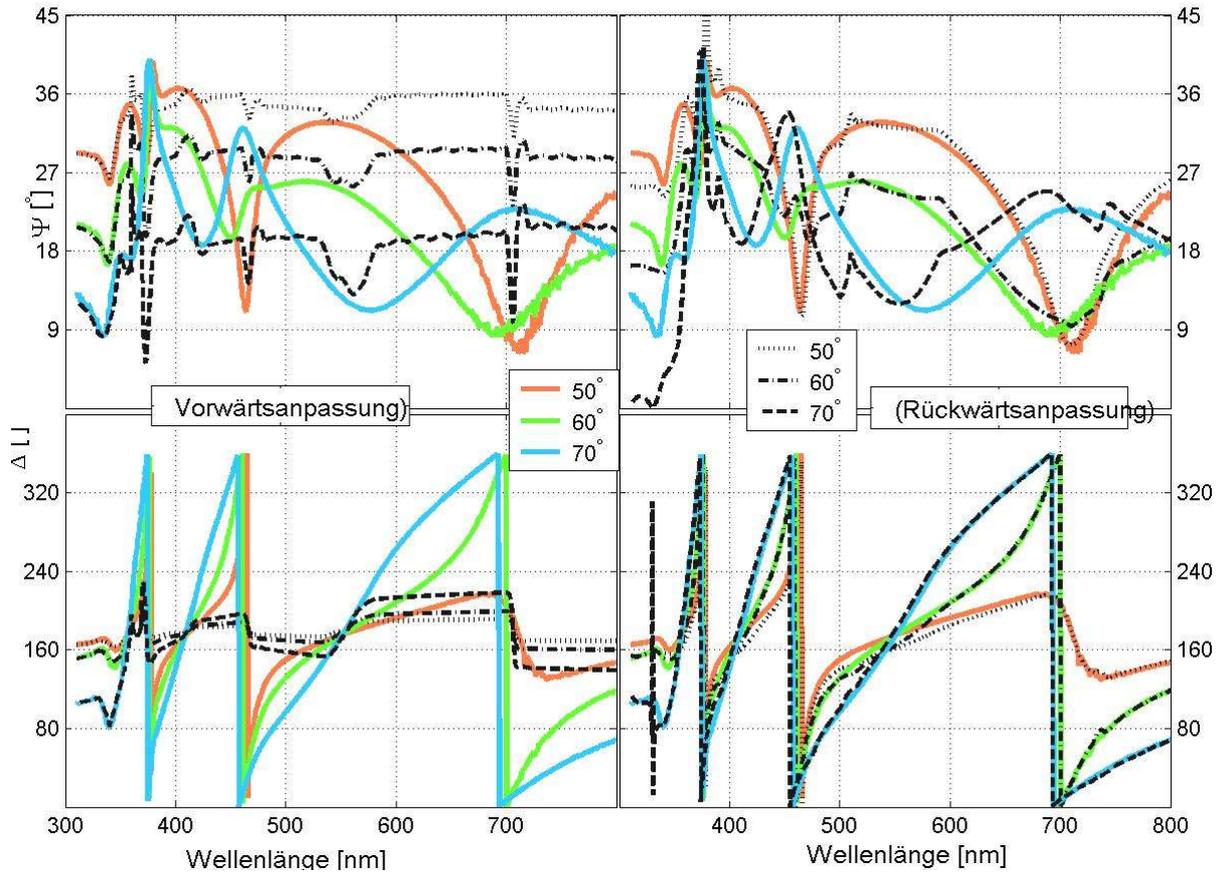


Abb. 5.2.3: Gegenüberstellung der Messung und Theorie aus der automatisierten spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\left[\left[1 \ 0 \ \infty \right]^\dagger \left[n_{\lambda_i} \ k_{\lambda_i} \right]^\dagger \left[n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \ \infty \right]^\dagger \right)^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{ \text{Luft} | \text{Titanoxid} | \text{Si Substrat} \}_{2213b}$, wobei $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Die Darstellungen auf der linken und rechten Seiten beziehen sich auf Vorwärts- bzw. Rückwärtsanpassung bei $d=378\text{nm}$.

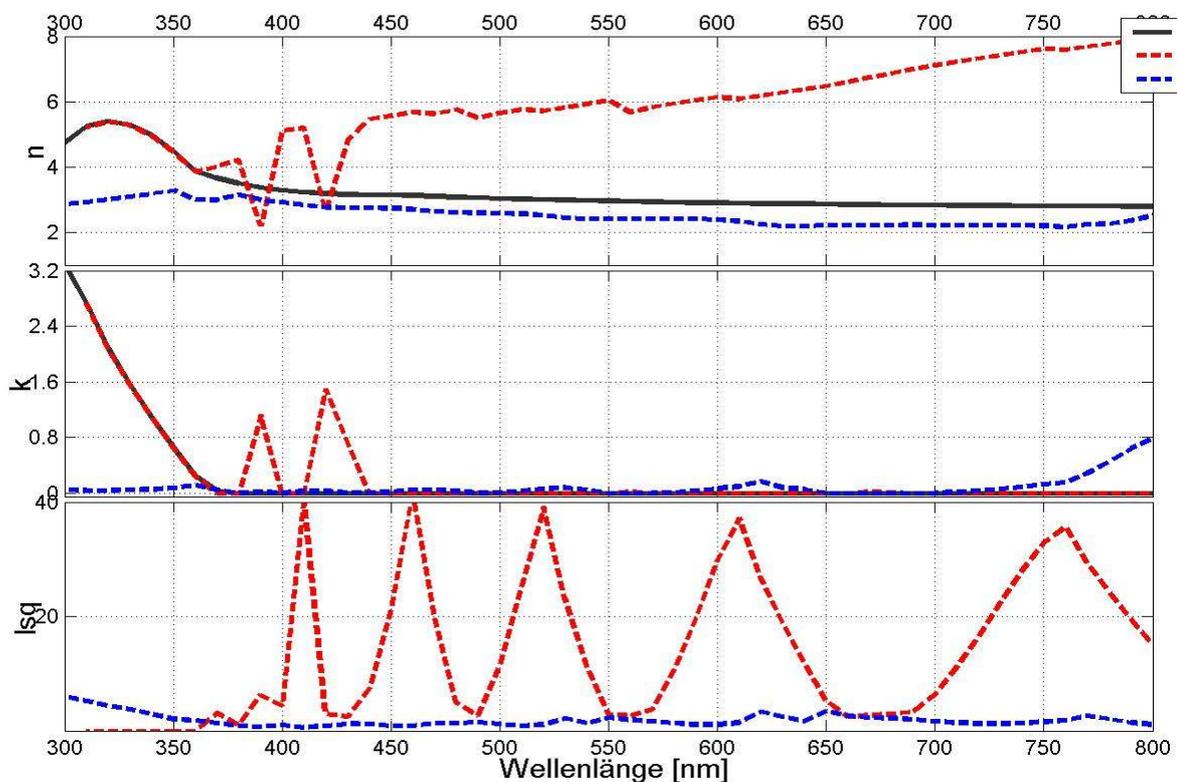
5.3 Leistungsüberprüfung des kommerziellen Programms

Im nächsten Schritt muss man auf eine grundlegendere Untersuchung zurückgreifen. Die Frage lautet nicht, welcher Ablauffolge der Vorzug gegeben wird, sondern ob eine angepasste Dispersionsrelation überhaupt richtig ist. Dafür sollte man die Grundfähigkeit des kommerziellen Programms bei simulierten, fehlerfreien und geräuschfreien Messungen mit einem bekannten optischen Modell getestet werden. Die Vorgänge werden in folgender Aufstellung zusammengefasst:

- I. Das optische Modell $M_m = [L_1 L_2 L_3 \dots L_{i-1} L_i L_{i+1} \dots L_m]^\dagger$ aufbauen.
- II. $F_\theta^{\text{meas}} = F(M_m, \theta)$ simulieren, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\theta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$.
- III. $L_i = [n_i \ k_i \ d_i]$ durch $L = [n \ k \ d_i]$ ersetzen.
- III. $M_m = [L_1 L_2 L_3 \dots L_{i-1} L L_{i+1} \dots L_m]^\dagger$ $n_i^{\text{fit}}(\lambda_j) \ k_i^{\text{fit}}(\lambda_j)$ ergibt durch Anfitzen von $\tilde{F}(M_m^{\text{fit}}(\lambda))$
- IV. Globales Minimum an $M_m^{\text{fit}} = M_m$ weil $\text{At}[n_i^{\text{fit}} \ k_i^{\text{fit}} \ d_i^{\text{fit}}] = [n_i \ k_i \ d_i]$,
 $F_{\text{Mod},j} - F_{\text{meas},j} = F_j(M_m^{\text{fit}}(\lambda_j)) - F_j(M_m(\lambda_j)) = 0 \quad \forall j \in \{1, 2, 3, \dots, q\}$

$$\text{err}(L) = \frac{1}{q} \sqrt{\sum_{j=1}^q (F_j(M_m(\bar{x})) - F_{\text{meas},j})^2} = 0$$

(a)



(b)

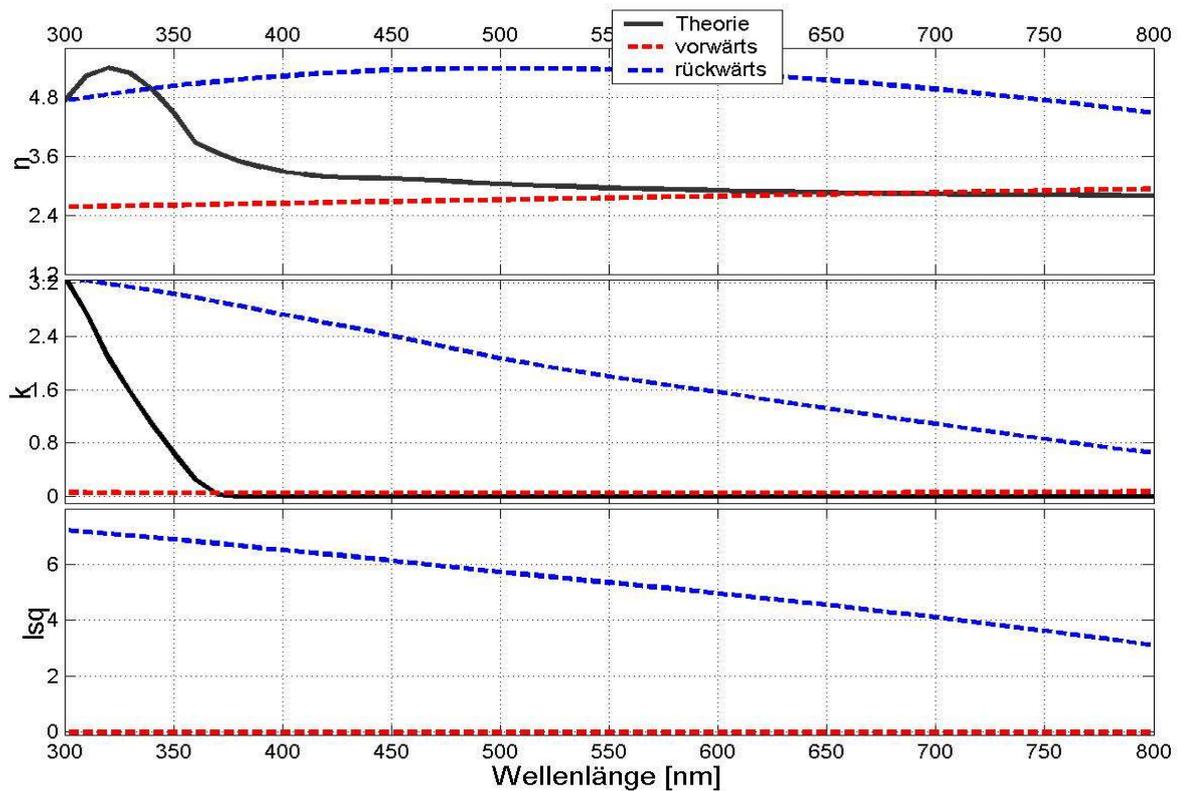


Abb. 5.3.1: Ergebnisse der automatischen spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Vorwärts- bzw. Rückwärtsanpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n_{\lambda_i} & k_{\lambda_i} & d \end{smallmatrix} \right]^{\dagger} \left[n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \right. \left. k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \right]^{\dagger} \left[\infty \right]^{\dagger} \left[\infty \right]^{\dagger}, \vartheta)$ für simulierte Messung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n_{\text{TiO}_2}(\lambda) & k_{\text{TiO}_2}(\lambda) & 500\text{nm} \end{smallmatrix} \right]^{\dagger} \left[n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \right. \left. k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \right]^{\dagger} \left[\infty \right]^{\dagger} \left[\infty \right]^{\dagger}, \vartheta)$, wobei $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, bei zwei Anpassungsbedingungen.

Als konkretes Beispiel wird das optische Modell $M_3 = \left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n_{\text{TiO}_2}(\lambda) & k_{\text{TiO}_2}(\lambda) & 500\text{nm} \end{smallmatrix} \right]^{\dagger} \left[n_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \right. \left. k_{\text{Si(Pal85)}}(\lambda) \right]^{\dagger} \left[\infty \right]^{\dagger} \left[\infty \right]^{\dagger}$ verwendet. Mit der Bedingung *No. of iterations* > 4000 (praktisches Infinitum) und *Least square* < 0.00001 (praktisches Null) wird die simulierte Messung $F(M_3, \vartheta)$ vorwärts und rückwärts Wellenlänge-für-Wellenlänge angepasst. Dargestellt in Abb.5.3.1 sind die Ergebnisse bei zwei verschiedenen Anfangsbedingungen. Nach vielen Versuchen kommt es, sowohl bei Vorwärts- als auch bei Rückwärtsanpassungen fast es nie vor, dass die ganzen theoretischen Dispersionsrelationen regeneriert werden können. Urteilt man anhand der teilweisen Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung, wenn sie denn überhaupt funktioniert, so ist die Rückwärtsanpassung besser als die Vorwärtsanpassung. Als Rückweisung des geprüften Programms ist ein solcher Test jedoch nicht schlüssig. Vielmehr hat man die Grundleistungsfähigkeit nicht jedoch die Grundfähigkeit getestet, da die letztere auch noch von anderen Bedingungen abhängt. Daher muss man das Anpassungsverfahren bei jeder einzelnen Wellenlänge genau untersucht werden. Dabei gilt es nicht nur die Grundfähigkeit zu prüfen, sondern auch, wie nahe der Startwert von der Nullstelle entfernt ist, damit der erstere auf den letzteren konvergiert.

5.4 Monochromatische Anpassungsüberprüfung anhand simulierter Messungen

Um besser auf das Problem eingehen zu können, muss die zu Grunde liegende Suchroutine monochromatisch überprüft werden. Wie bei den meisten kommerziellen Anpassungsprogrammen sind die Programmierungscodes des *Spectraray* Programms für die Benutzer nicht transparent. Die unterstützte Suchroutine, angeblich Simplex Algorithmus, ist vom Suchbegriff her iterativ. Die Zwischenwerte, die sich im Laufe der Suche ergeben, werden nicht erfasst. Wie die Iteration tatsächlich abläuft, bleibt ein Rätsel, das sich nur phänomenologisch verstehen lässt und experimentell überprüft werden muss.

Wie im spektroskopischen Fall wird die Messung $F_{\vartheta}^{\text{meas}} = F([\![1\ 0\ \infty]\!]^{\dagger} [n^{(0)}\ k^{(0)}\ d^{(0)}]_{\text{Sub}}^{\dagger} [\![n_{\text{Sub}}\ k_{\text{Sub}}\ \infty]\!]^{\dagger}, \vartheta)$ simuliert und $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^{\dagger} [n\ k\ d]_{\text{Sub}}^{\dagger} [\![n_{\text{Sub}}\ k_{\text{Sub}}\ \infty]\!]^{\dagger}, \vartheta)$ für $F_{\vartheta}^{\text{meas}}$ angepasst, wobei $F = \Psi, \Delta$ und $\vartheta = \vartheta_1, \vartheta_2, \dots$ usw. Vor jeder iterativen Anpassung wird die Eingabe der Anfangswerte jeweils um die voraussichtlichen Zielwerte variiert. Hierbei wird mit einem vereinfachten Verfahren vorgegangen. Bei jeder Anpassungsüberprüfung werden Anfangswerte eingegeben, indem jeweils nur ein Parameter aus n, k oder d , $\pm 10\%$ oder $\pm 20\%$ um den exakten Zielwert $L_{pt1}^{(1)} = L^{(0)} = [n^{(0)}\ k^{(0)}\ d^{(0)}]$ variiert wird (siehe Punkt 1 in Abb. 5.4.1). Daraus ergeben sich 12 Anfangswerte (Punkte 2 bis 13 in Abb. 5.4.1):

$$\begin{aligned}
 L_{pt10}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)} - 0.2d^{(0)}) & L_{pt11}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)} - 0.1d^{(0)}) \\
 L_{pt12}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)} + 0.1d^{(0)}) & L_{pt13}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)} + 0.2d^{(0)}) \\
 L_{pt2}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)} - 0.2k^{(0)}, d^{(0)}) & L_{pt3}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)} - 0.1k^{(0)}, d^{(0)}) \\
 L_{pt4}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)} + 0.1k^{(0)}, d^{(0)}) & L_{pt5}^{(in)} &= (n^{(0)}, k^{(0)} + 0.2k^{(0)}, d^{(0)}) \\
 L_{pt6}^{(in)} &= (n^{(0)} - 0.2n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)}) & L_{pt7}^{(in)} &= (n^{(0)} - 0.1n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)}) \\
 L_{pt8}^{(in)} &= (n^{(0)} + 0.1n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)}) & L_{pt9}^{(in)} &= (n^{(0)} + 0.2n^{(0)}, k^{(0)}, d^{(0)})
 \end{aligned}$$

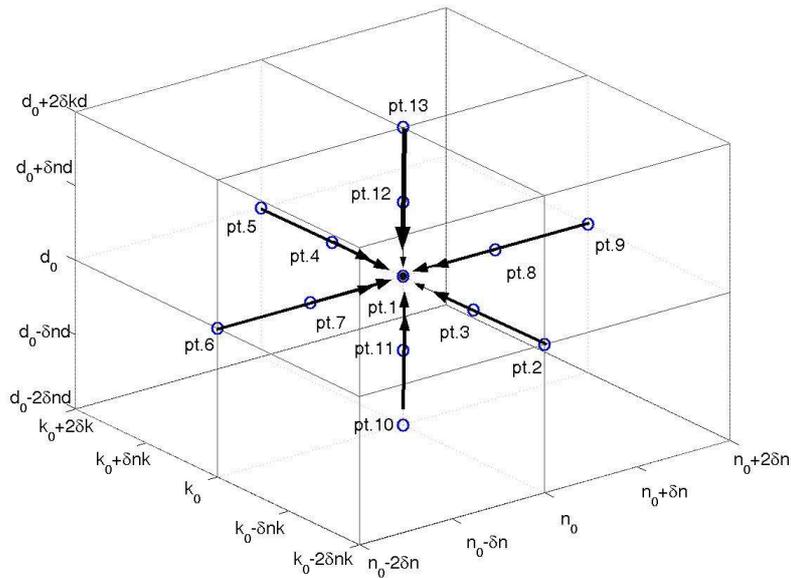


Abb. 5.4.1: Theoretisches Input-Output Schema für monochromatische iterative Anpassung $F([\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix}]^\dagger [n \ k \ d]^\dagger [n_{\text{Sub}} \ k_{\text{Sub}} \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$ für die simulierte Messung $F_\vartheta^{\text{meas}}=F([\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix}]^\dagger [n^{(0)} \ k^{(0)} \ d^{(0)}]^\dagger [n_{\text{Sub}} \ k_{\text{Sub}} \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta$ und $\vartheta=\vartheta_1, \vartheta_2, \dots$ usw. Die Anfangspunkte (Punkte 2-13) werden so ausgewählt, dass jeweils nur ein Parameter aus n, k oder $d, \pm 10\%$ oder $\pm 20\%$ um den exakten Zielwert (Punkt 1) variiert wird. Idealerweise sollte $L_{pt(i)}^{(out)}=[n^{(0)} \ k^{(0)} \ d^{(0)}]$ gelten, wenn $L_{pt-i}^{(in)} \in D(L^{(0)}) \quad \forall i \in \{2, \dots, 13\}$ zutrifft.

Nach der Anpassung ergibt sich $L_{pt(i)}^{(out)} = [n_{pt(i)}^{(out)} \ k_{pt(i)}^{(out)} \ d_{pt(i)}^{(out)}]$. Eine Zusammenfassung der Anpassungsergebnisse kann graphisch durch ein Input-Output Schema dargestellt werden, indem ein Anfangswert (oder analog ein Anfangspunkt im 3-D Lösungsraum) und der entsprechende Endwert (oder analog der Endpunkt im 3-D Lösungsraum) durch eine leere bzw. gefüllte Kugel bezeichnet werden. Der Zusammenhang zwischen Anfangs- und Endpunkt wird durch die iterative Funktion verknüpft, die den ersteren auf den letzteren abbildet und mit einem Pfeil bezeichnet wird. Idealerweise gilt $L_{pt(i)}^{(out)}=[n^{(0)} \ k^{(0)} \ d^{(0)}]$, wenn $L_{pt-i}^{(in)} \in D(L^{(0)}) \quad \forall i \in \{2, \dots, 13\}$ zutrifft. Theoretisch sollte das Input-Output Schema wie in Abbildung 5.4.1 aussehen. Als konkretes Beispiel wird der Fall $\lambda_j=360\text{nm}$ gezeigt. Die exakten Werte des optischen Modells bei dieser Wellenlänge betragen:

$$M_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \infty \\ n_{\text{TiO}_2[\text{Pa85}]}(360\text{nm}) & k_{\text{TiO}_2[\text{Pa85}]}(360\text{nm}) & 500\text{nm} \\ n_{\text{Si}[\text{Pa85}]}(360\text{nm}) & k_{\text{Si}[\text{Pa85}]}(360\text{nm}) & \infty \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \infty \\ 3.870 & 0.251 & 500\text{nm} \\ 6.042 & 6.994 & \infty \end{bmatrix}$$

Die Messung $F_\vartheta^{\text{meas}}$ mit $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ wird simuliert. Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \Psi(M_3(360\text{nm}),40^\circ) &= 36.965, & \Delta(M_3(360\text{nm}),40^\circ) &= 179.033, \\ \Psi(M_3(360\text{nm}),50^\circ) &= 31.453, & \Delta(M_3(360\text{nm}),50^\circ) &= 178.204, \\ \Psi(M_3(360\text{nm}),60^\circ) &= 23.272, & \Delta(M_3(360\text{nm}),60^\circ) &= 176.490, \\ \Psi(M_3(360\text{nm}),70^\circ) &= 10.508, & \Delta(M_3(360\text{nm}),70^\circ) &= 169.848. \end{aligned}$$

$F([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ \infty]^\dagger, \vartheta)$ wird für die simulierte Messung angepasst. Die konkreten Werte der 12 Anfangspunkte sind in Tabelle 5.4.1 aufgeführt. Nach jeder Überprüfung werden die verwendeten Anpassungsparameter des *Spectraray* Programms verändert (Tabelle 5.4.2). Insgesamt werden 6 Versuche durchgeführt; bei jedem wird jeweils eine andere Kombination von Parametern verwendet. Bei allen Versuchen wird die höchste Anzahl Iterationen und die Untergrenze der Fehler, unter der der Iterationsvorgang aufhört, auf $N_{\text{up}}=4000$ bzw. $LSQ_{\text{low}}=0.00001$ beschränkt. Die Ergebnisse jedes Versuches, die die Endwerte und den entsprechenden *LSQ* umfassen, werden in Tabelle 5.4.3 aufgelistet.

t.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
d	500	500	500	500	500	500	500	500	500	400	450	550	600
n	3.87	3.87	3.87	3.87	3.87	3.09	3.48	4.25	4.64	3.87	3.87	3.87	3.87
	0	0	0	0	0	6	3	7	4	0	0	0	0
k	0.25	0.20	0.22	0.27	0.30	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
	1	1	6	6	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Tabelle 5.4.1: Die bei der monochromatischen ($\lambda_j=360\text{nm}$) iterativen Anpassung (Abb. 5.4.2) nachgeprüften konkreten Anfangswerte (Punkt 2-13), bei denen jeweils ein Parameter aus n, k oder d , $\pm 10\%$ oder $\pm 20\%$ um den exakten Zielwert (Punkt 1) variiert wird. Die variierten Beträge sind kursiv gedruckt.

Bedingung		$x_i^{(jump)}$	<i>Accuracy</i>	<i>Dig</i>	$x_i^{(min)}$	$x_i^{(max)}$	$x_i^{(min_{reset})}$	$x_i^{(max_{reset})}$
1	d	20.00	0.100	2	300	700	400	600
	n	0.1	0.00010	4	0.0010	40.0000	1.1000	2.0000
	k	0.1	0.00010	4	0.0000	40.0000	0.0000	10.0000
2	d	20.00	0.100	2	300	700	400	600
	n	0.1	0.00010	4	0.0010	40.0000	1.1000	5.0000
	k	0.1	0.00010	4	0.0000	40.0000	0.0000	10.0000
3	d	50.00	0.100	2	300	700	400	600
	n	0.1	0.00010	4	0.0010	40.0000	1.1000	2.0000
	k	0.1	0.00010	4	0.0000	40.0000	0.0000	10.0000
4	d	50.00	0.100	2	300	700	400	600
	n	0.1	0.00010	4	0.0010	40.0000	1.1000	5.0000
	k	0.1	0.00010	4	0.0000	40.0000	0.0000	10.0000
5	d	20.00	0.100	2	300	700	450	550
	n	0.1	0.00010	4	0.0010	40.0000	1.1000	2.0000
	k	0.1	0.00010	4	0.0000	40.0000	0.0000	10.0000
6	d	50.00	0.100	2	300	700	400	600
	n	0.5	0.00010	4	0.0010	40.0000	1.1000	2.0000
	k	0.1	0.00010	4	0.0000	40.0000	0.0000	10.0000

Tabelle 5.4.2: Die bei der monochromatischen ($\lambda_j=360\text{nm}$) iterativen Anpassungsüberprüfung (Abb. 5.4.2) verwendeten Anpassungsparameter des *Spectraray* Programms.

(a)

(Bedingung 1)				
Punkt	d_f	n_f	k_f	<i>MSE</i>
1	500.00	3.8700	0.2510	0.00001008
2	500.00	3.8700	0.2510	0.00001749
3	500.00	3.8700	0.2510	0.00001025
4	500.00	3.8700	0.2510	0.00001395
5	500.00	3.8700	0.2510	0.00001322
6	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141
7	453.86	3.8724	0.2620	0.00713197
8	546.09	3.8656	0.2421	0.00902101
9	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288
10	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141
11	453.86	3.8724	0.2620	0.00713198
12	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100
13	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288

(b)

(Bedingung 2)				
	d_f	n_f	k_f	<i>MSE</i>
	500.00	3.8700	0.2510	0.00001347
	500.00	3.8700	0.2510	0.00001652
	500.00	3.8700	0.2510	0.00001585
	500.00	3.8700	0.2510	0.00001520
	500.00	3.8700	0.2510	0.00001350
	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141
	453.86	3.8724	0.2620	0.00713197
	546.09	3.8656	0.2421	0.00902101
	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288
	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141
	453.86	3.8724	0.2620	0.00713198
	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100
	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288

(c)					(d)				
Punkt	(Bedingung 3)				<i>MSE</i>	<i>d_f</i>	<i>n_f</i>	<i>k_f</i>	<i>MSE</i>
	<i>d_f</i>	<i>n_f</i>	<i>k_f</i>	<i>MSE</i>					
1	500.00	3.8700	0.2510	0.00001659	500	3.8700	0.251	0,00001659	
2	500.00	3.8700	0.2510	0.00001524	500	3.8700	0.251	0,00001524	
3	500.00	3.8700	0.2510	0.00001093	500	3.8700	0.251	0,00001093	
4	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	500	3.8700	0.251	0,00001309	
5	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	546.09	3.8656	0.2421	0,00902100	
6	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141	407.39	3.8742	0.2749	0,01339141	
7	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141	407.39	3.8742	0.2749	0,01339141	
8	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288	593.79	3.8579	0.239	0,02047288	
9	546.09	3.8656	0.2421	0.00902101	546.09	3.8656	0.2421	0,00902101	
10	453.86	3.8724	0.2620	0.00713197	453.86	3.8724	0.262	0,00713197	
11	500.00	3.8700	0.2510	0.00001383	500	3.8700	0.251	0,00001383	
12	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	546.09	3.8656	0.2421	0,00902100	
13	642.82	3.8513	0.2399	0.03086590	642,82	3.8513	0.2399	0,03086590	

(e)					(f)				
Punkt	(Bedingung 5)				<i>MSE</i>	<i>d_f</i>	<i>n_f</i>	<i>k_f</i>	<i>MSE</i>
	<i>d_f</i>	<i>n_f</i>	<i>k_f</i>	<i>MSE</i>					
1	500.00	3.8700	0.2510	0.00001347	500	3.87	0.251	0.00001007	
2	500.00	3.8700	0.2510	0.00001652	500	3.87	0.251	0.00001729	
3	500.00	3.8700	0.2510	0.00001585	500	3.87	0.251	0.00001193	
4	500.00	3.8700	0.2510	0.00001520	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	
5	500.00	3.8700	0.2510	0.00001350	546.09	3.8656	0.2421	0.00902101	
6	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141	500	3.87	0.251	0.00001011	
7	453.86	3.8724	0.2620	0.00713197	584.23	3.8628	0.1721	0.08145790	
8	546.09	3.8656	0.2421	0.00902101	500	3.87	0.251	0.00001029	
9	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	
10	407.39	3.8742	0.2749	0.01339141	453.86	3.8724	0.262	0.00713197	
11	453.86	3.8724	0.2620	0.00713198	500	3.87	0.251	0.00001812	
12	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	546.09	3.8656	0.2421	0.00902100	
13	593.79	3.8579	0.2390	0.02047288	593.79	3.8579	0.239	0.02047288	

Tabelle 5.4.3: Endwerte und *MSE* (die Spectraray Version der *LSQ*) als Ergebnisse der Überprüfung monochromatischer iterativer Anpassung $F(\llbracket [1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n \ k \ d]^\dagger [6.042 \ 6.994 \ \infty]^\dagger, \emptyset)$ für die simulierte Messung $F_\emptyset^{\text{meas}}=F(\llbracket [1 \ 0 \ \infty]^\dagger [3.87 \ 0.251 \ 500\text{nm}]^\dagger [6.042 \ 6.994 \ \infty]^\dagger, \emptyset)$, wobei $F=\Psi, \Delta$ und $\emptyset=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, bei 12 Anfangswerte (Punkt 2-13, Tabelle 5.4.1), die jeweils eine $\pm 10\%$ oder $\pm 20\%$ um den exakten Zielwert (Punkt 1, Tabelle 5.4.1) umgestellte Variable aus n, k oder d , besitzen. Die entsprechenden Input-Output Schemen werden in Abb. 5.4.2 dargestellt.

Die entsprechenden Input-Output Schemen werden in Abb. 5.4.2 dargestellt. Die Anfangs- und Endpunkte werden durch leere bzw. gefüllte Kreise dargestellt. Die erfolgreiche Suche wird von der erfolglosen durch blaue bzw. rote Farbe unterschieden. Der Erfolg der Anpassung hängt stark von der Auswahl der Eingabe ab. Das Resultat ist ein asymmetrisches Muster. Aus 6 Versuchen, von

insgesamt 24 Anfangspunkten mit variierter d aus, und von 24 Anfangspunkten mit variiertem n aus, erreichen nur 3 Punkte (c, d, f), bzw. 2 Punkte (f) erfolgreich das gewünschte Ziel. Die Anfangspunkte, die erfolgreich zum gewünschten Ziel führen, sind fast ausschliesslich diejenigen mit variiertem k . Mathematisch gesehen gibt es keinen Grund, weshalb k gegenüber n bevorzugt wird. Unter den 48 erfolglosen Iterationen gelangen 45 Anfangspunkte bis zu vier Endpunkten (Endpunkt 10, 11, 12, 13 beim Versuch unter Bedingung 1). Man fragt sich, ob diese vier Punkte lokale Minima sind.

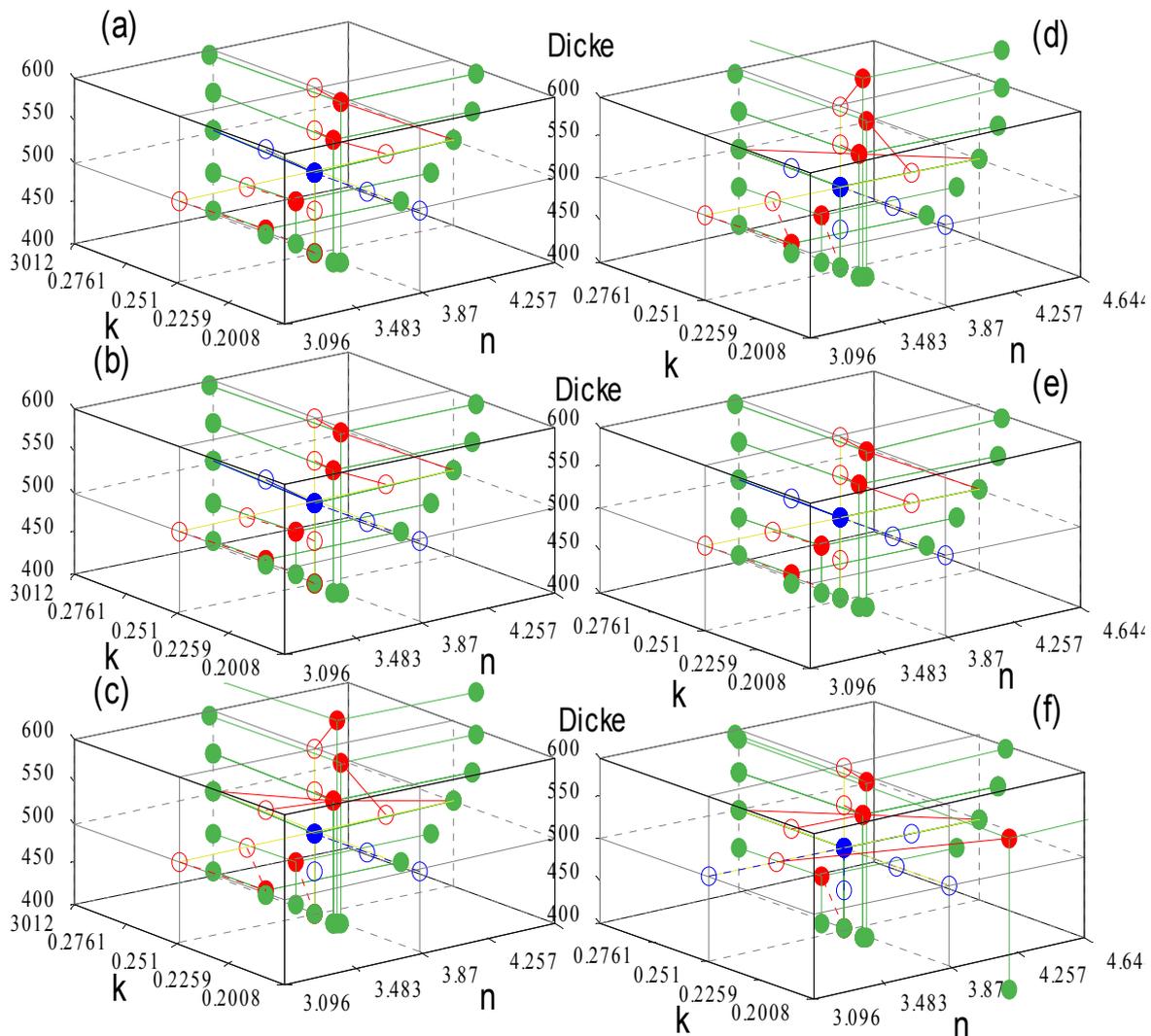
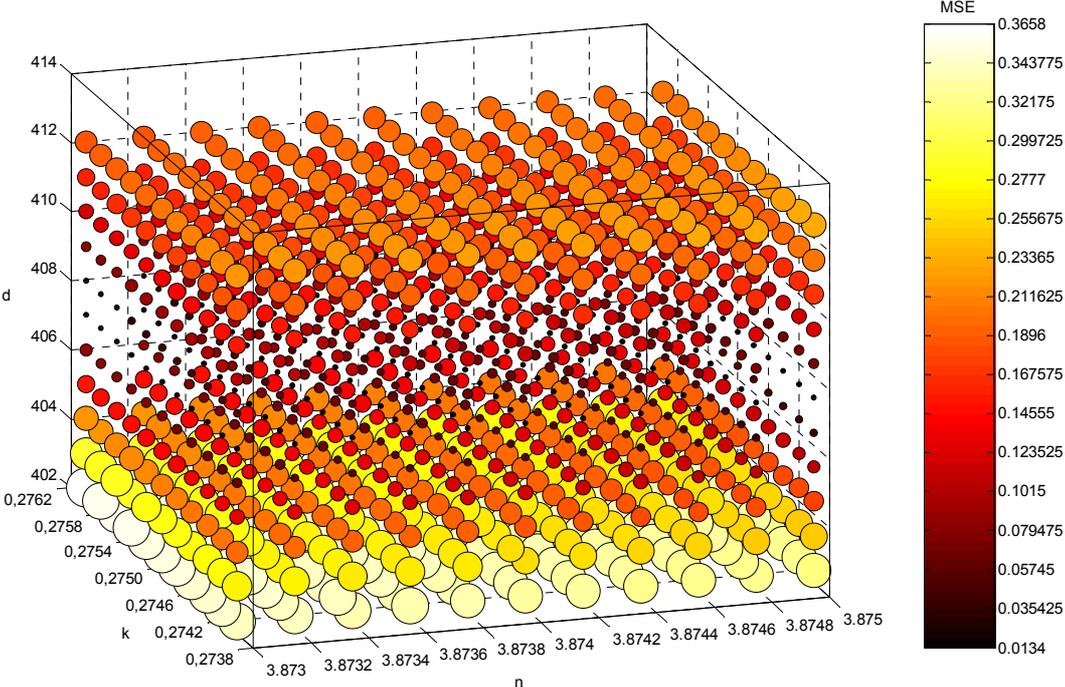


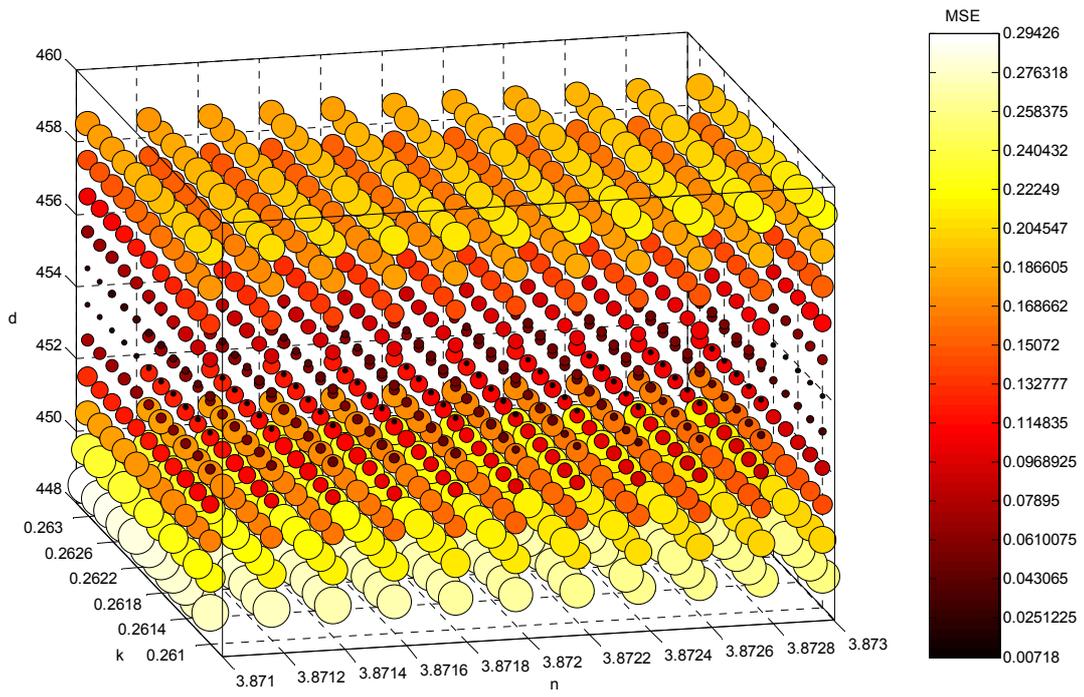
Abb. 5.4.2: Input-Output Schemen der Überprüfung von monochromatischer iterativer Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n\ k\ d]^\dagger [6.042\ 6.994\ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für die simulierte Messung $F_\vartheta^{\text{meas}}=F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [3.87\ 0.251\ 500\text{nm}]^\dagger [6.042\ 6.994\ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$, wobei $F=\Psi, \Delta$ und $\vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, bei 12 Anfangswerten (Punkt 2-13, Tabelle 5.4.1) und 6 programmabhängigen Bedingungen (a-f). Die Anfangs- und Endpunkte werden durch leere bzw. gefüllte Kreise dargestellt. Die erfolgreiche Suche wird von der erfolglosen durch blaue bzw. rote Farbe unterschieden.

Um diese Erscheinung nachzuvollziehen, wird die lokale Verteilung der *MSE* um die vier Punkte im *n-k-d* Raum genauer untersucht. Gerechnet wird die *MSE* in kleinen Schritten um die Endpunkte 10, 11, 12, bzw. 13, des Versuches unter Bedingung 1 (Tabelle 5.4.3). Der Betrag der *MSE* als vierte Dimension wird mit Hilfe der Größe und Farbe der Kugeln dargestellt (Abb. 5.4.4). Je größer der Betrag, desto größer und heller ist die Kugel.

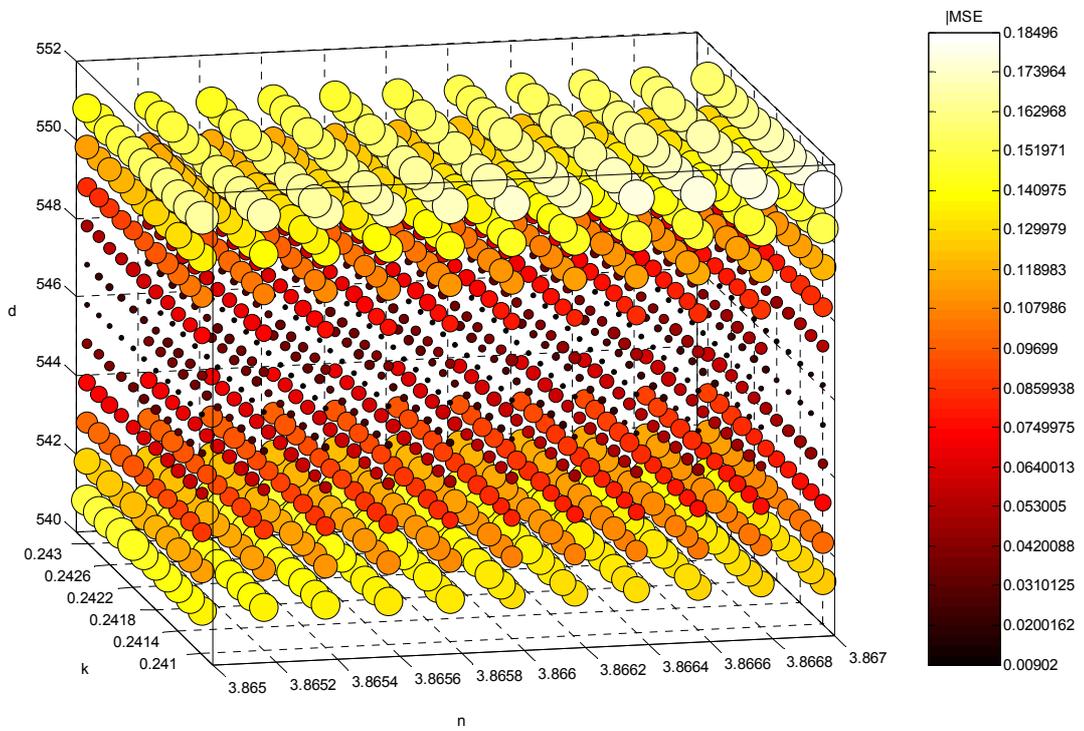
(a)



(b)



(c)



(d)

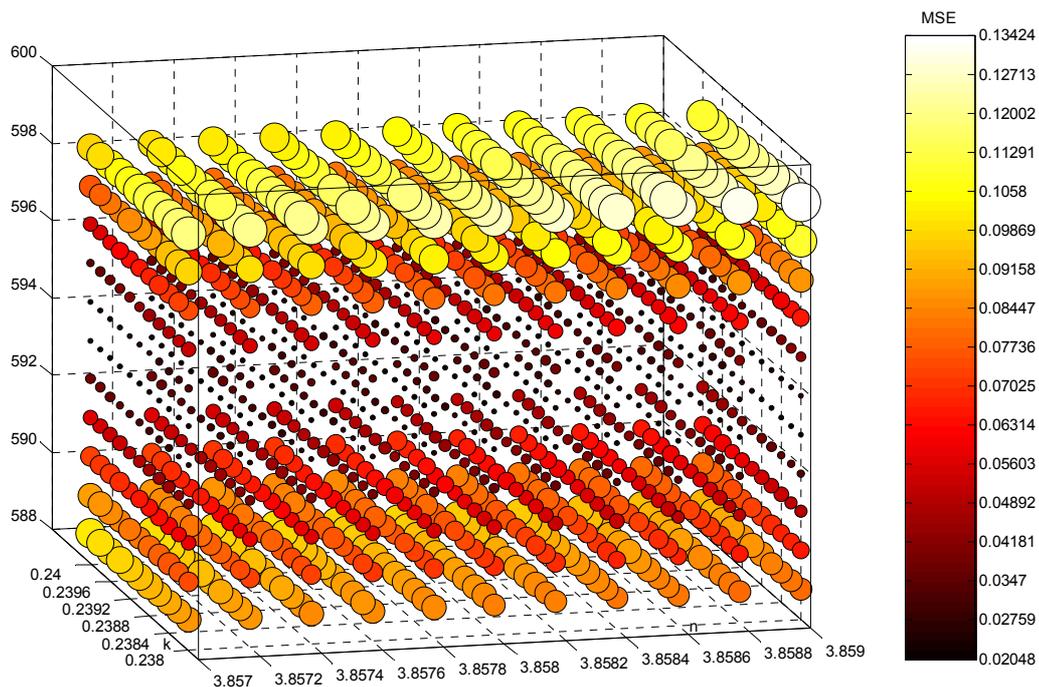


Abb. 5.4.4: Darstellung der MSE als Funktion von n , k und d an den Endpunkten 10, 11, 12, bzw. 13 des Versuches unter Bedingung 1 (Tabelle 5.4.3). Die Höhe der Beträge wird mit Hilfe der Größe und Farbe der Kugeln dargestellt. Je höher der Betrag, desto größer und heller die Kugeln.

Hinsichtlich der Verteilung der Kugelgröße liegt es nahe, dass die vier Punkte tatsächlich lokale Minima sind. Sie liegen bezüglich $n-k$ bei konstantem d in einem sehr flachen Tal. Wenn man die MSE der vier Bilder gegenüberstellt, sind die Unterschiede nicht signifikant. Daher ist das $n-k-d$ 3-D-Tal, dort wo die globale Nullstelle liegt, auch sehr flach. Die Konvergenz ist an sich sehr schwierig, auch wenn d einen gut Wert hat.

5.5 Mathematische Formulierung des Konvergenzproblems bei iterativer Suche

Die oben aufgeführten Verfahren sind nur einige aller möglichen, um das Konvergenzverhalten einer iterativen Suchroutine, besonders jener von einem kommerziellen Programm, zu überprüfen. Standardisiertes Rezept sollen von der Arbeitskreise der Ellipsometrie ausgearbeitet werden, um die Leistungsfähigkeit von Invertierungsroutinen zu charakterisieren und zu vergleichen.

Mathematisch gesehen kann die *black box* als eine iterative Suchfunktion $F_I(\vec{x}_{\lambda_i})$ dargestellt werden, die den Anfangspunkt $\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)}$ in den Endpunkt $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)}$, mit dem die Iteration aufhört, abbildet. Infolgedessen gilt $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)} = F_I(\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)})$. Zum Starten der iterativen Suchroutine ist $\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)} = \vec{x}_{\lambda_i}^{(1)} = (x_{1,\lambda_i}^{(1)}, x_{2,\lambda_i}^{(1)}, \dots, x_{p,\lambda_i}^{(1)})$ einzugeben. Als Ausgabe ist der letzte Wert $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)} = \vec{x}_{\lambda_i}^{(N)} = (x_{1,\lambda_i}^{(N)}, x_{2,\lambda_i}^{(N)}, \dots, x_{p,\lambda_i}^{(N)})$ geliefert, mit dem die Iteration aufhört. Graphisch kann die *black box* wie Abb. 5.5.1 dargestellt werden.

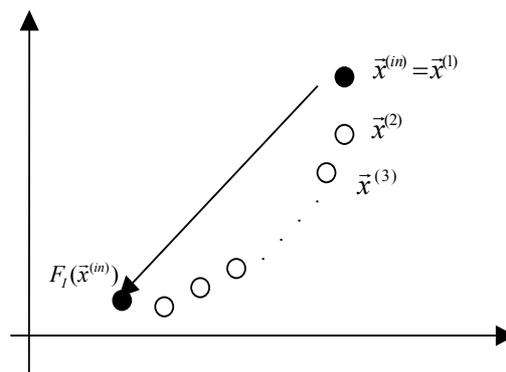


Abb. 5.5.1: Die Iteration wirkt eventuelle wie eine Funktion F_I , die $\vec{x}^{(in)}$ in $\vec{x}^{(out)}$ abbildet, nämlich $\vec{x}^{(out)} = F_I(\vec{x}^{(in)})$.

Bei der iterativen Suchfunktion gibt es zwei Grenzfälle. Auf einer Seite ist der Idealfall, wobei $D(\vec{x}^{(0)}) = X$ oder $F_I(X) = \{\vec{x}^{(0)}\}$ gilt. Auf anderer Seite ist die allertrivialste Voraussetzung

$$F_I(\vec{x}^{(0)}) = \vec{x}^{(0)} \quad (5.5.1)$$

Selbstverständlich beschleunigt bloss diese Eigenschaft den Suchvorgang nicht, es sei denn $\exists \vec{x}^{(in)} \neq \vec{x}^{(0)}$ damit $F_I(\vec{x}^{(in)}) = \vec{x}^{(0)}$ gilt. Ansonst ist das ganze Suchverfahren dasselbe besagend. In der Realität wird X in eine Menge Punkte $X^{(\wedge)} = \{\vec{x}^{(\wedge_1)}, \vec{x}^{(\wedge_2)}, \dots, \vec{x}^{(\wedge_n)}\} \subset X$ abgebildet. Daher gelten $F_I(X) = X^{(\wedge)}$ und $\vec{x}^{(0)} \in X^{(\wedge)}$. Um die globale Nullstelle $\vec{x}^{(0)}$, muss es eine Konvergenzregion $D(\vec{x}^{(0)}) \neq \vec{x}^{(0)}$ geben, die alle Anfangswerte $\vec{x}^{(in)}$ enthält, die mittels der Iterationsfunktion in $\vec{x}^{(0)}$ abgebildet werden. Mit anderen Worten,

$\exists D(\bar{x}^{(0)}) = \{\bar{x} = (x_1, \dots, x_p) \in X \mid F_l(\bar{x}) = \bar{x}^{(0)}\}$. Da $D(\bar{x}^{(0)}) \neq X$, folgt $X^{(*)} \neq \bar{x}^{(0)}$. Also $\exists \bar{x}^{(*)} \in X^{(*)}$ mit $\bar{x}^{(*)} \neq \bar{x}^{(0)}$. X wird in eine Potenzmenge von gegenseitig exklusiven Untermengen partitioniert. Somit gilt $X = \{D(\bar{x}^{(*)_1}), D(\bar{x}^{(*)_2}), \dots, D(\bar{x}^{(*)_n})\}$ und $F(\bar{x}) = \bar{x}^{(*)_j} \quad \forall \bar{x} \in D(\bar{x}^{(*)_j})$.

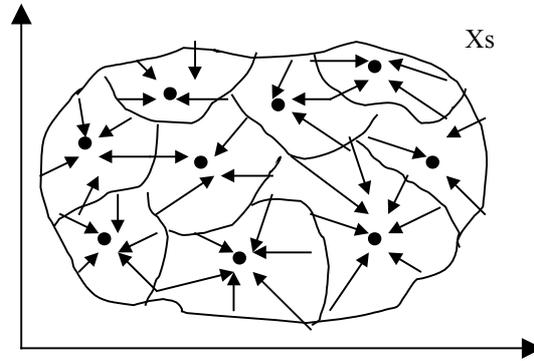


Abb. 5.5.2: Partition von X in Untermenge $D(\bar{x}^{(*)_1}), D(\bar{x}^{(*)_2}), \dots, D(\bar{x}^{(*)_n})$ wobei $F(\bar{x}) = \bar{x}^{(*)_j} \quad \forall \bar{x} \in D(\bar{x}^{(*)_j})$.

Um $F_l(\bar{x}^{(in)}) = \bar{x}^{(0)}$ zu erzielen, muss $\bar{x}^{(in)}$ so gewählt werden, dass $\bar{x}^{(in)} \in D(\bar{x}^{(0)})$. Ein $D(\bar{x}^{(0)})$ zugehöriger Punkt lässt sich vom Abstand zwischen $\bar{x}^{(in)}$ und $\bar{x}^{(0)}$,

nämlich $dist(\bar{x}^{(in)}, \bar{x}^{(0)}) = \sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i^{(in)} - x_i^{(0)})^2}$, und der Richtung beschreiben.

Innerhalb $D(\bar{x}^{(0)})$ existiert eine kompakte Region $D_c(\bar{x}^{(0)}) = \{\bar{x} = (x_1, \dots, x_p) \in X \mid \cup \bar{x} \text{ kompakt} \ \& \ \cup \bar{x} \subseteq D(\bar{x}^{(0)})\}$. Innerhalb der kompakten Region existiert ein n-dimensionaler kompakter Kugel um das Zentrum $\bar{x}^{(0)}$ mit dem

möglichst größten Radius R . Wenn $\bar{x}^{(in)}$ so ausgewählt wird, dass es innerhalb dem Kugel liegt, d.h. $dist(\bar{x}^{(in)}, \bar{x}^{(0)}) < R$, wird Konvergenz auf $\bar{x}^{(0)}$ garantiert.

$\exists R$ st. $D_{\rho_R}(\bar{x}^{(0)}) = \{\bar{x} \text{ st. } dist(\bar{x}^{(0)}, \bar{x}) < R \mid \bar{x} \in D(\bar{x}^{(0)})\}$. Mit anderen Worten ist es hinreichend, Konvergenz zu garantieren wenn $\bar{x}^{(in)} \in D_{\rho_R}(\bar{x}^{(0)})$ gewählt wird.

Diese von der Richtung unabhängige Anforderung ist Programmierungs- aber nicht Überprüfungs-freundlich. Stattdessen ein p-dimensionaler Kasten

$D_{B_R}(\bar{x}^{(0)}) = \{\bar{x} \in D(\bar{x}^{(0)}) \mid dist(x_i^{(0)}, x_i) < R/2 \quad \forall i\}$ gewählt, damit $\bar{x}^{(in)} \in D_{B_R}(\bar{x}^{(0)})$. Nimmt

man an, $X^{(*)} = \{\bar{x}^{(*)_1}, \bar{x}^{(*)_2}, \dots, \bar{x}^{(*)_n}\} \subset X$ sei eine Menge aller lokalen Nullstellen in X . Bei einer primitivsten iterativen Suchroutine, die nicht einmal von der

flachsten lokalen Nullstelle entkommen kann, gilt $F_l(\bar{x}^{(in)}) = x^{(*)} \in X^{(*)}$. Daraus folgt $F_l(X) = X^{(*)}$. Bei jedem $\bar{x}^{(*)} \in X^{(*)}$, $\exists D(\bar{x}^{(*)}) = \{\bar{x} \in X \mid F_l(\bar{x}) = \bar{x}^{(*)}\}$.

Ausserdem, $\bar{x}^{(*)} \notin D(\bar{x}^{(0)}) \quad \forall \quad \bar{x}^{(*)} \neq \bar{x}^{(0)}$. Wenn $F_l(X) = X^{(*)}$ nur lokale Nullstellen enthält, gilt $X^{(*)} \subseteq X^{(*)}$. Die Partition von X kann als

$X = \{D(\bar{x}^{(*)_1}), D(\bar{x}^{(*)_2}), \dots, D(\bar{x}^{(*)_n})\}$ dargestellt werden.

Iterationsalgorithmen unterscheiden sich in der Größe der Konvergenzregion. Normalerweise wird die Konvergenzrate kleiner, wenn die Konvergenzregion größer ist. Ein mächtigerer Iterationsalgorithmus, der lokale Nullstelle in der Konvergenzregion zulässt, ist bevorzugt. Aber die Konvergenz zur globalen Nullstelle hängt oft von der relativen Lage der Nullstellen und der Anfangspunkte der Iteration ab. Ebenfalls auf der Seite der Programmierung verkauft sich ein Algorithmus schlecht, das nur mit Iteration arbeitet. Sowohl kommerziell als auch forschungsgemäss, ist es wünschenswert, dass $\exists \bar{x}^{(*)} \neq \bar{x}^{(*)}$ s.t. $\bar{x}^{(*)} \in D(\bar{x}^{(0)})$ gilt. $D(\bar{x}^{(0)})$ sollte so groß wie möglich sein und so viele lokale Minima wie möglich beinhalten. Jedoch entstehen daraus zwei wesentliche Schwierigkeiten. Erstens muss die Implementierung eine Möglichkeit anbieten, bei Iteration raus von der Schlinge einer lokalen Nullstelle zu fliehen. Zweitens muss ein Algorithmus implementiert werden, der die globale Nullstelle von den lokalen Nullstellen unterscheiden kann. Bei anspruchvolleren Problemen muss partielle Abtastung in die Implementierung einbezogen werden, damit die globale Nullstelle $\bar{x}^{(*)}$ innerhalb einer Menge von lokalen Nullstellen $\{\bar{x}^{(*)_1}, \bar{x}^{(*)_2}, \dots, \bar{x}^{(*)_n}\} \in X$ herauszufinden ist, damit $err(\bar{x}^{(*)}) = \min\{err(\bar{x}^{(*)_1}), err(\bar{x}^{(*)_2}), \dots, err(\bar{x}^{(*)_n})\}$. Im Großen und ganzen muss ein Kompromiss zwischen iterativer und universeller Suche geschlossen werden.

5.6 Problemdiagnose des kommerziellen Invertierungsverfahrens

Obwohl die Implementierung der vom *Spectraray* Programm unterstützten Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierungsroutine den Endbenutzern nicht durchsichtig ist, zeigen obige Tests einige Probleme. Erstens liefert die Studie keine Begründung des asymmetrischen Vorzugs gegenüber k , da die Unterschiede der Kugelgröße innerhalb einer $n-k$ Ebene nicht signifikant sind. Sehr wahrscheinlich spielt die Reihenfolge der zu prüfenden Variablen bei der Programmierung der Suchroutine eine Rolle. Dennoch kann man das vorliegende Programm, wie auch andere Programme, nicht beschuldigen. Sofern $\vec{x}^{(0)} = F_I(\vec{x}^{(0)})$ gilt, ist ein Anpassungsmisserfolg kein Nachweis für Programmierungsfehler. Ob ein globales Minimum zu finden ist, hängt von der Größe der Konvergenzzonen ab, die sich von Fall zu Fall, von Algorithmus zu Algorithmus und von Programm zu Programm ändern. Im Grunde genommen, findet die Simplex-Iterationsroutine nur lokale Minima. Wie schon gesehen, garantiert ein Anfangspunkt, der mehr als 10% vom Zielpunkt liegt, keine Konvergenz mehr. Die Größe der Konvergenzzonen ist sicherlich noch kleiner. Eine vollständige Charakterisierung umfasst die Überprüfung von $F_I(\vec{x}^{(0)}) = \vec{x}^{(0)}$, $\vec{x}^{(\wedge)} \in X^{(*)}$ und $\exists \vec{x}^{(*)} \in D_{B_R}(\vec{x}^{(0)})$, die Bestimmung von $X^{(*)}$, $X^{(\wedge)}$ und $D_{B_R}(\vec{x}^{(0)})$, usw., die der jetzige Autor seinem nachfolgenden Entwicklern und den übrigen Benutzern der Ellipsometrie überlässt.

Somit lässt sich das Divergenzproblem bei Automatisierung der Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung erklären: Das Problem liegt darin, dass die Endwerte des monochromatischen Iterationsverfahrens als die Anfangswerte für den benachbarten Messpunkt angenommen werden [Bos98]. Man betrachtet zwei spektral benachbarte Messpunkte. Anzupassen sind die Variablen \vec{x}_{λ_i} und $\vec{x}_{\lambda_{i+1}}$. Befindet sich $\vec{x}_{\lambda_i}^{(in)}$ innerhalb von $D(\vec{x}_{\lambda_i}^{(0)})$, gelangt $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)}$ in $D(\vec{x}_{\lambda_i}^{(0)})$ nach der Iteration bei Wellenlänge λ_i . $\vec{x}_{\lambda_i}^{(out)}$ wird als $\vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(in)}$ angenommen. Befindet sich $\vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(in)}$ ausserhalb $D(\vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(0)})$, folgt $\vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(out)} \neq \vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(0)}$ und $\vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(out)}$ liegt ausserhalb von $D(\vec{x}_{\lambda_{i+1}}^{(0)})$ (Abb. 5.6.1). Dies erklärt, weshalb Vorwärts- und Rückwärtsanpassungen selten übereinstimmen und weshalb Vorwärts- häufiger als Rückwärtsanpassungen schief gehen. Je steiler eine Dispersionsrelation, desto wahrscheinlicher ist es, dass sich die Endwerte ausserhalb der Konvergenzzone des nächsten Messpunkts befinden und die spektroskopische Divergenz von dort herrührt.

Trotz des obigen Divergenzproblems ist der Grund für den heuristischen Ansatz leicht vorstellbar. Mit einem primitiven iterativen Algorithmus wie Simplex als Herzstück des monochromatischen Invertierungsverfahrens, bleibt der Automatisierung spektroskopischer Invertierung keine bessere Wahl. Ein statischer Ansatz wäre von Anfang an zum Scheitern verurteilt, da die

Verteilung der lokalen Nullstellen, die Form und Größe der Konvergenzregion, sowie die Form der globalen Nullstelle und der lokalen Nullstellen, mit der Wellenlänge variieren. Ohne Vorkenntnisse darüber ist jeder andere Anfangspunkt im Raum der anzupassenden Variablen nicht weniger divergenzanfällig. Der benachbarte Endpunkt ist ohnehin, als Anfangspunkt des jeweiligen monochromatischen Invertierungsverfahrens, die beste Wahl. Allerdings ist es nur heuristisch zu hoffen, dass der Endpunkt spektroskopisch auf dem richtigen Pfad bleibt. Ist einmal eine Divergenz aufgetreten, ist der Ablauf des übrigen Teils der spektroskopischen Anpassung unkontrollierbar.

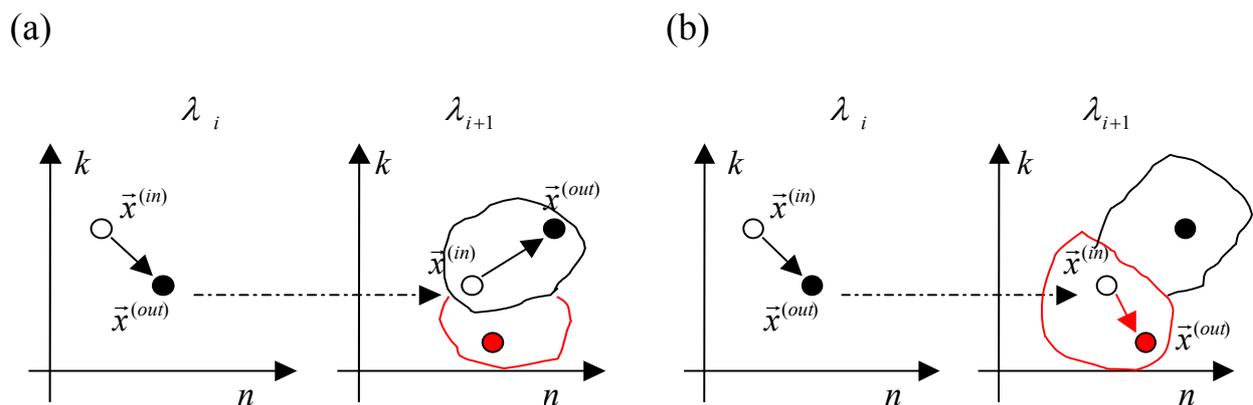


Abb. 5.6.1: Typisches Divergenzproblem einer auf Iteration basierenden Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Anpassung. Die Anpassung für den nächsten Messpunkt konvergiert nur dann, wenn die Endwerte sich bei dem betrachteten spektralen Messpunkt innerhalb der Konvergenzzone des nächsten Messpunkts befinden (Abbildung a). Wenn die Endwerte sich bei dem betrachteten spektralen Messpunkt ausserhalb der Konvergenzzone des nächsten Messpunkts befinden (Abbildung b), tritt Divergenz auf.

Trotzdem ist die Divergenz nicht spektroskopisch kumulierbar. Es wird beobachtet, dass die iterative Suche nach der Divergenz bei einer bestimmten Wellenlänge wieder auf den richtigen Pfad gelangt. Wie in Kapitel 3 erwähnt, verfügt das *Spectralray* Programm über die Anpassungsparameter „Type difference“, „Minimum“, „Maximum“, „Reset minimum“ & „Reset maximum“. Offensichtlich werden die Prüfwerte auf „Reset minimum“ & „Reset maximum“ zurückgestellt, wenn die Suche auf „Minimum“ & „Maximum“ gelangt. Ausserdem geschehen auch Sprünge, vermutlich wenn ein Prüfwert auf gewisse festgelegte Extrempunkte stösst. Aber wie die Sprungbedingungen vorgeschrieben sind, einschliesslich der Sprungrichtung und -größe, und ihr Zusammenhang mit den anderen Parametern, ist bisher unklar. Somit werden die Probleme des auf klassische Iteration basierenden Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Anpassungsalgorithmus' geklärt. Es ist zweifelhaft, wie brauchbar ein Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopisches

Anpassungsprogramm ist, wenn monochromatische Konvergenz, nicht selbstverständlich ist und spektroskopische Automatisierung nicht garantiert ist. In Kapitel 7 wird ein eigenes Programm auf der Basis einer ungewöhnlichen Lösung angestrebt.

6. Exakte Invertierung für nicht-absorbierende Filme

Bis auf einige Modelle lässt sich die ellipsometrische Gleichung nicht analytisch invertieren. Unter den Ausnahmen ist die klassische semi-analytische Version der einwinkligen, monochromatischen ellipsometrischen Invertierung [Mcc63] auf der Basis des einfachsten Einschichtmodells $[[[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{Oxid}} \ 0 \ d]^\dagger [n_{\text{Sub}} \ k_{\text{Sub}} \ \infty]^\dagger]^\dagger$, bei welchem die optischen Konstanten des Substrats, n_{Sub} und k_{Sub} , bekannt sind und die unbekannte Schicht nichtabsorbierend ist. Obwohl dieser spezielle Fall der exakten Invertierung schon seit Jahrzehnten vorhanden gewesen ist, wurde die gesamte Aufmerksamkeit ausschliesslich auf die einwinklige, monochromatische ellipsometrische Invertierung gerichtet. Ihre Erweiterung auf Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung ist nicht behandelt worden. Diese semi-analytische Version wurde von neuem untersucht, um die Möglichkeit einer schnelleren oder sichereren Implementierung auszukundschaften. Das System {Luft | Oxidschichten | Si-Substrat} (Kapitel 4) gehören dieser Kategorie an. Die Oxidschichten werden mit dem nachstehenden alternativen Invertierungsvorgang nochmals behandelt. Im ersten Abschnitt wird die Untersuchung monochromatisch durchgeführt. Anschliessend wird die Erweiterung auf spektroskopische Invertierung herangezogen.

6.1 Theorie

Der Ausgangspunkt ist die ellipsometrische Funktion $\rho_{123} = r_{\perp 123} / r_{\parallel 123}$ (2.5.15) [Azz79], die sich als $\Psi[[[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ 0 \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ und $\Delta([[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n(\lambda) \ 0 \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$ kompakt schreiben lässt. Dabei sind nur n und d bei jedem Wellenlängenmesspunkt zu bestimmen. Deshalb ist die Messung unter einem Winkel (ϑ) im Prinzip hinreichend. Mit der Annahme von homogenen und isotropen Schichten mit parallelen Oberflächen zwischen den Schichten, sind sowohl $r_{\perp 123}$ als auch $r_{\parallel 123}$ [Azz75, Azz79] bilineare Funktionen von Z (2.4.19). Somit kann ρ_{123} als eine rationale Funktion von Z [Azz75, Azz79] geschrieben werden. Als quadratische Funktion von Z lassen sich sowohl der Nenner als auch der Zähler ausdrücken. Nach einer Umstellung des Ausdrucks ergibt sich eine quadratische Gleichung in Z [Mcc63]:

$$(\rho_{123} F - C)Z^2 + (\rho_{123} E - B)Z + (\rho_{123} D - A) = 0 \quad (6.1.1)$$

wobei die Koeffizienten A , B , C , D , E und F laut [Azz75], von den optischen Konstanten der Schicht und des Substrats abhängen. Die Auflösung der quadratischen Gleichung liefert zwei Wurzeln [Svi96]:

$$Z_{\pm} = \frac{(B - \rho_{123} E) \pm \sqrt{\det}}{2(\rho_{123} F - C)} \quad (6.1.2)$$

wobei

$$\det = (\rho_{123} E - B)^2 - 4(\rho_{123} F - C)(\rho_{123} D - A) \quad (6.1.3)$$

Drückt man die Lösungen in Polarkoordinaten aus, folgt

$$Z_{\pm} = |Z_{\pm}| \exp(-i\theta_{\pm}) \quad (6.1.4)$$

Setzt man die zwei Ausdrücke von Z in (2.4.19) und (6.1.4) gleich, erhält man

$$\beta_{\pm} = \frac{1}{2}(i \ln |Z_{\pm}| + 2\pi m) \quad (6.1.5)$$

Mehrdeutigkeit, ausgedrückt durch den Parameter m , entsteht wegen der Periodizität der Dickenfunktion. Nach Einsetzen von (3) (2.4.20) und Umstellung ergibt sich

$$d_{\pm} = \frac{\lambda}{4\pi(\tilde{n}^2 - \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} (\theta_{\pm} + i \ln |Z_{\pm}| + 2\pi m) \quad (6.1.6)$$

Bei einem bestimmten Einfallswinkel führen die zwei quadratischen Wurzeln zu zwei Schichtdicken als Lösungen, d_{\pm} , von denen jede Mehrdeutigkeit bezüglich m hat. Einsetzen von (2.5.18) und (6.1.6) ergibt

$$d_{\pm} = \frac{\lambda}{4\pi(\eta^2 + \gamma^2)} \{ [\eta(\theta_{\pm} + 2\pi m) - \gamma \ln |Z_{\pm}|] + i[\gamma(\theta_{\pm} + 2\pi m) + \eta \ln |Z_{\pm}|] \} \quad (6.1.7)$$

Die Schichtdicke ist physikalisch nur sinnvoll wenn sie eine reelle Zahl ist. Bei der richtigen Wahl von m und der Wurzel sollte der imaginäre Teil,

$$f = [\gamma(\theta_{\pm} + 2\pi m) + \eta \ln |Z_{\pm}|] \quad (6.1.8)$$

von nun an Selektionsfunktion genannt [Svi96], theoretisch bei einem einzigen Wert von n verschwinden, Mit den Parametern, die die Selektionsregel

$$[\gamma(\theta_{\pm} + 2\pi m) + \eta \ln |Z_{\pm}|] = 0 \quad (6.1.9)$$

erfüllen, wird die richtige Schichtdicke

$$d_{\pm} = \frac{\lambda}{4\pi(\eta^2 + \gamma^2)} [\eta(\theta_{\pm} + 2\pi m) - \gamma \ln |Z_{\pm}|] \quad (6.1.10)$$

berechnet. Des mangelnden Platzes halber wird die folgende Diskussion auf nichtabsorbierende Schichten beschränkt, wobei $k=0$. Deshalb kann sowohl n als auch d durch die einwinklige Ellipsometrie bestimmt werden. Wenn der Realteil vom imaginären Teil (10) (2.5.18) getrennt wird, können η und γ explizit als Funktionen von n und k ausgedrückt werden. Es folgt, dass für nichtabsorbierende Schichten $\gamma=0$ gilt. In der Selektionsfunktion (6.1.8) wird der m enthaltende Faktor, $(\theta_{\pm} + 2\pi m)$, mit γ multipliziert, der zu Null wird. Folglich wird die Selektionsfunktion (6.1.8) ausschliesslich von n und der Wahl der Wurzel bestimmt. Selbst bei richtigem n und der richtigen Wurzel wird die Selektionsregel (6.1.9) von allen m erfüllt. Da die Schichtdicke, d_{\pm} (6.1.10), abhängig von der Wahl von m ist, wird sie nicht durch die Selektionsregel eindeutig bestimmt. Die Schichtdicke, gegeben durch

$$d_{\pm} = \frac{\lambda}{4\pi\eta} (\theta_{\pm} + 2\pi m) \quad (6.1.11)$$

ist mehrdeutig bezüglich der Wahl von m . Nach dem Umschreiben folgt

$$d_{\pm} = \lambda\theta_{\pm}/4\pi\eta + m\lambda/2\eta \quad (6.1.12)$$

Die gleichen Lösungen von n entspricht einer Folge von Schichtdicken, die durch eine Periode von

$$d_p = \lambda/\eta \quad (6.1.13)$$

abgetrennt sind. Um ein solches Suchverfahren zu implementieren, muss die Selektionsfunktion (6.1.8) für eine Folge von n innerhalb eines potentiellen Lösungsraums berechnet werden. Für jedes angenommene n muss ein Bereich von m ausgerechnet werden, bis die Schichtdicke unter den betrachteten Bereich fällt. Deswegen muss der Suchraum der Schichtdicke durch eine unabhängige Methode so eingeschränkt werden, dass die mögliche Dicken nicht über d_p schwankt und die richtige Dicke umfasst. Sowohl für Z_+ als auch für Z_- muss das Verfahren ausgeführt werden, um die korrekte Wahl der Wurzel sicherzustellen. Jedoch ist die Hälfte des Rechenaufwands überflüssig, gleichgültig ob eine Doppelwurzel vorkommt. Lediglich eine und die korrekte Wurzel ist hinreichend für die Bestimmung der korrekten Lösung. Es ist nicht nur von theoretischem, sondern auch von praktischem Interesse, eine effizientere Invertierung zu implementieren, vornehmlich für spektroskopische ellipsometrische Daten. Bedeutungsvoller ist der Vorteil, den möglichen Fehler, dem die falsche Wahl der Wurzel zu Grunde liegt,

auszuschliessen. Darüber hinaus, weil der Algorithmus weder vom Anfangswert noch vom Konvergenzverhalten einer iterativen Funktion abhängt, kann der Fehler der Ergebnisse direkt auf die Unangemessenheit des angenommenen optischen Modells zurückgeführt werden. Aus den obigen Gründen sind Vorkenntnisse über die Muster der Z_+ -Zone und Z_- -Zone in einem betrachteten Lösungsraum, indem Z_+ bzw. Z_- zur korrekten Lösung beiträgt, erforderlich. An einem bestimmten Punkt in einem Lösungsraum sind zwei Fälle möglich: (i) sowohl Z_+ und Z_- erfüllen die Selektionsregel (6.1.9) und (ii), entweder Z_+ oder Z_- ausschliesslich erfüllt die Selektionsregel. Demnach wird der Lösungsraum in Zonen partitioniert. Die Partition besteht im ersten Fall aus der $Z_+ \setminus Z_-$ -Zone, der $Z_- \setminus Z_+$ -Zone und der $Z_+ \cap Z_-$ -Zone, während sie im letzteren Fall einfach aus der Z_+ -Zone und der Z_- -Zone besteht. Zuerst ist es von fundamentaler Bedeutung zu sehen, ob die $Z_+ \cap Z_-$ -Zone überhaupt existiert und wie groß sie ist. In der Zone der Überschneidung kommt eine Doppelwurzel vor und es spielt keine Rolle, welche Wurzel verwendet wird. Demnach bleibt zu hoffen, dass sich ein einfaches Muster der Verteilung der entsprechenden Zonen abzeichnet, das für die Invertierung mit einer voraussichtlichen Wurzel passend ist.

Da $\gamma=0$ für nichtabsorbierende Schichten gilt, folgt aus (3) (2.4.20) und (10) (2.5.18), dass β reell ist. Der Exponent im Ausdruck (2) (2.4.19) wird rein imaginär. Das Kriterium zur Auswahl der korrekten Wurzel ist, dass der Betrag gleich Eins ist. Daher gelten die folgenden Kriterien

$$|Z_+|=1 \text{ oder } |Z_-|=1 \quad (6.1.14)$$

oder gleichbedeutend,

$$\ln|Z_+|=0 \text{ oder } \ln|Z_-|=0 \quad (6.1.15)$$

Um die Existenz von Doppelwurzeln zu prüfen, kann man (6.1.3) direkt gleich Null setzen:

$$\det = 0 \quad (6.1.16)$$

Alternativ für den speziellen Fall der nichtabsorbierenden Schichten kann man das Produkt von den zwei Wurzeln betrachten. Aus der Gleichung (6.1.1) folgt

$$Z_+ Z_- = \frac{(\rho_{123} D - A)}{(\rho_{123} F - C)} \quad (6.1.17)$$

Wendet man den Betrag auf beide Seiten an und betrachtet man die Beziehung (6.1.15), folgt

$$|Z_+| = \left| \frac{(\rho_{123} D - A)}{(\rho_{123} F - C)} \right|, |Z_-| = 1 \quad (6.1.18a)$$

oder

$$|Z_+| = 1, |Z_-| = \left| \frac{(\rho_{123} D - A)}{(\rho_{123} F - C)} \right| \quad (6.1.18b)$$

Wenn eine Doppelwurzel vorkommt, haben sowohl Z_+ und Z_- den Betrag 1. Daher kann

$$\left| \frac{(\rho_{123} D - A)}{(\rho_{123} F - C)} \right| = 1 \quad (6.1.19)$$

als ein Kriterium verwendet werden, um die Existenz einer Doppelwurzel zu prüfen. Nach dem Gleichsetzen von (6.1.3) und (6.1.16), der Anwendung des Absolutbetrags, Division durch $(\rho_{123} D - C)^2$ und Anwendung der Beziehung (6.1.19) kann das Existenzkriterium der Doppelwurzel auch als

$$\left| \frac{(\rho_{123} D - B)}{(\rho_{123} F - C)} \right| = 2 \quad (6.1.20)$$

ausgedrückt werden.

6.2 Wurzelwahlverteilung

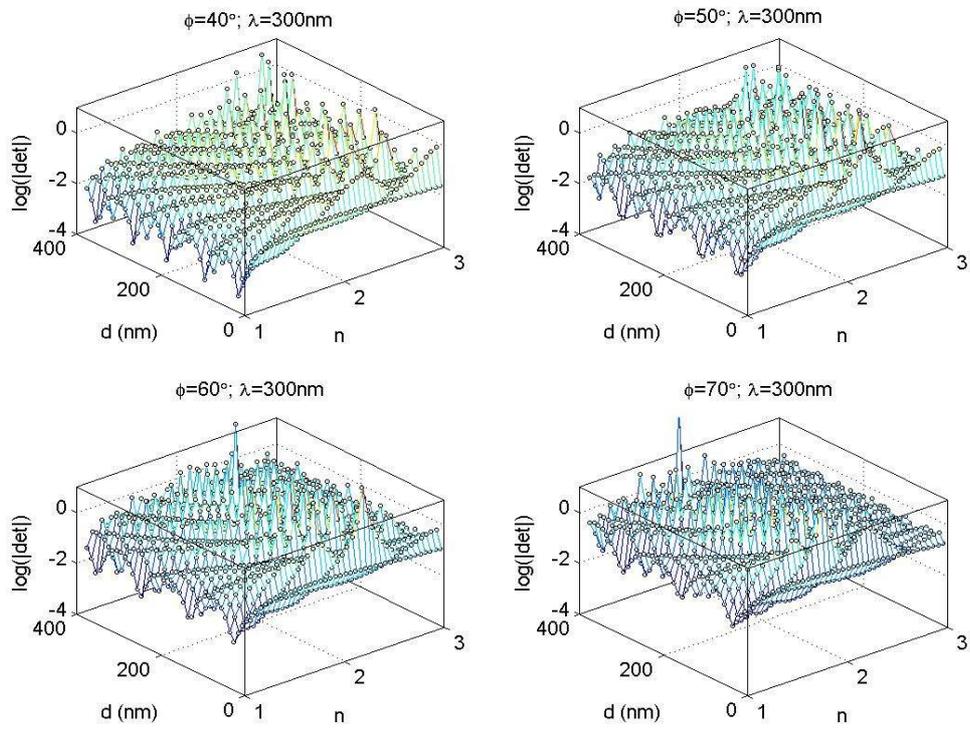
Zur Veranschaulichung wird die Abbildung von den Z_+ - und Z_- -Zonen auf folgende Bereiche beschränkt: $40^\circ \leq \vartheta \leq 70^\circ$ in Schritten von 10° und $300\text{nm} \leq \lambda \leq 700\text{nm}$ in Schritten von 100nm . Das Modell $[[1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n \ 0 \ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} \ \infty]^\dagger]^\dagger$ wird aufgebaut. Im sichtbaren Bereich ist der Brechungsindex (n) der nichtabsorbierenden Schichten üblicherweise größer als 1. Ein Unterbereich von n , $1.05 \leq n \leq 3$, in Schritten von 0.05, wird überprüft. Die Schichtdicke (d) wird auf $10\text{nm} \leq d \leq 400\text{nm}$ in Schritten von 10nm beschränkt. Laut (2.4.15), (2.4.16), (2.5.15), (2.4.19) und (2.4.20) wird die ellipsometrische Gleichung für jeden Punkt des betrachteten Bereichs simuliert. Die optischen Konstanten des Si-Substrats (Tabelle 6.2.1) wird aus der Literatur [Pal85] übernommen.

λ (nm)	n_{Si}	k_{Si}
300	5.0075	4.1620
400	5.5700	0.3878
500	4.2981	0.0713
600	3.9474	0.0273
700	3.7829	0.0121

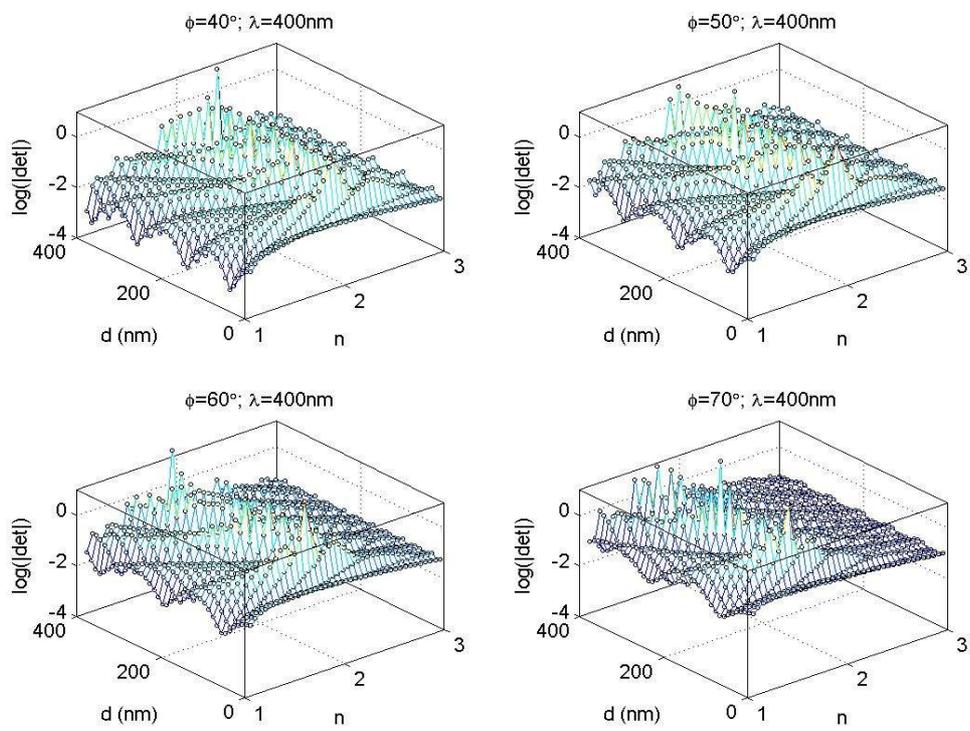
Tabelle 6.2.1: Die in der Simulation verwendeten optischen Konstanten von Si aus der Literatur [Pal85].

Die zwei Wurzeln, Z_+ und Z_- , werden nach (6.1.2) berechnet. Zuerst wird die Vorfrage betreffend der Existenz von Doppelwurzeln behandelt. $\log|\det|$ wird für den ausgewählten n - d Lösungsraum und die Messparameter berechnet. Die Verteilung wird in Abb. 6.2.1a-e aufgezeichnet. Der kleinste Wert von $|\det|$ wird in Tabelle 6.2.2 aufgeführt.

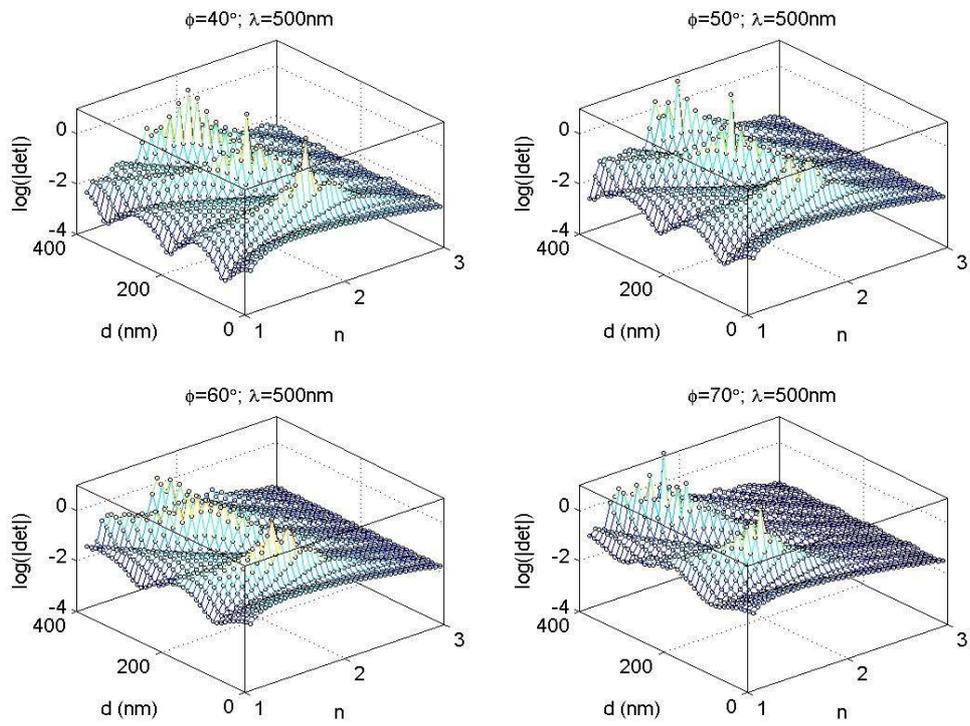
(a)



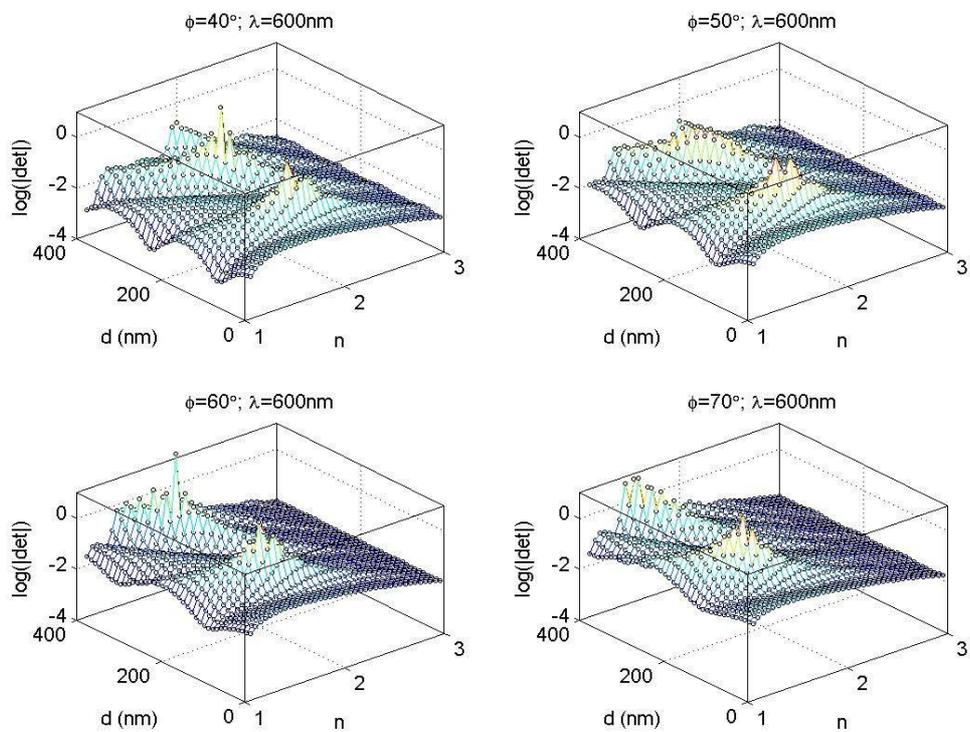
(b)



(c)



(d)



(e)

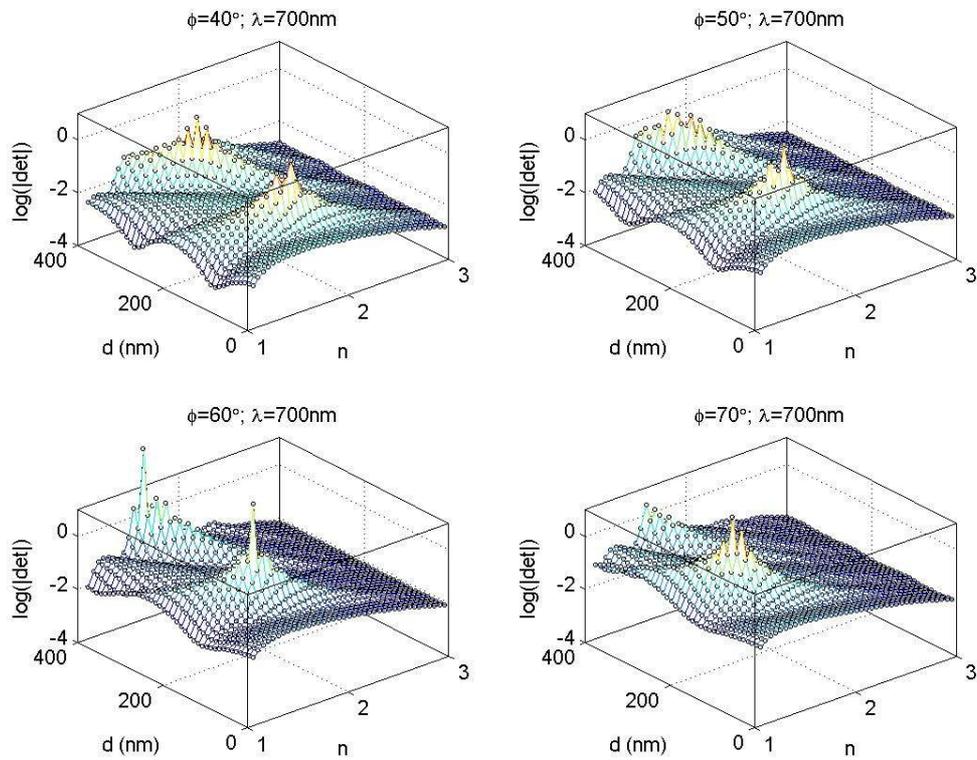


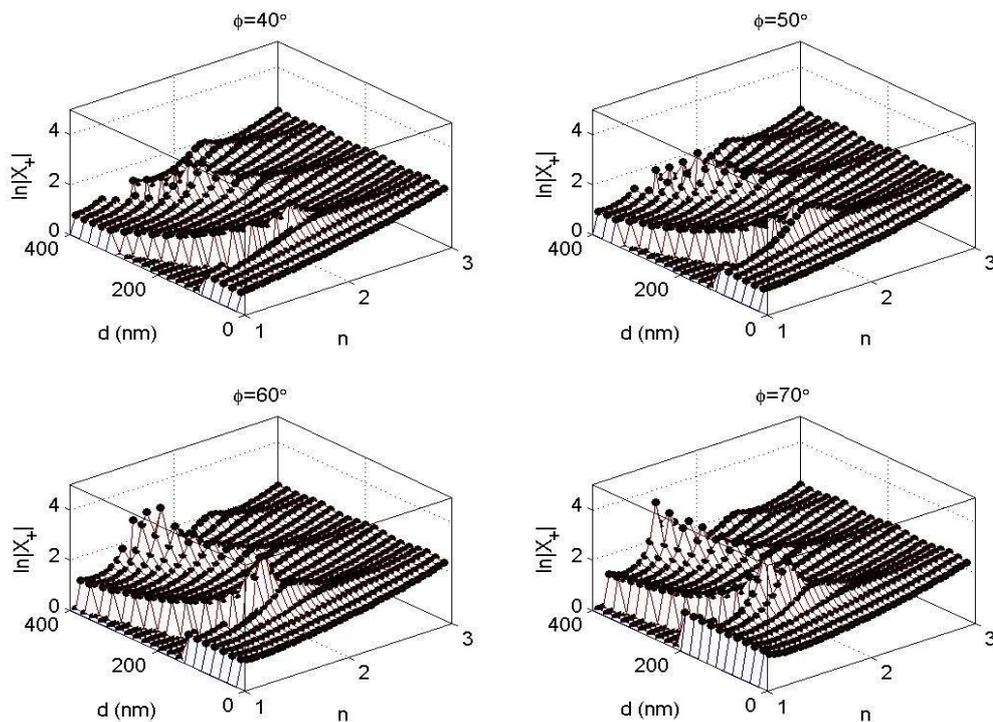
Abb. 6.2.1. Aufzeichnung der Doppelwurzelanzeiger $\log|\det|$ mit (a) $\lambda=300\text{ nm}$; (b) $\lambda=400\text{ nm}$; (c) $\lambda=500\text{ nm}$; (d) $\lambda=600\text{ nm}$; (e) $\lambda=700\text{ nm}$

λ (nm)	$\phi=40^\circ$	$\phi=50^\circ$	$\phi=60^\circ$	$\phi=70^\circ$
300	0.000214	0.0015	0.0039	0.0146
400	0.000374	0.0015	0.0062	0.0252
500	0.00049	0.0019	0.0076	0.0236
600	0.000501	0.002	0.0079	0.014
700	0.000513	0.0021	0.0066	0.01

Tabelle 6.2.2: Das Minimum von $|\det|$, für jeden betrachteten Einfallswinkel und jede Wellenlänge.

Der entsprechende Exponent liegt in der Größenordnung von -3 . Bei einer Doppelwurzel gilt $\log|\det|=\infty$, was bei der maschinellen Implementierung dem Exponent von -99 entspricht. Daraus lässt sich auf die Abwesenheit der Doppelwurzel schliessen, es sei denn eine Doppelwurzel taucht nur gelegentlich bei einem Suchraum mit einer feineren Auflösung auf. Daher wird der n - d Lösungsraum in disjunkte Z_+ - und Z_- -Zonen partitioniert. Um die Zonen kartographisch zu erfassen, müssen $\ln|Z_+|$ und $\ln|Z_-|$ nachgeprüft werden. Die 3-dimensionale Darstellung von $\ln|Z_+|$, wird in Abb. 6.2.2a gezeigt. Sie ähnelt an eine Küste platschender riesiger Flutwellen. Die Wellen kommen von der Richtung der größeren n während das Tiefland sich bei niedrigeren n befindet. Die Darstellung von $\ln|Z_-|$ (Abb. 6.2.2b) ist genau umgekehrt. Sie ähnelt zerklüfteten Klippen am ruhigem Meer.

(a)



(b)

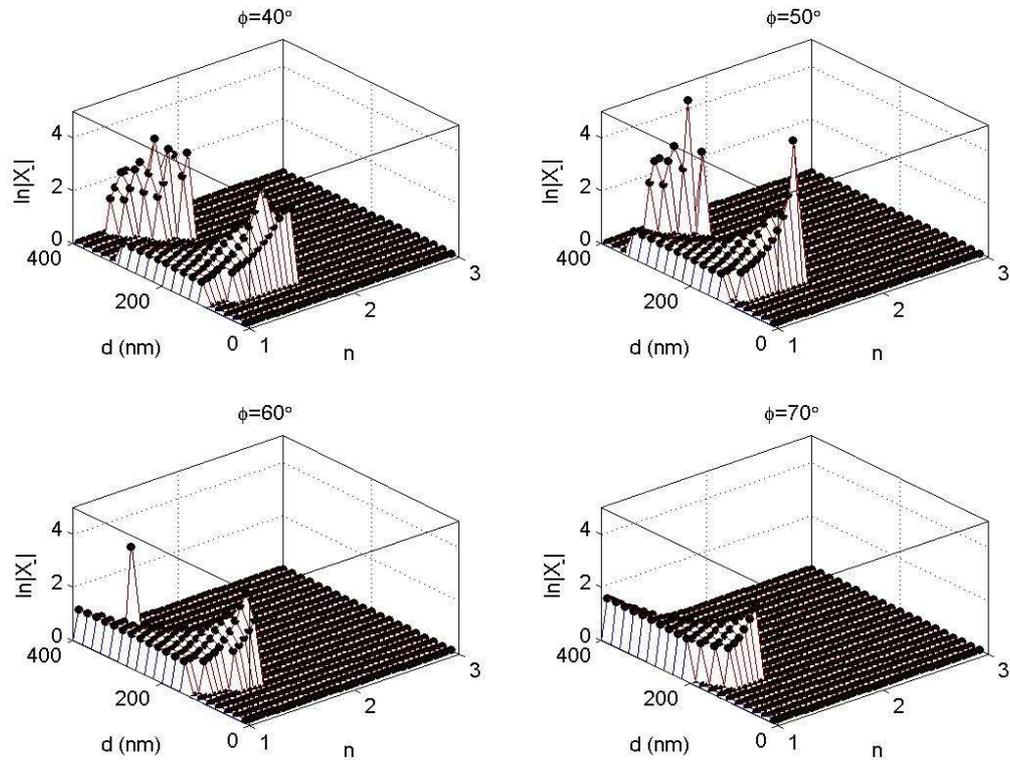
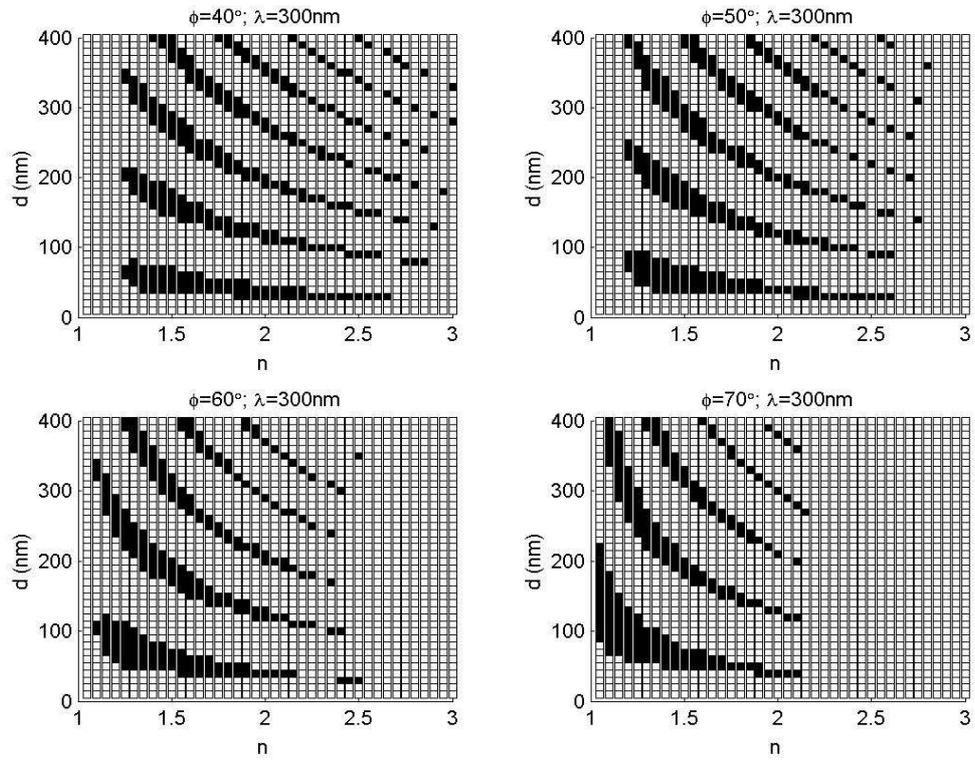


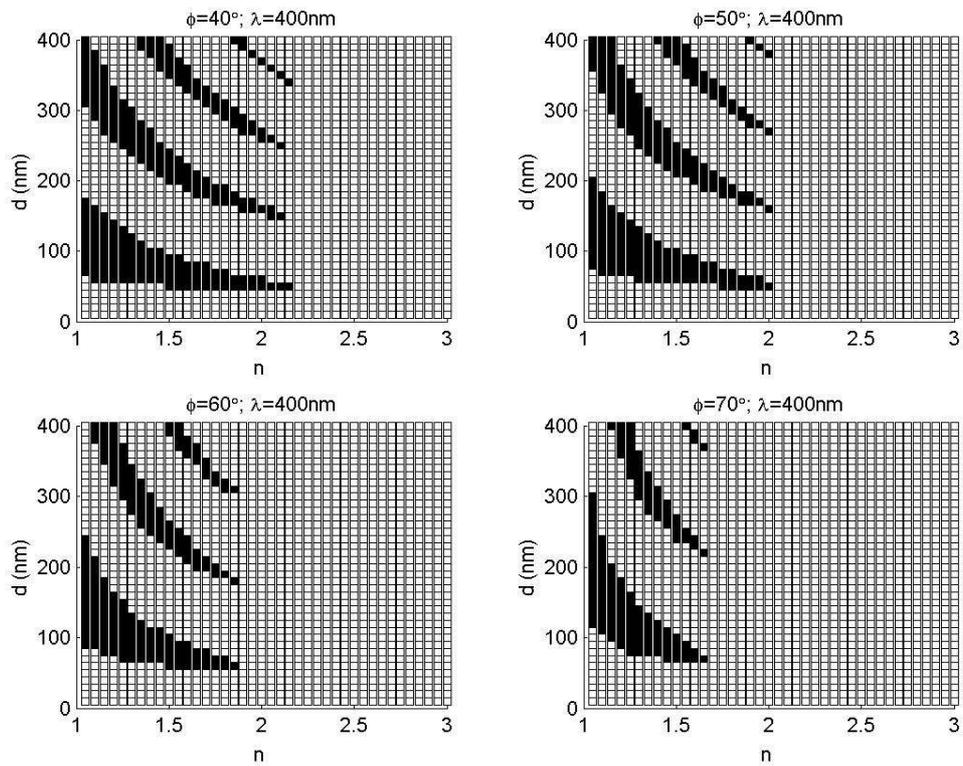
Abb. 6.2.2. 3-D Darstellung von $\ln|Z_+|$ (Abb. a) bzw. $\ln|Z_-|$ (Abb. b) als eine Funktion von der Dicke d und dem Brechungsindex n , an $\lambda=700\text{nm}$, für den Bereich $1.05 \leq n \leq 3$ in Schritten von 0.05 und $10\text{nm} \leq d \leq 400\text{nm}$ in Schritten von 10nm.

Von größerem Interesse für eine potentielle Anwendung ist die Vogelperspektive. In der Abwesenheit der Doppelwurzel gilt $\ln|Z_-| \neq 0$ gerade in der Zone, in welcher $\ln|Z_+|=0$ gilt und die von jetzt an als Z_+ -Zone bezeichnet wird. Umgekehrt gilt $\ln|Z_+| \neq 0$ in der Zone, in welcher $\ln|Z_-|=0$ herrscht (fortan die Z_- -Zone). Nach der Projektion der 3-dimensionalen geologischen Struktur der Steilküste auf die n - d Ebene entsteht ein allgemeines Bild, das enge Fransen der Z_+ -Zone (schwarz) auf einem Hintergrund aus der zusammenhängenden Z_- -Zone zeigt (weiss) (Abb. 6.2.3a-e).

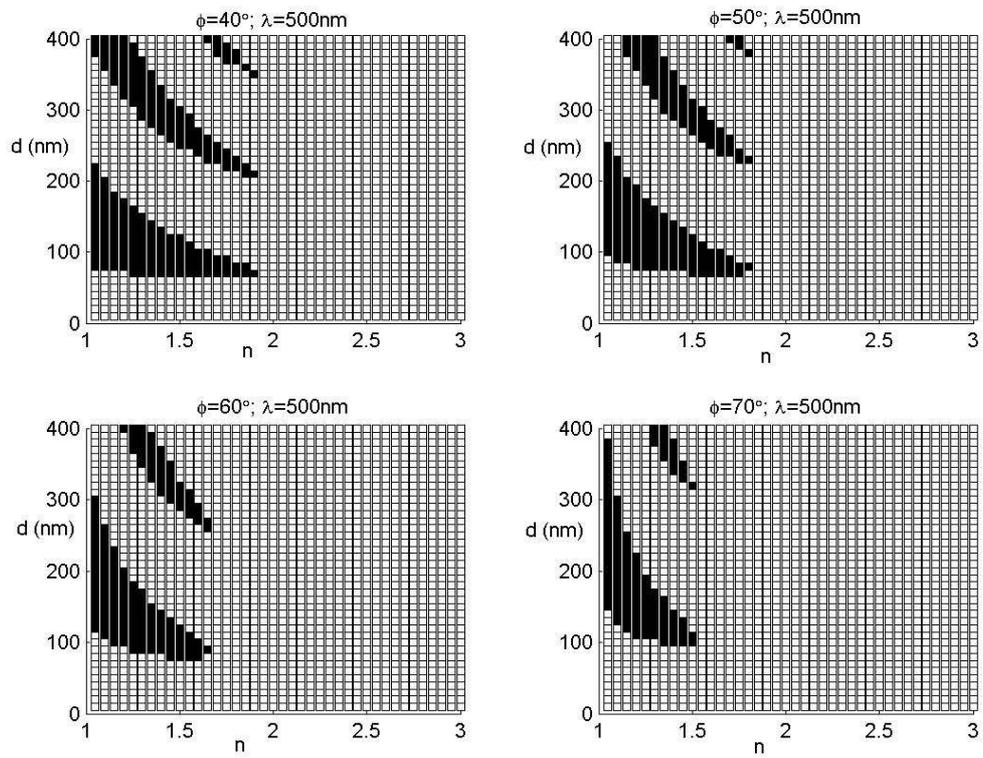
(a)



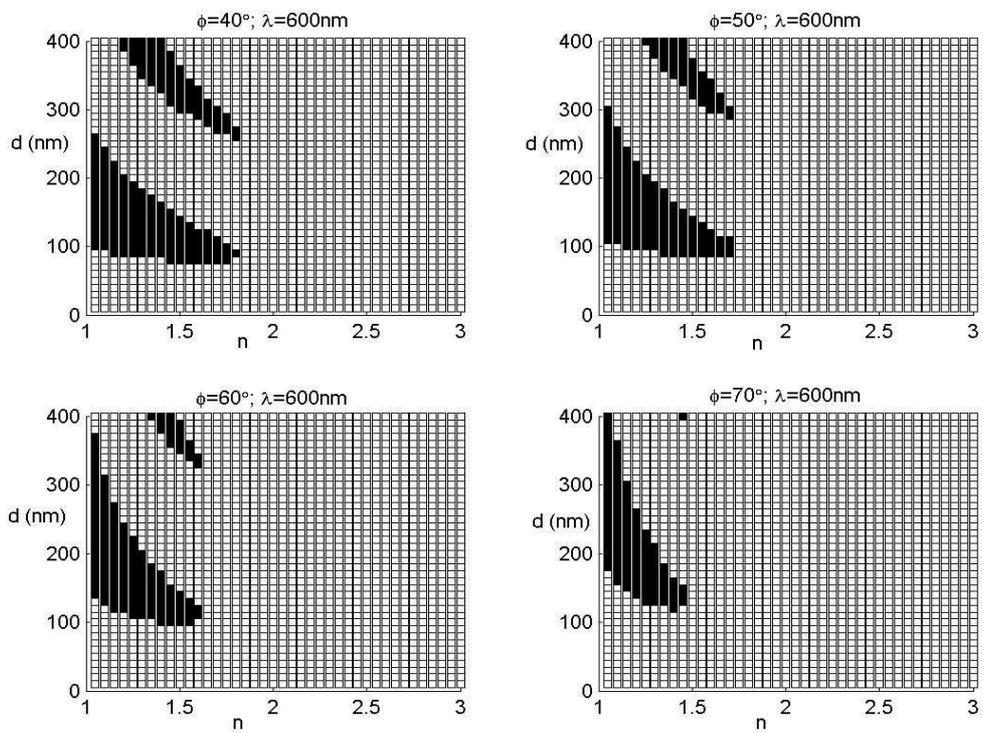
(b)



(c)



(d)



(e)

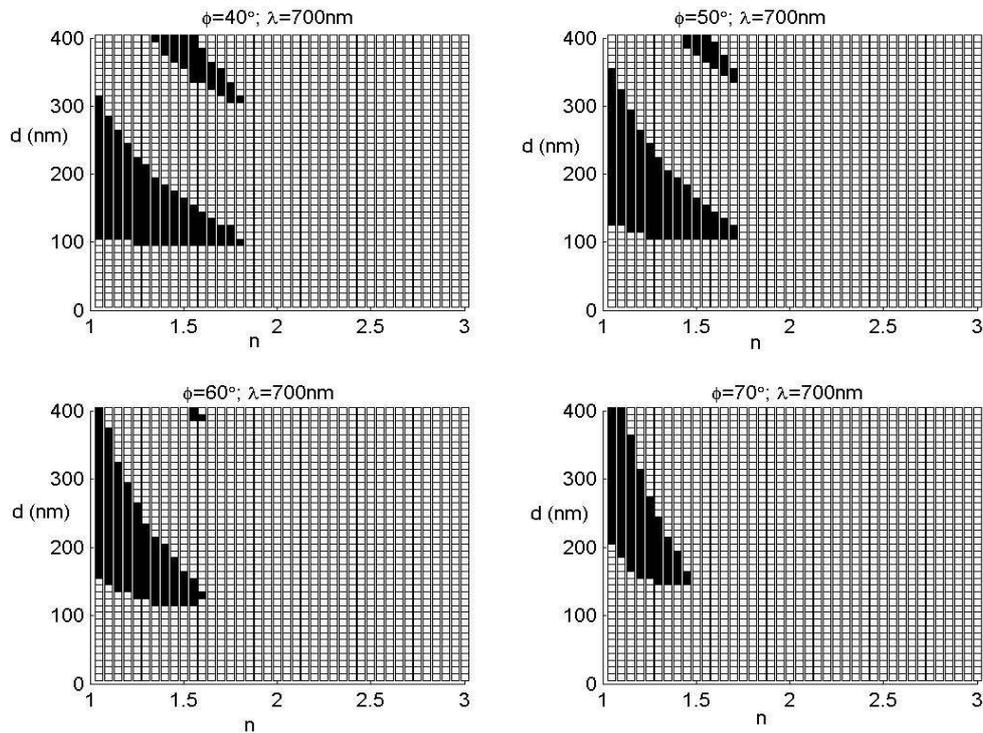


Abb.6.2.3: Partition des n - k Lösungsraums in Z_+ - und Z_- -Zone bei (a) $\lambda=300\text{nm}$, (b) $\lambda=400\text{nm}$, (c) $\lambda=500\text{nm}$, (d) $\lambda=600\text{nm}$, bzw. (e) $\lambda=700\text{nm}$. Berechnet werden $\ln|Z_+|$ und $\ln|Z_-|$ als eine Funktion der Schichtdicke d und des Brechungsindex n , im Bereich $1.05 \leq n \leq 3$ in Schritten von 0.05 und $10\text{nm} \leq d \leq 400\text{nm}$ in Schritten von 10nm unter Winkeln $\phi=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Bei jedem betrachteten Punkt ist $\ln|Z_+|=0$ als schwarze Vierecke dargestellt während $\ln|Z_-|=0$ als weisse Vierecke dargestellt ist.

Im Großen und ganzen, zutreffend für die Entwicklung bezüglich der Wellenlänge und des Einfallswinkels, ist die Partition in die zwei Zonen nicht nur flächenmässig ungleich sondern auch betreffend Gestalt asymmetrisch. Bei bestimmten ϕ und λ werden sie mit zunehmendem n dünner. Ein Vergleich der Darstellungen verschiedener Wellenlängen und Winkeln weist darauf hin, dass die Z_+ Fransen mit abnehmenden ϕ und λ dünner und dichter werden. Bei festgehaltenen n wechseln sich die Z_+ -Zone und die Z_- -Zone beinahe periodisch ab. Die Periode der Abwechslung zwischen der Z_+ -Zone und Z_- -Zone nimmt mit steigenden ϕ und λ zu. Dazu wird die Ausdehnung der Fransen auf ein niedrigeres n zurücktreten. Eine Extrapolation der Fransenspitzen definiert eine Küstenlinie. Die konkrete Werte von n an allen im betrachteten n - d Raum auftretenden Fransenspitzen werden in Tabelle 6.2.3 aufgeführt.

Wellenlänge (nm)									n_{\perp}
300	n	2.155	2.156	2.153	2.155	2.156	2.156	2.155	2.157
	d	38	115	193	270	347	424	502	
350	n	1.914	1.914	1.914	1.914	1.913			1.915
	d	53	158	263	368	413			
400	n	1.666	1.666	1.666	1.666				1.667
	d	73	218.5	364	509				
450	n	1.565	1.565	1.565					1.566
	d	90	270	450					
500	n	1.522	1.522						1.523
	d	105	314.5						
550	n	1.497	1.497						1.498
	d	118	354						
600	n	1.481	1.481						1.482
	d	131	393						
650	n	1.469	1.469						1.470
	d	144	432						
700	n	1.461	1.461						1.462
	d	156.5	469.5						
750	n	1.455	1.455						1.456
	d	169	506						
800	n	1.450	1.450						1.451
	d	181	543.5						

Tabelle 6.2.3: Die spektrale Entwicklung der Obergrenze jeder Z. Franse und des n_{\perp} im Wellenlängenbereich $300\text{nm} < \lambda < 800\text{nm}$ in Schritten von 50nm mit einer Auflösung von 0.001 in n und 1nm in d .

Im Hinblick auf die Voraussagbarkeit der Wurzelwahl ist das Gebiet rechts von der Küstenlinie einfacher zu berücksichtigen. Nach einer pragmatischen Ansicht kann die n - d Ebene grob in eine linke Region, $D_{<}$, und eine rechte Region, $D_{>}$, durch eine senkrechte Linie aufgeteilt werden. Die Grenzlinie $n=n_{\perp}$ (Tabelle 6.2.3) liegt an der Spitze der längsten Franse. Mathematisch wird die Abgrenzung durch die Obergrenze der größten Abszisse der Z_{+} -Zone an einem bestimmten \varnothing und λ definiert. Die Region $D_{>}$, in welcher $n > n_{\perp}$ gilt, besteht gänzlich aus der Z -Zone. Die Region $D_{<}$, in welcher $n < n_{\perp}$ gilt, umfasst sowohl alle Fransens der Z_{+} -Zone als auch unterbrochene Teile der Z -Zone. Interessanter ist die Region $D_{>}$, weil dort die

Invertierung ausschliesslich anhand Z_- ausgeführt werden kann. Die Voraussagbarkeit der Z_- als Wurzelwahl ist dort günstiger, wo sowohl ein größeres kompaktes Gebiet aus der Z_- -Zone als auch eine größere Region $D_>$ zur Verfügung stehen. Diese Bedingungen treffen bei größerem λ und ϑ zu, denn einerseits nimmt n_{\perp} ab und andererseits werden die Z_+ Fransen dicker und spärlicher. Da die Dispersionsrelation nicht von ϑ abhängt, ist für diesen Ansatz eine Vielzahl von Materialien geeignet. Im jetzigen Fall ist $D_>$ am größten bei $\vartheta=70^\circ$. Sofern nicht anderweitig erwähnt, gilt $\vartheta=70^\circ$ bei einwinkliger Messung.

λ (nm)	Al_2O_3	TiO_2	n_{\perp}
300	1.8148	---	2.15
400	1.7862	3.2861	1.65
500	1.7747	3.0300	1.50
600	1.7680	2.9000	1.45
700	1.7633	2.8300	1.45

Tabelle 6.2.4: Brechungsindexe von Aluminium und Titanoxid im Vergleich mit der Abszisse der Grenzlinie $n=n_{\perp}$ bei $\vartheta=70^\circ$, die als Obergrenze der Abszisse der Z_+ -Zonen ausgesehen werden kann. Der Brechungsindex von Titanoxid bei $\lambda=300\text{nm}$, wo der Absorptionskoeffizient ungleich Null ist, wird nicht angegeben.

Trotz der zurücktretenden Küstelinie und somit kleinerwerdenden n_{\perp} mit zunehmendem λ , darf man nicht voreilig die Schlussfolgerung ziehen, dass der Höchstwert für λ zur monochromatischen Invertierung am optimalsten ist. Wegen der spektralen Abhängigkeit von n_{\perp} kann das n eines Materials bei gewissen spektralen Bereichen in $D_<$ und bei anderen Bereichen in $D_>$ fallen. Das Kriterium für das günstigste λ muss in Bezug auf die Dispersionsrelation von Materialien beurteilt werden. Was nichtabsorbierende Schichten anbelangt, nimmt das n im sichtbaren Bereich normalerweise mit steigendem λ ab. Bei den meisten Oxidschichten (siehe TiO_2 und Al_2O_3 in Abb. 6.2.4) ist die Abnahme von $n_{\perp}(\lambda)$ mässiger als der Abfall von $n(\lambda)$. Wenn n bei dem größten λ schon innerhalb Region $D_>$ liegt, wird es bei einem kleineren λ , weiter von n_{\perp} entfernt sein. TiO_2 ist ein solches Beispiel (siehe Abb. 6.2.4), wobei $n(\lambda) \forall \lambda$ beträchtlich größer als $n_{\perp}(\lambda)$ ist. Im Fall, z.B. Al_2O_3 , wo n gerade innerhalb der Region $D_<$ aber nahe n_{\perp} beim

größten λ liegt, kann sich $n(\lambda)$ so entwickeln, dass es die Grenzlinie, $n=n_1(\lambda)$, bei einem kleineren λ durchschneidet und in die Region $D_>$ eintritt. Die Durchschneidung passiert ungefähr bei $\lambda=400\text{nm}$. Da die Absorption im Falle von TiO_2 etwa bei $\lambda<400\text{nm}$ auftaucht, kann die Invertierung in beiden Fällen einfach mit Z_- ausgeführt werden, ohne sich um Z_+ zu kümmern. Dadurch wird die Hälfte des Rechenaufwands gespart. Das ist besonders angenehm für in-situ Echtzeitüberwachung und auch für die Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Invertierung. SiO_2 ist ein Material, das dem Grenzfall angehört. Obwohl die Z_+ Fransen nahe $n=n_1$ sehr dünn werden, kann die gleiche Invertierungstaktik angewendet werden, wenn eine Schichtdicke durch eine unabhängige Technik auf die Z_- -Zone abgeschätzt werden kann.

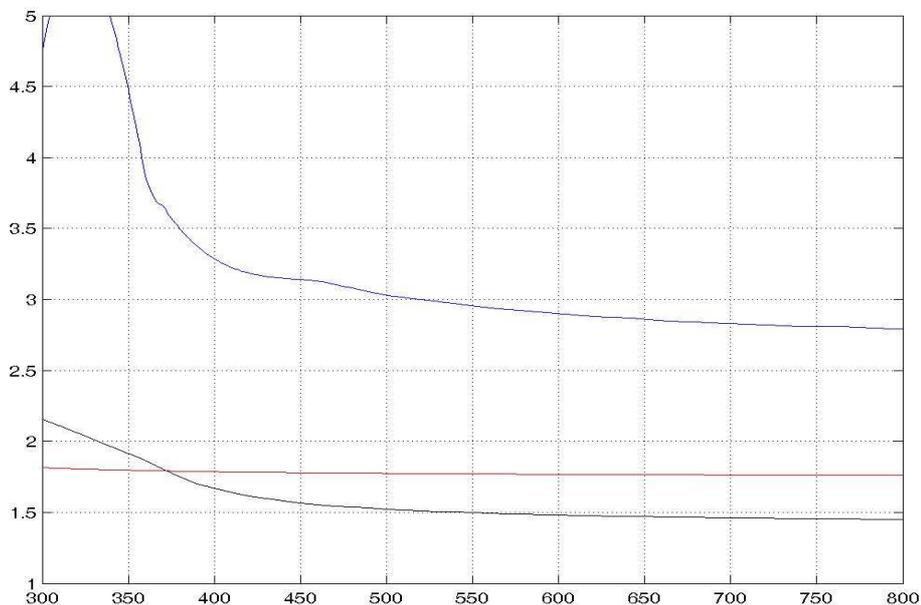


Abb. 6.2.4 Dispersionsrelation von Aluminiumoxid [Pal85] verglichen mit $n_1(\lambda)$.

Der abgekürzte Ansatz findet Anwendung sowohl in der monochromatischen als auch in der spektroskopischen ellipsometrischen Invertierung. Bei in-situ Überwachung der Filmabschneidung werden Messungen oft auf eine Wellenlänge und einen Winkel eingeschränkt. Da die Abscheidung in Echtzeit verfolgt wird, ist die Mehrdeutigkeit der Schichtdicke kein Problem. Man kann nämlich einfach mit $m=0$ anfangen bis die Schichtdicke einen bestimmten Wert erreicht, so dass die Selektionsregel nicht mehr erfüllt ist. Anschliessend wird $m=1, 2$ usw. im Laufe der Abschneidung verwendet. Um die Implementierung der in-situ Überwachung der Filmqualität zuverlässiger zu machen, ist es wünschenswert, λ und θ festzustellen,

bei welchen die Dickeperiode d_p am größten ist. Dies gilt bei größeren λ und ϑ . Bei spektroskopisch ellipsometrischer Messung eines unbekanntes Materials ohne Vorkenntnisse über die mathematische Form der Dispersionsrelation muss die Invertierung Wellenlänge-für-Wellenlänge bei allen Messpunkten durchgeführt werden. Es ist vorzuziehen, die Invertierung bei einer bestimmten Wellenlänge anzufangen, bei der die Methode mit höherer Sicherheit abläuft. Das gilt ebenso bei größeren λ und ϑ .

Des beschränkten Umfangs halber konzentriert sich die nachstehende Diskussion auf die Region $D_>$. Zunächst wird die Durchführbarkeit anhand künstlicher Messungen getestet. Die Brechungsindexe werden hinsichtlich denjenigen von Aluminiumoxid und Titanoxid für $1.5 \leq n \leq 3.5$ in Schritten von 0.01 untersucht. Das optische Modell [Luft | Schicht | Substrat] wird bei allen möglichen Kombinationen der folgenden Parameter, $20\text{nm} \leq d \leq 400\text{nm}$ in Schritten von 10nm, $300\text{nm} \leq \lambda \leq 700\text{nm}$ in Schritten von 100nm und $40^\circ \leq \vartheta \leq 70^\circ$ in Schritten von 10° , jeweils simuliert und invertiert. Bisher wird m bei der Wahl der korrekten Wurzel und bei der Berechnung des Brechungsindex nicht benötigt. Bei der Definition von θ_{\pm} ist es klar, dass die Nachprüfung für $m < 0$ nicht nötig ist.

Aus (17) (6.1.13) und (10) (2.5.18) lässt sich leicht folgern, dass d_p mit ϑ und λ bei einem bestimmten n und d zunimmt. So sind $\vartheta = 70^\circ$ und $\lambda = 700\text{nm}$ die optimale Auswahl. Da d_p mit n bei einem festen ϑ und λ abnimmt, hat Titanoxid ein kleineres d_p und folglich einen engeren Dickebereich für die Implementierung von ellipsometrischer Invertierung, wobei das m im voraus festgelegt werden muss. Die Dickenabschätzung wird schwieriger. Eine unabhängige Technik wird benötigt, die während der anfänglichen Phase des Filmwachstums geeicht wird, wobei $m = 0$ gilt.

6.3 Monochromatische Invertierung

Als nächstes wird die Durchführbarkeit der vorliegenden vereinfachten Invertierung mit Hilfe von echten Proben von Aluminiumoxid (Probe {2523a}, {2822b} und {2905d}) und Titanoxid (Probe {3211c}, {3213b}, {3407a} und {3212b}) überprüft. Die Mehrdeutigkeit wegen des periodischen Parameters m in (6.1.11) wird mit Hilfe eines Quarzkristalls grob geschätzt, um die Dicken von Aluminiumoxid- und Titanoxidschichten unter 100nm bzw. 85nm zu beschränken, damit $m=0$ gesichert ist. Eine ex-situ ellipsometrische Messung wird unter $\vartheta=70^\circ$ und $\lambda=700\text{nm}$ ausgeführt. Die gewonnenen Ψ und Δ (Tabelle 6.3.1) werden nach (2.5.15) bearbeitet, um ρ_{123} zu erhalten. ϑ , λ , n , k , $n_{\text{Si[Pal85]}}$ und $k_{\text{Si[Pal85]}}$ sind alles was man braucht, um die Koeffizienten A , B , C , D , E und F in (6.1.1) zu berechnen. $k=0$ wird angenommen nach der XPS-Bestätigung der Transparenz der abgeschiedenen Schichten. $n_{\text{Si[Pal85]}}$ und $k_{\text{Si[Pal85]}}$ werden in Tabelle 6.2.1 angegeben. $\vartheta=70^\circ$ und $\lambda=700\text{nm}$ sind die Messungsparameter. Der reelle Brechungsindex der Schicht, n , ist die einzige zu bestimmende unbekannt Variable. Eine Reihe von n -Werte, absteigend von $n=1.45$ und in Schritten von 0.01, wird eingesetzt, um Z (6.1.2) und folglich die Selektionsfunktion (6.1.8) und die reelle Dickenfunktion (6.1.10) zu berechnen. Die Ergebnisse, zusammen mit den verwendeten m , werden in Abb. 6.3.1-2 dargestellt. Die Stelle des Minimums der Selektionsfunktion legt den Brechungsindex fest. Die Projektion auf die Dickenfunktion legt die Dicke fest. Bei jeder Probe existiert ein eindeutiges Minimum der Selektionsfunktion innerhalb des betrachteten Bereichs von n .

Probe Nummer	Oxid Schichten	$\Psi(^{\circ})$	$\Delta(^{\circ})$	n	m	d (nm)
{2523a}	Aluminiumoxid	33.3580	72.2003	1.60	0	72.5
{2822b}	Aluminiumoxid	29.5678	75.4125	1.63	0	72.7
{2905d}	Aluminiumoxid	38.8516	68.4781	1.60	0	94.7
{3211c}	Titanoxid	26.8616	35.4092	2.22	0	70.3
{3213b}	Titanoxid	26.7183	37.7580	2.21	0	69.5
{3407a}	Titanoxid	15.5958	94.8714	2.20	0	33.7
{3212b}	Titanoxid	32.6179	19.9157	2.14	0	82.2

Tabelle 6.3.1: Ellipsometrische Messdaten von drei Proben von Aluminiumoxidschicht und vier Proben von Titanoxidschicht auf Silizium-Substrat, für $\vartheta=70^\circ$ und $\lambda=700\text{nm}$, mit den entsprechenden durch Invertierung bestimmten Brechungsindexe n und Dicken d . Aufgeführt sind auch die Werte der Mehrdeutigkeitsparameter m , die für die Berechnung verwendet werden.

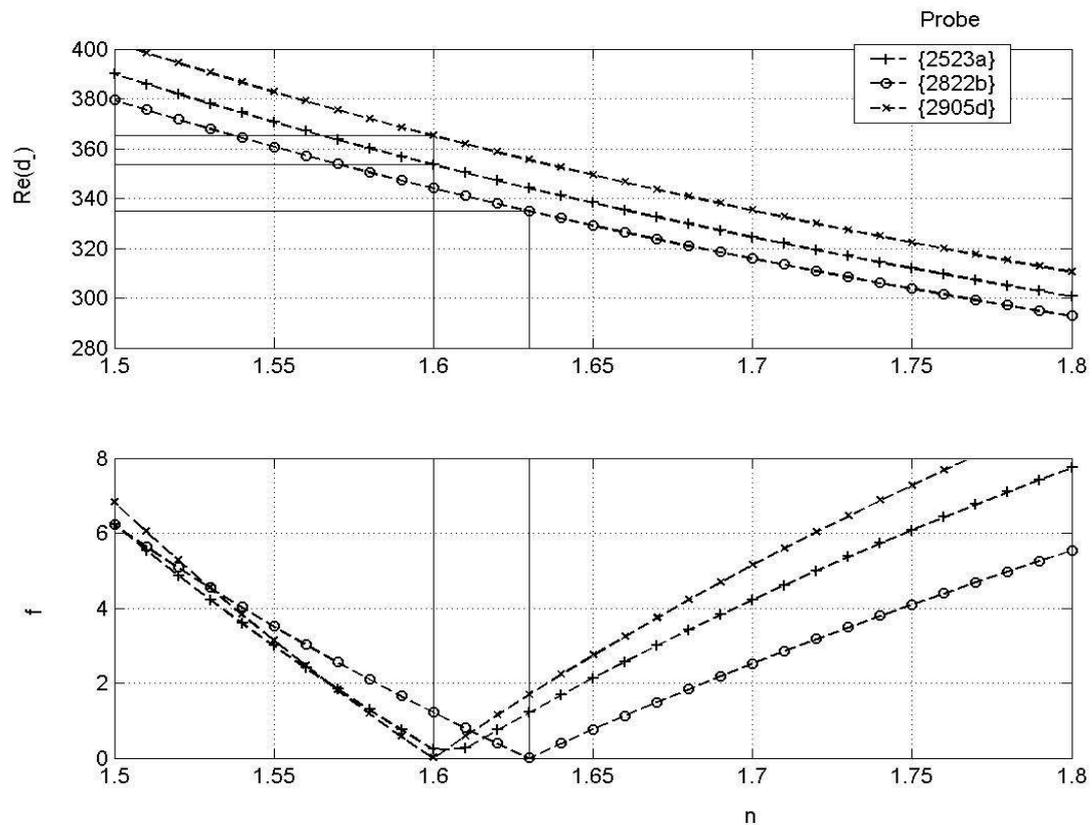


Abb. 6.3.1: Selektionsfunktion f und der Realteil der Dickenfunktion, $\text{Re}(d)$, die von ellipsometrischen Messungen an drei Proben von Aluminiumoxid für $\lambda=700\text{nm}$ und $\varphi=70^\circ$ berechnet werden. Die Stelle des Minimums der ersteren Funktion legt den Brechungsindex fest. Die Projektion auf die letztere Funktion bestimmt die in Tabelle 6.3.1 angegebenen Schichtdicken.

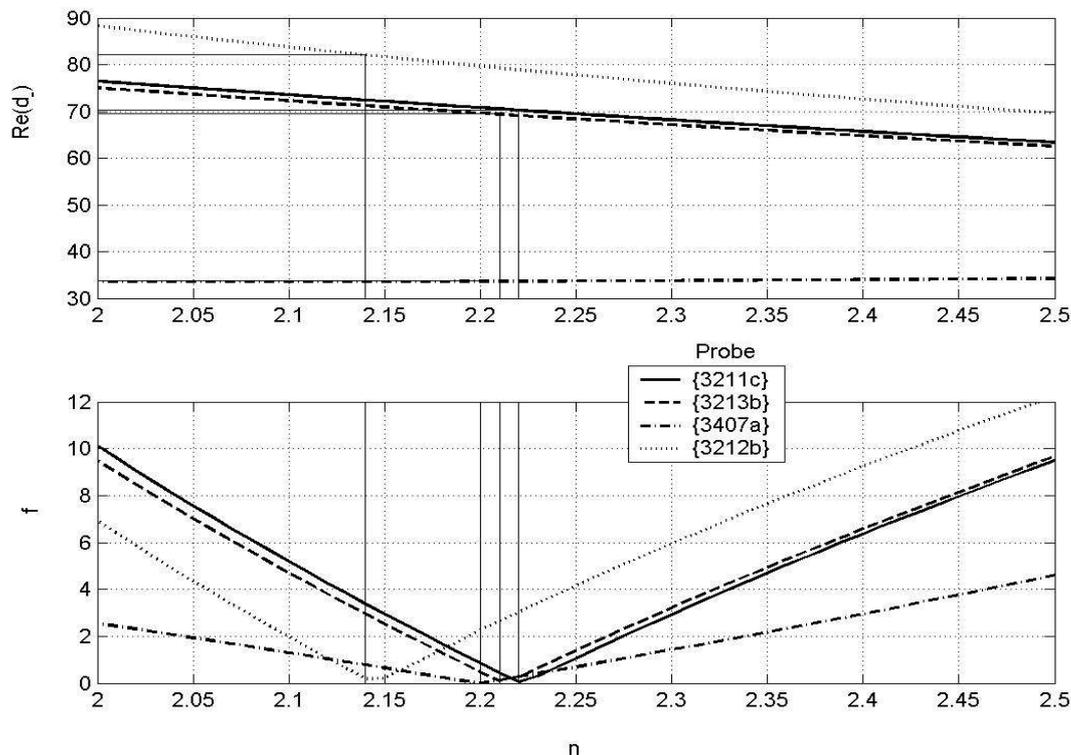


Abb. 6.3.2: Selektionsfunktion f und der Realteil der Dickenfunktion, $\text{Re}(d)$, die aus ellipsometrischen Messungen an vier Proben von Titanoxid für $\lambda=700\text{nm}$ und $\vartheta=70^\circ$ berechnet werden. Die Stelle des Minimums der ersteren Funktion legt den Brechungsindex fest. Die Projektion auf die letztere Funktion bestimmt die in Tabelle 6.3.1 angegebenen Schichtdicken.

Im Vergleich mit den Literaturwerten (Tabelle 6.2.4) sind die Brechungsindizes beider Gruppen von Oxidproben (Tabelle 6.3.1) konsistent tiefer. Der Rückgang ist für Aluminiumoxid kleiner. An Reproduzierbarkeit übertreffen Aluminiumoxid und Titanoxid mit einer Standardabweichung von 1.41% gegenüber 3.11%. Ein flüchtiger Blick lässt vermuten, dass der Unterschied zwischen dem Gruppendurchschnitt und dem Literaturwert mit der Gruppenabweichung in positiver Beziehung steht. Ob die Vermutung zulässig ist, wird eine bessere Statistik mit einer großen Anzahl Experimente und Proben zeigen. Immerhin hat der vorliegende Versuch gezeigt, dass der abgekürzte Invertierungsalgorithmus durchführbar ist und eine schnellere und sichere routinemässige Überprüfung der Filmqualität anbietet. Das ist besonders dienlich für ein in-situ Prüfprogramm, wobei die Erfassung von ellipsometrische Daten in Echtzeit so schnell wie möglich laufen sollte und die Messung zumeist auf einen Winkel und eine Wellenlänge eingeschränkt ist.

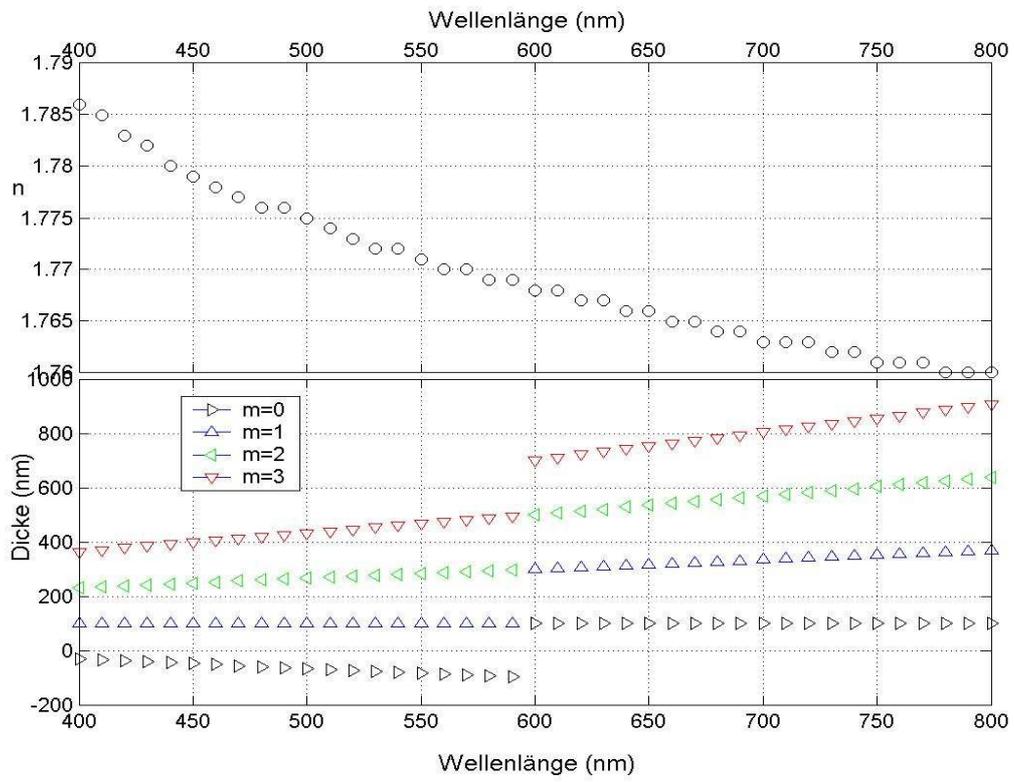
6.4 Spektroskopische Erweiterung

Der im obigen Abschnitt eingeführte abgekürzte monochromatische Invertieralgorithmus wird nun auf die Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Ellipsometrie erweitert. Die Vorhersehbarkeit der Wurzelwahl bei spektroskopischer Invertierung hängt von der spektralen Entwicklung des Z_+ - Z_- Partitions-musters und von der $D_<$ - $D_>$ Abgrenzung ab. Die Durchführbarkeit wird mit Hilfe simulierter Messungen bestätigt und anhand von Proben aus Aluminiumoxid auf Silizium-Substrat nachgeprüft, da Aluminiumoxid einfach herzustellen und zu charakterisieren ist, und da die Dispersionsrelation von Aluminiumoxid, für einen breiten spektralen Bereich--bis so tief wie $\lambda=400\text{nm}$, höher als $n_1(\lambda)$ liegt. Dabei wird gezeigt, dass der Einsatz von Messpunkten benachbarter Wellenlängen von der Schichtdickenberechnung unabhängig ist.

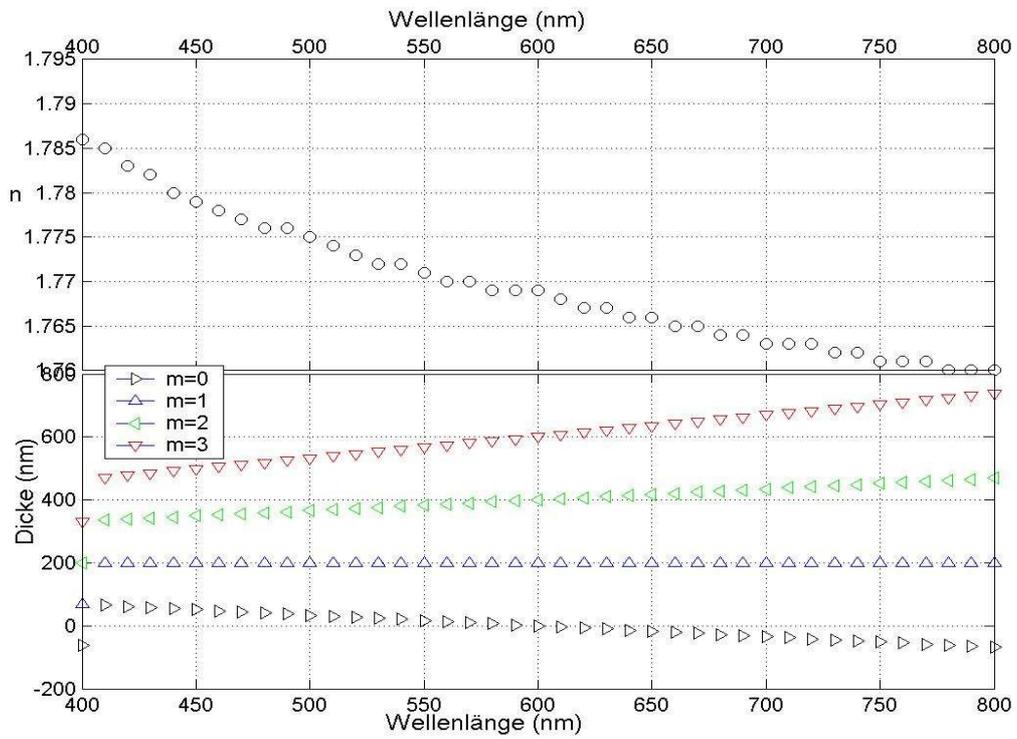
i. Invertierung der simulierten Messung

Wie im monochromatischen Fall wird die Durchführbarkeit zuerst mit simulierten Messungen überprüft. Laut den Gleichungen (2.4.15), (2.4.16), (2.5.15), (2.4.19) und (2.4.20) werden $\Psi[[1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)\ 0\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ und $\Delta([[1\ 0\ \infty]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pal85}]}(\lambda)\ 0\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ für $400\text{nm} < \lambda < 800\text{nm}$ in Schritten von 10nm , jeweils für drei Schichtdicken, $d=100\text{nm}$, $d=200\text{nm}$ und $d=300\text{nm}$ (Abb. 6.4.1), simuliert. Die optischen Konstanten aller verwendeten Materialien werden von den Tabellen 6.2.1 und 6.2.4 [Pal85] entnommen. Die Simulation wird als Messung angenommen, für die $\Psi[[1\ 0\ \infty]^\dagger [n(\lambda)\ 0\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ und $\Delta([[1\ 0\ \infty]^\dagger [n(\lambda)\ 0\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, 70^\circ)$ invertiert wird, indem man die Selektionsregel für $1.001 \leq n \leq 2$ in Schritten von 0.001 überprüft. Die Werte, die die Selektionsfunktion am geringsten halten, werden als Lösung angenommen und weiter für die Berechnung von d verwendet. Der Vorgang wird für einen eingeschränkten Bereich von m wiederholt. Abb. 6.4.1a-c zeigen die Ergebnisse der Invertierung.

(a)



(b)



(c)

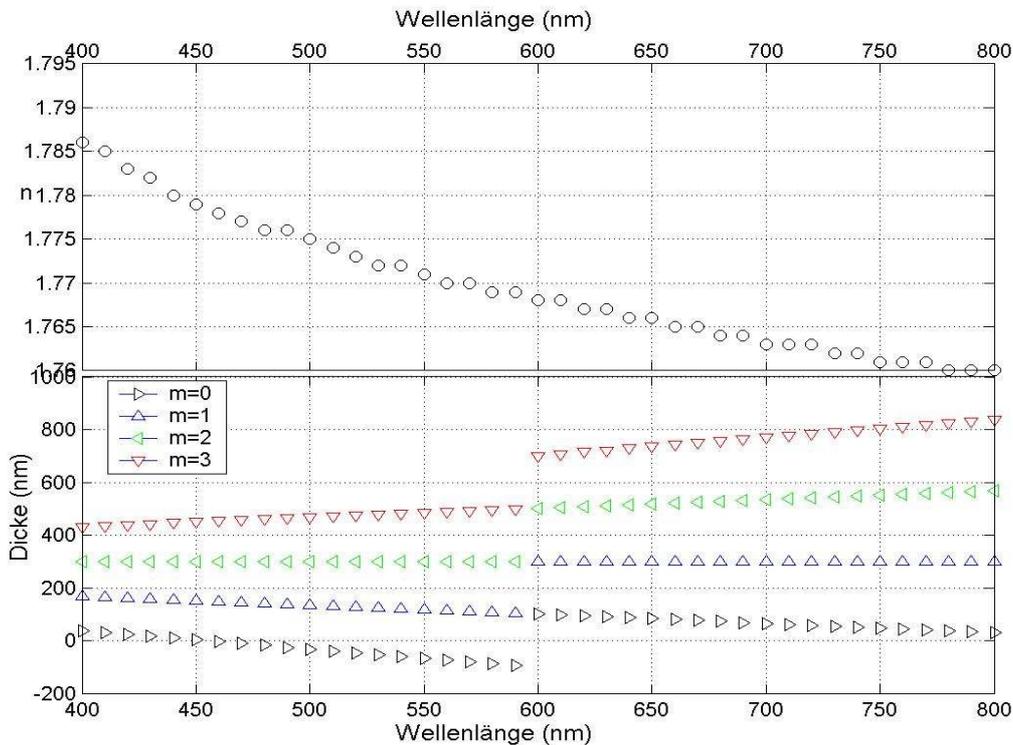


Abb. 6.4.1: Invertierung von synthetisierten Messungen $F(\llbracket 1 \ 0 \ \infty \rrbracket^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pa}185]}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pa}185]}(\lambda) \ d]^\dagger [n_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pa}185]}(\lambda) \ k_{\text{Al}_2\text{O}_3[\text{Pa}185]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger$, 70°), wobei $F=\Psi$ bzw. Δ , $400\text{nm}<\lambda<800\text{nm}$ in Schritten von 10nm, für die Schichtdicke (a) $d=100\text{nm}$, (b) $d=200\text{nm}$, (c) $d=300\text{nm}$. Die Selektionsregel wird für den Bereich $1.001\leq n\leq 2$ in Schritten von 0.001 nachgeprüft. $d_m(\lambda)$ wird mit dem resultierenden n bei verschiedenen m berechnet, die durch unterschiedliche Symbole gekennzeichnet werden.

Für jedes betrachtete m , erhält man eine spektrale Dicke, die als eine Funktion von λ dargestellt und mit m indiziert ist-- $d_m(\lambda)$. Da sowohl die Dickenperiode als auch n mit λ variieren, finden gelegentlich unstetige Sprünge bei $d_m(\lambda)$ statt. Die spektrale Entwicklung von $d_m(\lambda)$ sagt aus, ob ein m in einem bestimmten Abschnitt unter- oder überbewertet wird. Wenn alle Kurven zusammengestellt sind, sollte sich bei der korrekten Dicke eine horizontale Kurve abzeichnen, die aus den verschiedenen, m entsprechenden Abschnitten von $d_m(\lambda)$ zusammengestückt ist. Es ist naheliegend, dass spektroskopische Ellipsometrie über genügend Messpunkte im gesamten Spektrum verfügt, um eine externe Hilfsmessung zur Dickenabschätzung überflüssig zu machen. Daraus kann die spektrale Dickenfunktion als

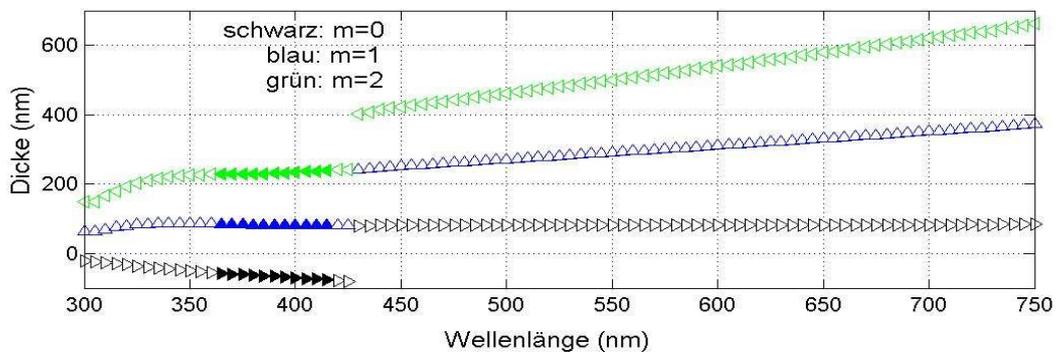
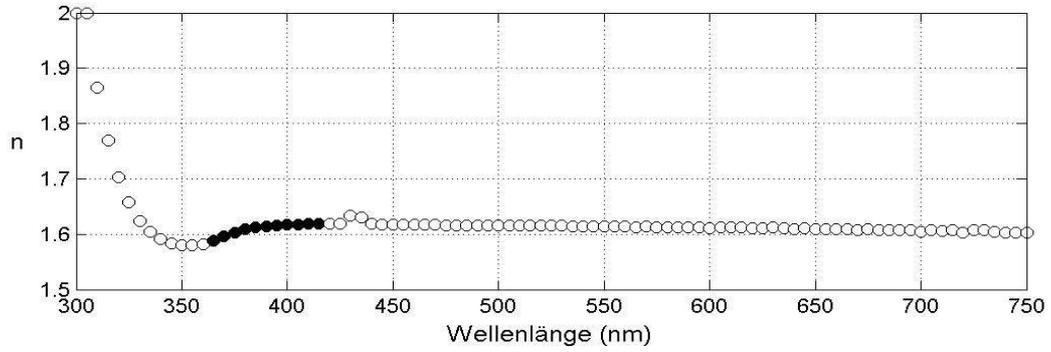
$$d(\lambda) = \begin{cases} d_{m_1}(\lambda) & \lambda_0 \leq \lambda < \lambda_1 \\ d_{m_2}(\lambda) & \lambda_1 \leq \lambda < \lambda_2 \\ \dots & \dots \\ d_{m_{l-1}}(\lambda) & \lambda_{l-2} \leq \lambda \leq \lambda_{l-1} \\ d_{m_l}(\lambda) & \lambda_{l-1} \leq \lambda < \lambda_l \end{cases} \quad \text{wenn}$$

dargestellt werden, wobei l für die Anzahl Abschnitte steht. Verschiedene Indizes von $d_m(\lambda)$ werden durch unterschiedliche Symbole hervorgehoben. Dass die Berechnung der korrekten Lösung mit Hilfe der Wurzel Z_+ oder Z_- erreicht wurde, wird durch leere, bzw. gefüllte Symbole gekennzeichnet. Abb. 6.4.1a-c bestätigen, dass die spektroskopische Invertierung, bis auf einen kleinen spektralen Bereich bei kurzen Wellenlängen, ohne Betrachtung von Z_+ ausgeführt werden kann. Die Simulation hilft dabei, die spektrale Zusammensetzung der Indizes von $d_m(\lambda)$ vorherzusagen.

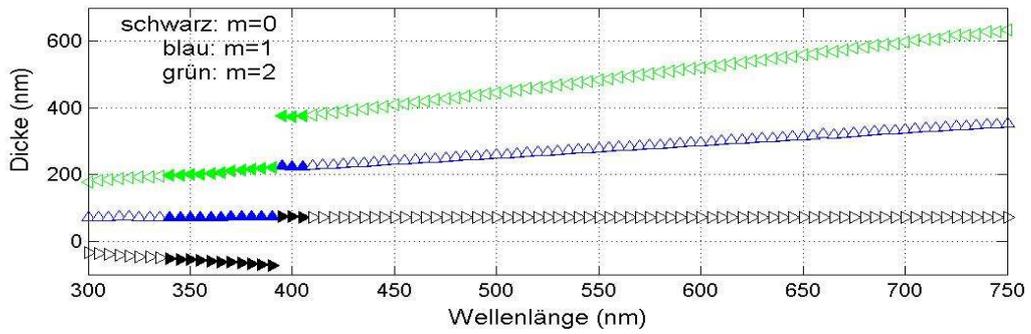
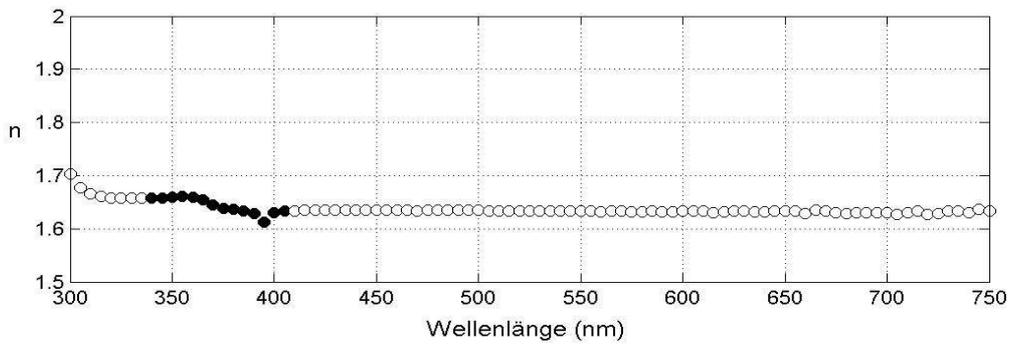
6.5 Experiment

Die Proben wurden einer ex-situ spektroskopischen ellipsometrischen Messung unter $\vartheta=70^\circ$ unterzogen. Die ellipsometrischen Messdaten wurden nach dem gleichen semi-analytischen Algorithmus wie in Abschnitt 6.4 invertiert. Die Ergebnisse sind in Abb. 6.5.1a-c dargestellt.

(a)



(b)



(c)

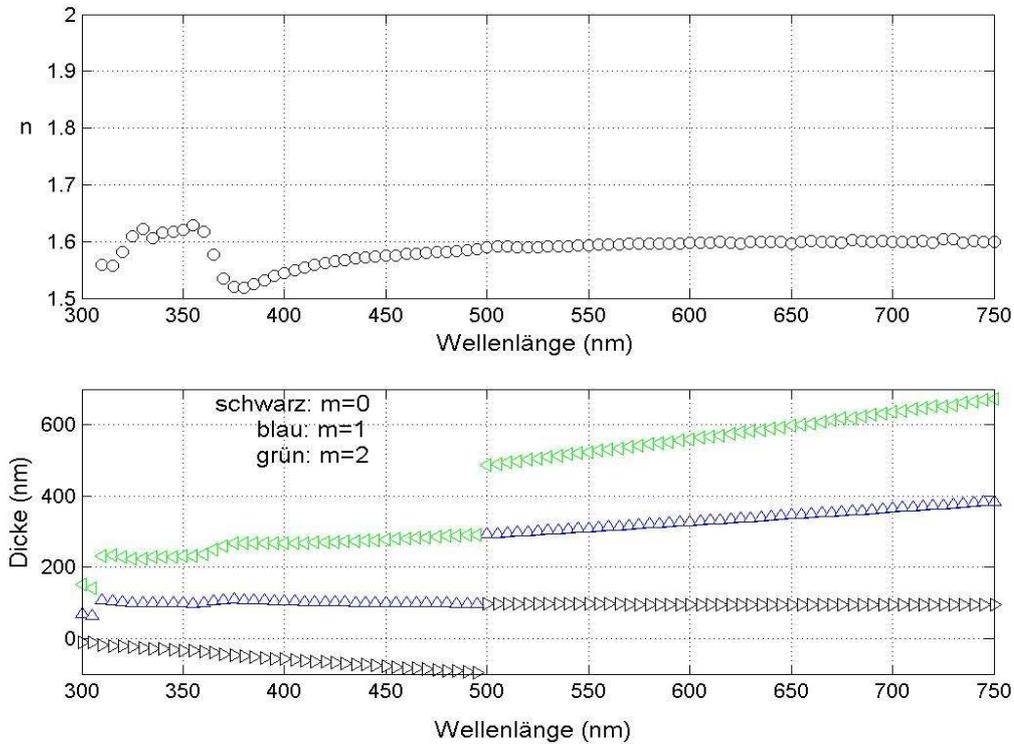


Abb. 6.5.1 Invertierungsergebnisse der spektroskopisch ellipsometrischen Messung F_{70}^{mea} {Luft | Aluminiumoxid | Si-Substrat} für (a) Probe {2523a}, (b) Probe {2822b}, bzw. (c) Probe {2905d}, für den Wellenlängenbereich $300\text{nm} < \lambda < 750\text{nm}$. Die Selektionsregel wird für $1.001 \leq n \leq 2$ in Schritten von 0.001 nachgeprüft. $d_m(\lambda)$ wird mit dem resultierenden n bei verschiedenen m berechnet, die jeweils durch unterschiedliche Symbole gekennzeichnet sind. Gefüllte, bzw. leere Symbole bezeichnen, dass die korrekte Lösung anhand der Wurzel Z_+ , bzw. Z_- , berechnet wurde.

Die jeweiligen Lösungsspektren der Schichtdicke lauten

$$d(\lambda) = \begin{cases} d_{1,-}(\lambda) & 300 \text{ nm} \leq \lambda < 365 \text{ nm} \\ d_{1,+}(\lambda) & 365 \text{ nm} \leq \lambda < 420 \text{ nm} \\ d_{1,-}(\lambda) & 420 \text{ nm} \leq \lambda < 430 \text{ nm} \\ d_{0,-}(\lambda) & 430 \text{ nm} \leq \lambda \leq 750 \text{ nm} \end{cases} \quad \text{wenn}$$

$$d(\lambda) = \begin{cases} d_{1,-}(\lambda) & 300 \text{ nm} \leq \lambda < 340 \text{ nm} \\ d_{1,+}(\lambda) & 340 \text{ nm} \leq \lambda < 395 \text{ nm} \\ d_{0,+}(\lambda) & 395 \text{ nm} \leq \lambda < 410 \text{ nm} \\ d_{0,-}(\lambda) & 410 \text{ nm} \leq \lambda \leq 750 \text{ nm} \end{cases} \quad \text{wenn}$$

$$d(\lambda) = \begin{cases} d_{1,-}(\lambda) & 300 \text{ nm} \leq \lambda < 500 \text{ nm} \\ d_{0,-}(\lambda) & 500 \text{ nm} \leq \lambda \leq 750 \text{ nm} \end{cases} \quad \text{wenn}$$

Aus den zahlreichen Kurven, die aus unterschiedlichen $d_m(\lambda)$ zusammengesetzt sind, sind die gesuchten Dickenspektren als die flachsten Kurven sofort zu erkennen. Die entsprechenden Dispersionsrelationen sind in den oberen Kasten aufgetragen. Im Gegensatz zur Theorie bleiben die Dickenspektren nicht das gesamte Spektrum hindurch konstant. Um die spektrale Dickenschwankung zu charakterisieren, gibt es beliebig viele mathematischen Mittel. Eines der einfachsten erfolgt durch Angabe des Durchschnitts, der Standardabweichung, des Maximums, des Minimums (d_{mean} , d_{std} , d_{max} , bzw. d_{min} in Tabelle 6.5.1) usw. für das gesamte Spektrum. Nach vielen Versuchen erwies sich eine solche einfache Durchschnittsbestimmung als ungenügend in Bezug auf die hohe Anforderung an die Präzision der einzelnen Schichten als Bausteine des Mehrschichtsystems.

Probe	spektraler Bereich (in Schritten von 5 nm)	d_{max}	d_{min}	d_{std}	d_{mean}	$d_{\text{std}}/d_{\text{me}}$ an
{2523a}	i. 300–750 nm	87.9527	63.0656	3.5827	81.8199	0.0438
	ii. 430–750 nm	83.6712	80.2867	0.7911	81.9469	0.0097
	iii. 430--615 nm	82.0177	80.2867	0.4064	81.3848	0.005
{2822b}	i. 300--750 nm	74.8562	70.7733	0.5099	72.4528	0.007
	ii. 410–750 nm	72.9020	71.8152	0.2172	72.3118	0.003
	iii. 410–750 nm	72.9020	71.8152	0.2172	72.3118	0.003
{2905d}	i. 300--750 nm	150.8836	64.4524	9.2376	98.7303	0.0936
	ii. 500–750 nm	97.5412	94.4155	0.8	95.6867	0.0084
	iii. 555--750 nm	96.3818	94.4155	0.4643	95.3374	0.0049

Tabelle 6.5.1: i. Gesamtes Spektrum: ii. Spektraler Bereich von $d_{0,-}$; iii: versuchte Anforderung

Eine nähere Betrachtung der in Abb. 6.5.1a-c gezeigten Lösungsspektren der Schichtdicke (Abb. 6.5.2) zeigt, dass die Fluktuationen bei kürzeren Wellenlängen sowie bei Abschnitten mit höherem m turbulenter sind. Diese Tatsache lässt sich vielleicht mit dem Partitionsmuster erklären. Erwartungsgemäss sind sowohl die Selektionsfunktionen als auch die Dickenfunktionen empfindlich gegenüber

Messfehlern und Hintergrundrauschen in der Nähe des Grenzgebietes zwischen der Z_+ - und der Z_- -Zone. Eine andere Fehlerquelle ist die sehr kleine, durch unvollständige Oxidation verursachte, nicht detektierte Absorption, die die Messungen hauptsächlich bei kurzen Wellenlängen beeinflusst. Daher sind die zum höheren spektralen Ende hin bestimmten Dicken glaubwürdiger. Es stellen sich die Fragen: Wie soll die Glaubwürdigkeit quantifiziert werden? Welcher Abschnitt des Spektrums ist als glaubhaft anzunehmen?

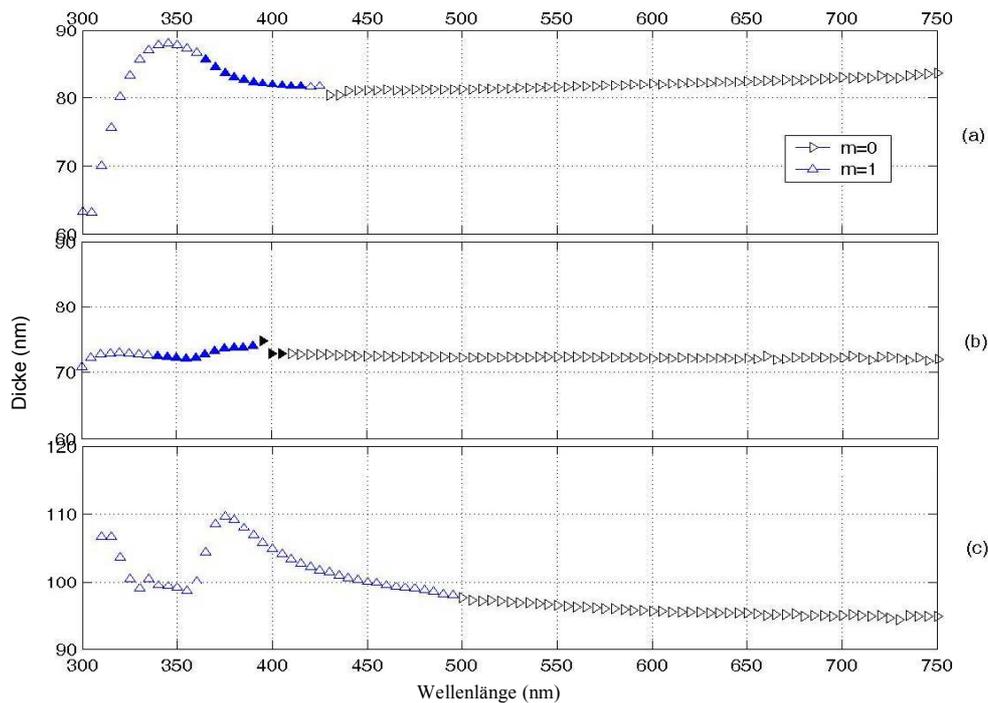


Abb. 6.5.2 Eine nähere Betrachtung der Dickelösungsfunktionen. Die unterschiedlichen Symbole kennzeichnen, dass die Lösung bei verschiedenen m berechnet wurde. Gefüllte und leere Symbole bezeichnen, dass die korrekte Lösung anhand der Wurzel Z_+ , bzw. Z_- , berechnet wurde.

Für die genannten Fragestellungen bietet die Analyse der Vorhersehbarkeit der Wurzelwahl im Abschnitt §6.2 eine schnelle Option, da die Parameter, m und Z_- -Zone, mathematisch wohl-definiert sind. Konkret erfolgt diese Option durch Auswahl des $m=0$ entsprechenden Abschnitts in der Z_- -Zone (Bereich ii, Tabelle 6.5.1) und durch Angabe der entsprechenden Schwankungsmerkmale. Der Teil des Spektrums mit höherer Schwankung wird automatisch beanstandet. Die Anforderung an die tolerierbare Schwankung wird dabei ebenfalls berücksichtigt. Dies funktioniert allerdings nur, wenn der flache Teil der Dispersionsrelation abgeschätzt werden muss. Statt immer einen Teil des Spektrums mit höherer

Schwankung abzuschneiden, muss je nach Anwendung eine Anforderung an die tolerierbare Schwankung gestellt werden. Ausser mathematisch sinnvoll zu sein, muss die Anforderung der physikalischen Realität entsprechen. Leider liefert hierzu die Literatur der Ellipsometrie weder theoretische noch praktische Hinweise.

Vor der Entwicklung eines endgültigen Algorithmus, muss man sich zuerst mit einem solchen zufrieden geben, der die Anforderung und die Charakterisierung zu quantifizieren versucht. Dabei wird die Obergrenze der maximal akzeptierenden Standardabweichung (hier: 0.005) festgelegt. Der automatisierte Algorithmus wird so viele Messpunkte wie möglich auswählen, damit $d_{\text{std}}/d_{\text{mean}}$ die voreingestellte Obergrenze nicht überschreitet. Mit diesen Punkten wird der entsprechende Durchschnitt, d_{mean} , berechnet und als Invariable für weitere Anpassungen angenommen. Eine Reihe von Versuchswerten von n wird überprüft, um denjenigen herauszufinden, der der Dickenfunktion am besten angepasst ist. Die resultierenden Dispersionsrelationen für alle drei Aluminiumoxidschichten sind in Abb. 6.5.3 dargestellt. Zum Vergleich mit den vorherigen Messungen werden die theoretischen Messungen jeweils bei den bestimmten Dicken simuliert (Abb. 6.5.4a-c). Die Angemessenheit der Lösung kann endgültig anhand visueller Übereinstimmung der Theorie und Messung oder anhand einer Anforderung an die LSQ überprüft werden.

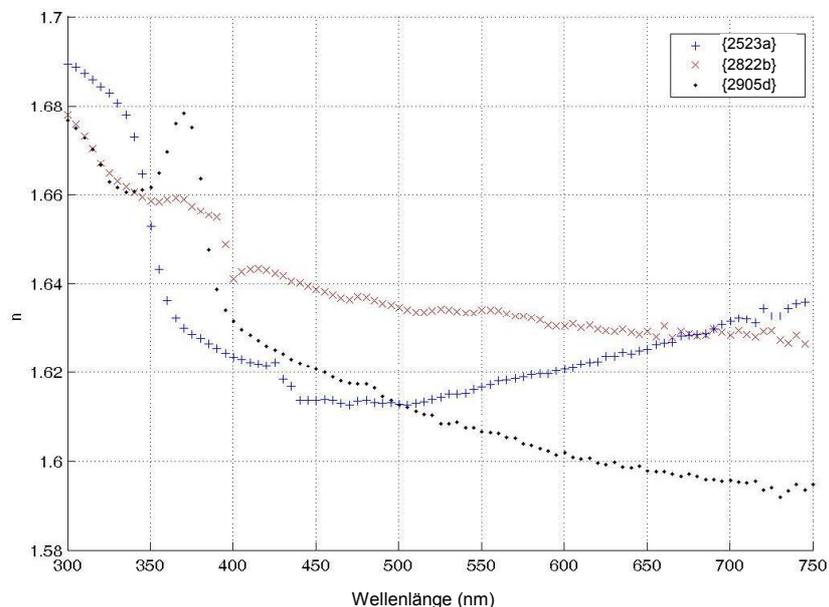
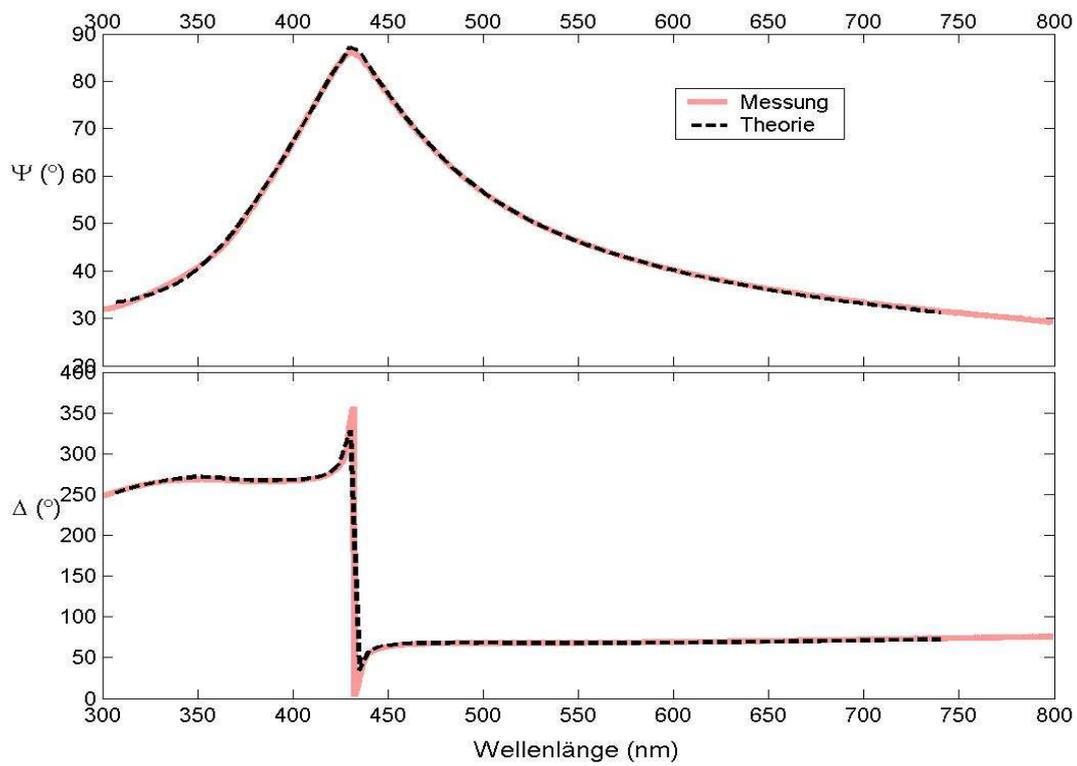


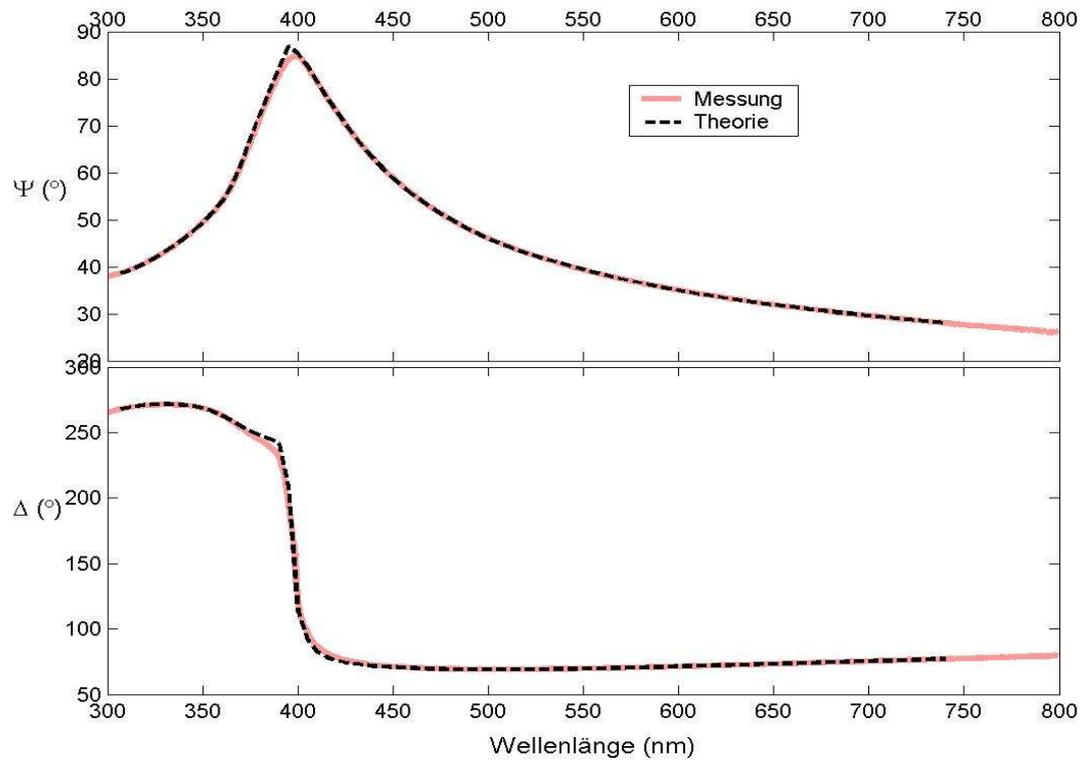
Abb. 6.5.3 Dispersionsrelationen, die wie folgt bestimmt werden. Zunächst wird die Obergrenze der Standardabweichung auf 0.005 eingestellt. Der automatisierte Algorithmus wird so viele Messpunkte wie möglich in der Weise auswählen, dass $d_{\text{std}}/d_{\text{mean}}$ die eingestellte Obergrenze nicht überschreitet. Mit diesen Punkten wird

der entsprechende Durchschnitt, d_{mean} , berechnet und als Lösung angenommen. Eine Reihe Versuchswerte von n wird nachgeprüft, um denjenigen herauszufinden, der sich der Dickenfunktion am besten anpasst.

(a)



(b)



(c)

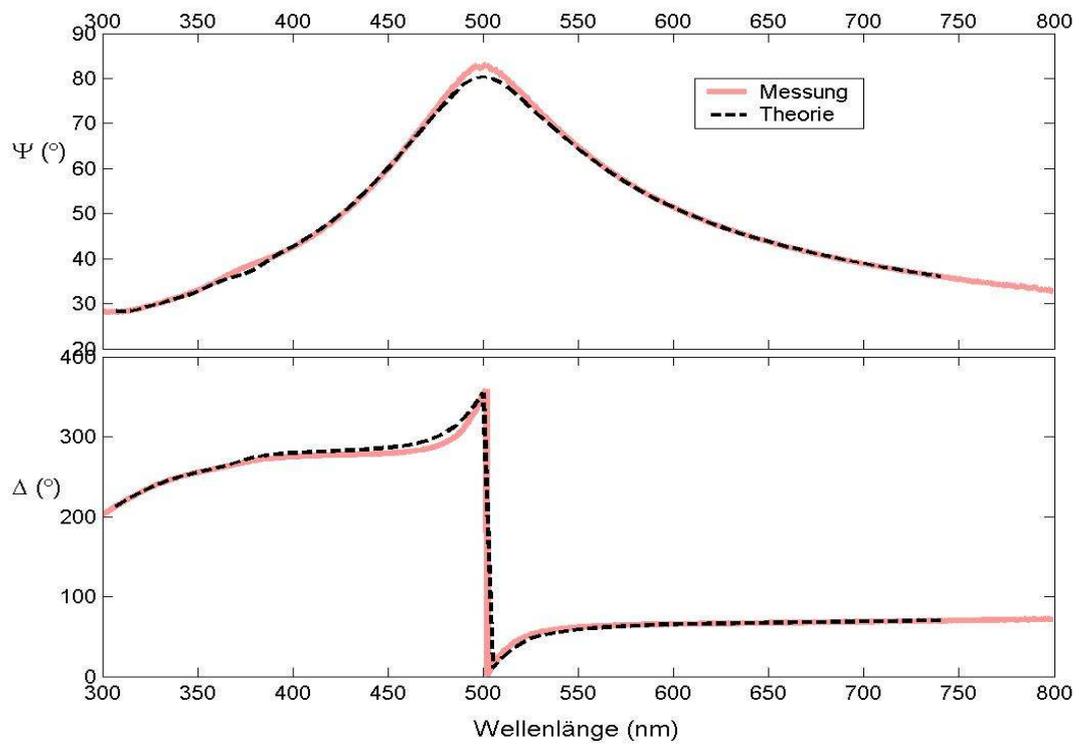


Abb.6.5.4: Spektroskopische ellipsometrische Messung an (a) Probe {2523a}, (b) Probe {2822b}, bzw. (c) Probe {2905d}, verglichen mit der an der bestimmten Schichtdicke simulierten Messung.

Entgegen der Erwartung erweisen sich die invertierten Dispersionsrelationen (Abb. 6.5.3), deren Schichtdicken aus physikalisch Erwägungen als spektroskopisch konstant angenommen wurden, als weniger natürlich und glatt, als wenn diese Annahme nicht gemacht wurde (Abb. 6.5.1). Ob hier auf Kosten der mathematischen Natürlichkeit eine bessere physikalische Realität erzielt werden kann, ist fraglich. Somit befinden wir uns in einer neuen Unschärferelation zwischen Physik und Mathematik. Bei den Veröffentlichungen, die Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung behandeln, wird die Auferlegung der spektroskopisch konstanten Schichtdicke unkritisch übernommen (). Während die Motivation der Zwangsbedingung zwar physikalischen Ursprungs ist, ist ihre Implementierung rein mathematisch. Dass die aus der Relaxation der spektralen Schichtdicken der Invertierung entstandene Dispersionsrelation mathematisch überzeugender aussieht, könnte auf eine selbstheilende Eigenschaft der betreffenden mathematischen Funktionen zurückgeführt werden. Eine solche Eigenschaft könnte möglicherweise zu Stande kommen, da die Fehlerempfindlichkeit des optischen Modells spektral unterschiedlich ist. Dieser Sachverhalt lässt sich schwer zu quantifizieren und ist daher nicht berücksichtigt worden. Ob sich dies auf eine allgemeine Selbstheilung oder Selbstvernichtung auswirkt, muss erst durch weitere Untersuchungen aufgeklärt werden. Bevor diese neue Herausforderung der Ellipsometrie erschlossen wird, wirkt die Anwendung der Relaxation zwangsläufig physikalisch naiv. Die bei der Implementierung der ungewöhnlichen Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung wird daher im nächsten Kapitel nicht mehr betrachtet.

Aus diesem Grund wird der Ablauf der Wellenlänge-für-Wellenlänge Bestimmung der Dispersionsrelation einfacher, da der Schichtdicke konstanter Wert aufgezwungen wird. Allerdings ist der Bestimmungsalgorithmus mit Hilfe einer Zusatzmessung der Schichtdicke noch einfacher. Dieser Schritt ist, im Gegensatz zur üblichen Meinung, jedoch nicht notwendig. Anders als bei der monochromatischen Bestimmung der Schichtdicke, kann der konkrete Betrag der aufgezwungenen Schichtdicke unbekannt sein, weil die Wahl von m nicht in der Selektionsregel auftaucht. Da die Dickeperiode wellenlängenabhängig ist, variiert der Mehrdeutigkeitsfaktor ebenso. Folglich wird die Mehrdeutigkeit der Dicke bei einer Wellenlänge, durch die Invertierung bei anderen Wellenlängen kompensiert. Die Mehrdeutigkeit an allen Messpunkten als Ganzes ermöglicht theoretisch, eine eindeutige Dicke festzustellen. Während die monochromatische Bestimmung der

Schichtdicke im Prinzip die Bestimmung von n beeinflusst, hängt die Glaubwürdigkeit von n indirekt von der Konsistenz der festgestellten Dicke in Bezug auf das gesamte Spektrum ab. Kurz gesagt, bereitet die Mehrdeutigkeit der Schichtdicke bei ellipsometrischer Invertierung im Gegenteil zu vielen Überzeugungen [Shu96, Alt98, Bos98, Mar00] keine wirklichen Probleme. Bei ex-situ Charakterisierung findet diese praktisch keine Anwendung mehr, da die spektroskopische Messung immer üblicher wird und spektroskopische Datenerfassung nicht viel langsamer ist als monochromatische Messung. Dank der hohen Empfindlichkeit der Ellipsometrie als eine optische Messtechnik, und aufgrund der Anforderung der Selbstkonsistenz von spektroskopischen Schichtdicken, lässt sich die Genauigkeit kaum durch andere Techniken ergänzen. Vielmehr sollte Ellipsometrie verwendet werden, um andere Techniken zu eichen. Eine Zusatzmessung der Schichtdicke unterstützt im Allgemeinen die spektroskopische Ellipsometrie nicht; und falls doch, dann nur bei in-situ monochromatischer Charakterisierung. Vielmehr hat sie die praktische Funktion, den Blick nur auf eine eindeutige Dicke zu richten und dadurch die Lösung auf die entsprechende Dispersionsrelation aufzuzwingen. Ob die dadurch gewonnene Schichtdicke und Dispersion realistischer ist, ist eine andere Frage.

Kapitel 7 Ungewöhnlicher Algorithmus zur Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung

In Kapitel 5 wurden bereits die Hauptschwierigkeiten mit dem gewöhnlichen Ansatz zur Automatisierung der Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung dargelegt. In vorliegendem Kapitel wird die Entwicklung eines eigenen Anpassungsprogramms (als *hoelp* benannt) auf der Basis eines ungewöhnlichen Ansatzes diskutiert. Ziel des Programms ist es, die Messdaten möglichst exakt, Wellenlänge-für-Wellenlänge zu invertieren und den Benutzer von übermässiger manueller Operation zu befreien. Anhand des Programms soll versucht werden, Messungen an neuartigen Filmen zu invertieren.

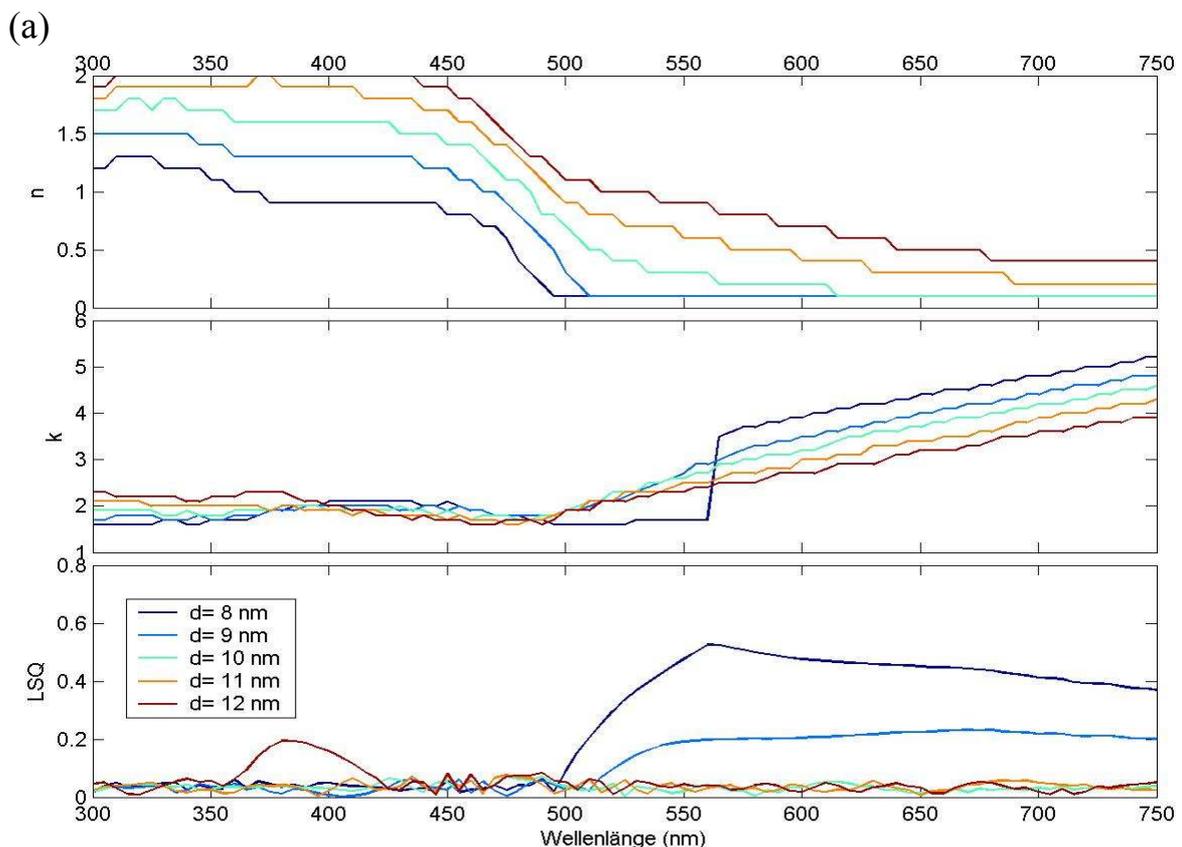
Andere Bestandteile müssen integriert werden, um das Programm zu kommerzialisieren. Im Anhang A bis D wird eine ausführliche Beschreibung des Programms und der anderen Bestandteile, von der Entwicklung bis hin zur Benutzung, geliefert. Thematisch gehen die Beschreibungen über die grundlegenden Themen hinaus und bilden so die Schnittstelle zum Forscher und Entwickler. Anhang B bietet eine Beschreibung aller Befehle und Funktionen zum Nachschlagen. Der folgende Abschnitt widmet sich der Entwicklung des Kernmoduls zur grundlegenden spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung.

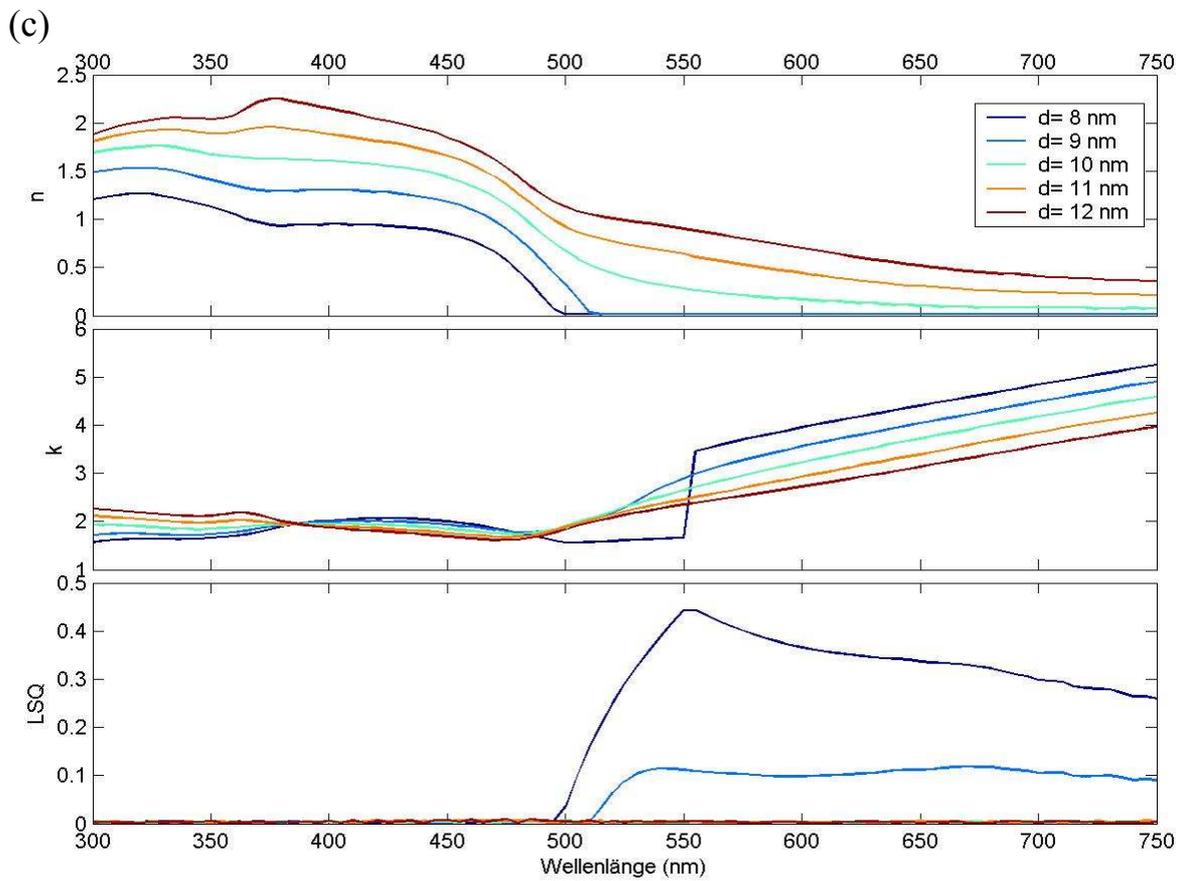
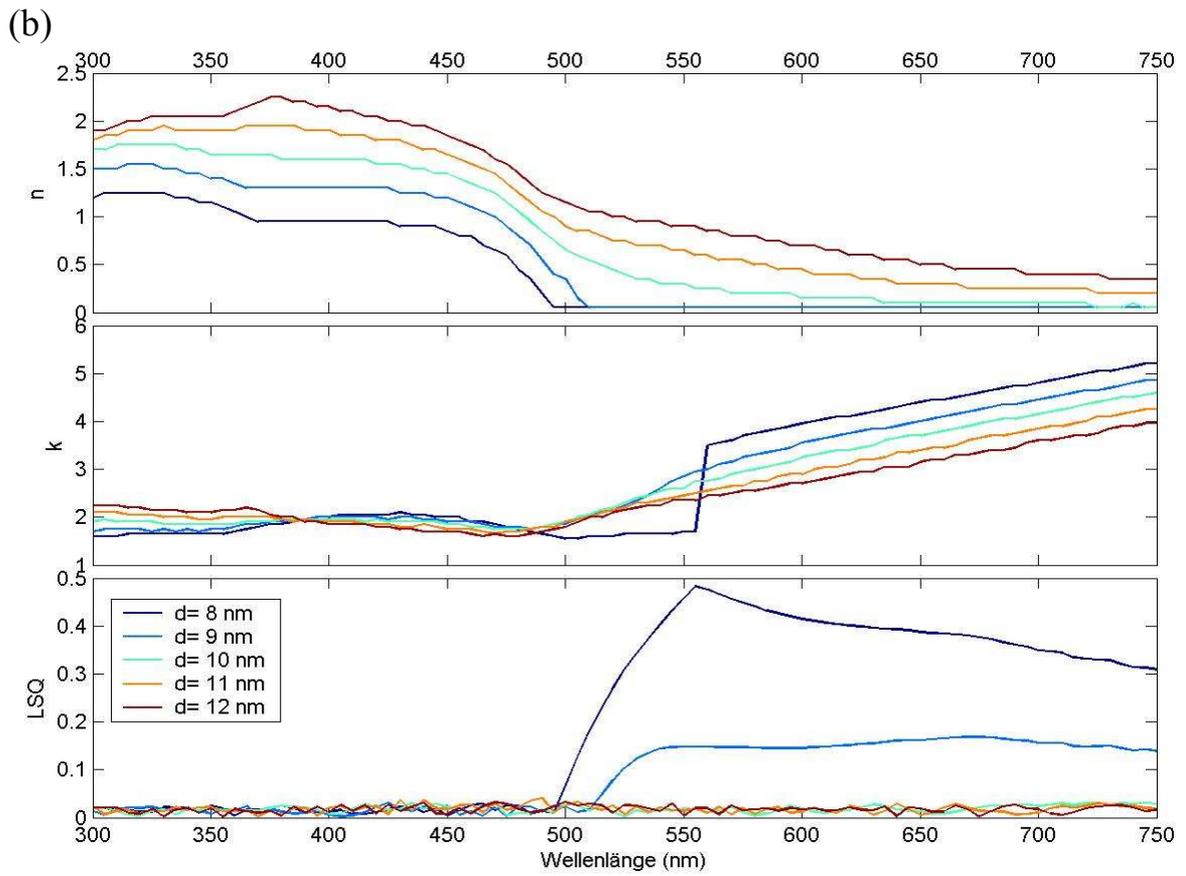
7.1 Begriff und Entwicklung

Bei einer Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopischen Invertierung im wirklichen Sinn sollte der Vorgang bei jedem spektralen Messpunkt einzeln vorgenommen werden. Im Gegensatz zum *Spectrary* Programm sollte der Invertierungsvorgang bei einer bestimmten Wellenlänge nicht von den Ergebnissen benachbarter Messpunkte beeinflusst werden. Um nicht bei jedem Messpunkt manuell einen Invertierungsvorgang starten zu müssen, ist Automatisierung notwendig. Die Hauptschwierigkeit der Automatisierung eines auf Iteration basierenden Anpassungsalgorithmus' besteht in der Wahl des Inputs und der Anpassungsbedingungen jeder Zwischenwellenlänge. Während ein in Kapitel 5 gezeigter dynamischer Ansatz bestenfalls heuristisch ist, kommt ein statischer Ansatz, bei dem die Anfangswerte auf einen gleichen Wert festgelegt werden, zweifellos nicht in Frage. Der Schwierigkeit liegt die mathematische Tatsache zu Grunde, dass ein klassischer iterativer Algorithmus im Prinzip die globale Nullstelle von den lokalen Nullstellen nicht unterscheiden kann. Er funktioniert für

Wellenlänge-für-Wellenlänge spektroskopische Invertierung nur, wenn ein geeigneter Input für jeden einzelnen Messpunkt gewählt werden kann. Die meisten iterativen Algorithmen wurden in einer Epoche, in der die Leistungsfähigkeit des Computerprozessors noch sehr beschränkt war, für monochromatische Invertierung entwickelt. Eine Erweiterung auf automatische spektroskopische Invertierung ist von Anfang an zum Scheitern verurteilt, wenn der Input und die Anpassungsbedingungen nicht spektroskopisch variierbar sind.

Es liegt nahe, dass ein eigener Algorithmus entwickelt werden muss. Dabei wird dennoch kein zeitlich intelligenter Ansatz bevorzugt. Denn die bisher stetig steigende Rechengeschwindigkeit der modernen Computerprozessoren lässt viele iterative Algorithmen veralten. Mit diesem Entwicklungstrend im Hinterkopf wird lieber ein langsamerer Ansatz berücksichtigt, der aber auf eine zuverlässige Basis zurückgreift. Was natürlich immer funktioniert ist die unmittelbare Suche durch universelle Abtastung und Vergleich. Programmierungsgemäss muss der Raum, in dem die Lösung gesucht wird, beschränkt werden. Der begrenzte Lösungsraum wird dann durch ein dichtes Netz von Punkten diskretisiert. Daher wird die Eingabe von Obergrenze $\bar{x}_{\lambda_i}^{(up)}$, Untergrenze $\bar{x}_{\lambda_i}^{(low)}$ und Diskretisierungsschritten $\bar{x}_{\lambda_i}^{(int)}$ implementiert. Die drei Parameter werden fortan als Suchbedingungen bezeichnet.





(d)

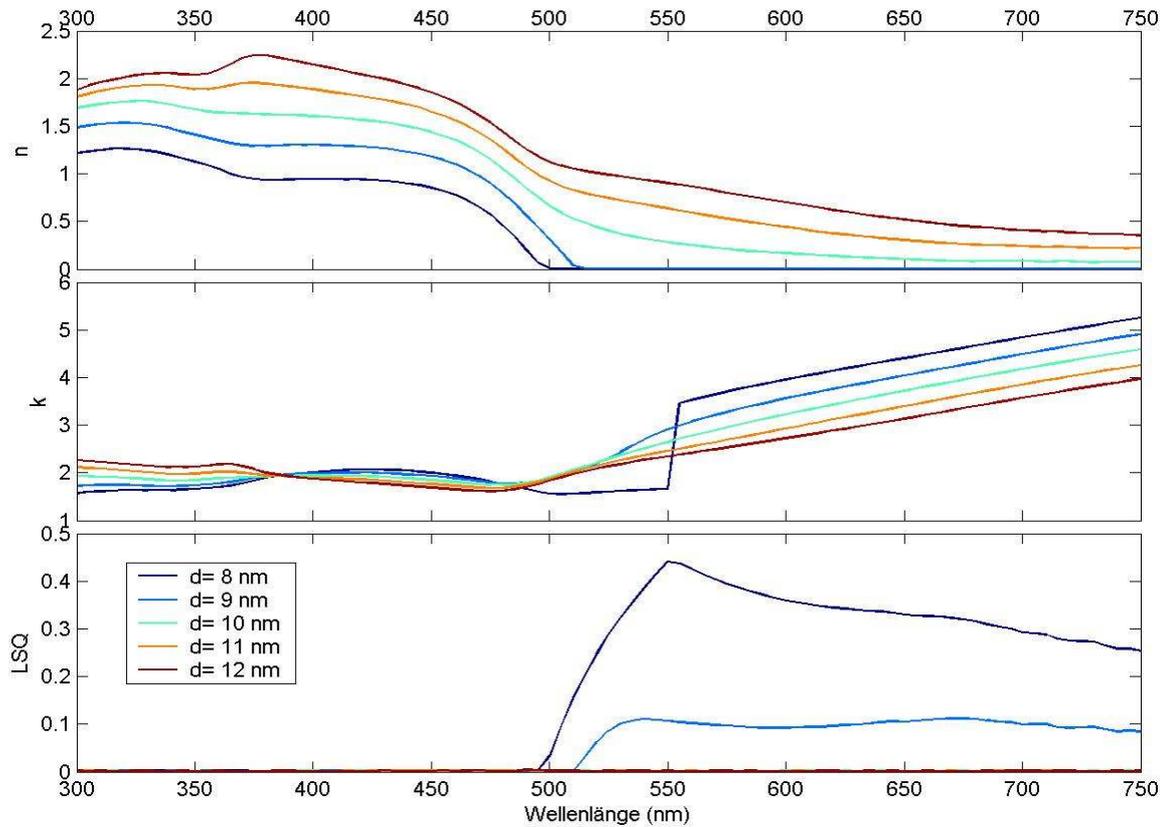
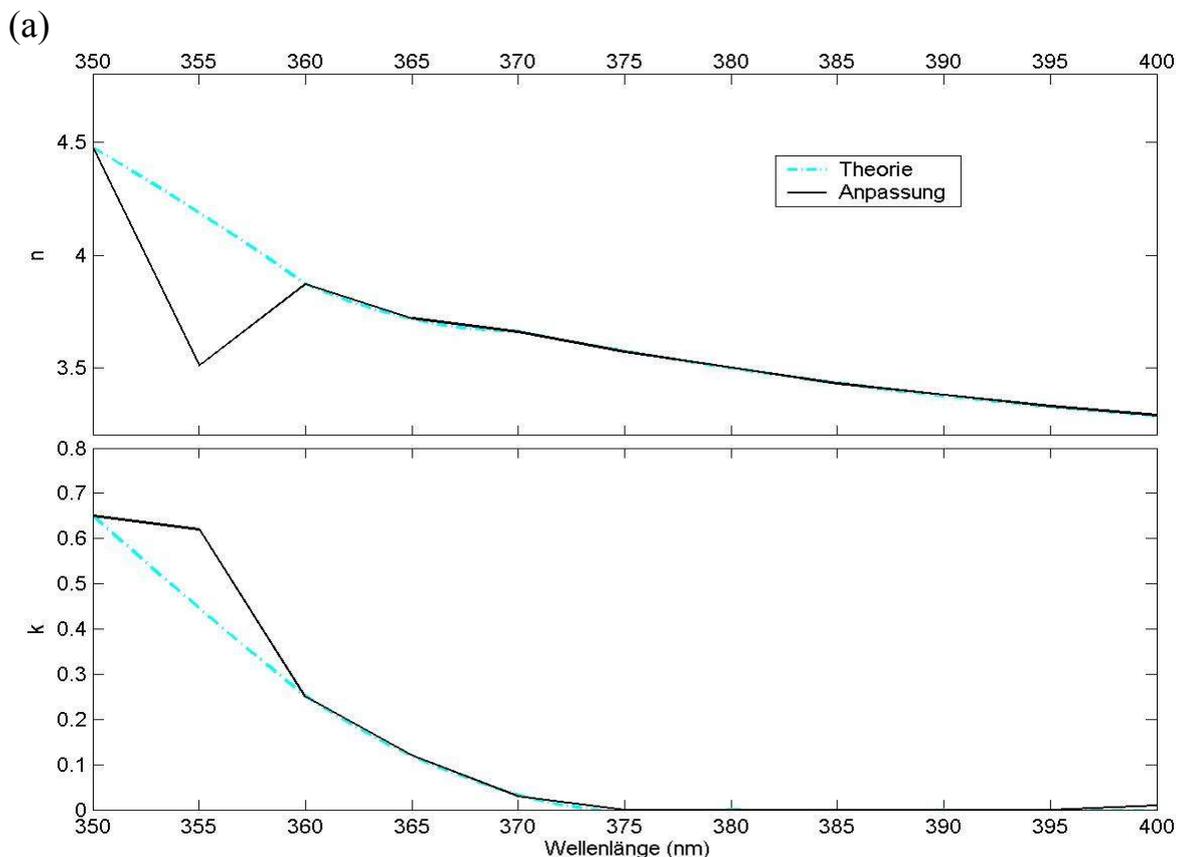


Abb.7.1.1: Spektroskopische Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\lambda_i} k_{\lambda_i} d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$, für die simulierte Messung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Au}[\text{Asp80}]}(\lambda) k_{\text{Au}[\text{Asp80}]}(\lambda) 10\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Eingezeichnet sind die Ergebnisse, die den angenommenen Schichtdicken $d=8\text{nm}, 9\text{nm}, 10\text{nm}, 11\text{nm}$, bzw. 12nm entsprechen. Abb. a und b entsprechen zwei verschiedenen Anpassungsbedingungen (Tabelle E.1).

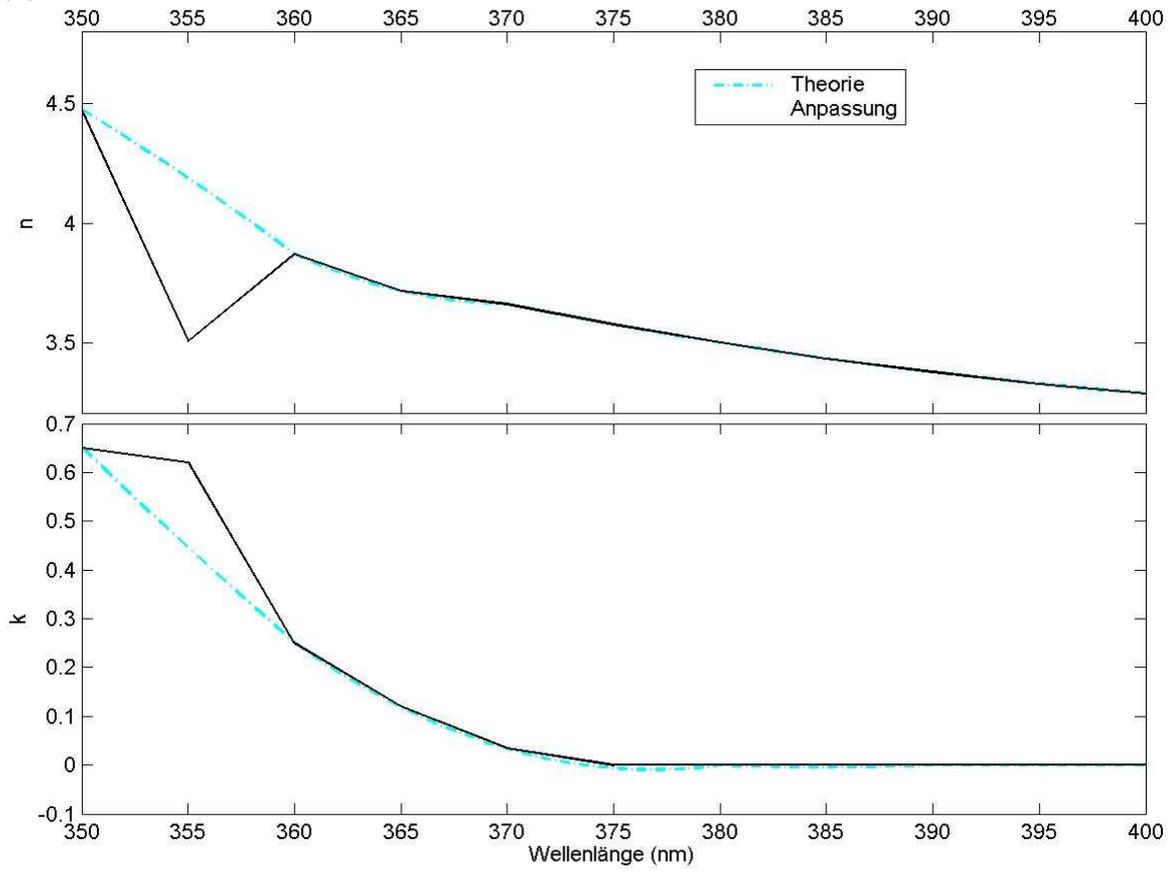
Abb.7.1.1a zeigt eine spektroskopische Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\lambda_i} k_{\lambda_i} d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$, mittels des *hoelp* Programms, für die simulierte Messung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n_{\text{Au}[\text{Asp80}]}(\lambda) k_{\text{Au}[\text{Asp80}]}(\lambda) 10\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda) \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Eingezeichnet sind die Ergebnisse, die den angenommenen Schichtdicken $d=8\text{nm}, 9\text{nm}, 10\text{nm}, 11\text{nm}$, bzw. 12nm entsprechen. Die Anpassungsbedingungen sind in Tabelle E.1 aufgelistet. Es ist bemerkenswert, dass die Diskretisierung auch einen Fehler, auch wenn kleinen, beiträgt. Abb.7.1.1b-d zeigen die gleiche Invertierung mit zunehmend strenger Anpassungsbedingung (Tabelle E.1). Die kleinen Abweichungen von den theoretischen Dispersionsrelationen lassen sich

durch beliebige Erhöhung der Diskretisierungsdichte reduzieren. Anders ausgedrückt ist es immer möglich, genügend kleine Diskretisierungsschritte zu finden, mit denen die Abweichung kleiner als eine vorgegebene Fehlerschranke ist.

Je nach optischem System und je nach Wellenlänge sind die Anforderungen an die Diskretisierungsdichte unterschiedlich. In dem Wellenlängenbereich, in welchem die Dispersionsrelation rasch steigt oder sinkt, ist die diskretisierungsbedingte Abweichung empfindlicher. Gerade an solcher Stelle ist die Dispersionsrelation für die Entwicklung neuartiger Filme und optischer Anwendungen von größerer Bedeutung. Dementsprechend muss die Diskretisierungsdichte erhöht werden. Beispielsweise bei der Anpassung $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_\lambda \ k_\lambda \ 10\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für die simulierte Messung $F([1 \ 0 \ \infty]^\dagger [n_{\text{TiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{TiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda) \ 10\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$, wobei $F = \Psi, \Delta; \vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, müssen die Diskretisierungsschritte bis auf 0.001 verkleinert werden (Abb.7.1.2)c, um den großen Sprung aus der erwarteten Position mit 16% Fehler bei $\lambda=355\text{nm}$ (Abb. 7.1.2a und 7.1.2b) zu beseitigen. Diese wird als Defektzelle bezeichnet.



(b)



(c)

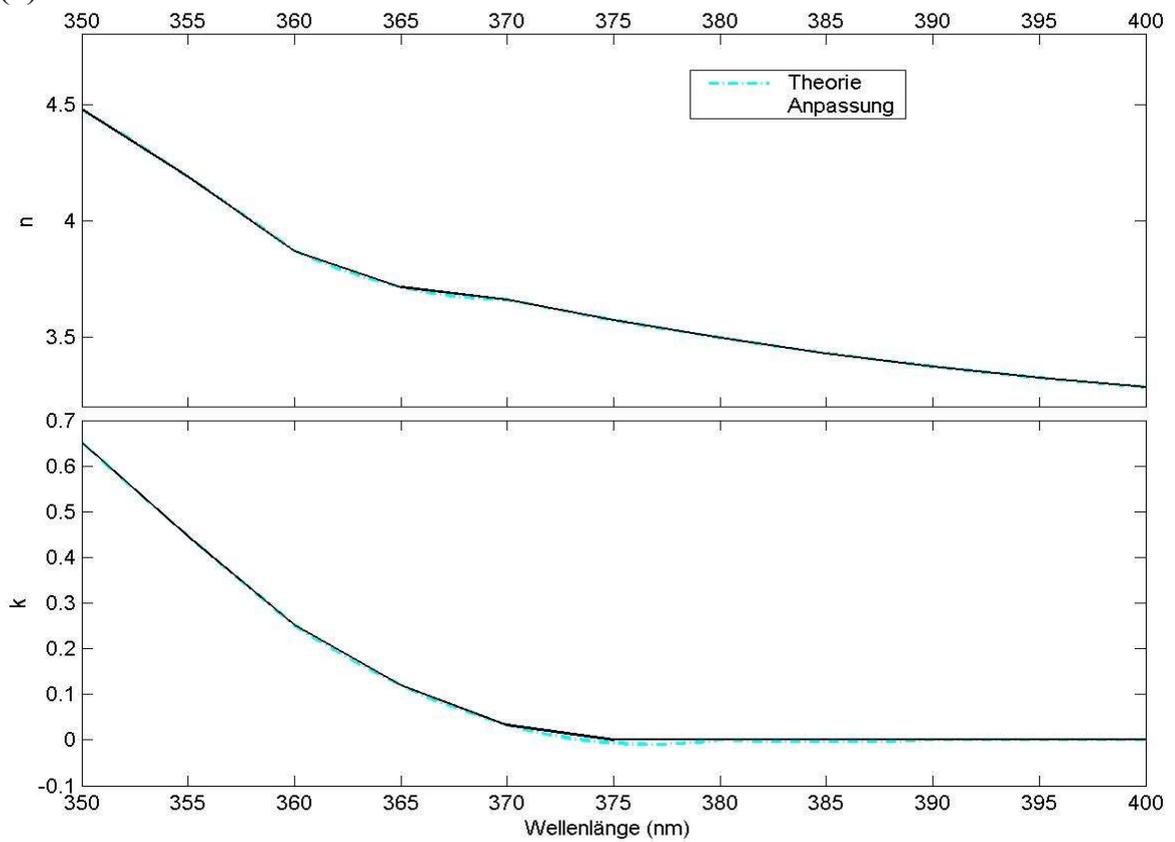


Abb.7.1.2: Spektroskopische Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\lambda_i} & k_{\lambda_i} & d \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger \right)^\dagger, \vartheta)$, für die simulierte Messung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) & 10\text{nm} \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger \right)^\dagger, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Abb. a, b und c entsprechen drei Anpassungsbedingungen mit abnehmenden Diskretisierungsschritten: $n_{\lambda_i}^{(\text{int})}=0.01, 0.005$ bzw. 0.001 (Tabelle E.1).

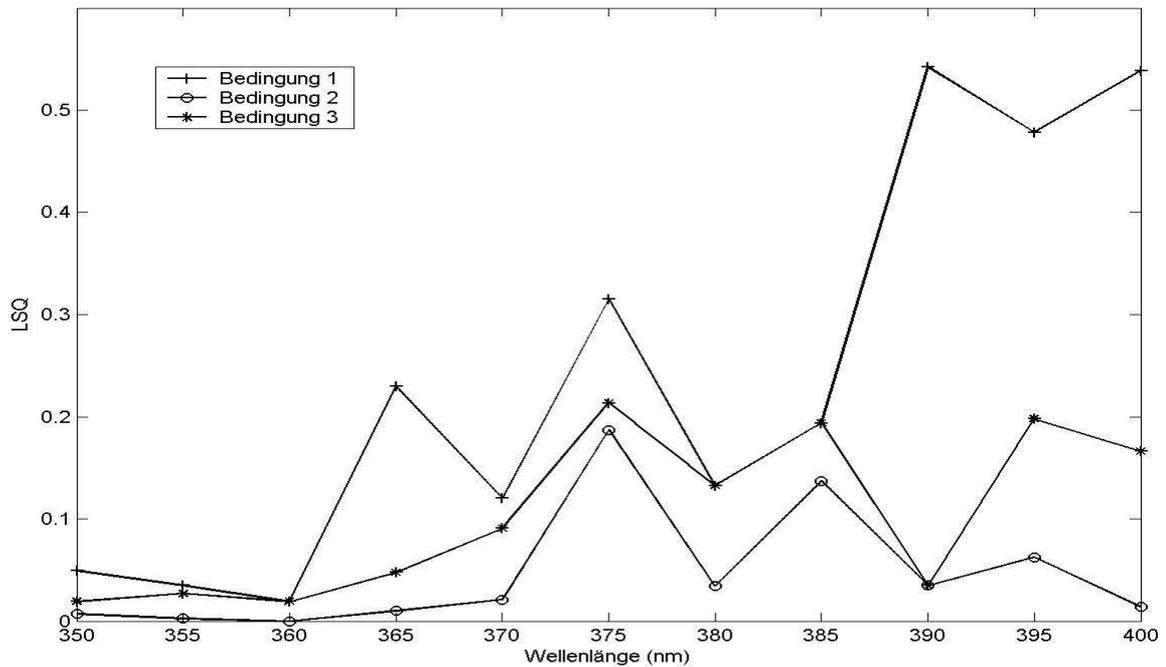


Abb.7.1.3: LSQ der spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\lambda_i} & k_{\lambda_i} & d \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger \right)^\dagger, \vartheta)$, für die simulierte Messung $F(\left[\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) & k_{\text{TiO}_2[\text{Pal85}]}(\lambda) & 10\text{nm} \end{smallmatrix} \right]^\dagger \left[\begin{smallmatrix} n_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & k_{\text{Si[Pal85]}(\lambda)} & \infty \end{smallmatrix} \right]^\dagger \right)^\dagger, \vartheta)$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Bedingungen 1, 2 und 3 entsprechen drei Anpassungsbedingungen mit abnehmenden Diskretisierungsschritten: $n_{\lambda_i}^{(\text{int})}=0.01, 0.005$ bzw. 0.001 (Tabelle E.1).

Während sich eine Defektzelle in der Anpassung an eine theoretische Messung immer durch Erhöhung der Diskretisierungsdichte heilen lässt, stösst die Erniedrigung der LSQ bei Anpassung an eine echte Messung an eine Grenze. Von der geforderten Genauigkeit von 0.001 , besonders für Filme in der Versuchsphase, wagt man kaum zu träumen. Jedoch ist es auf der spektroskopischen Ebene durchaus nicht hoffnungslos. Wenn eine Defektzelle nur gelegentlich auftaucht, kann man sie natürlich wegschneiden. Die fehlende Zelle kann durch einfache Extrapolation ersetzt werden. Die Fähigkeit der Selbstheilung durch die benachbarte

gesunde Zelle wird bedroht, wenn sich mehrere Defektzellen nahe beieinander befinden. Bei einer höheren Konzentration der Defektzellen ist eine Operation bestenfalls intuitiv. Besonders schwierig ist eine Operation um einen Resonanzpeak. Manchmal ist eine Defektzelle so bösartig, dass sie die Unsicherheit an die Nachbarzelle verbreitet. Beispielsweise ist es bei den n -Kurven in Abb.7.1.2a und 7.1.2b ohne Mithilfe der k -Kurve zweifelhaft, ob die Zelle bei 355nm oder 360nm defekt ist. Eine sorgfältige Untersuchung der Ursache ist erforderlich, um eine praktischere Lösung zu finden.

Da der Fehler der theoretischen Anpassung bei $\lambda=355\text{nm}$ viel größer ist als derjenige aus Diskretisierung, ist die Begründung durch ein sehr flaches, der globalen Nullstelle angehörendes Tal nicht hinreichend. Das Endergebnis muss im Tal einer sehr tiefen lokalen Nullstelle liegen. Für Diskretisierung wird die globale Nullstelle durch die nächste betrachtete Stelle im diskretisierten Raum angenähert, deren LSQ nicht mehr Null ist. Wenn ein lokales Minimum im betrachteten Lösungsraum existiert, und wenn sich die beste diskretisierte Annäherung an einer Stelle befindet, deren LSQ tiefer als diejenige der angenäherten globalen Nullstelle ist, geschieht die obige Verwechslung. Um die Vermutung zu bestätigen, werden die zwei Anpassungen (Abb.7.1.2a und b) nochmals betrachtet. Neben dem ersten Minimum werden auch das zweite Minimum, das dritte Minimum, usw. gesucht. Daraus ergeben sich interessante Ergebnisse (Abb.7.1.4a, bzw. b). Während im ersteren Fall die Stelle des zweiten Minimums der gesuchten Stelle am nächsten ist (Abb.7.1.4a), kommt die Stelle des dritten Minimums im letzteren Fall zum Einsatz (Abb.7.1.4b).

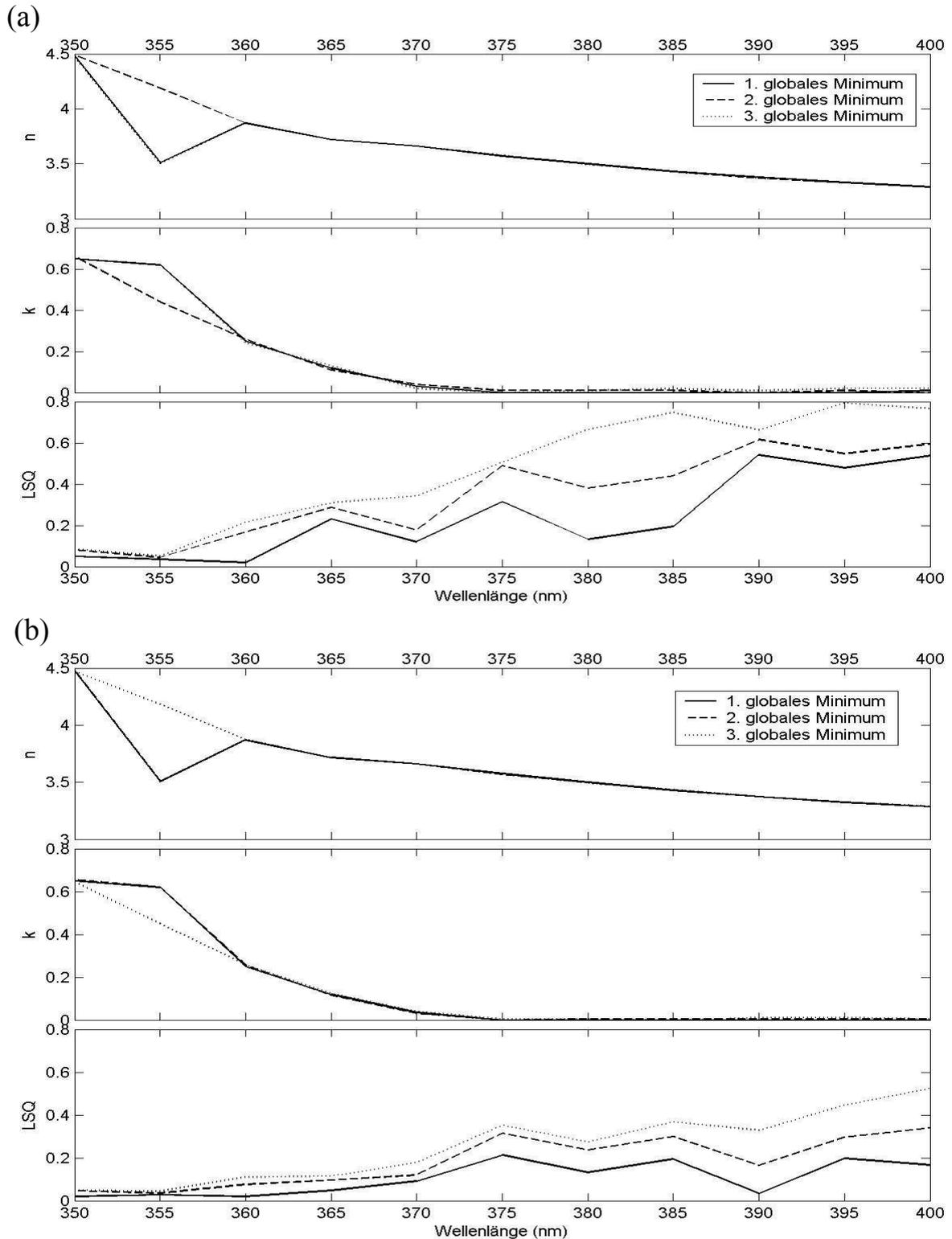


Abb.7.1.4: Spektroskopische Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F([\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix}]^\dagger [n_{\lambda_i} \ k_{\lambda_i} \ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$, für die simulierte Messung $F([\begin{smallmatrix} 1 & 0 & \infty \end{smallmatrix}]^\dagger [n_{\text{TiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{TiO}_2[\text{Pal}85]}(\lambda) \ 10\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ \infty]^\dagger]^\dagger, \vartheta)$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Abb. a und b entsprechen drei Anpassungsbedingungen mit abnehmenden Diskretisierungsschritten (Tabelle E.1). Dargestellt sind $n^{*0}(\lambda), n^{*1}(\lambda), n^{*2}(\lambda), k^{*0}(\lambda), k^{*1}(\lambda), k^{*2}(\lambda), lsq^{*0}(\lambda), lsq^{*1}(\lambda)$ und $lsq^{*2}(\lambda)$.

Bei realen Messungen spielen systematische Rauschen und falsche Modellannahmen bei den Invertierungsfehlern eine größere Rolle. Es kommt öfter vor, dass die globalen Nullstellen aus den gesuchten Stellen geraten. Wenn es passiert, ist das Ausmass normalerweise größer. Daher gibt es sicher mehr Defektzellen, die sich durch ein solches Phänomen erklären lassen, bei dem die gewünschten Werte nicht als die globale Nullstelle $\bar{x}_{\lambda_i}^{(0)} = \bar{x}_{\lambda_i}^*$, sondern als die nächstniedrige lokale Nullstelle $\bar{x}_{\lambda_i}^*$ auftreten. Dafür sind nicht nur echte, sondern auch statistische lokale Nullstelle verantwortlich, die aus Superposition systematischer Fehler mit einem flachen Tal der globalen Minima entstehen. Es kommt deshalb zu einer unvermeidbaren Verwechslung, wobei die mathematisch, anstatt der physikalisch richtigen Stelle für die Lösung gehalten wird, wenn lediglich die globale Nullstelle berücksichtigt wird und wenn die gesuchte Dispersionsrelation nicht schon vor der Anpassung bekannt ist. Selbst wenn sich Defektzellen durch Ersatz von Nullstellen höherer Ordnungen heilen lassen, müssen die Nachbarzellen gesund sein. Das bedeutet, dass die Defektzellen höchstens willkürlich und vereinzelt im Spektrum auftreten sollten. Wenn zwei oder mehr angrenzende Zellen defekt sind, verbleibt als letzte Chance, die Spuren der gesuchten Dispersionsrelation durch spektroskopisches Zusammenstückeln der ersten und zweiten globalen Nullstellen hervorzuheben. Die Vertauschungen des Ranges der Nullstellen sollten nicht auf die gleiche Weise geschehen. Mathematisch kann die Lösung wie folgt formuliert werden. Die Lösung ist nicht einfach $\bar{x}(\lambda_i) = \bar{x}_{\lambda_i}^*$, sondern $\bar{x}(\lambda_i) = \bar{x}_{\lambda_i}^{*m}$, wobei m von 0, 1, 2, usw. zu wählen ist, unter der Bedingung, dass $\bar{x}(\lambda_i)$ möglichst stetig ist.

Bei dieser neuen, kollektiven Berücksichtigung der globalen Minima höherer Ordnungen müssen neben der niedrigsten Nullstelle auch noch die zweitniedrigste lokale Nullstelle, usw. gesucht werden. Selbst wenn ein Algorithmus existiert, der speziell die zweitniedrigste lokale Nullstelle suchen kann, wäre dieser bereits sowohl von der Zeit als auch vom Verfahren her anspruchsvoller als ein herkömmlicher Algorithmus, der nur die globale Nullstelle sucht. Um den Arbeitsaufwand drastisch zu reduzieren, wird der ungewöhnliche Ansatz wie folgt implementiert. Dabei müssen nicht alle berechneten Fehlerfunktionen abgespeichert und abgefragt werden. Verglichen werden müssen die Fehlerfunktion an hingegen allen diskretisierten Punkte. Aber nur die Ränge der festgelegten Anzahl Punkte mit den kleinsten Fehlerfunktionen müssen der aufsteigenden Größe nach, nach Berechnung der Fehlerfunktion für jeden Punkt, ständig auf den neuesten Stand gebracht werden. Der kleinste, zweitkleinste, drittkleinste Betrag, usw. werden als das niedrigste, zweitniedrigste, dritt niedrigste numerische Minimum, usw. (fortan einfach

als das erste, zweite, dritte Minimum, usw.) bezeichnet. Ihre entsprechenden Stellen sind als $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_1}$, $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_2}$, bzw. $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_3}$, usw. gekennzeichnet. Sie sind nicht mit den ersten, zweiten, bzw. dritten lokalen Nullstellen, usw., zu verwechseln, die als $\bar{x}_{\lambda_i}^{*1}$, $\bar{x}_{\lambda_i}^{*2}$, bzw. $\bar{x}_{\lambda_i}^{*3}$, usw. gekennzeichnet sind. Zwischen den beiden Reihen von Minima besteht keine systematische Beziehung ausser im Grenzfall, in dem das niedrigste numerische Minimum gleich dem niedrigsten lokalen Minimum ist: $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_1} = \bar{x}_{\lambda_i}^{*1}$. Während die ersteren erst durch Diskretisierung ins Leben gerufen werden, sind die letzteren bereits analytisch exakt definiert. Allerdings werden die letzteren programmierungsgemäss auch nicht mehr exakt, sondern bezüglich des diskretisierten Raums durch die nächsten Punkte angenähert. Dort ist der Absolutwert der ersten Ableitung ihrer Fehlerfunktion nicht mehr Null, sondern der niedrigste Wert. Zur Berechnung der Ableitung und zur Suche nach dem tiefsten Absolutwert der Ableitung wird mehr als ein Punkt benötigt.

Bei der Einstellung der Diskretisierungsauflösung sind immer entgegengesetzte Kräfte am Werk. Einerseits wird die Annäherung der Lösung bei höherer Auflösung genauer. Andererseits konzentrieren sich verhältnismässig mehr numerische Minima in dem dem globalen Minimum angehörenden Tal. Die Chance dafür, dass sich gewisse Stellen der numerischen Minima um die zweite lokale Nullstelle herum befinden, ist geringer. Je nach Auflösung der Abtastung, Höhenunterschied zwischen den zwei niedrigsten lokalen Minima und der Anzahl der berücksichtigten Minima verteilen sich die numerischen Maxima unterschiedlich in den den lokalen Nullstellen anhörenden Tälern. Um spektroskopisch auf die Doppelspuren zu kommen, muss die Anzahl der zu berücksichtigenden numerischen Minima genügend hoch sein. Jedoch muss wegen langer Rechendauer Mässigkeit geübt werden. Je nach Bedürfnis sollte diese Anzahl bei der Programmierung frei einstellbar sein.

Bei dem jetzigen Stand der Rechengeschwindigkeit wird angestrebt, die Rechendauer für eine spektroskopische Invertierung auf höchstens einen Tag zu beschränken. Somit wird die entsprechende Dauer in der nahen Zukunft sicherlich auf die Größenordnung von ein paar Stunden bis einem halben Tag reduziert. Für ein kommerzielles Angebot ist die Rechendauer noch immer unzumutbar lang. Aber zum Zweck der Forschung wird es sinnvoll, wenn der Forscher einen Invertierungsvorgang über Nacht laufen lassen kann und quasi keine Wartezeit verliert. Somit wird der Forscher von ständigem manuellen Wiederstarten und Korrigieren befreit. Bei vorliegendem Implementierungsversuch werden nur $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_1}$, $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_2}$ und $\bar{x}_{\lambda_i}^{0_3}$ als potentielle Lösungen betrachtet. Die Abbildungen im Anhang E zeigen die

ersten groben Anpassungsergebnisse der Ordnung drei für einige Proben. Die Gegenüberstellung von Anpassungsergebnissen an verschiedenen Schichtdicken trägt auch zu kooperativer Selbstheilung bei Wellenlängenbereichen bei, in welchen der Fehler nicht empfindlich gegenüber Annahme der Schichtdicke ist, z.B. $\lambda=350\text{nm}-400\text{nm}$ in Abbildungen E.2a-e. Die Abweichungen in Gestalt von Dreiecken und Trapezoiden ähneln Wäsche auf einer Leine. Die Dispersionsrelation, die zur Wäscheleine analog ist, lässt sich häufig erkennen. Um die gesuchte Dispersionsrelation aus den Rohergebnissen zu extrahieren, werden effiziente Module zum selektiven Darstellen und Bearbeiten der Ergebnisse benötigt. Um Geräusche und Defekte auf der kleinsten Zellenebene wegzuperieren, muss entsprechender Zugang angeboten werden. Zu diesem Zweck kann das Werkzeug zum Signaleditieren [Ho99] integriert werden.

Um weiterhin Rechendauer zu sparen, können die Anpassungsbedingungen bei einer wohlbekanntem Dispersionsrelation lockerer eingestellt werden. Dennoch wird diese Möglichkeit durch die Form der Dispersionsrelation bedingt. Bei einer erwartungsgemäss relativ flachen Dispersionsrelation kann durch eine angemessene Einstellung sehr viel Speicherraum gewonnen werden. An dieser Stelle müssen die Begriffe der statischen und dynamischen Anpassungsbedingungen eingeleitet werden. Sie unterscheiden sich durch die Abhängigkeit der Anpassungsbedingungen $\bar{x}_{\lambda_i}^{(int)}$, $\bar{x}_{\lambda_i}^{(up)}$ und $\bar{x}_{\lambda_i}^{(low)}$ von den Wellenlängen. Während bei den ersteren die Bedingungen das ganze Spektrum hinweg festgelegt sind, variieren sie bei den letzteren mit der Wellenlänge. Der dynamische Ansatz wird noch nicht implementiert. Es gibt zahlreiche Implementierungsmöglichkeiten. Eine sinnvolle ist, die Größe des gesuchten Lösungsraums laufend in vorbestimmtem Verhältnis zum Ergebnis spektroskopisch umzustellen (Abb.7.1.5). Dieser Ansatz sollte die Rechenrate um einen Faktor erhöhen, da die meisten Dispersionsrelationen nur an einer engen Resonanzstelle stark variieren, aber im übrigen Bereich relativ strukturlos sind. Daher ist ein statischer Ansatz etwas verschwenderisch, was beim *Spectraray Programm* der Fall ist.

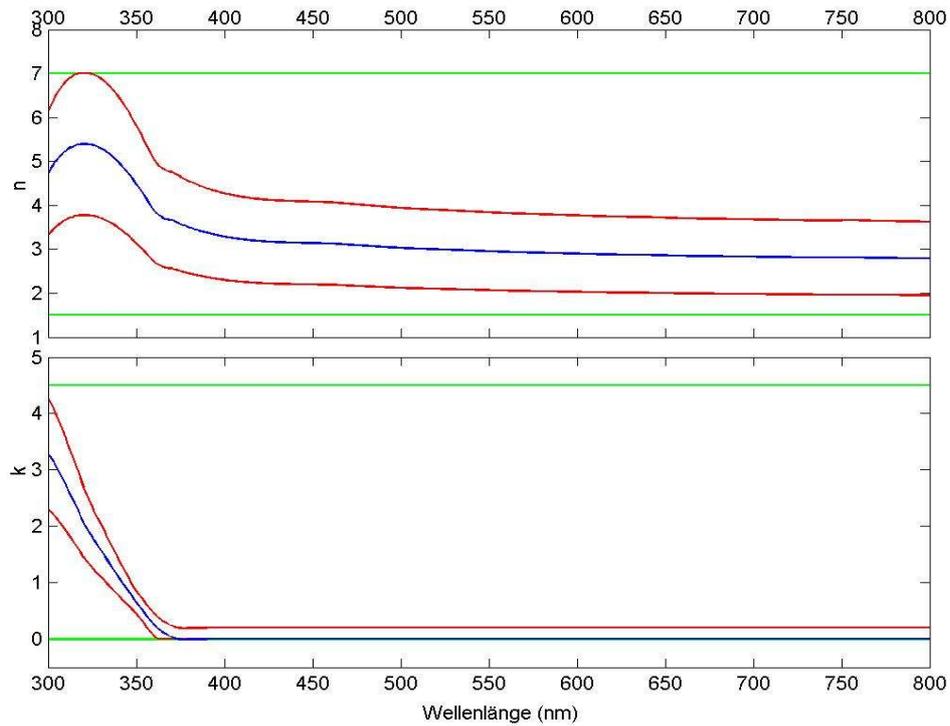


Abb.7.1.5: Vergleich einer statischen (grüne Kurven) mit einer dynamischen (roten Kurven) Implementierung der Grenzen des Lösungsraums, innerhalb dessen die Lösung (die blauen Kurven) gesucht wird. Bei der dynamischen Implementierung werden die roten Kurven immer plus und minus 20% um das Ergebnis angepasst.

7.2 Anwendung

i. Goldsubstrat, -filme und -partikel

Im Rahmen des Versuchs zur Suche nach dem idealen Substrat wurden in Kapitel 3 in-vacuo hergestellte dicke Goldproben betrachtet. Dazu bietet das Goldsubstrat eine Referenz zur Modellierung dünner Goldschichten und eingebetteter Goldpartikel innerhalb von amorphen Kohlenwasserstoffschichten. Mit dem *hoelp* Programm werden die 3 besten Ergebnissen mit den tiefsten *LSQ* der Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n(\lambda) & k(\lambda) \\ 1000\text{nm} \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si|Pal85}}(\lambda) & k_{\text{Si|Pal85}}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ für $F_\emptyset^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{dicke Au} \mid \text{Si-Substrat}\}_{0908a}$ im Lösungsraum (n, k) gesucht werden, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\emptyset = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, n von 0.01 bis 2 in Schritten von 0.01 läuft und k von 1 bis 5.5 in Schritten von 0.01 läuft. Wie in Abb.7.2.1 ersichtlich, zeichnen sich die Dispersionsrelationen klar ab. Das dem globalen Minimum angehörende Tal der Fehlerfunktion ist eindeutig und scharf zu erkennen.

In Kapitel 3 ist die Qualität unterschiedlicher Goldproben anhand der Höhe der Δ -Kurve verglichen worden. Nun wird $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\{0908a\}}(\lambda)$ zum Vergleich mit dem Literaturwert der Dispersionsrelation $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ graphisch dargestellt (Abb.7.2.2). Um ihre Angemessenheit als Anpassungsansatz für die Messung mit dem Literaturwert der Dispersionsrelation zu vergleichen, werden sie in $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n(\lambda) & k(\lambda) \\ 1000\text{nm} \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si|Pal85}}(\lambda) & k_{\text{Si|Pal85}}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right]^\dagger, \emptyset)$ mit $F = \Psi, \Delta$; $\emptyset = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, eingesetzt und jeweils zusammen mit der Messung $F_\emptyset^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{dicke Au} \mid \text{Si-Substrat}\}_{0908a}$ dargestellt (Abb.7.2.3). Während die Anpassung mit Dispersionsrelation aus der Literatur eine kleine, aber nicht zu vernachlässigende Abweichung aufweist (Abb.7.2.3a), ist der Unterschied zwischen der vorliegenden Anpassung und der Messung (Abb.7.2.3b) nicht spürbar. Des weiteren wird das Ergebnis als Anpassungsansatz für die Messung an zwei Goldschichten $\{0909c\}$ und $\{0909d\}$ mit verschiedenen Schichtdicken überprüft, die bis auf die Abscheidungsdauer unter den gleichen Bedingungen wie die dicke Goldprobe $\{0908a\}$ hergestellt wurden. Die Übereinstimmung zwischen Anpassung und Theorie ist ausgezeichnet (Abb.7.2.4b und Abb.7.2.5b). Hingegen besteht nach wie vor eine Unstimmigkeit bei der Anpassung mit $\tilde{n}_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ (Abb.7.2.4a und Abb.7.2.5a).

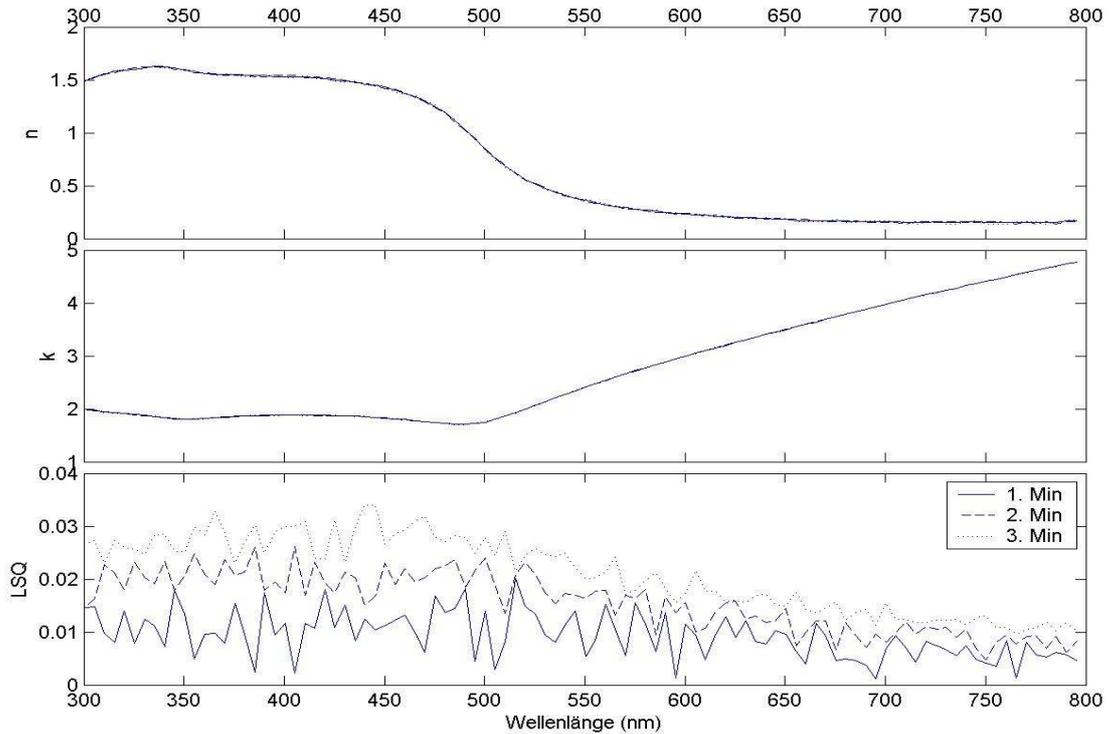


Abb.7.2.1: $n(\lambda)=n_{\{0908a\}}(\lambda)$, $k(\lambda)=k_{\{0908a\}}(\lambda)$ und $LSQ(\lambda)$ als Ergebnisse der Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n(\lambda)\ k(\lambda)\ 1000\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si[Pa185]}}(\lambda)\ k_{\text{Si[Pa185]}}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{dicke Au} \mid \text{Si-Substrat}\}_{0908a}$, wobei $F=\Psi, \Delta; \vartheta=50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ mittels universeller Suche unter der Suchbedingung $n=0.01:0.01:2$ und $k=1:0.01:5.5$.

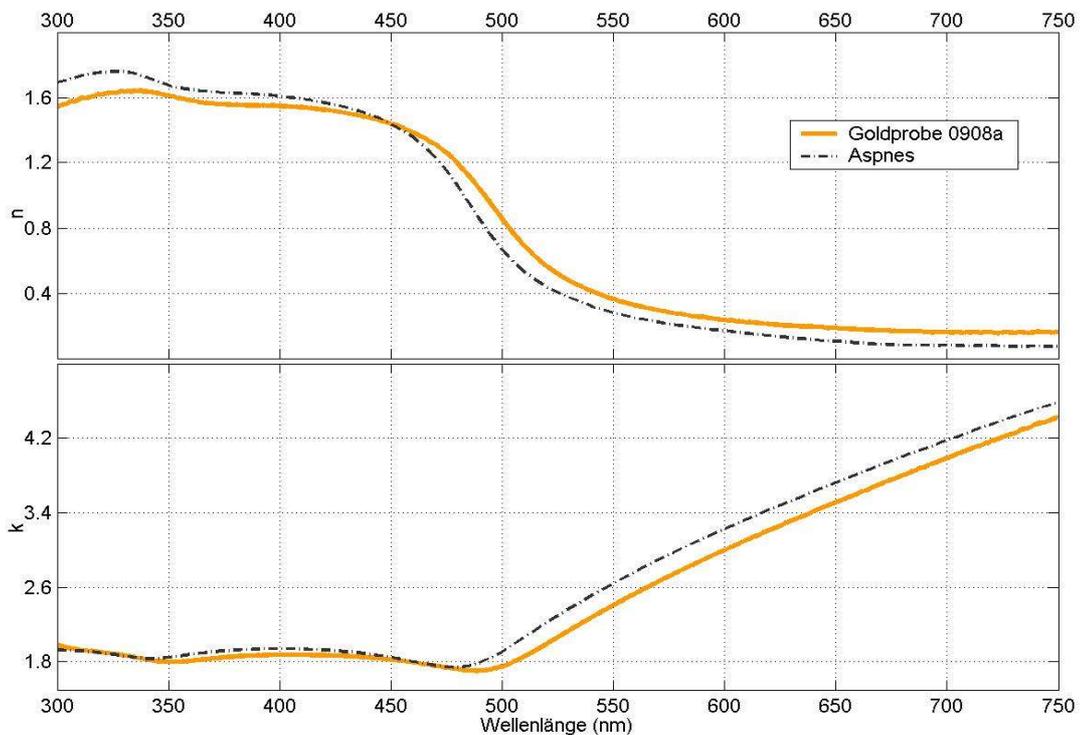
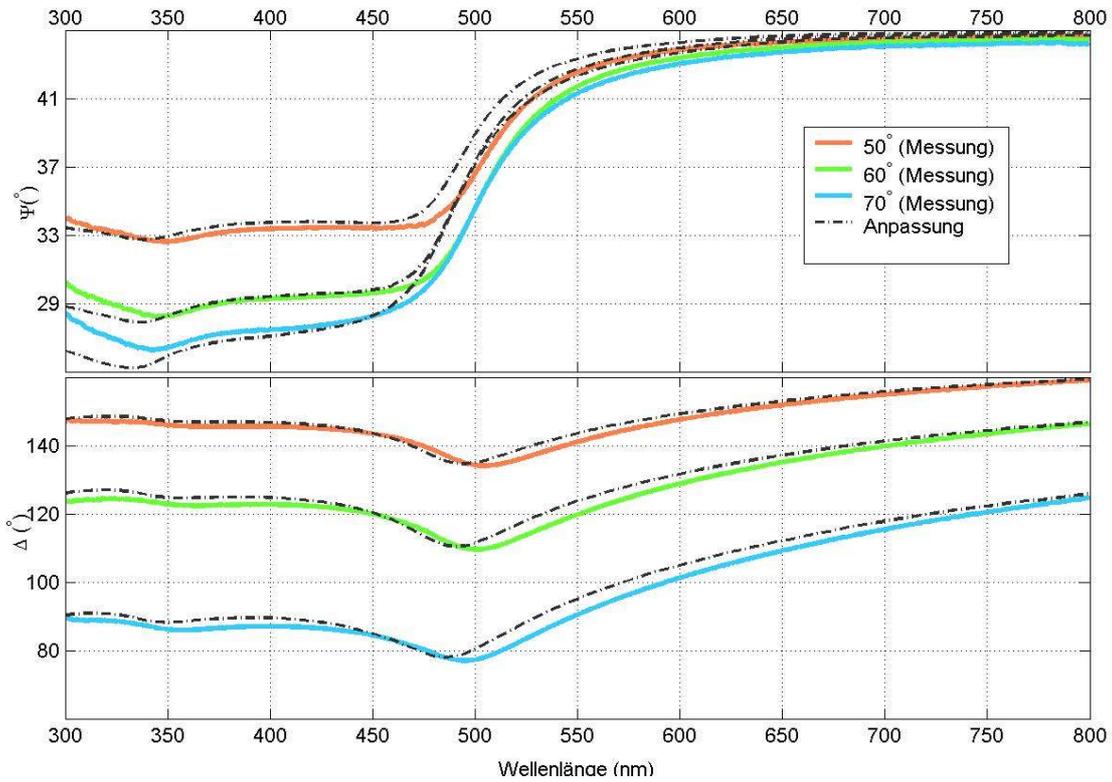


Abb.7.2.2: Gegenüberstellung von $n_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$, $k_{\text{Au[Asp80]}}(\lambda)$ und $n_{\{0908a\}}(\lambda)$, $k_{\{0908a\}}(\lambda)$.

(a)



(b)

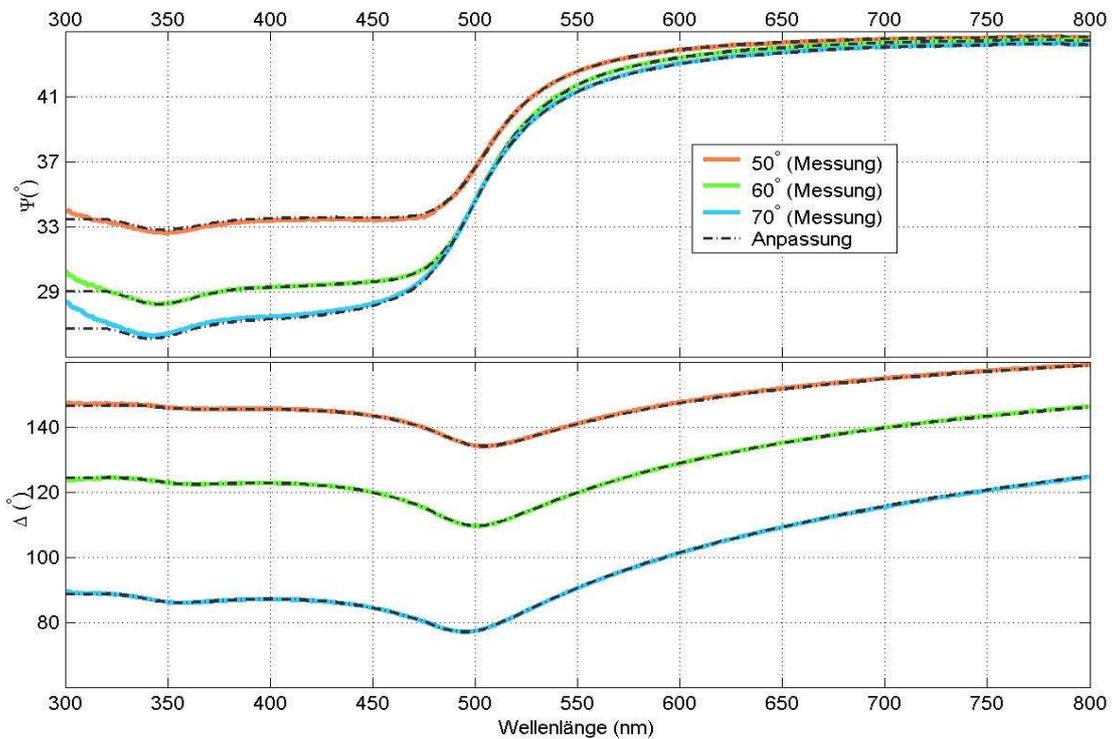


Abb.7.2.3: Gegenüberstellung der Messung $F_\theta^{\text{meas}} \{ \text{Luft} \mid \text{dickes Au} \mid \text{Si-Substrat} \}_{0908a}$ und der Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n(\lambda)\ k(\lambda)\ 1000\text{nm}]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal85}]}(\lambda)\ \infty]^\dagger]^\dagger, \theta)$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\theta = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Abbildungen (a) und (b) entsprechen den Einsätzen $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\text{Au}[\text{Asp80}]}(\lambda)$, bzw. $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\{0908a\}}(\lambda)$.

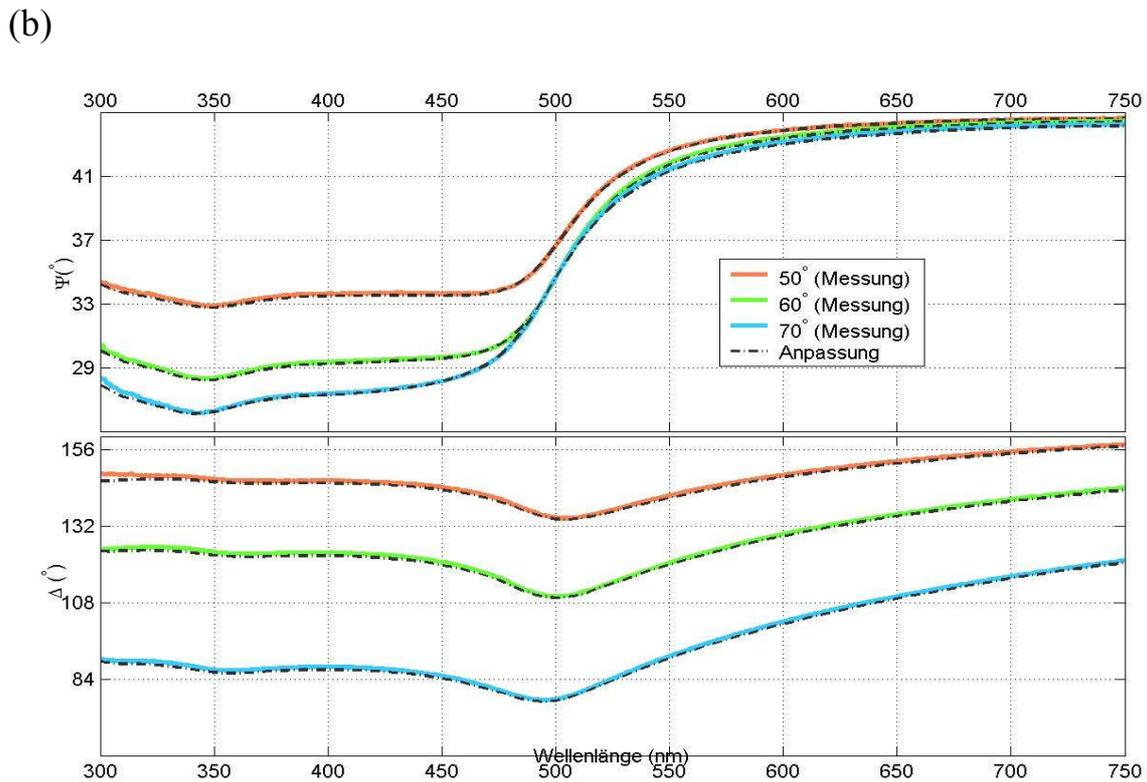
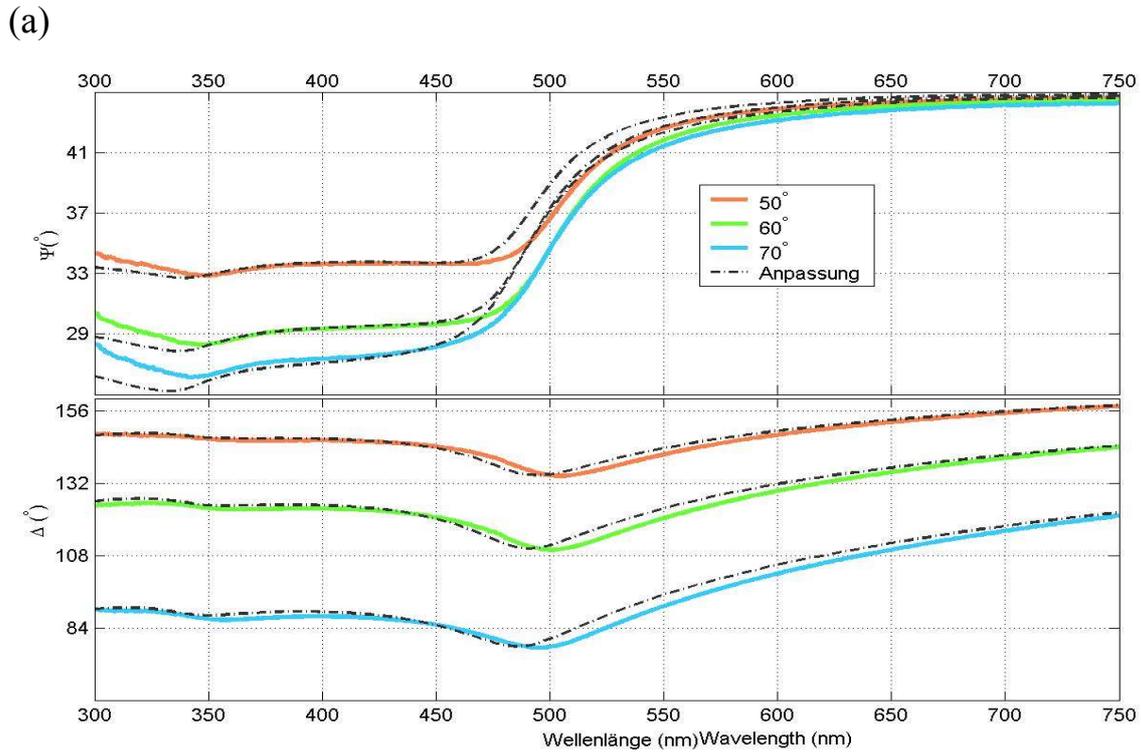


Abb.7.2.4: Gegenüberstellung der Messung $F_\theta^{\text{meas}} \{ \text{Luft} \mid \text{dicke Au} \mid \text{Si-Substrat} \}_{0909c}$ und der Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n(\lambda)\ k(\lambda)\ d]^\dagger [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, \theta)$ für die Messung, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\theta = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$. Abbildungen (a) und (b) entsprechen den Einsätzen $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\text{Au}[\text{Asp}80]}(\lambda)$, bzw. $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\text{0908a}}(\lambda)$ und den Ergebnissen $d = 227.5\text{nm}$, bzw. $d = 122.7\text{nm}$.

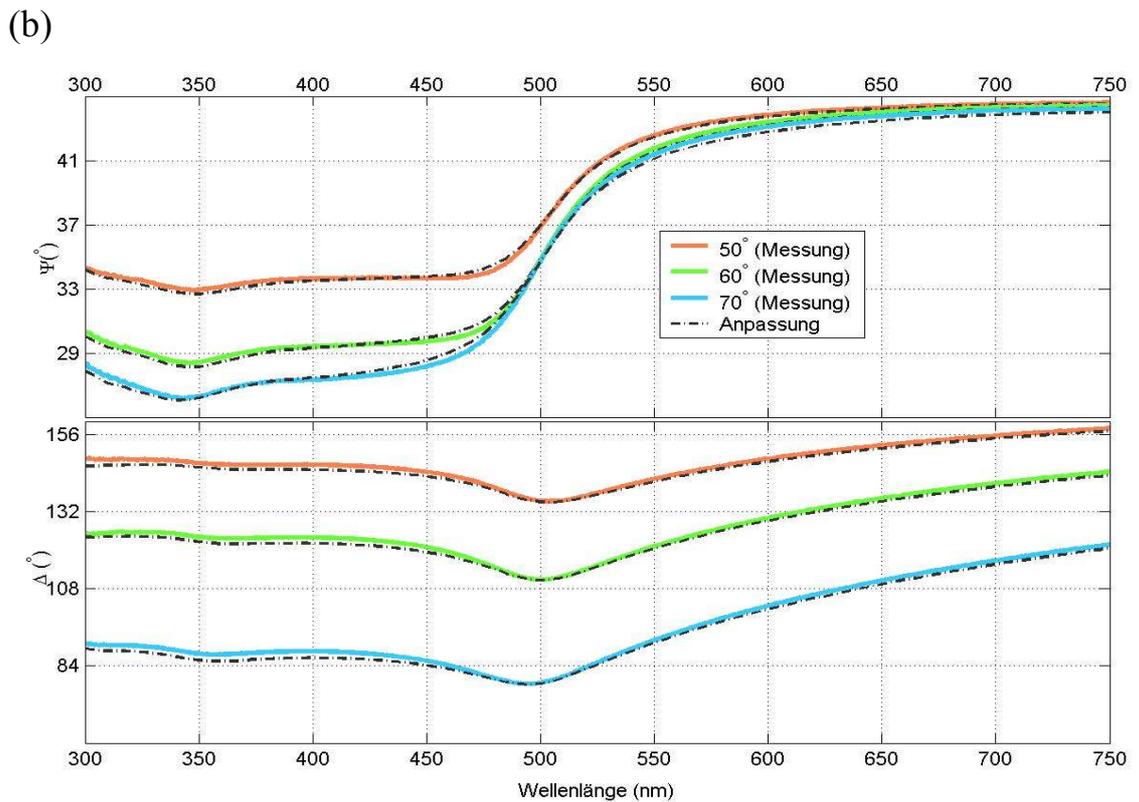
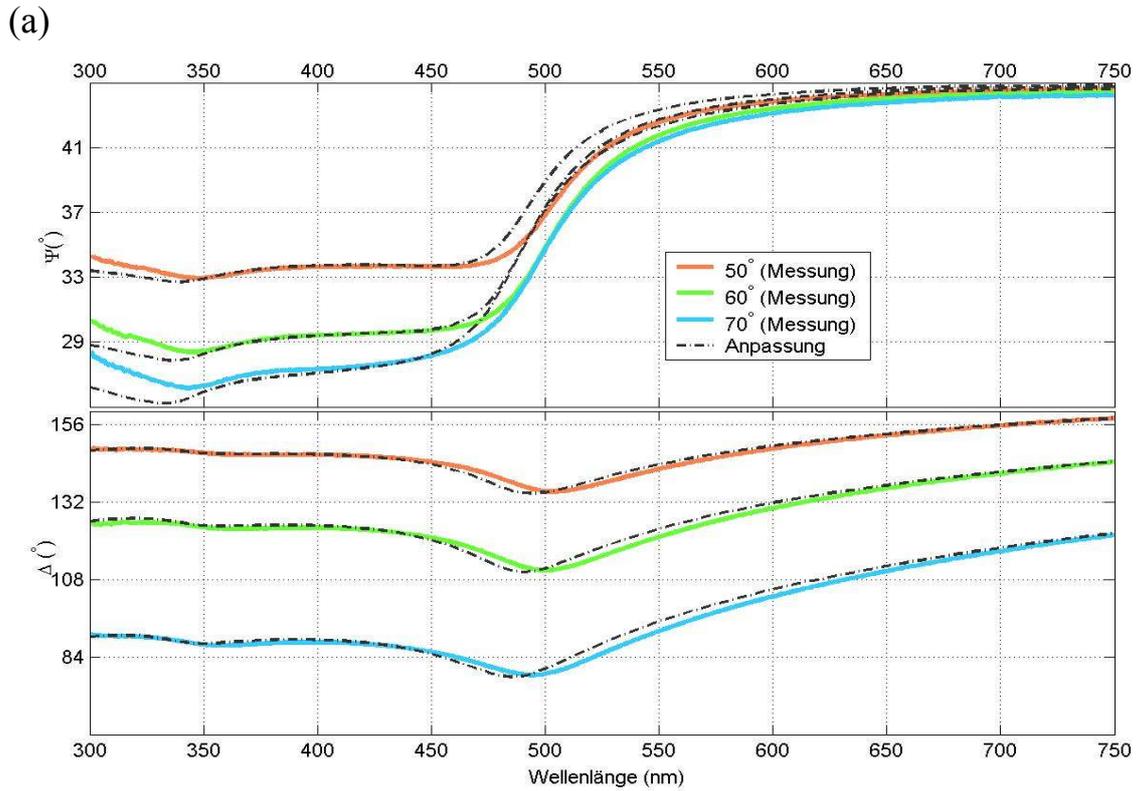
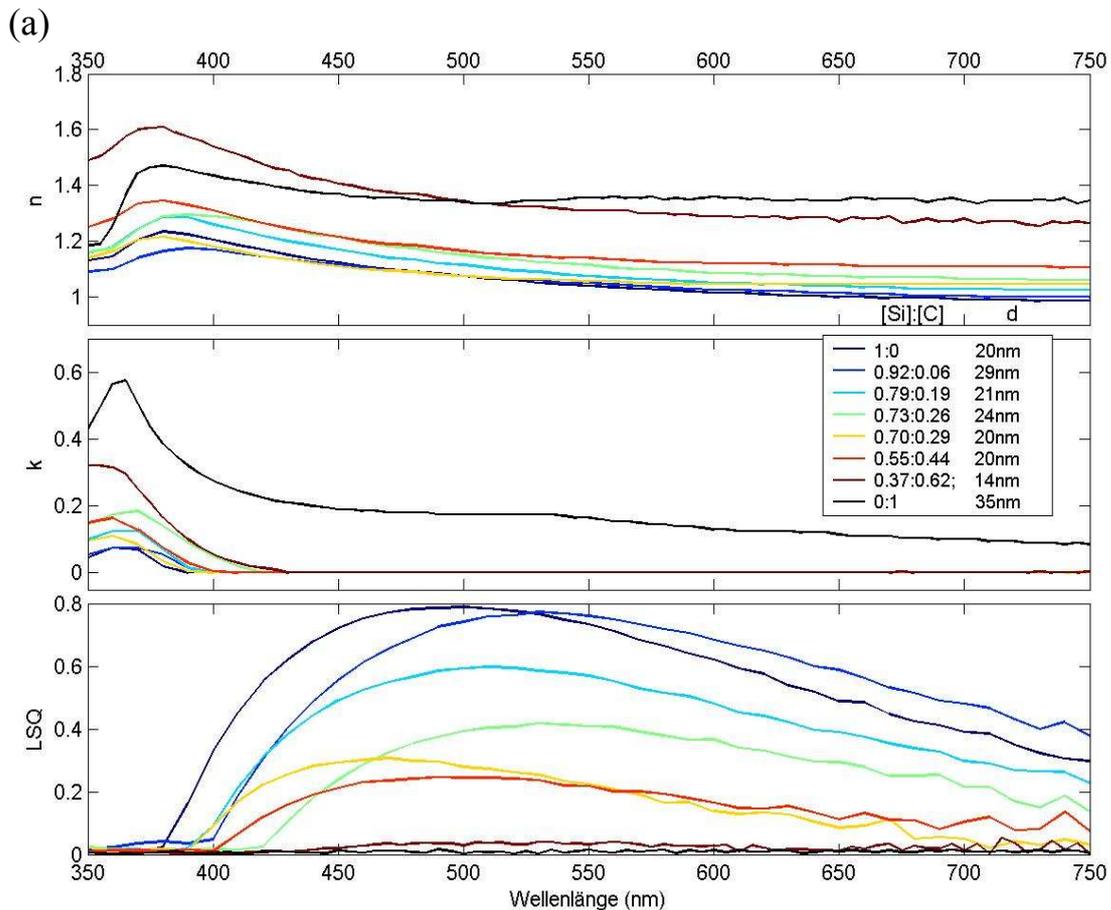


Abb.7.2.5: Gegenüberstellung der Messung $F_{\vartheta}^{\text{meas}} \{ \text{Luft} \mid \text{dicke Au} \mid \text{Si-Substrat} \}_{0909d}$ und der Anpassung $F([[[1 \ 0 \ \infty]^{\dagger} [n(\lambda) \ k(\lambda) \ d]^{\dagger} [n_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ k_{\text{Si}[\text{Pal}85]}(\lambda) \ \infty]^{\dagger}]^{\dagger}, \vartheta)$ für die Messung, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 50^{\circ}, 60^{\circ}, 70^{\circ}$. Abbildungen (a) und (b) entsprechen den Einsätzen $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\text{Au}[\text{Asp}80]}(\lambda)$, bzw. $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}_{\{0908a\}}(\lambda)$ und den Ergebnissen $d = 238.1 \text{ nm}$, bzw. $d = 75.4 \text{ nm}$.

ii. C₆₀/a-Si

Der Mensch lebt in einer Epoche der explosionsartigen Entstehung neuer Materialien. Die Zahl der neuen Stoffe [Det94], die täglich in der Welt geschaffen werden, ist bereits gewaltig, abgesehen von der unübersehbaren Zahl und Vielfalt potentieller Synthesen, die aus den neuen Stoffen entstehen. Die Entdeckung des Fullerenes [Kro85], des aus 60 Kohlenstoffatomen bestehenden, in sich geschlossenen käfigartigen Kohlenstoffmoleküls, ist einer der aufregendsten Anstöße in der Materialforschung. In den Laboratorien rund um die Welt wird versucht, neue Materialien aus C₆₀ zu synthetisieren. Aus diesem Geist heraus wurde die Einbettung der C₆₀-Moleküle in Amorphsilizium (a-Si) Schichten versucht. Als Einbettungssubstanz hat C₆₀ den Vorteil seiner schwachen van der Waalsschen intermolekularen Kraft.



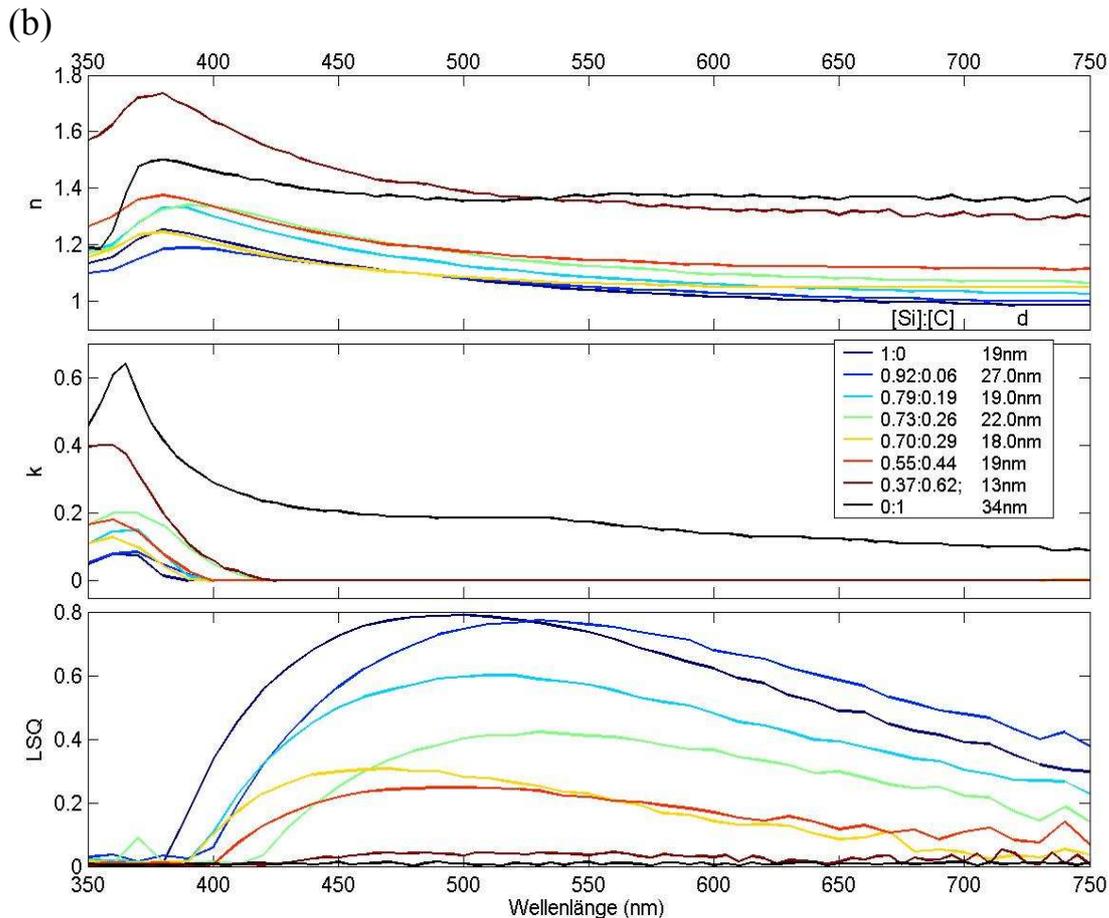


Abb.7.2.6: Ergebnisse der spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F([\![1\ 0\ \infty]\!]^\dagger [n(\lambda)\ k(\lambda)\ d]^\dagger [n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda)\ k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda)\ \infty]^\dagger)^\dagger, \vartheta$ für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{\text{Luft} \mid \text{a-Si/C}_{60} \mid \text{Si-Substrat}\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ mittels *hoelp* Programms mit den in Tabelle E1 aufgelisteten Anpassungsbedingungen. Abbildungen (a) und (b) entsprechen der Untergrenze, bzw. Obergrenze der bestimmten Dispersionsrelation, die sich aus Schichtdickeunsicherheit ergibt. Dargestellt sind nur $n^*(\lambda)$, $k^*(\lambda)$, und $lsq^*(\lambda)$.

Eine Reihe von C_{60} /a-Si Proben mit unterschiedlichen Anteilverhältnissen wurde hergestellt. Die chemischen Eigenschaften wurden schon mittels XPS untersucht [Rei02]. Zu ihrer optischen Charakterisierung wurden die Proben spektroskopischen ellipsometrischen Messungen unterzogen und benötigen eine Wellenlänge-für-Wellenlänge Charakterisierung. Wegen Problemen des kommerziellen Programms wartet die Invertierung der Messdaten auf die Anfertigung des vorliegenden Algorithmus'. Die ersten groben Ergebnisse sind im Anhang E beigefügt. Danach wird der Dickenbereich weiter beschränkt und die Lösung wird in einem feineren diskretisierten Lösungsraum gesucht. Die Resultate sind in Abb.7.2.6 dargestellt. Die Beschriftung kennzeichnet das Verhältnis von Kohlenstoff- zu Siliziumgehalt in Atomprozent.

Bei allen Proben ist die LSQ im Wellenlängenbereich von 400nm bis 750nm erheblich größer als derjenige im Wellenlängenbereich von 300nm bis 400nm. Bevor eine systematische Fehleranalyse vorhanden ist, werden die kleinsten LSQ s im kleineren Wellenlängenabschnitt bevorzugt. Da in diesem Bereich die Absorption viel größer ist, ist der Einfluss wegen Fehlern in der Schichtdicke geringer. Immerhin ist die tiefste LSQ nicht bei jeder Wellenlänge mit der gleichen Dicke verknüpft. Die Untergrenze (Abb.7.2.6a) und die Obergrenze (Abb.7.2.6b) der gesuchten Dispersionsrelationen entsprechen der Unsicherheit der Schichtdickenbestimmung. Bemerkenswert in diesem Fall ist, dass die den Untergrenzen der Dispersionsrelation entsprechenden Schichtdicken größer als die den Obergrenzen entsprechenden Schichtdicken sind. Somit liegen die Schichtdicken zwischen 13nm und 34nm. Im Vergleich zur Dickenabschätzung mit Schwingquarz, wobei die Dicke zwischen 17nm und 22nm liegt [Rei02], weist die jetzige Bestimmung eine größere Schwankung auf.

Als nächstes wird der Verlauf der Differenzspektren der Dispersionsrelation unter die Lupe genommen. Als Ausgangspunkt wird die reine C_{60} -Schicht erstmals mit den Literaturwerten verglichen. Es gelang Krätschmer *et al.* [Krä90a, Krä90b] nicht lange nach der Entdeckung des C_{60} , sein optisches Spektrum zu bestimmen. Die Dispersionsrelationen wurden durch ellipsometrische Messungen [Ren91, Krä90a, Krä90b] gewonnen. Die n -Kurve im Wellenlängenbereich von 550nm bis 750nm ist beinahe konstant und liegt etwa unter 1.4, und ist bereits wesentlich kleiner als der aus der Anpassung mit Lorenzischem Oszillator erhaltenen $n(\omega=0)=1.9$ [Ren91]. Während dieselben Autoren die Absorptionskante bei 2.3eV (539.1nm) identifizieren können, kann bei der vorliegenden k -Kurve an der gleichen Stelle ein Knie beobachtet werden. Jedoch ist der entsprechende k -Wert in vorliegendem Fall nicht gleich Null sondern 0.2. Bei 2.72eV (455.8nm) wird kein Peak beobachtet. Stattdessen tritt ein starker Resonanzpeak nahe 365nm in Erscheinung, über den in der Literatur nicht berichtet wurde. Mit abnehmender C-Konzentration werden die Peaks sowohl bei n -Kurven als auch bei k -Kurven breiter.

Bezüglich der Entwicklung der Stelle und Höhe des Resonanzpeaks als Funktion des Elementverhältnisses von C und Si können die Differenzspektren der Dispersionsrelation in zwei Gruppen aufgeteilt werden. Die erste besteht aus Proben mit C-Konzentrationen von 0.09, 0.19 und 0.26 atomarem Verhältnis, die zweite aus Proben mit C-Konzentrationen von 0.29, 0.44, 0.62 und 1 atomarem Verhältnis. Bei der Gruppe mit niedrigeren C-Konzentrationen liegt der Peak der n -Kurve etwa

einheitlich bei 375nm Ebenfalls ändert sich die Resonanzstelle der Gruppe mit höherer C-Konzentration gar nicht und bleibt bei 380nm. Innerhalb jeder Gruppe steigt der Verlauf der Dispersionsrelation mit zunehmender C-Konzentration. Ähnliches gilt auch für die k -Kurven. Es scheint, dass ein unstetiger Sprung sowohl bei der Höhe des Verlaufs der Dispersionsrelation als auch bei dessen Resonanzstelle herrscht. Dies erinnert an die in der Vorstudie [Rei02] erkannte statische Bindungsenergie. Ob hier wirklich eine Ähnlichkeit besteht und bei welcher Konzentration die Diskontinuität liegt, muss durch ausführliche Experimente mit einer Reihe von Proben mit feineren Konzentrationsschritten bestätigt werden. Ausserdem muss der Algorithmus verbessert werden, damit bei dem anzupassenden Modell die Oxidschicht in Betracht gezogen werden kann.

Im Gegensatz zur Beobachtung von Reinke et al. [Rei02], bei welcher die Verschiebung der Bindungsenergie gegenüber der Änderung des Gehaltverhältnisses konstant bleibt, scheint dies nach dem vorliegenden Ergebnis nicht der Fall zu sein. Gerade im Wellenlängenbereich der kleineren LSQ haben die Dispersionsrelationen eine auffallende Resonanzstruktur. Sowohl bei n - als auch bei k -Kurven besteht eine positive Korrelation zwischen der Resonanzstelle und dem Anteilsverhältnis von C_{60} und a-Si. Jedoch gilt diese Tendenz nicht für die Höhe des Resonanzpeaks. Mehr Versuche werden benötigt, um die Reproduzierbarkeit nachzuprüfen und eine endgültige Beziehung festzustellen.

iii. a-C:H:N

Zuletzt werden die ersten Resultate für eine Reihe von Proben von amorphem Kohlenwasserstoffstickstoff (a-C:H:N) besprochen. Dank seiner ausserordentlichen Eigenschaften und Mehrzweckanwendungen [Rob92, Tsa87] ist amorpher Kohlenwasserstoff seit langem ein beliebter Gegenstand von Untersuchungen [Koi87, Pou89]. Jedoch ist Kohlenwasserstoffstickstoff noch nicht gut etabliert. Einige Untersuchungen sind vorhanden [Mck91, Oga94, Dem95, Sil97, Bha98], aber die Ergebnisse sind kontrovers. Im Rahmen einer ABB-Vorstudie wurden a-C:H:N Filme hergestellt, um den Einfluss der Einfügung des Stickstoffs in den Kohlenwasserstoff zu untersuchen. Als Referenz wurde ein a-C:H Film einbezogen. Die Herstellungsbedingungen sind im Anhang F zu finden. Die ersten Anpassungsergebnisse mit dem *hoelp* Programm sind im Anhang E beigelegt. Als Folge eines ausführlichen Vergleichs und

Operation werden die endgültigen Dispersionsrelationen ermittelt, deren Gegenüberstellung in Abb.7.2.7 dargestellt sind.

Als Referenz wird zuerst die Dispersionsrelation der a-C:H Probe {1n16a} betrachtet. Die n -Kurve verläuft relativ flach und liegt um $n=2.1$. Sie ist um 0.4 höher als der typische Wert von 1.7 [Bub83, Koi89, Gam96]. Die k -Kurve bei den kleinen Wellenlängen des sichtbaren Bereiches steigt bis 0.4. Sie ist zweimal so hoch wie die der Referenzkurve in Gampp [Gam96]. Wie der letztgenannte Autor angemerkt hat, sind die Eigenschaften von a-C:H stark von Herstellungsparametern abhängig [Gam96]. Das gleiche wird von a-C:H:N erwartet. Die Proben {1n16d} und {1n16e} wurden unter genau den gleichen Bedingungen, mit Ausnahme der Abscheidungsdauer, hergestellt. Jedoch ist die Abweichung deutlich größer als diejenige zwischen {1n18b} und {1n19b}, die unter dem gleichen Gasflussverhältnis, aber unterschiedlichem Druck hergestellt wurden. Unter den vier n -Kurven der a-C:H:N Schichten weist nur diejenige der Probe {1n16e} nahe $\lambda=540\text{nm}$ keinen Buckel auf. Ob das mit der Größenordnung der Schichtdicke zu tun hat, ist nicht klar. Trotz der großen Fehlerschranken wird eine grobe Tendenz beobachtet: Während die n -Kurve mit dem Stickstoffgehalt abnimmt, nimmt die k -Kurve zu. Mehr Versuche werden benötigt, um diese Tendenz zu bestätigen.

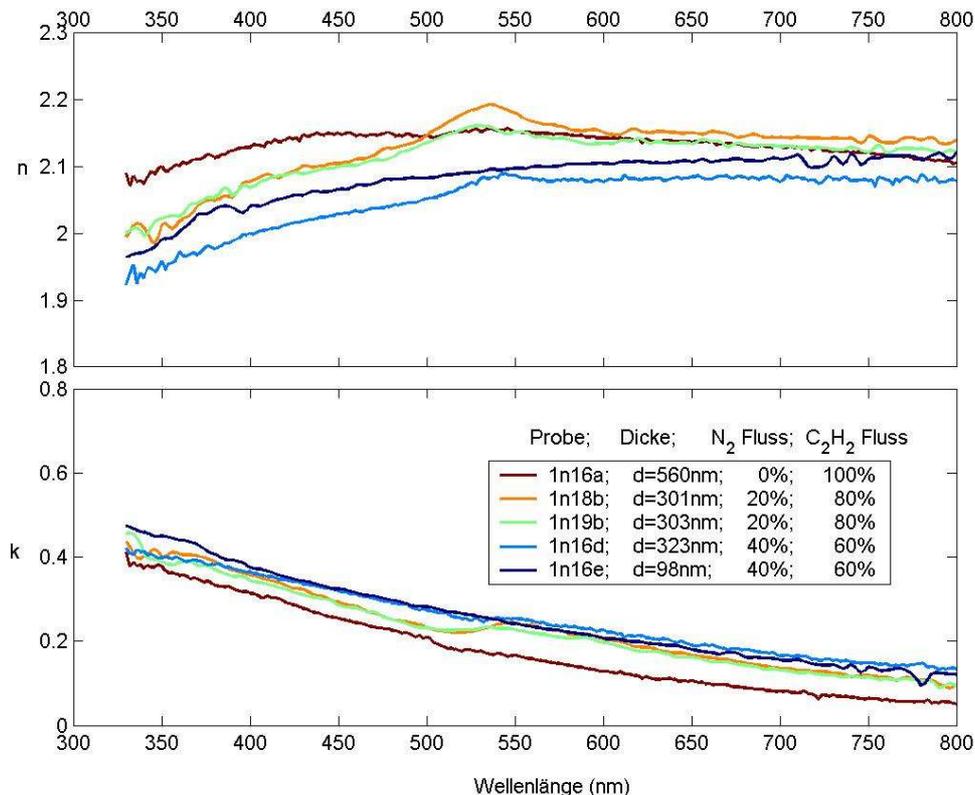


Abb.7.2.7: Dispersionsrelationen der a-C:H:N-Filme unterschiedlicher N₂-Anteile.

7.3 Diskussion

Die angesichts der in Kapitel 5 dargelegten Problematik und der Überlegung zu künftiger Nutzung und Anpassung an technische Entwicklungen eingesetzte allgemeine Lösung erweisen sich, nach simulierten sowie echten Messungen, als durchführbar. Obwohl das Prinzip der Suchverfahren an sich sehr unmittelbar ist, wurde bisher nichts darüber berichtet. Auch wenn es bei den modernsten Prozessoren möglichst sein sollte, wurde es noch nicht in Form kommerzieller Programme angeboten. Experimente haben gezeigt, dass selbst mit dem heutigen Stand der Rechengeschwindigkeit eine solche sämtliche Anpassungsrechnung Stunden oder Tage dauern könnte und dass das Gewinnen einer Dispersionsrelation als Endergebnis die Größenordnung von Tagen einnimmt. Für ein kommerzielles Angebot ist die Rechendauer noch unzumutbar lange. Jedoch für Forschungszweck ist die Anwendung bereits realisierbar. Um Wartezeit zu sparen, wird es empfohlen, eine Anpassung während der Nacht laufend zu lassen. Im Gegensatz zu den vergangenen Algorithmen ist der vorliegende Algorithmus getreulich automatisch. Er kann wirklich vom manuellem Starten und Abbrechen eines Suchverfahrens befreit werden. Überdies hat der jetzige Algorithmus bessere Zukunftsaussichten in Hinblick auf den Trend der unaufhörlichen Geschwindigkeitssteigerung des modernen Computers. Es wird nicht mehr lange dauern, bis die Implementierung dieses Invertierungsverfahrens auch kommerziell attraktiv wird. Das Suchverfahren ist so allgemein, dass es auch in anderen Anpassungsproblemen angewendet werden kann, bei denen ein Spektrum im Sinne der Abhängigkeit von einer laufenden Variablen analog zur Wellenlänge vorliegt. Somit wird quasi die alte Tugend des Fleisses wiederbelebt. Anstatt auf Zeitsparen basierende, intelligentere Algorithmen auszudenken, sollte sich das Augenmerk der Herausforderung der ellipsometrischen Invertierung der neuen Zeitwende langsam wieder auf die bisher wenig gefassten Probleme der Modellabhängigkeit umrichten.

8 Schlusswort

Die kaum zu bremsende Steigerung der Leistungsfähigkeit der modernen Computerprozessoren setzt eine Trendwende im Betrieb der Mathematik in Gang. Die Grenze zwischen angewandter und reiner Mathematik wird insofern verschoben, dass mehr und mehr numerische Methode und Algorithmen, die Wert auf Intelligenz gelegt haben und die nach Zeitsparen konzipiert gewesen sind, zum reinen Interesse des Mathematikers gehören. Dies betrifft auch viele experimentelle Bereiche der Naturwissenschaften, in denen mathematische Algorithmen zur Erhebung und Analyse der Messdaten eine zentrale Rolle spielen. Ellipsometrische Invertierung ist ein Beispiel dafür. Die vielen Überprüfungen von vorhandenen Algorithmen und die Bestrebungen nach besseren Algorithmen war zu einem Zeitalter modisch, in der eine intelligente zeitsparende Lösung geschätzt und gefragt wurde, sind aber schnell zur Kunst der Vergangenheit geworden. Sie haben nichts Wesentliches zu dieser Technik beigetragen, da die zusätzliche Anforderung der Modellabhängigkeit ohne intensiven modernen Computer-Einsatz nur sehr beschränkt oder gar nicht gewährleistet werden konnte. Angesichts der in Kapitel 5 aufgeklärten Problematik und der obigen Überlegung zu künftiger Nutzung und Anpassung an technische Entwicklungen wurde in der vorliegenden Arbeit eine allgemeine Lösung (Kapitel 7) eingesetzt. Im Gegensatz zu den vergangenen Algorithmen hat der jetzige eine bessere Zukunft in Hinblick auf den Trend der Geschwindigkeitssteigerung. Somit wird die alte Tugend des Fleisses wiederbelebt. Es bleibt in dieser Richtung nicht viel zu verbessern. In der neuen Zeitwende der immer schnelleren Rechnern sollte mehr Energie auf die bisher wenig thematisierten Probleme der Modellabhängigkeit aufgewendet werden.

Diese Studien der ellipsometrischen Invertierung werfen nicht nur einige spezifische Probleme auf, sondern auch allgemeine Fragen betreffend des Antriebs der Naturwissenschaften auf. Im Mittelpunkt steht die Frage der Transparenz. Die Kommerzialisierung der Naturwissenschaften stellt sich oftmals dem Prinzip der Transparenz entgegen. Was die Ellipsometrie anbelangt, wurde sehr viel Aufwand in die technische Verbesserung der Messgeräte investiert während die Entwicklung der Invertierung stagnierte. Wie die Überprüfung des *Spectraray*-Programms gezeigt hat (Kapitel 5), arbeiten alle bekannten kommerziellen Programme mit irgendeiner Art numerischer Iteration, deren Implementierung jedoch nicht transparent ist. Die Erkenntnisfortschritte sollten Vorrang gegenüber kommerziellen Interessen einnehmen. In den naturwissenschaftlichen

Kreisen sollten auch administrative Instrumente entwickelt werden, um Programme zu kontrollieren.

Des Weiteren möchte ich die Transparenz der Daten in Frage stellen. Es hat sich bei wissenschaftlichen Publikationen leider die Praxis etabliert, dass die Messdaten beim Einreichen neuer Beiträge nicht mitgeliefert werden müssen, geschweige denn, dass die Daten überhaupt je veröffentlicht werden. Was man in der Publikation sieht, sind nur die Invertierungsergebnisse. Der Schritt von den Messdaten zu den ersten Ergebnissen ist bisher nicht streng kontrolliert worden. Geschweige denn sollte die Intuition, mit deren der jeweilige Wissenschaftler von ersten Anpassungsergebnissen zu den präsentierten Ergebnissen in hohem Masse kommt, quantifiziert und transparent gemacht werden. Diese Tatsache führt zu dem Widerspruch, der bei der Überprüfung im letzten Abschnitt des Kapitels 5 entdeckt wurde. Die meisten Zeitschriftkommissionen sind nicht in der Lage, sich um das Vorhandensein und die Überprüfbarkeit der Messdaten zu kümmern. Die Erkenntnisfortschritte der experimentellen Naturwissenschaften hängen massgeblich von der persönlichen Erfahrung und der Intuition zahlreicher Autoritäten ab.

In jetzigem Zeitalter der Informatisierung, in der viele etablierte Berufe durch Digitaltechnik und globale Kommunikationstechnik plötzlich veraltet sind, erweist sich auch der jetzige Antriebe der Naturwissenschaften als ungenügend. Die Digital- und Halbleitertechnik sowie das Internet haben die Übertragungsgeschwindigkeit und Speicherkapazität der Daten drastisch revolutioniert. Neue Möglichkeiten für eine transparentere Vorgehensweise in der Naturwissenschaft sind ermöglicht worden. Durch die Informatisierung der naturwissenschaftlichen Erkenntnisse wird die alleinige Autorität des naturwissenschaftlichen Experten in Frage gestellt. Der jetzige Autor sieht die Notwendigkeit, folgende Anforderungen zu stellen: Eine zentrale Datenbank für jeden der betroffenen naturwissenschaftlichen Bereiche sollte im Internet zur Verfügung gestellt werden. Bei einer Veröffentlichung sollten die zu Grunde liegenden Daten auf diese Weise öffentlich zugänglich und nachprüfbar gemacht werden. Neben der zentralen Datenbank sollte auch noch betroffene Analysealgorithmen sehr einfach durch das globale Netzwerk zur Verfügung gestellt werden. Jeder Amateurwissenschaftler könnte an diesem Netzwerk teilnehmen. Anhand der öffentlich zugänglichen Ausgangsdaten und Analysealgorithmen könnte jeder Teilnehmer das Experiment nachvollziehen, die Reproduzierbarkeit eines bestimmten Algorithmus mit denselben Daten überprüfen oder einen bestimmten Algorithmus mit einem anderen

vergleichen. Somit funktionierte diese zentrale Einrichtung als ein gemeinsames Gehirn der Wissenschaftler. Das Betreiben von Wissenschaft könnte weiter objektiviert werden. So, wie in der Epoche Galileis durch die Mathematisierung der Naturgesetze eine Emanzipierung von theologischer Bevormundung stattfand, sollte sich der Betrieb der naturwissenschaftlichen Erkenntnisprozesse durch globale Zugänglichkeit und Nachprüfbarkeit unabhängig von der bisher unantastbaren Intuition einer Minderheit quasi säkularisieren und von der Kommerzialisierung befreien.

Die vorliegende Arbeit hat einen ersten Schritt in der Entwicklung in dieser Richtung gewidmet. Bei der spektroskopischen ellipsometrischen Invertierung bleiben noch viele offene Fragen, deren numerische Untersuchung ohne den jetzigen Stand der Digitaltechnik kaum zeitgemäss möglich war. Im allgemeinen ist das Verhalten der ellipsometrischen Funktion noch nicht gut verstanden. Beliebige numerische Versuche können durchgeführt werden, um die ellipsometrischen Funktionen gründlich zu untersuchen. Eine andere numerisch zu behandelnde Frage betrifft die Benutzung der gewichteten statt der ungewichteten Fehlerfunktion (§ 2.5). Daraus ergibt sich die Frage der Fehlerabschätzung. Trotz der Eröffnung des neuen Horizontes ist es im wesentlichen nicht möglich, die Fehlerfunktionen von verschiedenem Gewicht zu vergleichen. Was möglich ist, ist nur ein Vergleich verschiedener Anpassungen mit der gleichen Fehlerfunktion. Innerhalb dieses Rahmen kann man nicht mal die Verbesserung der optischen Modelle vergleichen, da die Änderung der Anzahl Schichten die Anzahl Parameter auch ändern. An und für sich gibt es keinen universellen Massstab für die Eignung einer Anpassung [Jel93]. Hierfür spielt die Intuition des Physikers immerhin eine Rolle.

Anhang A Anleitung zur Programmierung

Im Moment funktioniert das *hoelp* Programm nur für Einschichtsystem. Es kann auf Mehrschichtsystem anhand der klassischen Methode [Vas60] oder mit Hilfe der Matrizen [Abe50b, Hay64] erweitert werden. Da noch zusätzliche Komponenten ausgebaut werden müssen, um das Programm zu kommerzialisieren oder zu externer Benutzung zu empfehlen, ist diese Anleitung nicht in der Art eines vollständigen Handbuches abgefasst. Jedoch enthält sie die wesentlichen Punkte, die einen Bezug zu Anwendung und zu weiterer Entwicklung bieten. Eine ausführliche Beschreibung für MATLAB ist auf ein Handbuch zu verweisen.

A.1 Begriff und Entwurf

Neben dem Invertierungskernstück muss eine ganze Reihe von Modulen implementiert werden, um es benutzbar zu machen und die Bedienung handhabbar zu machen. Im Mittelpunkt der Implementierung steht die Darstellung und Behandlung der zahlreichen Funktionen, die während der Haupttätigkeit von Simulation von Messungen, Bereitstellen von Messungen, Anpassung, Dispersionsvergleich und Gegenüberstellung von Theorie und Messung, auftauchen und in Betracht zu ziehen sind. Der Funktionen lassen sich bezüglich der Abbildung $\bar{x}_{\lambda_i} \rightarrow \vec{F}(M(\bar{x}_{\lambda_i}))$ und ihrer umgekehrten Abbildung Umkehrfunktion $\vec{F}_{\lambda_i}^{meas} \mapsto \bar{x}_{\lambda_i}$ verallgemeinern. Als Input und Output der Abbildungen sind lediglich Dispersionen und optische Funktionen zu berücksichtigen. Dazu muss der Anpassungsfehler zur Betrachtung parallel mit den Ergebnissen dargestellt werden. Neben der Darstellung von Daten muss das optische Modell konstruiert werden. Darüber hinaus muss das Programm auch über gewisse standardmässige Funktionen verfügen, wie Abrufen und Auswahl von Dateien, Speichern und Löschen von Dateien.

Um die Funktionen effizient darzustellen, wird ein neues Konzept entwickelt. Statt immer verschiedene Fenster öffnen und schliessen zu müssen wie bei *Spectraray*, werden 5 Darstellungsfenster zur gleichzeitigen Anzeige von LSQ , n , k , Δ , Ψ in die Bedienoberfläche untergebracht. Jedes Darstellungsfenster ist für einen der 5 Funktionstypen vorgesehen, um die mathematische Beziehung anschaulicher zu machen. Die obersten zwei Fenster sind exklusiv für die Darstellung von n und k gedacht, mit denen n & k verschiedener Materialien, Rohdaten wie auch angepasste Daten, verglichen werden

können. Die nächsten zwei Fenster sind für Darstellung von Δ und Ψ reserviert, mit denen simulierte und/oder echte Messungen verglichen werden können. Das unterste spezialisiert sich auf die Zeichnung von Anpassungsfehler. Zusätzlich wird die Alternative angeboten, die Kurven in separaten Fenstern aufzutragen.

Der Effizienz halber werden die Dateien in 4 separaten Kästen untergebracht. Sie sind gerade neben dem Fenster gestellt, in dem die Kurven zu zeichnen sind. Die Objekte sind nach ihrer Art in verschiedenen Farben erstellt. Eine einfache Anleitung für normale Benutzer wird im Anhang zusammengefasst. Abschnitt A.1 behandelt die Benutzung jedes Objekts während Abschnitt A.2 eine Wegleitung für komplexe Aufgaben, z.B. die Durchführung einer Simulation oder Anpassung vermittelt.

A.2 Programmierung

Zu diesem Ziel wird das Computerprogramm *hoelp* mit der MATLAB (MATrix LABoratory) Programmiersprache realisiert. MATLAB ist ein numerisches Berechnungs- und Simulationswerkzeug, das zu einem kommerziellen Werkzeug mit benutzerfreundlicher Bedienoberfläche entwickelt wurde. Anders als bei den bekannten Computeralgebra-Programmen wie MAPLE oder MATHEMATICA, welche in der Lage sind, symbolische Operationen durchzuführen, rechnet MATLAB prinzipiell rein numerisch. Der Vorteil besteht darin, dass MATLAB Programme weit problemloser in anderen Hochsprachen geschrieben werden können [Beu00]. Für die Weiterentwicklung von Nachfolgern ist es auch günstiger. Das Computerprogramm bietet einen Rahmen zur forschungsmässigen Überprüfung von vorhandenen und neuen Anpassungsverfahren. Mit Anfertigung weiterer Funktionen lässt sich das Programm auch kommerzialisieren. Der Quellcode des Programms ist im Anhang E angefügt. Die Bedienung wird im Anhang D zusammengefasst.

i. Dateityp

Die ausführbare Dateien (die Routinen oder 'function') sind mit der Erweiterung '*.m' versehen. Sie umfassen die folgenden:

'cal_fcn.m', 'cr_fcn.m', 'define_fcn.m', 'edit_fcn.m', 'fit_fcn.m',
'get_par.m', 'get_wpar.m', 'hoelp.m', 'inv_fcn.m', 'plot_df.m',
'plot_fcn.m', 'plot_gp.m', 'push_fcn.m', 'save_fcn.m', 'set_par.m',
'set_wpar.m'

Ihre Auswirkung werden Kommentarzeilen der entsprechenden Routinen zusammengefasst und durch Eintippen von den gleichen Name nach 'help' in der Kommandozeile abrufbar. Das Herzstück des Programms ist die Anpassungsroutine: 'fit.m'. 'inv_fcn.m' ist eine Routine zur forschungsmässigen Analyse. Die Ergebnisse in Kapitel 6 wurden mit Hilfe dieser Routine erzeugt.

Die Parameter der Objekte, z.B. die Grösse und Position, werden in Dateien mit Erweiterung '*.mat' abgespeichert. Sie umfassen

'axes_pos.mat', 'checkbox_pos.mat', 'define_pos.mat', 'edit_pos.mat',
'listbox_pos.mat', 'object_col.mat', 'optics.mat',
'popupmenu_pos.mat', 'pushbutton_pos.mat', 'ref_pos.mat' und
'text_pos.mat'.

Die Dateien mit '*.dat' Erweiterung enthalten nur Daten. Die Materialdateien, die Ergebnisdateien haben die Erweiterung. Während die ersteren im Ordner 'mat' gelagert sind, werden die letzteren erst nach der Invertierung in 'fit_res' untergebracht.

ii. Objekte

Der jetzige Prototyp enthält insgesamt 131 Objekte. Sie bestehen aus den folgenden Objektarten, die durch die Objekteigenschaft 'style' erklärt wird: 'axes', 'checkbox', 'edit', 'pushbutton', 'listbox', 'text'. Ein Objekt wird durch die Objekteigenschaft ('property') 'tag' gekennzeichnet. Dadurch lässt sich ein Objekt eindeutig identifizieren und es lässt sich mit Hilfe der MATLAB Funktion 'findobj' schnell finden. Je nach Objektart kann eine Routine durch Aktivierung des Objekts aufgerufen werden, z.B. wenn ein 'pushbutton' angeklickt wird oder wenn ein 'Checkbox'

aktiviert wird. Eine solche Routine wird als Objekteigenschaft 'Callbackfunction' erklärt. Der Quellcode der Objekte und die durch die Aktivierung der Objekte abzurufenden Routine sind getrennt erstellt. Alle Objekte werden in der Datei 'hoelp.m' erstellt.

iii. Routine

Nicht alle Routinen sind 'Callbackfunction'. Beispielweise werden 'get_par.m' und 'set_par.m' innerhalb anderen Routinen ausgeführt. Sie rufen die globalen Variable oder Parameter bzw. stellen sie ein. 'Createfunction' ist eine spezielle Art von 'Callbackfunction'. Sie werden erst bei Erstellung der Objekte ausgeführt. Sie werden als Eigenschaft 'CreateFcn' des entsprechenden Objekts deklarierten. Daher werden die Bestimmung der Grösse und Position der Objekte dort gelagert. Sie werden erst bei Erstellung durch Abruf der als Eigenschaft 'CreateFcn' des entsprechenden Objekts deklarierten 'Create function' zur Verfügung gestellt. Der Quellcode der Routinen sind im Anhang E beigelegt.

iv. Benennung

Jedes Objekt wird durch einen Namen als Eigenschaft 'tag' identifiziert. Das gleiche Etikett wird später zur MATLAB Programmierung verwendet.

v. Modellaufbau

Zur Simulation von Ψ - Δ Dateien als auch zur Anpassung von Messungen braucht man ein optisches Modell zu konstruieren. Momentan wird nur das 3-Schicht System unterstützt. Bei Simulation können beliebig 3 Schichte ausgewählt werden. Die Anpassung wird auf [air | unknown | Substrat] eingeschränkt werden. Die Datei 'unknown.dat' enthält keine Daten. Es bezeichnet für die Programmierung nur, dass die Schicht unbekannt ist und anzupassen ist.

Anhang B Programmobjekte

B.1 Überblick über die Objekte

Tabelle B.1 sollte Benutzern einen Überblick geben. Der gewöhnliche Benutzer kann sich auf die ersten drei Spalten beschränken. Die erste Spalte gibt den gewöhnlichen Namen an, mit dem ein Objekt im Allgemeinen angesprochen wird. Ihre Benutzung wird in der zweiten Spalte beschrieben. Jedes Objekt wird mit einem Etikett in der dritten Spalte benannt und eindeutig angesprochen. Die gleichen Etikette werden in der Identifikation der Objekte in der MATLAB Programmierung verwendet. Der Typ eines Objekts wird als 'style' in der Programmierung definiert.

Objekt	Beschreibung	Name ('tag')	Objekttyp ('style')	'Callback' Routine
Darstellungsfenster	<i>LSQ</i> -, <i>n</i> -, <i>k</i> -, Ψ - bzw. Δ -Daten werden hier aufgetragen. Mit dem Dateiquellemenü und Darstellungszielmenü kann man auswählen, welche Dateien bzw. wo sie darzustellen sind.	'lsq_win', 'n_win', 'k_win', 'psi_win', 'del_win'	'axes'	
Dateihauptablage	Material-, Simulations-, Messungs- und Anpassungsdateien werden als Default hier abgelagert. Die Verzeichnisse können durch Anklicken von 'chd_mat', 'chd_sim', 'chd_mea' bzw. 'chd_fit' gewählt werden.	'mat_dat', 'sim_dat', 'mea_dat', 'fit_dat',	'listbox'	push_fcn
Dateizwischenablage	Bufferverzeichnisse für 'mat_dat', 'sim_dat', 'mea_dat' & 'fit_dat', aus denen die Dateien ausgewählt werden und vorläufig zur Bearbeitung abgelagert werden.	'mat_box', 'sim_box', 'mea_box', 'fit_box'	'listbox'	push_fcn
Dateiquellemenü	Mit den Optionen 'all', 'chosen' und 'highlighted' werden alle Dateien in Dateihauptablage, in Dateizwischenablage bzw. hervorgehobene Dateien in Dateizwischenablage ausgewählt.	'p_mod_sr', 'p_sim_sr', 'p_mea_sr', 'p_fit_sr'	'popupmenu'	plot_df
Darstellungszielmenü	Mit der Option 'display' oder 'separate' werden die ausgewählten Dateien werden in den von der Bedienoberfläche angebotenen Fenstern bzw. in Fenstern auf separater Oberfläche aufgetragen.	'p_mod_tr', 'p_sim_tr', 'p_mea_tr', 'p_fit_sr'	'popupmenu'	plot_df
Verzeichnisänderungsknöpfe	Ändert die Verzeichnisse der entsprechenden Dateihauptablage.	'chd_mat', 'chd_sim', 'chd_mea', 'chd_fit'	'pushbutton'	push_fcn
Dateiauswahlknöpfe	Wählt das in 'mat_dat', 'sim_dat', 'mea_dat' & 'fit_dat' hervorgehobene Datei aus und fügt es in 'mat_box', 'sim_box', 'mea_box' bzw. 'fit_box' ein	'add_mat', 'add_sim', 'add_mea', 'add_fit'	'pushbutton'	push_fcn

Dateilöschkнопfe	Löscht das in 'mat_box', 'sim_box', 'mea_box' & 'fit_box' hervorgehobene Datei.	'del_mat', 'del_sim', 'del_mea', 'del_fit'	'pushbutton'	push_fcn
Dateispeicherungskнопfe	Speicht das in 'mat_box', 'sim_box', 'mea_box' & bzw. 'fit_box' hervorgehobene Datei ab.	'save_nk', 'save_sim'	'pushbutton'	push_fcn
Kurvenzeichensknöpfе	Trägt die im Dateiquellemenü ausgewählten Dateien auf.	'plot_mat', 'plot_sim', 'plot_mea', 'plot_fit'	'pushbutton'	plot_fcn
Kurvenlöschensknöpfе	Löscht die in Darstellungsfenster 'lsq_win', 'n_win', 'k_win', 'psi_win', 'del_win' bzw. alle Fenster gezeichneten Kurven	'clear_lsq', 'clear_n', 'clear_k', 'clear_psi', 'clear_del', 'clear_all'	'pushbutton'	plot_fcn
Anpassungsparameterfelder	Eingabe von Werten der Parameter zur Ausführung der Anpassung und Analyse.	'wl', 'wlfr', 'wlin', 'wlto', 'ang', 'ang_fr', 'ang_in', 'ang_to', 'n', 'n_fr', 'n_in', 'n_to', 'k', 'k_fr', 'k_in', 'k_to', 'd', 'd_fr', 'd_in', 'd_to'	'edit'	define_fcn
Darstellungsbereichsfelder	Eingabe des Darstellungsbereichs	'psi_l', 'psi_r', 'psi_b', 'psi_t', 'del_l', 'del_r', 'del_b', 'del_t', 'n_l', 'n_r', 'n_b', 'n_t', 'k_l', 'k_r', 'k_b', 'k_t', 'lsq_l', 'lsq_r', 'lsq_b', 'lsq_t'	'edit'	edit_fcn

Ergebniswahlkästchen	Bei Auswahl von 'n', 'k' und 'lsq' werden die entsprechenden Teilen der Anpassungsergebnisse zur Darstellung ausgewählt. 'p_fit_n', 'p_fit_k' & 'p_fit_e' entsprechen n -, k - bzw. lsq -Kurven. Mit den Optionen '1. Min', '2. Min' und '3. Min.' wird das dem ersten, zweiten bzw. dritten Minimum entsprechende Ergebnis zur Darstellung ausgewählt.	'p_fit_n', 'p_fit_k', 'p_fit_e', 'p_fit_1m', 'p_fit_2m', 'p_fit_3m'	'checkbox'	plot_df
Auswahlkästchen	Bei Auswahl wird kohärente Interferenz berechnet. Die Funktion dieses Objekts muss noch implementiert werden.	'coh'	'checkbox'	define_fcn
Text	Sie sind durch die in 'string' angegebene auf der Oberfläche sichtbar Text erkannt. Sie sind die einzigen Objekte, die keine 'callbackfcn' haben und rufen keine Funktionen ab.	't_tr', 't_coh', 't_nbr', 't_ang', 't_wl', 't_n', 't_k', 't_d', 't_val', 't_from', 't_int', 't_to', 't_mod', 't_sim', 't_mea', 't_fit'	'text'	
Menü	Künstliche Geräusche an gewählte Daten zu superponieren	'add_noise'	'menu'	cal_fcn
Menü	Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung	'global'	'menu'	fit_fcn

Tabelle B.1 Entwicklung der Objekte und Routine.

B.2 Abkürzungen

Die folgende Tabelle erleichtert MATLAB Programmierern, die Bedeutung der verwendeten englischen Abkürzungen und Bezeichnungen zu finden.

Abkürzung	Bedeutung
mat	Material
sim	Simulation
_l	Left
_r	Right
_t	Top
_b	Bottom
wl	Wavelength
fr	From
in	Interval
ang	Angle
chd	Change
inv	Inversion
coh	Coherence
del	Delete
_del	Delta
1m	1st minimum
2m	2nd minimum
3m	3rd minimum

Tabelle B.2 Abkürzung für englische Ausdrücke, die in der Programmierung verwendet werden.

Anhang C Anleitung zur Programmbedienung

Dieser Anhang richtet sich an Durchschnittbenutzer. Es wird erklärt, wie man komplexe Aufgaben und Anwendungen ausführt, die aus mehrmaligen Anklicken und Auswählen der Objekte bestehen. Die Benennung und Benutzung einzelner Objekte ist in Tabelle B.1 & B.2 zusammengefasst.

i. Installieren

Das Programm steht unter dem Verzeichnis `\hoelp`. Zum Installieren soll das ganze Verzeichnis unter das `\work` Verzeichnis von MATLAB kopiert werden.

ii. Starten

Um auf das Verzeichnis zu wechseln

```
>>cd hoelp,
```

bei MATLAB Kommandozeile eingeben. Um das Programm zu starten,

```
>>hoelp
```

eingeben. Danach erscheint die folgende Oberfläche.

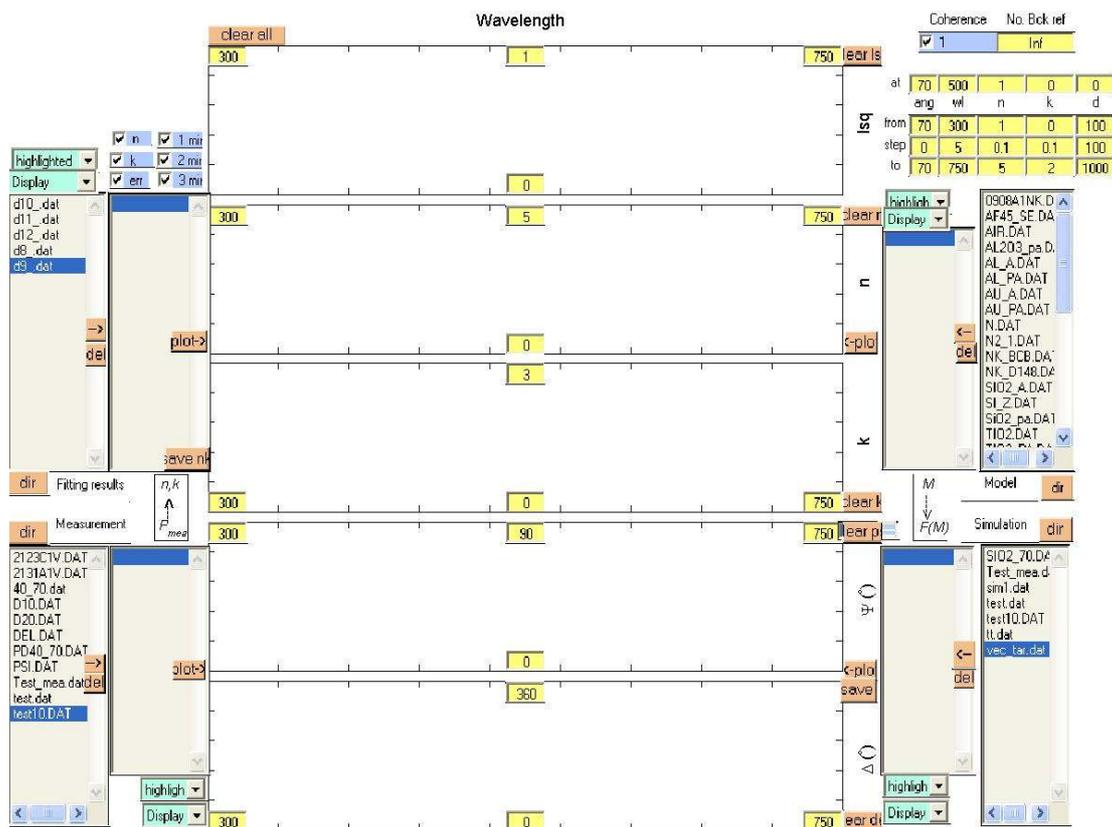


Abb. C.1: Bedienungsfläche vom Programm *hoelp*.

Das Programm hat eine benutzerfreundliche Oberfläche, die viele Objekte beinhaltet. Diese Objekte sind in einige Klassen unterteilt und werden in verschiedener Farbe dargestellt. Die Benennung und Benutzung einzelner Objekte ist in Tabelle B.1 & B.2 zusammengefasst. Der Durchschnittbenutzer kann sich auf die ersten drei Spalten der Tabelle B.1 beschränken.

iii. Modellkonstruieren

Den Pfeil zwischen Dateihauptablage '*mat_dat*' und Dateizwischenablage '*mat_box*' anklicken, um Materialdateien von der Dateihauptablage auszuwählen und zur Dateizwischenablage zu bringen. Mit dem Dateilöschknopf '*del_mat*' kann man die ausgewählten Dateien löschen. Bei Simulation sowie Anpassung muss ein Modell zuerst konstruiert werden.

iv. Simulation

Zuerst das gewünschte optische Modell wie oben konstruieren. Um eine simulierte Ψ - Δ -Datei zu erstellen, den Pfeil zwischen der Dateizwischenablage '**mat_box**' und der Dateizwischenablage '**sim_box**' anklicken. Danach erscheint die Datei in der letzteren Dateizwischenablage.

v. Wellenlänge-für-Wellenlänge Invertierung

Zuerst das anzupassende Messungsdatei auswählen und in Dateizwischenablage '**mea_box**' deponieren. Das gewünschte optische Modell konstruieren. Das Datei 'unknown.dat' muss als die anzupassende, unbekannte Schicht ausgewählt werden. Zur Zeit wird die Anpassung auf das System {Medium | unbekannte Schicht | Substrat} eingeschränkt. Den Lösungsraum definieren. Dann das Menu '**global**' anklicken, um die Invertierung zu starten.

vi. Ordnerwechsel

Per Default sind die Verzeichnisse 'hoelp\mat_dat', 'hoelp\mat_dat', 'hoelp\mat_dat', und 'hoelp\mat_dat' als die Dateizwischenablage '**mat_dat**', '**sim_dat**', '**mea_dat**', bzw. '**fit_dat**' ausgewählt. Um die Verzeichnisse zu ändern, den jeweiligen Knopf '**dir**' anklicken.

vii. Dateiauswahl

Um Dateien von einer Dateihauptablage zur entsprechenden Dateizwischenablage verschieben, den inzwischen befindenden Pfeil anklicken.

Anhang D Programmierquellcode

```
function hoelp(action)
%%
%%
%% function hoelp
%%
%% Ellisometric functions handling tool Graphics Objects Design..
%% Routines in separate files
%%
%%
%%
if nargin < 1,
    action = 'initialize';
end;
switch action
case 'initialize',

load optics.mat;
load define.mat;
load object_col.mat;

% Menu

a = figure('Color',[1 1 1], ...
    'CreateFcn','cr_fcn("fig");', ...
    'NumberTitle','off', ...
    'Tag','ho_elp', ...
    'Units','normalized', ...
    'UserData','');
b = uimenu('Parent',a, ...
    'Label','&Analyse', ...
    'Tag','AnalyseMenu');
c = uimenu('Parent',b, ...
    'Label','&Ana_Svit', ...
    'Tag','Ana_Svi');
d = uimenu('Parent',c, ...
    'Label','k=0', ...
    'Tag','Ana_Svi_k=0');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","1");', ...
    'Label','svitasheva1', ...
    'Tag','svitasheva1');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","2");', ...
    'Label','svitasheva2', ...
    'Tag','svitasheva1');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","3");', ...
```

```

        'Label','svitasheva3', ...
        'Tag','svitasheva1');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","d_ind");', ...
    'Label','ita, gamma, d_period', ...
    'Tag','d_ind');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","abs_det");', ...
    'Label','absolute determinant', ...
    'Tag','abs_det');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","X+, X-3");', ...
    'Label','X+, X-3', ...
    'Tag','X+, X-3');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","tran","X+, X-2");', ...
    'Label','X+, X-2', ...
    'Tag','X+, X-2');
d = uimenu('Parent',c, ...
    'Callback','inv_fcn("svitasheva","opaq","1");', ...
    'Label','k/=0', ...
    'Tag','k/=0');
b = uimenu('Parent',a, ...
    'Label','&Fit', ...
    'Tag','FitMenu');
c = uimenu('Parent',b, ...
    'Callback','fit_fcn("global","", "");', ...
    'Label','&Global', ...
    'Tag','Global');
c = uimenu('Parent',b, ...
    'Label','&Svitasheva', ...
    'Tag','Fit_Svi');
d = uimenu('Parent',c, ...
    'Label','k=0', ...
    'Tag','Fit_Svi_k=0');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','fit_fcn("svitasheva","trans","1");', ...
    'Label','free_d', ...
    'Tag','free_d');
e = uimenu('Parent',d, ...
    'Callback','fit_fcn("svitasheva","trans","2");', ...
    'Label','fixed_d', ...
    'Tag','fixed_d');
b = uimenu('Parent',a, ...
    'Label','&Calculate', ...
    'Tag','CalculateMenu');
c = uimenu('Parent',b, ...
    'Callback','cal_fcn("add_noise");', ...
    'Label','add_noise', ...
    'Tag','add_noise');

```

```

%axes

b = axes('Parent',a, ...
        'box','on', ...
        'CameraUpVector',[0 1 0], ...
        'CameraUpVectorMode','manual', ...
        'Color','none', ...
        'CreateFcn','cr_fcn("lsq_win");', ...
        'FontSize',0.05, ...
        'FontUnits','normalized', ...
        'Tag','lsq_win', ...
        'Units','normalized', ...
        'XAxisLocation','top', ...
        'XColor',[0 0 0], ...
        'XTickLabel'," ...
        'YAxisLocation','right', ...
        'YColor',[0 0 0], ...
        'YTickLabel'," ...
        'ZColor',[0 0 0]);

c = xlabel('Wavelength','parent',b, ...
        'fontunits','normalized', ...
        'fontsize',0.1, ...
        'units','normalized');

c = ylabel('lsq','parent',b, ...
        'fontunits','normalized', ...
        'fontsize',0.1, ...
        'units','normalized');

b = axes('Parent',a, ...
        'box','on', ...
        'CameraUpVector',[0 1 0], ...
        'CameraUpVectorMode','manual', ...
        'Color','none', ...
        'CreateFcn','cr_fcn("n_win");', ...
        'FontSize',0.05, ...
        'FontUnits','normalized', ...
        'Tag','n_win', ...
        'Units','normalized', ...
        'XAxisLocation','top', ...
        'XColor',[0 0 0], ...
        'XTickLabel'," ...
        'YAxisLocation','right', ...
        'YColor',[0 0 0], ...
        'YAxisLocation','right', ...
        'YTickLabel',"");

c = ylabel('n','parent',b, ...
        'fontunits','normalized', ...
        'fontsize',0.1, ...
        'units','normalized');

b = axes('Parent',a, ...

```

```

    'box','on', ...
    'CameraUpVector',[0 1 0], ...
    'CameraUpVectorMode','manual', ...
    'Color','none', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_win");', ...
    'FontSize',0.05, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'Tag','k_win', ...
    'Units','normalized', ...
    'XAxisLocation','top', ...
    'XColor',[0 0 0], ...
    'YAxisLocation','right', ...
    'XTickLabel'," ...
    'YColor',[0 0 0], ...
    'YTickLabel',"");
c = ylabel('k','parent',b, ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.1, ...
    'units','normalized');
b = axes('Parent',a, ...
    'box','on', ...
    'CameraUpVector',[0 1 0], ...
    'CameraUpVectorMode','manual', ...
    'Color','none', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("psi_win");', ...
    'FontSize',0.05, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'Tag','psi_win', ...
    'Units','normalized', ...
    'XAxisLocation','top', ...
    'XColor',[0 0 0], ...
    'XTickLabel'," ...
    'YAxisLocation','right', ...
    'YColor',[0 0 0], ...
    'YTickLabel',"");
c = ylabel('\Psi (^circ)','parent',b, ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.1, ...
    'units','normalized');
b = axes('Parent',a, ...
    'box','on', ...
    'CameraUpVector',[0 1 0], ...
    'CameraUpVectorMode','manual', ...
    'Color','none', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_win");', ...
    'FontSize',0.05, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'Tag','del_win', ...
    'Units','normalized', ...
    'XAxisLocation','bottom', ...

```

```

        'XColor',[0 0 0], ...
        'XTickLabel'," ...
        'YAxisLocation','right', ...
        'YColor',[0 0 0], ...
        'YTickLabel'," ...
        'ZColor',[0 0 0]);
c = ylabel('\Delta (^{\circ})','parent',b, ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.1, ...
    'units','normalized');
b = axes('Parent',a, ...
    'Box','off', ...
    'ButtonDownFcn','cal_fcn("cal_sim");', ...
    'CameraUpVector',[0 1 0], ...
    'CameraUpVectorMode','manual', ...
    'Color',pushbutton_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("cal_sim");', ...
    'FontSize',0.05, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'Tag','cal_sim', ...
    'Units','normalized', ...
    'XColor',[0 0 0], ...
    'XTick',[], ...
    'YColor',[0 0 0], ...
    'YTick',[]);
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.29 0.85 0], ...
    'String','M', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2, ...
    'fontangle','italic');
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.5 0.68 0], ...
    'String','----', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2, ...
    'rotation',-90);
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.33 0.38 0], ...
    'String','V', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2);
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.2 0.2 0], ...
    'String','F(M)', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2, ...
    'fontangle','italic');
b = axes('Parent',a, ...
    'box','on', ...

```

```

    'CameraUpVector',[0 1 0], ...
    'CameraUpVectorMode','manual', ...
    'Color','none', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("cal_inv");', ...
    'FontSize',0.05, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'Tag','cal_inv', ...
    'Units','normalized', ...
    'XColor',[0 0 0], ...
    'XTick',[], ...
    'YColor',[0 0 0], ...
    'YTick',[]);
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.21 0.85 0], ...
    'String','n,k', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2, ...
    'fontangle','italic');
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.305 0.55 0], ...
    'String','^', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.36);
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.5 0.58 0], ...
    'String','-----', ...
    'rotation',-90, ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2);
c = text('parent',b, ...
    'pos',[0.155 0.17 0], ...
    'String','F_m_e_a', ...
    'fontunits','normalized', ...
    'fontsize',0.2, ...
    'fontangle','italic');

```

% edit simulation & fit parameters

```

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("nbr");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("nbr");', ...
    'String','inf', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','nbr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("wl");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("wl");', ...

```

```

        'Style','edit', ...
        'Tag','wl', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("wlfr");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("wlfr");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','wlfr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("wlin");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("wlin");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','wlin', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("wlto");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("wlto");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','wlto', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("ang");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("ang");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','ang', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("ang_fr");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("ang_fr");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','ang_fr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("ang_in");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("ang_in");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','ang_in', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("ang_to");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("ang_to");', ...
    'Style','edit', ...

```

```

        'Tag','ang_to', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("n");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("n_fr");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_fr");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n_fr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("n_in");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_in");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n_in', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("n_to");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_to");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n_to', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("k");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("k_fr");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_fr");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_fr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("k_in");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_in");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_in', ...

```

```

        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("k_to");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_to");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_to', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("d");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("d");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','d', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("d_fr");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("d_fr");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','d_fr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("d_in");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("d_in");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','d_in', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','define_fcn("d_to");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("d_to");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','d_to', ...
    'Units','normalized');

```

% edit window parameters

```

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("psi_l");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("psi_l");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','psi_l', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("psi_r");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("psi_r");', ...

```

```

        'Style','edit', ...
        'Tag','psi_r', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("psi_b");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("psi_b");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','psi_b', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("psi_t");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("psi_t");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','psi_t', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("del_l");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_l");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','del_l', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("del_r");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_r");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','del_r', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("del_b");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_b");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','del_b', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("del_t");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_t");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','del_t', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("n_l");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_l");', ...
    'Style','edit', ...

```

```

        'Tag','n_l', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("n_r");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_r");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n_r', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("n_b");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_b");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n_b', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("n_t");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("n_t");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','n_t', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("k_l");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_l");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_l', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("k_r");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_r");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_r', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("k_b");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_b");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_b', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("k_t");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("k_t");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','k_t', ...

```

```

        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("lsq_l");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("lsq_l");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','lsq_l', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("lsq_r");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("lsq_r");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','lsq_r', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("lsq_b");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("lsq_b");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','lsq_b', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',edit_col, ...
    'Callback','edit_fcn("lsq_t");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("lsq_t");', ...
    'Style','edit', ...
    'Tag','lsq_t', ...
    'Units','normalized');

% listbox

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mark");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("mat_dat");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','mat_dat', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mark");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("sim_dat");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','sim_dat', ...
    'Units','normalized');

```

```

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mark");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("mea_dat");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','mea_dat', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mark");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("fit_dat");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','fit_dat', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mrk_tar");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("mat_box");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','mat_box', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mrk_tar");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("sim_box");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','sim_box', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mrk_tar");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("mea_box");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.01, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','mea_box', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mrk_tar");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("fit_box");', ...
    'FontUnits','normalized', ...

```

```

        'FontSize',0.01, ...
        'Style','listbox', ...
        'Tag','fit_box', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',listbox_col, ...
    'Callback','push_fcn("mark");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("sel_sim");', ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'FontSize',0.02, ...
    'String',{'psi & del','psi','del','R','T'}, ...
    'Style','listbox', ...
    'Tag','sel_sim', ...
    'Units','normalized');

% pushbutton

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("chd_mat");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("chd_mat");', ...
    'String','dir', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','chd_mat', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("chd_sim");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("chd_sim");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','dir', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','chd_sim', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("chd_mea");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("chd_mea");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','dir', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','chd_mea', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("chd_fit");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("chd_fit");', ...
    'FontSize',0.35, ...

```

```

        'FontUnits','normalized', ...
        'String','dir', ...
    'Style','pushbutton', ...
        'Tag','chd_fit', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("add_mat");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("add_mat");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','<--', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','add_mat', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("add_sim");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("add_sim");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','<--', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','add_sim', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("add_mea");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("add_mea");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','-->', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','add_mea', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("add_fit");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("add_fit");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','-->', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','add_fit', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("del_mat");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_mat");', ...
    'FontSize',0.35, ...

```

```

        'FontUnits','normalized', ...
        'String','del', ...
    'Style','pushbutton', ...
        'Tag','del_mat', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("del_sim");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_sim");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','del', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','del_sim', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("del_me");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_me");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','del', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','del_me', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','push_fcn("del_fit");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("del_fit");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','del', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','del_fit', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("mat_box");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("plot_mat");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','<-plot', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','plot_mat', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("sim_box");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("plot_sim");', ...
    'FontSize',0.35, ...

```

```

        'FontUnits','normalized', ...
        'String','<-plot', ...
    'Style','pushbutton', ...
        'Tag','plot_sim', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("mea_box");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("plot_mea");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','plot->', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','plot_mea', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("fit_box");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("plot_fit");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','plot->', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','plot_fit', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','save_fcn("save_nk");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("save_nk");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','save nk', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','save_nk', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','save_fcn("save_sim");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("save_sim");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','save', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','save_sim', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("clear_lsq");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("clear_lsq");', ...
    'FontSize',0.35, ...

```

```

        'FontUnits','normalized', ...
        'String','clear lsq', ...
    'Style','pushbutton', ...
        'Tag','clear_lsq', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("clear_n");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("clear_n");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','clear n', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','clear_n', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("clear_k");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("clear_k");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','clear k', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','clear_k', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("clear_psi");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("clear_psi");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','clear psi', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','clear_psi', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("clear_del");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("clear_del");', ...
    'FontSize',0.35, ...
    'FontUnits','normalized', ...
    'String','clear del', ...
    'Style','pushbutton', ...
    'Tag','clear_del', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',pushbutton_col, ...
    'Callback','plot_fcn("clear_all");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("clear_all");', ...
    'FontSize',0.35, ...

```

```

        'FontUnits','normalized', ...
        'String','clear all', ...
    'Style','pushbutton', ...
        'Tag','clear all', ...
        'Units','normalized');

%popupmenu

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_mod_sr");', ...
    'String',{'highlighted','all in box','display'}, ...
    'Style','popupmenu', ...
    'Tag','p_mod_sr', ...
    'Units','normalized');

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_mod_tr");', ...
    'String',{'Display','Separate'}, ...
    'Style','popupmenu', ...
    'Tag','p_mod_tr', ...
    'Units','normalized');

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_sim_sr");', ...
    'String',{'highlighted','all in box','display'}, ...
    'Style','popupmenu', ...
    'Tag','p_sim_sr', ...
    'Units','normalized');

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_sim_tr");', ...
    'String',{'Display','Separate'}, ...
    'Style','popupmenu', ...
    'Tag','p_sim_tr', ...
    'Units','normalized');

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_meas_sr");', ...
    'String',{'highlighted','all in box','display'}, ...
    'Style','popupmenu', ...
    'Tag','p_meas_sr', ...
    'Units','normalized');

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...

```

```

        'Callback','plot_df;', ...
        'CreateFcn','cr_fcn("p_mea_tr");', ...
    'String',{'Display','Separate'}, ...
        'Style','popupmenu', ...
        'Tag','p_mea_tr', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_sr");', ...
    'String',{'highlighted','all right','all left'}, ...
    'Style','popupmenu', ...
    'Tag','p_fit_sr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',popupmenu_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_tr");', ...
    'Style','popupmenu', ...
    'String',{'Display','Separate'}, ...
    'Tag','p_fit_tr', ...
    'Units','normalized');

% Checkbox

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_n");', ...
    'String','n', ...
    'Style','checkbox', ...
    'Tag','p_fit_n', ...
    'Units','normalized', ...
    'Userdata','1', ...
    'Value',1);
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_k");', ...
    'String','k', ...
    'Style','checkbox', ...
    'Tag','p_fit_k', ...
    'Units','normalized', ...
    'Userdata','1', ...
    'Value',1);
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_e");', ...
    'String','err', ...

```

```

        'Style','checkbox', ...
        'Tag','p_fit_e', ...
        'Units','normalized', ...
        'Userdata','1', ...
        'Value',1);
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_1m");', ...
    'String','1 min', ...
    'Style','checkbox', ...
    'Tag','p_fit_1m', ...
    'Units','normalized', ...
    'Userdata','1', ...
    'Value',1);
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_2m");', ...
    'String','2 min', ...
    'Style','checkbox', ...
    'Tag','p_fit_2m', ...
    'Units','normalized', ...
    'Userdata','1', ...
    'Value',1);
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','plot_df;', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("p_fit_3m");', ...
    'String','3 min', ...
    'Style','checkbox', ...
    'Tag','p_fit_3m', ...
    'Units','normalized', ...
    'Userdata','1', ...
    'Value',1);
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',checkbox_col, ...
    'Callback','define_fcn("coh");', ...
    'CreateFcn','cr_fcn("coh");', ...
    'String','1', ...
    'Style','checkbox', ...
    'Tag','coh', ...
    'Units','normalized');

% text

b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_coh");', ...
    'String','Coherence', ...

```

```

        'Style','text', ...
        'Tag','t_coh', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_nbr");', ...
    'String','No. Bck ref', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_nbr', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_ang");', ...
    'String','ang', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_ang', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_wl");', ...
    'String','wl', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_wl', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_n");', ...
    'String','n', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_n', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_k");', ...
    'String','k', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_k', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_d");', ...
    'String','d', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_d', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_val");', ...
    'String','at', ...
    'Style','text', ...

```

```

        'Tag','t_val', ...
        'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_from");', ...
    'String','from', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_from', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_int");', ...
    'String','step', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_int', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_to");', ...
    'String','to', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_to', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_mod");', ...
    'String','Model', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_mod', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_sim");', ...
    'String','Simulation', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_sim', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_mea");', ...
    'String','Measurement', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_mea', ...
    'Units','normalized');
b = uicontrol('Parent',a, ...
    'BackgroundColor',text_col, ...
    'CreateFcn','cr_fcn("t_fit");', ...
    'String','Fitting results', ...
    'Style','text', ...
    'Tag','t_fit', ...

```

```
end; 'Units','normalized');
```

function cr_fcn(action)

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
%                                                                 %  
% function cr_fcn                                               %  
%                                                                 %  
% 'create function'                                           %  
%                                                                 %  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
% % % % %  
load define.mat;  
load hoelp.mat;  
load listbox_pos.mat;  
load pushbutton_pos.mat;  
load popupmenu_pos.mat;  
load checkbox_pos.mat;  
load text_pos.mat;  
load object_col.mat;  
load axes_pos.mat;  
load ref_pos.mat;  
lsq_win_pos=[left base+4*(height+offset) width height];  
n_win_pos=[left base+3*(height+offset) width height];  
k_win_pos=[left base+2*(height+offset) width height];  
psi_win_pos=[left base+height+offset width height];  
del_win_pos=[left base width height];  
  
lsq_l_pos=[left base+5*height+4*offset-edit_height edit_width edit_height];  
lsq_r_pos=[left+width-edit_width base+5*height+4*offset-edit_height edit_width  
edit_height];  
lsq_b_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+4*(height+offset) edit_width  
edit_height];  
lsq_t_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+5*height+4*offset-edit_height edit_width  
edit_height];  
n_l_pos=[left base+4*height+3*offset-edit_height edit_width edit_height];  
n_r_pos=[left+width-edit_width base+4*height+3*offset-edit_height edit_width  
edit_height];  
  
n_b_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+3*(height+offset) edit_width edit_height];  
n_t_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+4*height+3*offset-edit_height edit_width  
edit_height];  
k_l_pos=[left base+2*(height+offset) edit_width edit_height];  
k_r_pos=[left+width-edit_width base+2*(height+offset) edit_width edit_height];  
k_b_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+2*(height+offset) edit_width edit_height];  
k_t_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+3*height+2*offset-edit_height edit_width  
edit_height];  
psi_l_pos=[left base+2*height+offset-edit_height edit_width edit_height];  
psi_r_pos=[left+width-edit_width base+2*height+offset-edit_height edit_width  
edit_height];  
psi_b_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+height+offset edit_width edit_height];  
psi_t_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+2*height+offset-edit_height edit_width  
edit_height];
```

```

del_l_pos=[left base edit_width edit_height];
del_r_pos=[left+width-edit_width base edit_width edit_height];
del_b_pos=[left+(width-edit_width)/2 base edit_width edit_height];
del_t_pos=[left+(width-edit_width)/2 base+height-edit_height edit_width
edit_height];

ang_pos=[left_2+0.75*edit_width 1-4*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
wl_pos=[left_2+1.5*edit_width 1-4*edit_height edit_width edit_height];
n_pos=[left_2+2.5*edit_width 1-4*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
k_pos=[left_2+3.75*edit_width 1-4*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
d_pos=[left_2+5*edit_width 1-4*edit_height edit_width edit_height];
ang_fr_pos=[left_2+0.75*edit_width 1-6*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
ang_in_pos=[left_2+0.75*edit_width 1-7*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
ang_to_pos=[left_2+0.75*edit_width 1-8*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
wlfr_pos=[left_2+1.5*edit_width 1-6*edit_height edit_width edit_height];
wlin_pos=[left_2+1.5*edit_width 1-7*edit_height edit_width edit_height];
wlto_pos=[left_2+1.5*edit_width 1-8*edit_height edit_width edit_height];
n_fr_pos=[left_2+2.5*edit_width 1-6*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
n_in_pos=[left_2+2.5*edit_width 1-7*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
n_to_pos=[left_2+2.5*edit_width 1-8*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
k_fr_pos=[left_2+3.75*edit_width 1-6*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
k_in_pos=[left_2+3.75*edit_width 1-7*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
k_to_pos=[left_2+3.75*edit_width 1-8*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
d_fr_pos=[left_2+5*edit_width 1-6*edit_height edit_width edit_height];
d_in_pos=[left_2+5*edit_width 1-7*edit_height edit_width edit_height];
d_to_pos=[left_2+5*edit_width 1-8*edit_height edit_width edit_height];
coh_pos=[left_2+edit_width 1-2*edit_height 2*edit_width edit_height];
nbr_pos=[left_2+3*edit_width 1-2*edit_height 2*edit_width edit_height];

% text

t_coh_pos=[left_2+edit_width 1-edit_height 2*edit_width edit_height];
t_nbr_pos=[left_2+3*edit_width 1-edit_height 2*edit_width edit_height];
t_ang_pos=[left_2+0.75*edit_width 1-5*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
t_wl_pos=[left_2+1.5*edit_width 1-5*edit_height edit_width edit_height];
t_n_pos=[left_2+2.5*edit_width 1-5*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
t_k_pos=[left_2+3.75*edit_width 1-5*edit_height 1.25*edit_width edit_height];
t_d_pos=[left_2+5*edit_width 1-5*edit_height edit_width edit_height];
t_val_pos=[left_2 1-4*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
t_from_pos=[left_2 1-6*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
t_int_pos=[left_2 1-7*edit_height 0.75*edit_width edit_height];
t_to_pos=[left_2 1-8*edit_height 0.75*edit_width edit_height];

clear_all_pos=[left base+5*height+4*offset 2*edit_width edit_height];
clear_lsq_pos=[left+width base+5*height+4*offset-edit_height edit_width
edit_height];
clear_n_pos=[left+width base+4*height+3*offset-edit_height edit_width edit_height];
clear_k_pos=[left+width base+2*(height+offset) edit_width edit_height];
clear_psi_pos=[left+width base+2*height+offset-edit_height edit_width edit_height];
clear_del_pos=[left+width base edit_width edit_height];

```

```

mat_path=[pwd '\ mat_dat_dir '\];
sim_path=[pwd '\ sim_dat_dir '\];
mea_path=[pwd '\ mea_dat_dir '\];
fit_path=[pwd '\ fit_dat_dir '\];

switch action
% case 'fig',
% set(gcbo,'WindowStyle','modal');

% axes

case 'lsq_win',
    set(gcbo,'xlim',[def_lsq_l def_lsq_r],'xlimmode','manual');
case 'n_win',
    set(gcbo,'xlim',[def_n_l def_n_r],'xlimmode','manual');
case 'k_win',
    set(gcbo,'xlim',[def_k_l def_k_r],'xlimmode','manual');
case 'psi_win',
    set(gcbo,'xlim',[def_psi_l def_psi_r],'xlimmode','manual');
case 'del_win',
    set(gcbo,'xlim',[def_del_l def_del_r],'xlimmode','manual');

% Edit

case 'nbr',
    set(gcbo,'String',num2str(def_nbr),'UserData',num2str(def_nbr),'value',def_nbr);
case 'wl',
    set(gcbo,'String',num2str(def_wl),'UserData',num2str(def_wl),'value',def_wl);
case 'wlfr',
    set(gcbo,'String',num2str(def_wlfr),'UserData',num2str(def_wlfr),'value',def_wlfr);
case 'wlin',
    set(gcbo,'String',num2str(def_wlin),'UserData',num2str(def_wlin),'value',def_wlin);
case 'wlto',
    set(gcbo,'String',num2str(def_wlto),'UserData',num2str(def_wlto),'value',def_wlto);
case 'ang',
    set(gcbo,'String',num2str(def_ang),'UserData',num2str(def_ang),'value',def_ang);
case 'ang_fr',

set(gcbo,'String',num2str(def_ang_fr),'UserData',num2str(def_ang_fr),'value',def_ang_fr);
case 'ang_in',

set(gcbo,'String',num2str(def_ang_in),'UserData',num2str(def_ang_in),'value',def_ang_in);
case 'ang_to',

set(gcbo,'String',num2str(def_ang_to),'UserData',num2str(def_ang_to),'value',def_ang_to);
case 'd',

```

```

    set(gcbo,'String',num2str(def_d),'UserData',num2str(def_d),'value',def_d);
case 'd_fr',
    set(gcbo,'String',num2str(def_d_fr),'UserData',num2str(def_d_fr),'value',def_d_fr);
case 'd_in',
    set(gcbo,'String',num2str(def_d_in),'UserData',num2str(def_d_in),'value',def_d_in);
case 'd_to',
    set(gcbo,'String',num2str(def_d_to),'UserData',num2str(def_d_to),'value',def_d_to);
case 'n',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n),'UserData',num2str(def_n),'value',def_n);
case 'n_fr',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_fr),'UserData',num2str(def_n_fr),'value',def_n_fr);
case 'n_in',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_in),'UserData',num2str(def_n_in),'value',def_n_in);
case 'n_to',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_to),'UserData',num2str(def_n_to),'value',def_n_to);
case 'k',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k),'UserData',num2str(def_k),'value',def_k);
case 'k_fr',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k_fr),'UserData',num2str(def_k_fr),'value',def_k_fr);
case 'k_in',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k_in),'UserData',num2str(def_k_in),'value',def_k_in);
case 'k_to',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k_to),'UserData',num2str(def_k_to),'value',def_k_to);

% edit window parameters

case 'lsq_l',
    set(gcbo,'String',num2str(def_lsq_l),'UserData',num2str(def_lsq_l),'value',def_lsq_l);
case 'lsq_r',

set(gcbo,'String',num2str(def_lsq_r),'UserData',num2str(def_lsq_r),'value',def_lsq_r);
case 'lsq_b',

set(gcbo,'String',num2str(def_lsq_b),'UserData',num2str(def_lsq_b),'value',def_lsq_b)
;
case 'lsq_t',
    set(gcbo,'String',num2str(def_lsq_t),'UserData',num2str(def_lsq_t),'value',def_lsq_t);
case 'n_l',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_l),'UserData',num2str(def_n_l),'value',def_n_l);
case 'n_r',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_r),'UserData',num2str(def_n_r),'value',def_n_r);
case 'n_b',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_b),'UserData',num2str(def_n_b),'value',def_n_b);
case 'n_t',
    set(gcbo,'String',num2str(def_n_t),'UserData',num2str(def_n_t),'value',def_n_t);
case 'k_l',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k_l),'UserData',num2str(def_k_l),'value',def_k_l);
case 'k_r',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k_r),'UserData',num2str(def_k_r),'value',def_k_r);
case 'k_b',

```

```

    set(gcbo,'String',num2str(def_k_b),'UserData',num2str(def_k_b),'value',def_k_b);
case 'k_t',
    set(gcbo,'String',num2str(def_k_t),'UserData',num2str(def_k_t),'value',def_k_t);
case 'psi_l',
    set(gcbo,'String',num2str(def_psi_l),'UserData',num2str(def_psi_l),'value',def_psi_l);
case 'psi_r',

set(gcbo,'String',num2str(def_psi_r),'UserData',num2str(def_psi_r),'value',def_psi_r);
case 'psi_b',

set(gcbo,'String',num2str(def_psi_b),'UserData',num2str(def_psi_b),'value',def_psi_b)
;
case 'psi_t',
    set(gcbo,'String',num2str(def_psi_t),'UserData',num2str(def_psi_t),'value',def_psi_t);
case 'del_l',

set(gcbo,'String',num2str(def_del_l),'UserData',num2str(def_del_l),'value',def_del_l);
case 'del_r',

set(gcbo,'String',num2str(def_del_r),'UserData',num2str(def_del_r),'value',def_del_r);
case 'del_b',

set(gcbo,'String',num2str(def_del_b),'UserData',num2str(def_del_b),'value',def_del_b)
;
case 'del_t',

set(gcbo,'String',num2str(def_del_t),'UserData',num2str(def_del_t),'value',def_del_t);

% listbox
case {'mat_dat', 'sim_dat', 'mea_dat', 'fit_dat'}
    dir_path=eval([action(1:3) '_path']);
    d=dir(dir_path);
    l=length(d);
    j=0;
    for i=1:l
        if (d(i).isdir)==0
            j=j+1;
            str{j}=d(i).name;
        end;
    end;
switch action
    case 'mat_dat',
        set(gcbo,'string',str,'value',j,'userdata',str(j));
    case 'sim_dat',
        set(gcbo,'string',str,'value',j,'userdata',str(j));
    case 'mea_dat',
        set(gcbo,'string',str,'value',j,'userdata',str(j));
    case 'fit_dat',
        set(gcbo,'string',str,'value',j,'userdata',str(j));
end;

```

```

case 'mat_box'
    set(gcbo,'string',{' '},'userdata',{' '});
case 'sim_box'
    set(gcbo,'string',{' '},'userdata',{' '});
case 'mea_box'
    set(gcbo,'string',{' '},'userdata',{' '});
case 'fit_box'
    set(gcbo,'string',{' '},'userdata',{' '});

% pushbutton

case 'chd_mat'
    set(gcbo,'userdata',mat_path);
case 'chd_sim'
    set(gcbo,'userdata',sim_path);
case 'chd_mea'
    set(gcbo,'userdata',mea_path);
case 'chd_fit'
    set(gcbo,'userdata',fit_path);

% popupmenu

case {'p_mat_op', 'p_mat_sr', 'p_mat_tr', 'p_sim_op', 'p_sim_sr', 'p_sim_tr',
'p_mea_op', ...
'p_mea_sr', 'p_mea_tr', 'p_fit_op', 'p_fit_sr', 'p_fit_tr'}
    set(gcbo,'value',1,'userdata','1');

case 'sel_sim'
    set(gcbo,'value',1,'userdata',{'psi & del'});

case 'sel_y'
    set(gcbo,'userdata',{'Angle'});

% Checkbox

case {'p_fit_1m', 'p_fit_2m', 'p_fit_3m', 'p_fit_n', 'p_fit_k', 'p_fit_e'}
    set(gcbo,'value',1,'userdata','1');
case 'coh',
    set(gcbo,'string',num2str(def_coh),'UserData',num2str(def_coh),'value',def_coh);
end;

eval(['pos=' action '_pos;']);
set(gcbo,'position',pos);

```



```

function cal_fcn(action)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% function cal_fcn
%
% calculate simulation
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
load optics.mat;
switch action
case 'cal_sim'
    % thickness in nm
    % wl is wave in nm
    Par = get_par({'coh' 'nbr' 'wlfr' 'wlin' 'wlto' 'ang' 'ang_fr' 'ang_in' 'ang_to' 'd' 'd_fr'
'd_in' 'd_to' 'n' 'n_fr' 'n_in' 'n_to' 'k' 'k_fr' 'k_in' 'k_to'});
    eval(Par);
    h_sel_y=findobj(gcf,'tag','sel_y');
    sel_y=get(h_sel_y,'userdata');
    if ang_in==0
        ang=ang_fr;
    else
        ang=ang_fr:ang_in:ang_to;
    end;
    qq=ang/180*pi;
    dicke=d*10^-9;
    hmod=findobj(gcf,'tag','mat_box');
    str1=get(hmod,'userdata');
    no_layer=length(str1)-1;
    clear fid;

    % wavelength range
    wl=wlfr:wlin:wlto;
    % change of scale
    lambda=wl.*10^-9;
    disp('debug35')
    % test if all files exist
    all_exist=1;
    for j=1:no_layer
        if exist(str1{j})~=2
            all_exist=0;
            disp([str1{j} 'does not exist']);
        end;
    end;
    if all_exist==0
        disp('not all layer files exist');
        return;
    end;

    rng_ok=1;

```

```

%%%%%%%% get wavelength range %%%%%%%%%
for j=1:no_lay
    fid(j) = fopen(str1 {j}, 'r');
    header=fgetl(fid(j));
    line=fgetl(fid(j));
    vec=sscanf(line, '%f');
    range(j,1)=vec(1);
    if ~feof(fid(j))
        line=fgetl(fid(j));
    end;
    disp('debug60');

    vec=sscanf(line, '%f');
    range(j,2)=vec(1);
    if range(j,1)>wlfr & range(j,2)<wlto
        rng_ok=0;
        disp(['File layer ' num2str(j) ' out of range']);
    end;
    fclose(fid(j));
end;
if rng_ok==0
    disp('Not all layer files within the specified range');
    disp('Narrow the range please!');
    return;
end;

%%%%%%%% open layer files and %%%%%%%%%
%%%%%%%% interpolate 2nd version using the range %%%%%%%%%
for m=1:no_lay
    fid(m) = fopen(str1 {m}, 'r');
    header=fgetl(fid(m));
    line_no=0;
    while ~feof(fid(m))
        line_no=line_no+1;
        line=fgetl(fid(m));
        vec(1:3,line_no)=sscanf(line, '%f');
    end;
    % ' means transpose
    ref_ind=interp1(vec(1,1:line_no),vec(2,1:line_no),wl,'pchip');
    ext_coe=interp1(vec(1,1:line_no),vec(3,1:line_no),wl,'pchip');

    n(1:length(wl),m)=ref_ind-i*ext_coe;
    fclose(fid(m));
end;

x=0;
while x<length(wl)
    x=x+1;
    for q_run=1:length(qq)
        % 1,2,3 ^= layer no.

```

```

q(x,1)=qq(q_run);
q(x,2)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,2));
q(x,3)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,3));
bb(x)=2*pi*dicke/lambda(x)*sqrt(n(x,2)^2-n(x,1)^2*sin(q(x,1))^2);
e(x)=exp(-2*i*bb(x));
r12p(x)=(n(x,2)*cos(q(x,1))-
n(x,1)*cos(q(x,2)))/(n(x,2)*cos(q(x,1))+n(x,1)*cos(q(x,2)));
r23p(x)=(n(x,3)*cos(q(x,2))-
n(x,2)*cos(q(x,3)))/(n(x,3)*cos(q(x,2))+n(x,2)*cos(q(x,3)));
r12s(x)=(n(x,1)*cos(q(x,1))-
n(x,2)*cos(q(x,2)))/(n(x,1)*cos(q(x,1))+n(x,2)*cos(q(x,2)));
r23s(x)=(n(x,2)*cos(q(x,2))-
n(x,3)*cos(q(x,3)))/(n(x,2)*cos(q(x,2))+n(x,3)*cos(q(x,3)));
t12p(x)=2*n(x,1)*cos(q(x,1))/(n(x,2)*cos(q(x,1))+n(x,1)*cos(q(x,2)));
t23p(x)=2*n(x,2)*cos(q(x,2))/(n(x,3)*cos(q(x,2))+n(x,2)*cos(q(x,3)));
t12s(x)=2*n(x,1)*cos(q(x,1))/(n(x,1)*cos(q(x,1))+n(x,2)*cos(q(x,2)));
t23s(x)=2*n(x,2)*cos(q(x,2))/(n(x,2)*cos(q(x,2))+n(x,3)*cos(q(x,3)));

if coh==1

tp(q_run,x)=n(x,3)/n(x,1)*abs((t12p(x)*t23p(x)*e(x))/(1+r12p(x)*r23p(x)*e(x)^2))^2
;

ts(q_run,x)=n(x,3)/n(x,1)*abs((t12s(x)*t23s(x)*e(x))/(1+r12s(x)*r23s(x)*e(x)^2))^2;
rp(q_run,x)=(r12p(x)+r23p(x)*e(x))/(1+r12p(x)*r23p(x)*e(x));
rs(q_run,x)=(r12s(x)+r23s(x)*e(x))/(1+r12s(x)*r23s(x)*e(x));
psi(q_run,x)=atan(abs(rp(q_run,x)/rs(q_run,x)))*180/pi;
del(q_run,x)=angle(rp(q_run,x)/rs(q_run,x))*180/pi;
else
fp(x)=abs(r12p(x)*r23p(x))^2;
fs(x)=abs(r12s(x)*r23s(x))^2;
zp(x)=1;
zs(x)=1;
for j=1:nbr
    zp(x)=zp(x)+fp(x)^j;
    zs(x)=zs(x)+fs(x)^j;
end;
tp(q_run,x)=n(x,3)/n(x,1)*zp(x)*abs(t12p(x)*t23p(x))^2;
ts(q_run,x)=n(x,3)/n(x,1)*zs(x)*abs(t12s(x)*t23s(x))^2;
end;
end; %end q_run
end;
h_opf=findobj(gcf,'tag','sel_sim');
opf=get(h_opf,'userdata');

switch opf{:}
case 'psi & del'
    res=[];
    s=size(psi);
    for ii=1:s(1)

```

```

        res=[res; psi(ii,:); del(ii,:)];
    end;
case 'psi'
    res=psi;
case 'del'
    res=del;
case 'T'
    res=(tp+ts)/2;
case 'Tp'
    res=tp;
case 'Ts'
    res=ts;
case 'R'
    res=(rp+rs)/2;
case 'Rp'
    res=rp;
case 'Rs'
    res=rs;
end;

aa=[wl; res];
cur_dir=[pwd '\ sim_box_dir '\];
cur_file='sim1.dat';
cur_ffln=[cur_dir cur_file];
fid_t=fopen(cur_ffln,'w');
header1=['; THICKNESS=' num2str(d) '; ANGLE=[' num2str(ang) '];'];
header2='; WAVELENGTH';
frmt_str='%f';
for ang_run=ang
    header2=[header2 ' ' num2str(ang_run) ' ' num2str(ang_run)];
    frmt_str=[frmt_str ' %f %f'];
end;
header1=[header1 '\n'];
header2=[header2 '\n'];
frmt_str=[frmt_str '\n'];
fprintf(fid_t, header1);
fprintf(fid_t, header2);
fprintf(fid_t, frmt_str, aa);
fclose(fid_t);

tar_tag='sim_box';
h_tar=findobj(gcf,'tag',tar_tag);
old_val=get(h_tar,'value');
old_str=get(h_tar,'string');
old_use=get(h_tar,'userdata');
len=length(old_str);

new_use=[old_use(1:old_val-1); {cur_ffln}; old_use(old_val:len)];
new_str=[old_str(1:old_val-1); {cur_file}; old_str(old_val:len)];
set(h_tar,'userdata',new_use,'string',new_str);

```

```

case 'add_noise'
    src_tag='sim_box';
    h_src=findobj(gcf,'tag',src_tag);
    cur_use=get(h_src,'userdata');
    if length(cur_use)>1
        cur_val=get(h_src,'value');
        src_fn=cur_use{cur_val};
    end;
    fid_src=fopen(src_fn,'r');
    header=fgetl(fid_src);
    eval(['ang_str=[' header(14:length(header)) '];']);
    ang=[];
    for j=1:length(ang_str)/2
        ang=[ang ang_str(2*j)];
    end;
    line_no=0;
    while ~feof(fid_src)
        line_no=line_no+1;
        zeile=fgetl(fid_src);
        vec_src(1:2*length(ang)+1,line_no)=sscanf(zeile,'%f');
    end;
    fclose(fid_src);
    vec_tar(1,:)=vec_src(1,:);
    dev=1;
    prn_str=['%f'];
    for j=2:length(ang_str)+1
        time=clock;
        randn('state',mod(time(6),1)*1000);
        noise=randn(1,line_no)*dev;
        vec_tar(j,:)=vec_src(j,:)+noise;
        prn_str=[prn_str '%f'];
    end;
    prn_str=[prn_str '\n'];
    tar_fn='C:\MATLAB6p5\work\optics\dat_box\vec_tar.dat';
    fid_tar=fopen(tar_fn,'w');
    header=[header '\n'];
    fprintf(fid_tar,header);
    fprintf(fid_tar,prn_str,vec_tar);
    fclose(fid_tar);
end;

```



```

new_ang=str2num(get(hang,'string'));
if isnumeric(new_ang) & (new_ang>=0) & (new_ang<=90)
    ang=new_ang;
end;
case 'd',
    new_d=str2num(get(hd,'string'));
    if isnumeric(new_d) & (new_d>=0)
        d=new_d;
    end;
case 'n',
    new_n=str2num(get(hn,'string'));
    if isnumeric(new_n) & (new_n>0)
        n=new_n;
    end;
case 'k',
    new_k=str2num(get(hk,'string'));
    if isnumeric(new_k) & (new_k>=0)
        k=new_k;
    end;
case 'coh'
    coh=get(hcoh,'value');
    switch coh
    case 1
        nbr=inf;
    case 0
        nbr=0;
    end;
case 'nbr'
    new_nbr=str2num(get(hnbr,'string'));
    new_coh=str2num(get(hcoh,'string'));
    if coh==0 & isnumeric(new_nbr) & (new_nbr)>=0 & (new_nbr<=5) &
(ceil(new_nbr)==floor(new_nbr))
        nbr=new_nbr;
    end;
case {'wlfr', 'wlin', 'wlto'}
    wlfr=get(hwlfr,'value');
    wlin=get(hwlin,'value');
    wlto=get(hwlto,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str)/5)*5;
        eval(['action '=new_val;']);
    end;
if wlfr<300 | wlto<300 | wlin<0 | wlfr>2500 | wlto>2500 | wlin>1000 | wlfr>wlto
    eval(['action '=old_val;']);
else
    if wlto==wlfr | wlin==0
        times=1;
    else

```

```

        times=ceil((wlto-wlfr)/wlin);
    end;
    switch action
    case 'wlfr'
        wlto=wlfr+times*wlin;
    case 'wlin'
        wlto=wlfr+times*wlin;
    case 'wlto'
        wlto=wlfr+times*wlin;
    end;
end;
case {'ang_fr', 'ang_in', 'ang_to'}
    ang_fr=get(hang_fr,'value');
    ang_in=get(hang_in,'value');
    ang_to=get(hang_to,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str)/5)*5;
        eval([action '=new_val;']);
    end;
    if ang_fr<0 | ang_to<0 | ang_in<0 | ang_fr>90 | ang_to>90 | ang_in>90 |
ang_fr>ang_to
        eval([action '=old_val;']);
    else
        if ang_to==ang_fr | ang_in==0
            times=1;
        else
            times=ceil((ang_to-ang_fr)/ang_in);
        end;
        switch action
        case 'ang_fr'
            ang_to=ang_fr+times*ang_in;
        case 'ang_in'
            ang_to=ang_fr+times*ang_in;
        case 'ang_to'
            ang_to=ang_fr+times*ang_in;
        end;
    end;
case {'d_fr', 'd_in', 'd_to'}
    d_fr=get(hd_fr,'value');
    d_in=get(hd_in,'value');
    d_to=get(hd_to,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(2*str2num(new_str))/2;
        eval([action '=new_val;']);
    end;
    if d_fr<=0 | d_to<=0 | d_in<0 | d_fr>d_to

```

```

    eval([action '=old_val;']);
else
    if d_to==d_fr | d_in==0
        times=1;
    else
        times=ceil((d_to-d_fr)/d_in);
    end;
    switch action
        case 'd_fr'
            d_to=d_fr+times*d_in;
        case 'd_in'
            d_to=d_fr+times*d_in;
        case 'd_to'
            d_to=d_fr+times*d_in;
    end;
end;
case {'n_fr', 'n_in', 'n_to'}
    n_fr=get(hn_fr,'value');
    n_in=get(hn_in,'value');
    n_to=get(hn_to,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(10000*str2num(new_str))/10000;
        eval([action '=new_val;']);
    end;
    if n_fr<=0 | n_to<=0 | n_in<0 | n_fr>n_to
        eval([action '=old_val;']);
    else
        if n_to==n_fr | n_in==0
            times=1;
        else
            times=ceil((n_to-n_fr)/n_in);
        end;
        switch action
            case 'n_fr'
                n_to=n_fr+times*n_in;
            case 'n_in'
                n_to=n_fr+times*n_in;
            case 'n_to'
                n_to=n_fr+times*n_in;
        end;
    end;
case {'k_fr', 'k_in', 'k_to'}
    k_fr=get(hk_fr,'value');
    k_in=get(hk_in,'value');
    k_to=get(hk_to,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))

```

```

    new_val=round(10000*str2num(new_str))/10000;
    eval([action '=new_val;']);
end;
if k_fr<0 | k_to<0 | k_in<0 | k_fr>k_to
    eval([action '=old_val;']);
else
    if k_to==k_fr | k_in==0
        times=1;
    else
        times=ceil((k_to-k_fr)/k_in);
    end;
    switch action
    case 'k_fr'
        k_to=k_fr+times*k_in;
    case 'k_in'
        k_to=k_fr+times*k_in;
    case 'k_to'
        k_to=k_fr+times*k_in;
    end;
end;
end;
end;
set_par(coh,nbr,wlfr,wlin,wlto,ang,ang_fr,ang_in,ang_to,d,d_fr,d_in,d_to,n,n_fr,n_in,
n_to,k,k_fr,k_in,k_to);

```

```

function edit_fcn(action)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                                                                    %
%  function edit_fcn                                                                    %
%                                                                    %
%  Set window options.                                                                    %
%                                                                    %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% ***** Initialize *****
%
mm = str2mat('hpsi_l = findobj(gcf,"tag","psi_l");', ...
    'hpsi_r = findobj(gcf,"tag","psi_r");', ...
    'hpsi_b = findobj(gcf,"tag","psi_b");', ...
    'hpsi_t = findobj(gcf,"tag","psi_t");', ...
    'hdel_l = findobj(gcf,"tag","del_l");', ...
    'hdel_r = findobj(gcf,"tag","del_r");', ...
    'hdel_b = findobj(gcf,"tag","del_b");', ...
    'hdel_t = findobj(gcf,"tag","del_t");', ...
    'hn_l = findobj(gcf,"tag","n_l");', ...
    'hn_r = findobj(gcf,"tag","n_r");', ...
    'hn_b = findobj(gcf,"tag","n_b");', ...
    'hn_t = findobj(gcf,"tag","n_t");', ...
    'hk_l = findobj(gcf,"tag","k_l");', ...
    'hk_r = findobj(gcf,"tag","k_r");', ...
    'hk_b = findobj(gcf,"tag","k_b");', ...
    'hk_t = findobj(gcf,"tag","k_t");', ...
    'hlsq_l = findobj(gcf,"tag","lsq_l");', ...
    'hlsq_r = findobj(gcf,"tag","lsq_r");', ...
    'hlsq_b = findobj(gcf,"tag","lsq_b");', ...
    'hlsq_t = findobj(gcf,"tag","lsq_t");', ...
    'hlsq_win = findobj(gcf,"tag","lsq_win");', ...
    'hn_win = findobj(gcf,"tag","n_win");', ...
    'hk_win = findobj(gcf,"tag","k_win");', ...
    'hpsi_win = findobj(gcf,"tag","psi_win");', ...
    'hdel_win = findobj(gcf,"tag","del_win");');

for n=1:25
    eval(mm(n,:));
end;

Par = get_wpar({'psi_l' 'psi_r' 'psi_b' 'psi_t' 'del_l' 'del_r' 'del_b' 'del_t' ...
    'n_l' 'n_r' 'n_b' 'n_t' 'k_l' 'k_r' 'k_b' 'k_t' 'lsq_l' 'lsq_r' 'lsq_b' 'lsq_t' });
eval(Par);
% ***** CreateFcn *****
switch action
    case {'psi_l', 'psi_r'}
        psi_l=get(hpsi_l,'value');
        psi_r=get(hpsi_r,'value');
        old_val=get(gcbo,'value');

```

```

new_str=get(gcbo,'string');
if ~isempty(str2num(new_str))
    new_val=round(str2num(new_str));
    eval(['action '=new_val;]);
end;
if psi_l<300 | psi_r<300 | psi_l>2500 | psi_r>2500 | psi_l>=psi_r
    eval(['action '=old_val;]);
end;
set(hpsi_win,'xlim',[psi_l psi_r]);

case {'del_l', 'del_r'}
del_l=get(hdel_l,'value');
del_r=get(hdel_r,'value');
old_val=get(gcbo,'value');
new_str=get(gcbo,'string');
if ~isempty(str2num(new_str))
    new_val=round(str2num(new_str));
    eval(['action '=new_val;]);
end;
if del_l<300 | del_r<300 | del_l>2500 | del_r>2500 | del_l>=del_r
    eval(['action '=old_val;]);
end;
set(hdel_win,'xlim',[del_l del_r]);

case {'n_l', 'n_r'}
n_l=get(hn_l,'value');
n_r=get(hn_r,'value');
old_val=get(gcbo,'value');
new_str=get(gcbo,'string');
if ~isempty(str2num(new_str))
    new_val=round(str2num(new_str));
    eval(['action '=new_val;]);
end;
if n_l<300 | n_r<300 | n_l>2500 | n_r>2500 | n_l>=n_r
    eval(['action '=old_val;]);
end;
set(hn_win,'xlim',[n_l n_r]);

case {'k_l', 'k_r'}
k_l=get(hpsi_l,'value');
k_r=get(hpsi_r,'value');
old_val=get(gcbo,'value');
new_str=get(gcbo,'string');
if ~isempty(str2num(new_str))
    new_val=round(str2num(new_str));
    eval(['action '=new_val;]);
end;
if k_l<300 | k_r<300 | k_l>2500 | k_r>2500 | k_l>=k_r
    eval(['action '=old_val;]);
end;

```

```

set(hk_win,'xlim',[k_l k_r]);

case {'lsq_l', 'lsq_r'}
    lsq_l=get(hlsq_l,'value');
    lsq_r=get(hlsq_r,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str));
        eval([action '=new_val;']);
    end;
    if lsq_l<300 | lsq_r<300 | lsq_l>2500 | lsq_r>2500 | lsq_l>=lsq_r
        eval([action '=old_val;']);
    end;
    set(hlsq_win,'xlim',[lsq_l lsq_r]);

case {'psi_b', 'psi_r'}
    psi_b=get(hpsi_b,'value');
    psi_t=get(hpsi_t,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str));
        eval([action '=new_val;']);
    end;
    if psi_b<0 | psi_t<0 | psi_b>90 | psi_t>90 | psi_b>=psi_t
        eval([action '=old_val;']);
    end;
    set(hpsi_win,'ylim',[psi_b psi_t]);

case {'del_b', 'del_t'}
    del_b=get(hdel_b,'value');
    del_t=get(hdel_t,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str));
        eval([action '=new_val;']);
    end;
    if del_b<-180 | del_t<-180 | del_b>360 | del_t>360 | del_b>=del_t
        eval([action '=old_val;']);
    end;
    set(hdel_win,'ylim',[del_b del_t]);

case {'n_b', 'n_t'}
    n_b=get(hn_b,'value');
    n_t=get(hn_t,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))

```

```

        new_val=round(str2num(new_str));
        eval(['action '=new_val;']);
    end;
    if n_b<0 | n_t<0 | n_b>20 | n_t>20 | n_b>=n_t
        eval(['action '=old_val;']);
    end;
    set(hn_win,'ylim',[n_b n_t]);

case {'k_b', 'k_t'}
    k_b=get(hpsi_b,'value');
    k_t=get(hpsi_t,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str));
        eval(['action '=new_val;']);
    end;
    if k_b<0 | k_t<0 | k_b>10 | k_t>10 | k_b>=k_t
        eval(['action '=old_val;']);
    end;
    set(hk_win,'ylim',[k_b k_t]);

case {'lsq_b', 'lsq_t'}
    lsq_b=get(hlsq_b,'value');
    lsq_t=get(hlsq_t,'value');
    old_val=get(gcbo,'value');
    new_str=get(gcbo,'string');
    if ~isempty(str2num(new_str))
        new_val=round(str2num(new_str));
        eval(['action '=new_val;']);
    end;
    if lsq_b>=lsq_t
        eval(['action '=old_val;']);
    end;
    set(hlsq_win,'ylim',[lsq_b lsq_t]);
end;

```

```

function fit_fcn(action,ext_coef,mode)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% function fit_fcn
%
% fit measurement
% 'svitasheva' with k=0 is based on one-angle measurement
% with the assumption that the film is non-absorbing
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
tic;
load optics.mat;
low_bnd=0.000000000001;
ms=6;
clear ita;
clear gam;
switch action
  case {'global', 'svitasheva'}
    Par = get_par({'coh' 'nbr' 'wlfr' 'wlin' 'wlto' 'ang' 'ang_fr' 'ang_in' 'ang_to' 'd' 'd_fr'
'd_in' 'd_to' 'n' 'n_fr' 'n_in' 'n_to' 'k' 'k_fr' 'k_in' 'k_to'});
    eval(Par);
    hmod=findobj(gcbf,'tag','mat_box');
    str_mod=get(hmod,'userdata');
    no_lay=length(str_mod)-1;
    % get min wavelength range
    % among measurement files
    hmea=findobj(gcbf,'tag','mea_box');
    wl=100:100:10000;
    str_mea=get(hmea,'userdata');
    if length(str_mea)>2
      disp('too many measurement files');
      return;
    end;
    if length(str_mea)==1
      disp('no measurement file, select one');
      return;
    end;
    for ii=1:1
      fid(ii)=fopen(str_mea{ii},'r');
      line=fgetl(fid(ii));
      while strcmp(line(1),';')==1
        line=fgetl(fid(ii));
      end;
      vec=sscanf(line,'%f');
      range(ii,1)=vec(1);
      while ~feof(fid(ii))
        line=fgetl(fid(ii));
      end;
      fclose(fid(ii));
      vec=sscanf(line,'%f');

```

```

    range(ii,2)=vec(1);
    wlfr=max(range(ii,1),wlfr);
    wlto=min(range(ii,2),wlto);
end;
if wlin==0
    uebrig=0;
else
    uebrig=rem(wlto-wlfr,wlin);
end;
%wlto=wlto-rem(wlto-wlfr,wlin);
wlto=wlto-uebrig;
if wlin==0
    wl=wlfr;
else
    wl=wlfr:wlin:wlto;
end;
% change of scale
lambda=wl.*10^-9;

%%%%%% test if all model files exist %%%%%%
all_exist=1;
for ii=1:no_lay
    pos=findstr(str_mod{ii},'\');
    str=str_mod{ii}(pos(length(pos))+1:length(str_mod{ii}));
    if exist(str_mod{ii})~=2
        all_exist=0;
        disp([str_mod{ii} 'does not exist']);
    elseif strcmp(str,'unknown.dat')==1
        unknown_lay=ii;
    end;
end;
if all_exist==0
    disp('not all layer files exist');
    return;
end;

rng_ok=1;
%%%%%% get wavelength range of model files %%%%%%
for ii=1:no_lay
    fid(ii)=fopen(str_mod{ii},'r');
    header=fgetl(fid(ii));
    line=fgetl(fid(ii));
    vec=sscanf(line,'%f');
    range(ii,1)=vec(1);
    if ~feof(fid(ii))
        line=fgetl(fid(ii));
    end;
    vec=sscanf(line,'%f');
    range(ii,2)=vec(1);
    if range(ii,1)>wlfr & range(ii,2)<wlto

```

```

        rng_ok=0;
        disp(['File layer ' num2str(m) ' out of range']);
    end;
    fclose(fid(ii));
end;
if rng_ok==0
    disp('Not all layer files within the specified range');
    disp('Narrow the range please!');
    return;
end;

%%%%% interpolate measurement files %%%%
%m=1;
fid=fopen(str_mea{1},'r');
header=fgetl(fid);
while strcmp(header(1,':')==1 & isempty(findstr(header,'WAVELENGTH'))
    header=fgetl(fid);
end;
eval(['ang_str=[' header(14:length(header)) '];']);
ang=[];
for j=1:length(ang_str)/2
    ang=[ang ang_str(2*j)];
end;
line_no=0;
while ~feof(fid)
    line_no=line_no+1;
    line=fgetl(fid);
    vec(1:2*length(ang)+1,line_no)=sscanf(line,'%f');
end;
% ' means transpose
for ii=1:length(ang)

```

```

psi_mea(1:length(wl),ii)=interp1(vec(1,1:line_no),vec(2*ii,1:line_no),wl,'pchip');

```

```

del_mea(1:length(wl),ii)=interp1(vec(1,1:line_no),vec(2*ii+1,1:line_no),wl,'pchip');
    disp('psi');
    %disp(psi_mea(1:length(wl),ii));
    %disp(del_mea(1:length(wl),ii));
end;
fclose(fid);

```

```

%%%%% interpolate modell files %%%%
ii=1;
for ii=1:no_lay
    if ii~=unknown_lay
        fid(ii)=fopen(str_mod{ii},'r');
        header=fgetl(fid(ii));
        line_no=0;
        while ~feof(fid)
            line_no=line_no+1;

```

```

        line=fgetl(fid);
        vec(1:3,line_no)=sscanf(line,'%f');
    end;
    % ' means transpose
    n_inter=interp1(vec(1,1:line_no),vec(2,1:line_no),wl,'pchip');
    k_inter=interp1(vec(1,1:line_no),vec(3,1:line_no),wl,'pchip');
    n(1:length(wl),ii)=n_inter-i*k_inter;
    fclose(fid);
end;
ii=ii+1;
end;

qq=ang/180*pi;
%disp('ang');
%disp(ang);
%d=(d_fr:d_in:d_to)*10^-9;
if d_in==0
    d_rng=d_fr;
else
    d_rng=d_fr:d_in:d_to;
end;
if n_in==0
    n_rng=n_fr;
else
    n_rng=n_fr:n_in:n_to;
end;
if k_in==0
    k_rng=k_fr;
else
    k_rng=k_fr:k_in:k_to;
end;
i_l=unknown_layer;

% fit
% prepare file to contain fit results
switch action
case 'global'
    for i_d=1:length(d_rng)
        cur_dir=[pwd '\fit_res\'];
        rest=num2str(d_rng(i_d)-floor(d_rng(i_d)));
        cur_file=['d' num2str(floor(d_rng(i_d))) '_' rest(3:length(rest)) '.dat'];
        cur_ffln=[cur_dir cur_file];
        fid=fopen(cur_ffln,'w');
        x=1;
        while x<=length(wl)
            fit_res(:,x)=[1 1 1; 0 0 0; inf inf inf];
            for i_n=1:length(n_rng)
                for i_k=1:length(k_rng)
                    % Prepare unknown layer
                    n(x,i_l)=n_rng(i_n)-i*k_rng(i_k);
                end
            end
            x=x+1;
        end
    end
end

```

```

dicke=d_rng(i_d)*10^-9;
% x ^= wavelength
sum=0;
for ii=1:length(qq)
    % 1,2,3 ^= layer no.
    q_run=qq(ii);
    q(x,1)=q_run;
    q(x,2)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,2));
    q(x,3)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,3));
    bb(x)=2*pi*dicke/lambda(x)*sqrt(n(x,2)^2-
(n(x,1)^2)*sin(q(x,1))^2);
    e(x)=exp(-2*i*bb(x));
    r12p(x)=(n(x,2)*cos(q(x,1))-
n(x,1)*cos(q(x,2)))/(n(x,2)*cos(q(x,1))+n(x,1)*cos(q(x,2)));
    r23p(x)=(n(x,3)*cos(q(x,2))-
n(x,2)*cos(q(x,3)))/(n(x,3)*cos(q(x,2))+n(x,2)*cos(q(x,3)));
    r12s(x)=(n(x,1)*cos(q(x,1))-
n(x,2)*cos(q(x,2)))/(n(x,1)*cos(q(x,1))+n(x,2)*cos(q(x,2)));
    r23s(x)=(n(x,2)*cos(q(x,2))-
n(x,3)*cos(q(x,3)))/(n(x,2)*cos(q(x,2))+n(x,3)*cos(q(x,3)));
    rp(x)=(r12p(x)+r23p(x)*e(x))/(1+r12p(x)*r23p(x)*e(x));
    rs(x)=(r12s(x)+r23s(x)*e(x))/(1+r12s(x)*r23s(x)*e(x));
    psi(x)=atan(abs(rp(x)/rs(x)))*180/pi;
    delta=angle(rp(x)/rs(x))*180/pi;
    if delta<0
        delta=delta+360;
    end;
    del(x)=delta;
    psi_dif=abs(psi_mea(x,ii)-psi(x));
    del_dif=abs(del_mea(x,ii)-del(x));
    if psi_dif>180
        psi_dif=360-psi_dif;
    end;
    if del_dif>180
        del_dif=360-del_dif;
    end;
end; % qq
sum=sum+psi_dif^2+del_dif^2;
lsq_temp=sqrt(sum)/2/length(qq);
%before_sort=[fit_res(:,x)'; n_run k_run lsq_temp];
before_sort=[fit_res(:,x)'; n_rng(i_n) k_rng(i_k) lsq_temp];
after_sort=sortrows(before_sort,3);
fit_res(:,x)=after_sort(1:3,:);
end;%k
end;%n

prnt_res(1:10,x)=[wl(x);fit_res(1,1,x);fit_res(2,1,x);fit_res(3,1,x);fit_res(1,2,x);fit_res
(2,2,x);fit_res(3,2,x);fit_res(1,3,x);fit_res(2,3,x);fit_res(3,3,x)];
x=x+1;
end;%x

```

```

    fprintf(fid,'%f %f %f %f %f %f %f %f %f %f\n',prnt_res);
    clear prnt_res;
    fclose(fid);
    disp(['d=' num2str(d_rng(i_d))]);
    disp('time');
    disp(toc/60);
end;%d
case 'svitasheva'
    m_c=['wk';'wb';'wg';'wr';'wm'];
    marker='>^<vd';
    cur_dir=[pwd '\fit_res\'];
    cur_file=['temp_res.dat'];
    cur_ffln=[cur_dir cur_file];
    fid=fopen(cur_ffln,'w');
    if strcmp(ext_coef,'trans')==1
        k_rng=0;
        d_rng=d;
        d_fixed=d;
    end;
    for i_d=1:length(d_rng)
        x=1;
        while x<=length(wl)
            for i_a=1:length(qq)
                fit_res(:,x)=[1; inf; 0; 0; 0; 0; 0; 0];
                d_res(:,x)=[inf; inf; inf; inf];
                for i_k=1:length(k_rng)
                    for i_n=1:length(n_rng)
                        % Prepare unknown layer
                        n(x,i_1)=n_rng(i_n)-i*k_rng(i_k);
                        dicke=d_rng(i_d)*10^-9;
                        q_run=qq(i_a);
                        q(x,1)=q_run;
                        q(x,2)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,2));
                        q(x,3)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,3));
                        r12p(x)=(n(x,2)*cos(q(x,1))-
n(x,1)*cos(q(x,2)))/(n(x,2)*cos(q(x,1))+n(x,1)*cos(q(x,2)));
                        r23p(x)=(n(x,3)*cos(q(x,2))-
n(x,2)*cos(q(x,3)))/(n(x,3)*cos(q(x,2))+n(x,2)*cos(q(x,3)));
                        r12s(x)=(n(x,1)*cos(q(x,1))-
n(x,2)*cos(q(x,2)))/(n(x,1)*cos(q(x,1))+n(x,2)*cos(q(x,2)));
                        r23s(x)=(n(x,2)*cos(q(x,2))-
n(x,3)*cos(q(x,3)))/(n(x,2)*cos(q(x,2))+n(x,3)*cos(q(x,3)));

rho=abs(tan(psi_mea(x,i_a)/180*pi))*exp(i*del_mea(x,i_a)/180*pi);
                        AA=r12p(x);
                        BB=r23p(x)+r12p(x)*r12s(x)*r23s(x);
                        CC=r23p(x)*r12s(x)*r23s(x);
                        DD=r12s(x);
                        EE=r23s(x)+r12p(x)*r23p(x)*r12s(x);
                        FF=r12p(x)*r23p(x)*r23s(x);
                    end;
                end;
                x=x+1;
            end;
        end;
    end;
end;

```

```

if (rho*FF-CC)==0
    XX1=(AA-rho*DD)/(rho*EE-BB);
    XX2=XX1;
else
    XX1=(BB-rho*EE+sqrt((BB-rho*EE)^2-4*(CC-
rho*FF)*(AA-rho*DD)))/2/(rho*FF-CC);
    XX2=(BB-rho*EE-sqrt((BB-rho*EE)^2-4*(CC-
rho*FF)*(AA-rho*DD)))/2/(rho*FF-CC);
end;
ita_gam(x,i_n,i_a)=n(x,2)*cos(q(x,2));
switch ext_coef
case 'opaq'
    d_1(x,i_n,i_a)=i*10^100;
    d_2(x,i_n,i_a)=i*10^100;
    ii_pos1(x,i_n,i_a)=-100;
    ii_pos2(x,i_n,i_a)=-100;
    % to find out the ambiguous parameter
    mm=5;
    for ii=1:m

sel_fcn1=(i*log(XX1)+2*pi*ii)*(lambda(x))*10^9/4/pi/ita_gam(x,i_n,i_a);

sel_fcn2=(i*log(XX2)+2*pi*ii)*(lambda(x))*10^9/4/pi/ita_gam(x,i_n,i_a);
    if abs(imag(sel_fcn1))<abs(imag(d_1(x,i_n,i_a)))
        d_1(x,i_n,i_a)=sel_fcn1;
        ii_pos1(x,i_n,i_a)=ii;
    end;
    if abs(imag(sel_fcn2))<abs(imag(d_2(x,i_n,i_a)))
        d_2(x,i_n,i_a)=sel_fcn2;
        ii_pos2(x,i_n,i_a)=ii;
    end;
end; % for
if abs(imag(d_1(x,i_n,i_a)))<abs(imag(d_2(x,i_n,i_a)))
    d(x,i_n,i_a)=d_1(x,i_n,i_a);
    ii_pos(x,i_n,i_a)=ii_pos1(x,i_n,i_a);
else
    d(x,i_n,i_a)=d_2(x,i_n,i_a);
    ii_pos(x,i_n,i_a)=ii_pos2(x,i_n,i_a);
end;
if abs(imag(d(x,i_n,i_a)))<low_bnd
    c(x,i_n,i_a)='w';
else
    c(x,i_n,i_a)='k';
end;
case 'trans'
    switch mode
        case '1'

sel_fcn1=abs(log(abs(XX1)))*(lambda(x))*10^9/4/pi/real(ita_gam(x,i_n,i_a)));

```

```

sel_fcn2=abs(log(abs(XX2))*(lambda(x))*10^9/4/pi/real(ita_gam(x,i_n,i_a)));
    if sel_fcn1<sel_fcn2
        sel_fcn(x,i_n,i_a)=sel_fcn1;
        XX=XX1;
        c(x,i_n,i_a)=1;
    else
        sel_fcn(x,i_n,i_a)=sel_fcn2;
        XX=XX2;
        c(x,i_n,i_a)=-1;
    end;
mm1=0;
mm2=2;
mm=mm1:mm2;
for ii=mm
    d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1)=(-
angle(XX)+2*ii*pi)*((lambda(x))*10^9/4/pi/real(ita_gam(x,i_n,i_a)));
end;
if sel_fcn(x,i_n,i_a)<fit_res(2,x)
    fit_res(1,x)=n_rng(i_n);
    fit_res(2,x)=sel_fcn(x,i_n,i_a);
    fit_res(3,x)=c(x,i_n,i_a);
    for ii=mm
        fit_res(ii-mm(1)+4,x)=d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1);
    end;
end;
case '2'

```

```

sel_fcn1=abs(log(abs(XX1))*(lambda(x))*10^9/4/pi/real(ita_gam(x,i_n,i_a)));

```

```

sel_fcn2=abs(log(abs(XX2))*(lambda(x))*10^9/4/pi/real(ita_gam(x,i_n,i_a)));
    if sel_fcn1<sel_fcn2
        sel_fcn(x,i_n,i_a)=sel_fcn1;
        XX=XX1;
        c(x,i_n,i_a)=1;
    else
        sel_fcn(x,i_n,i_a)=sel_fcn2;
        XX=XX2;
        c(x,i_n,i_a)=-1;
    end;
if sel_fcn(x,i_n,i_a)<fit_res(2,x)
    fit_res(2,x)=sel_fcn(x,i_n,i_a);
    fit_res(3,x)=c(x,i_n,i_a);
end;
mm1=0;
mm2=2;
mm=mm1:mm2;
for ii=mm
    d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1)=(-
angle(XX)+2*ii*pi)*((lambda(x))*10^9/4/pi/real(ita_gam(x,i_n,i_a)));

```

```

        if abs(d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1)-
d_fixed)<abs(d_res(ii-mm(1)+1,x)-d_fixed)
            fit_res(ii-mm(1)+4,x)=n_rng(i_n);
            d_res(ii-mm(1)+1,x)=d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1);
            end;
        if abs(d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1)-
d_fixed)<abs(fit_res(1,x)-d_fixed)
            fit_res(1,x)=d(x,i_n,i_a,ii-mm(1)+1);
            end;
        end;
    end; % switch mode
end; %ext_coef
monitoring=0;
if monitoring==1
    figure;
    axes1=axes;
    subplot(2,1,1);
    title(['angle=' num2str(ang(i_a)) ' degrees; wavelength='
num2str(wl(x)) ' nm']);
    grid on;
    hold on;
    if strcmp(ext_coef,'trans')==1
        for i_n=1:length(n_rng)
            yy=(c(x,i_n,i_a)-(-1))/2+1;
            for ii=mm
                mec=m_c(ii-mm(1)+1,2);
                mfc=m_c(ii-mm(1)+1,yy);
                plot(n_rng(i_n),d(x,i_n,i_a,ii-
mm(1)+1),'marker',marker(ii-
mm(1)+1),'markersize',ms,'markeredgecolor',mec,'markerfacecolor',mfc);
            end;
        end;
    end;
    xlabel('n');
    ylabel('d');
    subplot(2,1,2);
    grid on;
    hold on;
    if strcmp(ext_coef,'trans')==1
        for i_n=1:length(n_rng)
            yy=(c(x,i_n,i_a)-(-1))/2+1;
            mec=m_c(1,2);
            mfc=m_c(1,yy);

plot(n_rng(i_n),sel_fcn(x,i_n,i_a),'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',mec,'
markerfacecolor',mfc);
        end;
    end;
    xlabel('n');
    ylabel('Im(d)');

```

```

        end; % monitoring
    end; %i_n
end; %k
str='wl(x);fit_res(1,x);fit_res(2,x);fit_res(3,x)';
for ii=mm
    str=[str ';fit_res(' num2str(ii-mm(1)+4) ',x)'];
end;
str=['[' str ']'];
p_res(1:2,x)=[wl(x);n_fixedd(x)];
x=x+1;
end; %i_a
end; %x
end; %d
pstr='%f %f %f %f';
for ii=mm
    pstr=[pstr ' %f'];
end;
pstr=[pstr '\n'];
fprintf(fid,'%f %f\n',p_res);
clear prnt_res;
figure;
subplot(2,1,1);
hold on;
title('thickness');
grid on;
for x=1:length(wl)
    yy=(fit_res(3,x)-(-1))/2+1;
    mec=m_c(1,2);
    mfc=m_c(1,yy);
plot(wl(x),fit_res(1,x),'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',mec,'markerfacecolor',mfc);
end;
xlabel('Wavelength (nm)');
ylabel('n');
subplot(2,1,2);
hold on;
grid on;
for ii=mm
    for x=1:length(wl)
        yy=(fit_res(3,x)-(-1))/2+1;
        mec=m_c(ii-mm(1)+1,2);
        mfc=m_c(ii-mm(1)+1,yy);
        plot(wl(x),fit_res(ii-mm(1)+4,x),'marker',marker(ii-mm(1)+1),'markersize',ms,'markeredgecolor',mec,'markerfacecolor',mfc);
    end;
end;
xlabel('Wavelength (nm)');
ylabel('Thickness (nm)');
fclose(fid);

```

```
    disp('time');  
    disp(toc/60);  
end; %switch action  
end;% switch action
```

```

function par=get_par(CELL)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
%   function par=get_par
%
%   Get location parameters of displayed section,
%   marked segment and signal length
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
par=[];
for n=1:length(CELL),
    eval('h = findobj(gcf,"Tag",CELL {n});');
    par=[par CELL {n} ' ' eval('get(h,"Userdata")') ''];
end;

```

```

function par=get_wpar(CELL)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% function par=get_wpar
%
% Get location parameters of displayed section,
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
par=[];
for n=1:length(CELL),
    eval('h = findobj(gcf,"Tag",CELL{n});');
    par=[par CELL{n} ' ' eval('get(h,"Userdata")') ''];
end;

```

```

function inv_fcn(action,ext_coef,mode)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% function inv_fcn
%
% investigate inverse measurement
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
tic;
load optics.mat;
switch action
case 'svitasheva'
    low_bnd=0.00000000001;
    ms=4;
    colormap=[0 0 0; 0.5 0.5 0.5; 1 1 1];
    clear ita;
    clear gam;
    clear cal_res1;
    clear cal_res2;
    Par=get_par({'coh' 'nbr' 'wlfr' 'wlin' 'wlto' 'ang' 'ang_fr' 'ang_in' 'ang_to' 'd' 'd_fr'
'd_in' 'd_to' 'n' 'n_fr' 'n_in' 'n_to' 'k' 'k_fr' 'k_in' 'k_to'});
    eval(Par);
    hmod=findobj(gcf,'tag','mat_box');
    str_mod=get(hmod,'userdata');
    no_lay=length(str_mod)-1;
    % get min wavelength range
    % among measurement files
    wl=wlfr:wlin:wlto;
    if wlin==0
        wl=wlfr;
    end;
    % change of scale
    lambda=wl.*10^-9;
    % test if all model files exist
    all_exist=1;
    for ii=1:no_lay
        pos=findstr(str_mod{ii},'\');
        str=str_mod{ii}(pos(length(pos))+1:length(str_mod{ii}));
        if exist(str_mod{ii})~=2
            all_exist=0;
            disp([str_mod{ii} 'does not exist']);
        elseif strcmp(str,'unknown.dat')==1
            unknown_lay=ii;
        end;
    end;
    if all_exist==0
        disp('not all layer files exist');
        return;
    end;
end;

```

```

rng_ok=1;
%%%%%% get wavelength range of model files%%%%%
for ii=1:no_lay
    fid(ii)=fopen(str_mod{ii},'r');
    header=fgetl(fid(ii));
    line=fgetl(fid(ii));
    vec=sscanf(line,'%f');
    range(ii,1)=vec(1);
    if ~feof(fid(ii))
        line=fgetl(fid(ii));
    end;
    vec=sscanf(line,'%f');
    range(ii,2)=vec(1);
    if range(ii,1)>wlfr & range(ii,2)<wlto
        rng_ok=0;
        disp(['File layer ' num2str(ii) ' out of range']);
    end;
    fclose(fid(ii));
end;
if rng_ok==0
    disp('Not all layer files within the specified range');
    disp('Narrow the range please!');
    return;
end;

%%%%%% interpolate modell files %%%
ii=1;
for ii=1:no_lay
    if ii~=unknown_lay
        fid=fopen(str_mod{ii},'r');
        header=fgetl(fid);
        line_no=0;
        while ~feof(fid)
            line_no=line_no+1;
            line=fgetl(fid);
            vec(1:3,line_no)=sscanf(line,'%f');
        end;
        % ' means transpose
        n_inter=interp1(vec(1,1:line_no),vec(2,1:line_no),wl,'pchip');
        k_inter=interp1(vec(1,1:line_no),vec(3,1:line_no),wl,'pchip');
        n(1:length(wl),ii)=n_inter-i*k_inter;
        fclose(fid);
    end;
    ii=ii+1;
end;

if ang_in==0
    ang_rng=ang_fr;
else
    ang_rng=ang_fr:ang_in:ang_to;

```

```

end;
qq=ang_rng/180*pi;
if d_in==0
    d_rng=d_fr;
else
    d_rng=d_fr:d_in:d_to;
end;
if n_in==0
    n_rng=n_fr;
else
    n_rng=n_fr:n_in:n_to;
end;
if k_in==0
    k_rng=k_fr;
else
    k_rng=k_fr:k_in:k_to;
end;

i_l=unknown_layer;
mm=10;
min_ii=2*mm;
max_ii=-2*mm;
x=1;
while x<=length(wl)
    for i_a=1:length(qq)
        max_det(i_a)=0;
        min_det(i_a)=100;
        for i_d=1:length(d_rng)
            for i_k=1:length(k_rng)
                for i_n=1:length(n_rng)
                    % Prepare unknown layer
                    n(x,i_l)=n_rng(i_n)-i*k_rng(i_k);
                    dicke=d_rng(i_d)*10^-9;
                    % x ^= wavelength
                    q_run=qq(i_a);
                    q(x,1)=q_run;
                    q(x,2)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,2));
                    q(x,3)=asin(n(x,1)*sin(q(x,1))/n(x,3));
                    bb(x)=2*pi*dicke/lambda(x)*sqrt(n(x,2)^2-
(n(x,1)^2)*sin(q(x,1))^2);
                    e(x)=exp(-2*i*bb(x));
                    r12p(x)=(n(x,2)*cos(q(x,1))-
n(x,1)*cos(q(x,2)))/(n(x,2)*cos(q(x,1))+n(x,1)*cos(q(x,2)));
                    r23p(x)=(n(x,3)*cos(q(x,2))-
n(x,2)*cos(q(x,3)))/(n(x,3)*cos(q(x,2))+n(x,2)*cos(q(x,3)));
                    r12s(x)=(n(x,1)*cos(q(x,1))-
n(x,2)*cos(q(x,2)))/(n(x,1)*cos(q(x,1))+n(x,2)*cos(q(x,2)));
                    r23s(x)=(n(x,2)*cos(q(x,2))-
n(x,3)*cos(q(x,3)))/(n(x,2)*cos(q(x,2))+n(x,3)*cos(q(x,3)));
                    rp(x)=(r12p(x)+r23p(x)*e(x))/(1+r12p(x)*r23p(x)*e(x));

```

```

rs(x)=(r12s(x)+r23s(x)*e(x))/(1+r12s(x)*r23s(x)*e(x));
rho=rp(x)/rs(x);
psi(x)=atan(abs(rp(x)/rs(x)))*180/pi;
delta(x)=angle(rp(x)/rs(x))*180/pi;
AA=r12p(x);
BB=r23p(x)+r12p(x)*r12s(x)*r23s(x);
CC=r23p(x)*r12s(x)*r23s(x);
DD=r12s(x);
EE=r23s(x)+r12p(x)*r23p(x)*r12s(x);
FF=r12p(x)*r23p(x)*r23s(x);
dtrmnnt=(BB-rho*EE)^2-4*(CC-rho*FF)*(AA-rho*DD);
abs_det(i_n,i_k,i_d,i_a)=abs(dtrmnnt);
if abs(dtrmnnt)<min_det(i_a)
    min_det(i_a)=abs(dtrmnnt);
end;
if abs(dtrmnnt)>max_det(i_a)
    max_det(i_a)=abs(dtrmnnt);
end;
if (rho*FF-CC)==0
    XX1=(AA-rho*DD)/(rho*EE-BB);
    XX2=XX1;
else
    XX1=(BB-rho*EE+sqrt(dtrmnnt))/2/(rho*FF-CC);
    XX2=(BB-rho*EE-sqrt(dtrmnnt))/2/(rho*FF-CC);
end;
lnabs_XX1(i_n,i_k,i_d,i_a)=log(abs(XX1));
lnabs_XX2(i_n,i_k,i_d,i_a)=log(abs(XX2));
ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a)=n(x,2)*cos(q(x,2));

d_period(i_n,i_k,i_d,i_a)=real(ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a))*(lambda(x))*10^9/2/(abs(ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a)))^2;
d_1(i_n,i_k,i_d,i_a)=i*10^20;
d_2(i_n,i_k,i_d,i_a)=i*10^20;
ii_pos1(i_n,i_k,i_d,i_a)=-100;
ii_pos2(i_n,i_k,i_d,i_a)=-100;

switch ext_coef
case 'tran'
for ii=-mm:mm

sel_fcn1=(i*log(XX1)+2*pi*ii)*(lambda(x))*10^9/4/pi/ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a);

sel_fcn2=(i*log(XX2)+2*pi*ii)*(lambda(x))*10^9/4/pi/ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a);
if real(sel_fcn1)<d_rng(i_d)+d_period(i_n,i_k,i_d,i_a)/2 &
real(sel_fcn1)>d_rng(i_d)-d_period(i_n,i_k,i_d,i_a)/2
    d_1(i_n,i_k,i_d,i_a)=sel_fcn1;
    ii_pos1(i_n,i_k,i_d,i_a)=ii;
    min_ii=min(min_ii,ii);
    max_ii=max(max_ii,ii);
end;

```

```

        if real(sel_fcn2)<d_rmg(i_d)+d_period(i_n,i_k,i_d,i_a)/2 &
real(sel_fcn2)>d_rmg(i_d)-d_period(i_n,i_k,i_d,i_a)/2
            d_2(i_n,i_k,i_d,i_a)=sel_fcn2;
            ii_pos2(i_n,i_k,i_d,i_a)=ii;
            min_ii=min(min_ii,ii);
            max_ii=max(max_ii,ii);
        end;
    end; % for
    if imag(d_1(i_n,i_k,i_d,i_a))<low_bnd
        c_1(i_n,i_k,i_d,i_a)='w';
        root_pos(i_n,i_k,i_d,i_a)=1;
    else
        c_1(i_n,i_k,i_d,i_a)='r';
    end;
    if imag(d_2(i_n,i_k,i_d,i_a))<low_bnd
        c_2(i_n,i_k,i_d,i_a)='k';
        root_pos(i_n,i_k,i_d,i_a)=2;
    else
        c_2(i_n,i_k,i_d,i_a)='r';
    end;
    case 'opaq'
        for ii=-mm:mm

sel_fcn1=(i*log(XX1)+2*pi*ii)*(lambda(x))*10^9/4/pi/ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a);

sel_fcn2=(i*log(XX2)+2*pi*ii)*(lambda(x))*10^9/4/pi/ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a);
        if abs(imag(sel_fcn1))<abs(imag(d_1(i_n,i_k,i_d,i_a)))
            d_1(i_n,i_k,i_d,i_a)=sel_fcn1;
            ii_pos1(i_n,i_k,i_d,i_a)=ii;
        end;
        if abs(imag(sel_fcn2))<abs(imag(d_2(i_n,i_k,i_d,i_a)))
            d_2(i_n,i_k,i_d,i_a)=sel_fcn2;
            ii_pos2(i_n,i_k,i_d,i_a)=ii;
        end;
    end; % for
    if imag(d_1(i_n,i_k,i_d,i_a))<low_bnd
        c_1(i_n,i_k,i_d,i_a)='k';
    else
        c_1(i_n,i_k,i_d,i_a)='w';
    end;
    if imag(d_2(i_n,i_k,i_d,i_a))<low_bnd
        c_2(i_n,i_k,i_d,i_a)='k';
    else
        c_2(i_n,i_k,i_d,i_a)='w';
    end;
    end; %switch ext_coef
    end; %n
    end; %k
    end; %d
    end; %qq

```

```

    x=x+1;
end; %x

switch ext_coef %k=0
case 'tran'
    switch mode
    case 'd_ind',
        fig=figure;
        % i_d not necessary because it's d independent
        for i_a=1:length(qq)
            for i_n=1:length(n_rng)
                if n_rng(i_n)~=1
                    i_k=1;
                    color1='k';
                    c1=c_1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    c2=c_2(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    subplot(3,1,1);
                    hold on;

                    plot(n_rng(i_n),real(ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a)),'marker','s','markersize',ms,'markeredge
                    color','k','markerfacecolor','k','color','k');
                    ylabel('\_ita');
                    subplot(3,1,2);
                    hold on;

                    plot(n_rng(i_n),imag(ita_gam(i_n,i_k,i_d,i_a)),'marker','s','markersize',ms,'markeredge
                    color','k','markerfacecolor','k','color','k');
                    ylabel('\_gamma');
                    subplot(3,1,3);
                    hold on;

                    plot(n_rng(i_n),d_period(i_n,i_k,i_d,i_a),'marker','s','markersize',ms,'markeredgecolor
                    ','k','markerfacecolor','k','color','k');
                    ylabel('d period');
                    end;
                end; % if n_rng(i_n)~=1
            end; % i_n
        case {'X+X-3','X+X-2'}
            ms=5;
            ld=length(d_rng);
            k=1; % first value of k, which is zero
            for i_root=1:2
                fig=figure;
                for i_a=1:length(qq)
                    subplot(2,2,i_a);
                    hold on;
                    title(['Angle ' num2str(ang_rng(i_a)) '\circ; Wavelength '
                    num2str(wl(x-1)) 'nm']);
                    for i_d=1:ld
                        for i_n=1:length(n_rng)

```

```

if n_rng(i_n)~=1
    switch i_root
        case 1
            y(i_n,i_d)=lnabs_XX1(i_n,i_k,i_d,i_a);
        case 2
            y(i_n,i_d)=lnabs_XX2(i_n,i_k,i_d,i_a);
        end;
    if y(i_n,i_d)>0.5
        filling='k';
    else
        filling='w';
    end;
    switch mode
        case 'X+X-3'
            cmap(i_n,i_d)=1;

plot3(n_rng(i_n),d_rng(i_d),y(i_n,i_d),'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor','
k','markerfacecolor','k');

        case 'X+X-2'

plot(n_rng(i_n),d_rng(i_d),'marker','s','markersize',ms,'markeredgecolor','k','markerfac
ecolor',filling);

            xlabel('n');
            ylabel('d (nm)');
        end;
    end; % if i_n~=1
end; % for i_n
end; % i_d
if mode=='X+X-3'
    [X_grid,Y_grid]=ndgrid(n_rng(1,:),d_rng(1,:));
    mesh(X_grid,Y_grid,y,cmap);
    set(gca,'view',[320 40]);
    xlabel('n');
    ylabel('thickness (nm)');
    if i_root==1
        subscript='+';
    end;
    if i_root==2
        subscript='-';
    end;
    zlabel(['\ln|X_' subscript '']);
    xlim=get(gca,'xlim');
    zlim=get(gca,'zlim');
    set(gca,'zlim',[0 5],'ztick',0:5);
    box on;
    grid on;
end; %if 'x+x-3'
end; % i_a
end; % i_root=1:2
case 'abs_det'

```

```

ms=2;
ld=length(d_rng);
k=1;
fig=figure;
for i_a=1:length(qq)
    subplot(2,2,i_a);
    hold on;
    title(['Angle ' num2str(ang_rng(i_a)) '\circ; Wavelength '
num2str(wl(x-1)) 'nm']);
    for i_d=1:ld
        for i_n=1:length(n_rng)
            if n_rng(i_n)~=1
                y(i_n,i_d)=log10(abs_det(i_n,i_k,i_d,i_a));
                if y(i_n,i_d)<-4
                    filling='k';
                else
                    filling='w';
                end;
                cmap(i_n,i_d)=1;

plot3(n_rng(i_n),d_rng(i_d),y(i_n,i_d),'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
k,'markerfacecolor',filling);
            end; % if i_n~=1
        end; % for i_n
    end; % i_d
[X_grid,Y_grid]=ndgrid(n_rng(1,:),d_rng(1,:));
mesh(X_grid,Y_grid,y);
set(gca,'view',[320 40]);
xlabel('n');
ylabel('thickness (nm)');
zlabel('log(|det|)');
set(gca,'zlim',[-4 0],'ztick',-4:2:0);
box on;
grid on;
disp('min_det');
disp(min_det(i_a));
disp('max_det');
disp(max_det(i_a));
end; % i_a
case '2'
for i_a=1
    for i_d=1:length(d_rng)
        fig=figure;
        for i_n=1:length(n_rng)
            if n_rng(i_n)~=1
                i_k=1;
                color1='k';
                c1=c_1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                c2=c_2(i_n,i_k,i_d,i_a);
                subplot(6,1,1);

```

```

        box on;
        title([num2str(d_rng(i_d)) ' nm']);
        hold on;

plot(n_rng(i_n),real(d_1(i_n,i_k,i_d,i_a)), 'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
'k','markerfacecolor',c1,'color',c1);
        ylabel('real(d1)');
        subplot(6,1,2);
        box on;
        hold on;

plot(n_rng(i_n),imag(d_1(i_n,i_k,i_d,i_a)), 'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
'k','markerfacecolor',c1,'color',c1);
        ylabel('imag (d1)');
        subplot(6,1,3);
        box on;
        hold on;

plot(n_rng(i_n),ii_pos1(i_n,i_k,i_d,i_a), 'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
'k','markerfacecolor',c1,'color',c1);
        ylabel('m');
        subplot(6,1,4);
        box on;
        hold on;

plot(n_rng(i_n),real(d_2(i_n,i_k,i_d,i_a)), 'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
'k','markerfacecolor',c2,'color',c2);
        ylabel('real(d2)');
        subplot(6,1,5);
        box on;
        hold on;

plot(n_rng(i_n),imag(d_2(i_n,i_k,i_d,i_a)), 'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
'k','markerfacecolor',c2,'color',c2);
        ylabel('imag(d2)');
        subplot(6,1,6);
        box on;
        hold on;

plot(n_rng(i_n),ii_pos2(i_n,i_k,i_d,i_a), 'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor',
'k','markerfacecolor',c2,'color',c2);
        ylabel('m');
        end; % 2nd i_k
        end; % 2nd i_n
        %end; % if length(d_rng)
        end; % 1st i_d
        % k=0
        end;
        case '3'
            dim=3;

```

```

if dim==2
    packing=1;
    ld=length(d_rng);
    if packing==1
        fig=figure;
    end;
    for i_a=1:length(qq)
        if packing==0
            fig=figure;
        end;
        for i_d=1:ld
            switch packing
                case 0
                    subplot(ld,1,i_d);
                case 1
                    subplot(ld,length(qq),(i_d-1)*length(qq)+i_a);
            end;
            box on;
            if i_d==1
                title(['Angle ' num2str(ang_rng(i_a)) '\circ; Wavelength '
num2str(wl(x-1)) 'nm']);
            end;
            hold on;
            for i_n=1:length(n_rng)
                if n_rng(i_n)~=1
                    i_k=1;
                    color1='k';
                    if root_pos(i_n,i_k,i_d,i_a)==1
                        y(i_n,i_d)=ii_pos1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                        mfc=c_1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    else
                        y(i_n,i_d)=ii_pos2(i_n,i_k,i_d,i_a);
                        mfc=c_2(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    end;
                end;
            end;
            plot(n_rng(i_n),y,'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor','k','markerfacecolor',m
fc);

                end; % if i_n
            end; % i_n
            if i_d==ld
                xlabel('n');
            else
                set(gca,'xticklabel','');
                if i_d==1
                    ylabel('m');
                end;
            end;
            set(gca,'ylim',[min_ii max_ii],'ytick',min_ii:1:max_ii);
            grid on;
            xlim=get(gca,'xlim');

```

```

        ylim=get(gca,'ylim');
        xpos=xlim(2)+(xlim(2)-xlim(1))*0.03;
        ypos=ylim(1)+(ylim(2)-ylim(1))*0;
        %text(xpos,ypos,['d=' num2str(d_rng(i_d)) ' nm'],'rotation',90);
    end; % i_d=1:ld
end; % qq
end; % if dim=2
if dim==3
    packing=1;
    ld=length(d_rng);
    if packing==1
        fig=figure;
    end;
    for i_a=1:length(qq)
        if packing==0
            fig=figure;
            gca;
        end;
        for i_d=1:ld
            if packing==1
                subplot(2,2,i_a);
                hold on;
            end;
            title(['Angle ' num2str(ang_rng(i_a)) '\circ; Wavelength '
num2str(wl(x-1)) ' nm']);
            for i_n=1:length(n_rng)
                if n_rng(i_n)~=1
                    %-
                    if root_pos(i_n,i_k,i_d,i_a)==1
                        y(i_n,i_d)=ii_pos1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    end;
                    if root_pos(i_n,i_k,i_d,i_a)==2
                        y(i_n,i_d)=ii_pos2(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    end;
                    cmap(i_n,i_d)=1;
                end; % if i_n
            end; % i_n
        end; % i_d
        [X_grid,Y_grid]=ndgrid(n_rng(1,:),d_rng(1,:));
        mesh(X_grid,Y_grid,y,cmap);
        for i_d=1:ld
            for i_n=1:length(n_rng)
                if n_rng(i_n)~=1
                    if root_pos(i_n,i_k,i_d,i_a)==1
                        mfc=c_1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    else
                        mfc=c_2(i_n,i_k,i_d,i_a);
                    end;
                end;
            end;
        end;
    end;
end;

```

```

plot3(n_rng(i_n),d_rng(i_d),y(i_n,i_d),'marker','o','markersize',ms,'markeredgecolor','
k','markerfacecolor',mfc);
        hold on;
        end; % if i_n
        end; % i_n
        end; % i_d
        box on;
        grid on;
        set(gca,'view',[320 40]);
        xlabel('n');
        ylabel('thickness (nm)');
        zlabel('m');
        set(gca,'zlim',[min_ii max_ii],'ztick',min_ii:1:max_ii);
        xlim=get(gca,'xlim');
        zlim=get(gca,'zlim');
        xpos=xlim(2)+(xlim(2)-xlim(1))*0.03;
        zpos=zlim(1)+(zlim(2)-zlim(1))*0;
        end; % i_d=1:ld
        end; % qq
    end; % switch mode
case 'opaq'
    % '1' stands for opaque
    for i_d=1:length(d_rng)
        fig1=figure;
        axes1=axes;
        hold on;
        for i_n=1:length(n_rng)
            for i_k=1:length(k_rng)
                c1=c_1(i_n,i_k,i_d,i_a);
                z=d_1(i_n,i_k,i_d,1);

plot3(n_rng(i_n),k_rng(i_k),z,'marker','s','markersize',ms,'markeredgecolor','k','marker
facecolor',c1,'color',c1);
                end; % 1st i_n
            end; % 1st i_k
            fig2=figure;
            axes2=axes;
            hold on;
            for i_n=1:length(n_rng)
                for i_k=1:length(k_rng)
                    z=d_2(i_n,i_k,i_d,1);
                    c2=c_2(i_n,i_k,i_d,i_a);

plot3(n_rng(i_n),k_rng(i_k),z,'marker','s','markersize',ms,'markeredgecolor','k','marker
facecolor',c2,'color',c2);
                    end; % 2nd i_n
                end; % 2nd i_k
            end; % i_d
        end; % switch ext_coef

```

```
end; % switch  
disp('time');  
disp(toc/60);
```

```
function plot_df
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% function plot_df
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
eval('new_val=get(gcbo,"value");');
eval('set(gcbo,"userdata",num2str(new_val));');
```

```

function plot_fcn(action)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% function plot_fcn
%
% calculate simulation
%
% plot mode:
% 0: from measurement box to the display window
% 1: from databox to a ready-print window
% 2. from databox to a ready-print window
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% defined rainbow
rb=jet(512);
rainbow=rb;
len=length(rainbow);
% define colour
grey=[0.1 0.1 0.1];
color_order=[1 0.6 0; 0.8 0.9 0; 0.4 1 0.2; 0.2 0.8 1];
style_order={'-' '--' '-.' ':' '--' '-.' ':'};
% define linewidth
lw=2.5;
% define marker
marker='x';
mfc='k';

win_cell={'psi_win' 'del_win' 'n_win' 'k_win' 'lsq_win'};
for j=1:5
    h_win(j)=findobj(gcf,'tag',win_cell{j});
    h_line{j}=get(h_win(j),'userdata');
end;

load optics.mat;
switch action
    % psi-del files simulated with Advanced Fit are in the form
    % ; WAVELENGTH PSI ... PSI DEL ... DEL instead of
    % ; WAVELENGTH PSI DEL ... PSI DEL
    case 'mat_box'
        tar_tag='mat_box';
        h_tar=findobj(gcf,'tag',tar_tag);
        cur_use=get(h_tar,'userdata');
        cur_val=get(h_tar,'value');
        if cur_val<length(cur_use)
            cur_ffln=cur_use{cur_val};
            fid=fopen(cur_ffln,'r');
            fgetl(fid);
            line_no=1;
            while ~feof(fid)

```

```

        linie=fgetl(fid);
        vec(1:3)=sscanf(linie,'%f %f %f');
        wv(line_no)=vec(1);
        n(line_no)=vec(2);
        k(line_no)=vec(3);
        line_no=line_no+1;
    end;
end;
fclose(fid);
axes(h_win(3));
hold on;
hl=line(wv(:),n(:),'marker',marker,'markerfacecolor',mfc,'buttondownfcn','bcd;');
addline(hl);
set(h_win(3),'tag','n_win');

axes(h_win(4));
hold on;
hl=line(wv(:),k(:),'marker',marker,'markerfacecolor',mfc,'buttondownfcn','bcd;');
addline(hl);
set(h_win(4),'tag','k_win');

hk=findobj(gcf,'tag','k_win');
case 'sim_box'
    tar_tag='sim_box';
    h_tar=findobj(gcf,'tag',tar_tag);
    cur_use=get(h_tar,'userdata');
    if length(cur_use)>1
        cur_val=get(h_tar,'value');
        cur_ffln=cur_use{cur_val};
        fid=fopen(cur_ffln,'r');
        s=fgetl(fid);
        % read the first element
        first_chac=sscanf(s,'%c',1);
        % find if there are header lines before
        % ; WAVELENGTH and before data
        found=strncmp(s,' WAVELENGTH',12);
        while first_chac==';' & ~found
            s=fgetl(fid);
            first_chac=sscanf(s,'%c',1);
            found=strncmp(s,' WAVELENGTH',12);
            %pos=findstr(s,'WAVELENGTH');
        end;
        zero_str=findstr(s,' ');
        no_par=(length(zero_str)-1)/2;

        % rainbow step
        if no_par>1
            step=floor((len-1)/(no_par-1));
        else
            step=0;
        end;
    end;
end;

```

```

end;
for i=1:no_par
    % define legend string matrix
    len_str{i}=['par' num2str(i)];
end;

% get data
i=1;
s=fgetl(fid);
first_chac=sscanf(s,'%c',1);
while first_chac~=';' & ~feof(fid)
    %read one line into vec
    vec=sscanf(s,'%f');
    wl(i)=vec(1);
    for j=1:no_par
        psi(i,j)=vec(1+j);
        del(i,j)=vec(1+no_par+j);
    end;
    s=fgetl(fid);
    first_chac=sscanf(s,'%c',1);
    i=i+1;
end;
fclose(fid);
a_psi=findobj(gcf,'tag','psi_win');
a_del=findobj(gcf,'tag','del_win');

%~~ adapted from sim_cmb
% plot psi
axes(a_psi);
hold on;
for m=1:no_par
    h_psi(m)=line(wl,psi(:,m),'linestyle','-','color',rainbow(1+(m-
1)*step,:),'linewidth',lw,'marker',marker,'markerfacecolor',mfc,'buttondownfcn','bcd;');
    addline(h_psi(m));
end;
set(a_psi,'tag','psi_win');
grid on;
ylabel('\Psi(^circ)');

% plot del
axes(a_del);
hold on;
for m=1:no_par
    h_del(m)=line(wl,del(:,m),'linestyle','-','color',rainbow(1+(m-
1)*step,:),'linewidth',lw,'marker',marker,'markerfacecolor',mfc,'buttondownfcn','bcd;');
    addline(h_del(m));
end;
set(a_del,'tag','del_win');
xlabel('Wavelength (nm)');
ylabel('\Delta(^circ)');

```

```

    grid on;
end;
case 'mea_box'
    tar_tag='mea_box';
    h_tar=findobj(gcf,'tag',tar_tag);
    cur_use=get(h_tar,'userdata');
    if length(cur_use)>1
        cur_val=get(h_tar,'value');
        cur_ffln=cur_use{cur_val};
        fid=fopen(cur_ffln,'r');
        s=fgetl(fid);
        % read the first element
        first_chac=sscanf(s,'%c',1);
        % find if there are header lines before
        % ; WAVELENGTH and before data
        pos=findstr(s,'WAVELENGTH');
        if pos~=3 & first_chac==';'
            eval(s(3:length(s)));
            s=fgetl(fid);
            first_chac=sscanf(s,'%c',1);
            pos=findstr(s,'WAVELENGTH');
        end;
        while first_chac==';' & pos~=3
            s=fgetl(fid);
            first_chac=sscanf(s,'%c',1);
            pos=findstr(s,'WAVELENGTH');
        end;
        if pos==3 & first_chac==';'
            s=fgetl(fid);
            first_chac=sscanf(s,'%c',1);
        end;
        zero_str=findstr(s,' ');
        no_par=(length(zero_str)-1)/2;

        % rainbow step
        if no_par>1
            step=floor((len-1)/(no_par-1));
        else
            step=0;
        end;
        for i=1:no_par
            % define legend string matrix
            len_str{i}=['par' num2str(i)];
        end;

        % get data
        i=1;
        while first_chac~=';' & ~feof(fid)
            %read one line into vec
            vec=sscanf(s,'%f');

```

```

    wl(i)=vec(1);
    for j=1:no_par
        psi(i,j)=vec(1+j);
        del(i,j)=vec(1+no_par+j);
    end;
    s=fgetl(fid);
    first_chac=sscanf(s,'%c',1);
    i=i+1;
end;
fclose(fid);
a_psi=findobj(gcf,'tag','psi_win');
a_del=findobj(gcf,'tag','del_win');

%~~ adapted from sim_cmb
% plot psi
axes(a_psi);
hold on;
for m=1:no_par
    h_psi(m)=line(wl,psi(:,m),'linestyle','-','color',rainbow(1+(m-
1)*step,:),'linewidth',lw,'marker',marker,'markerfacecolor',mfc,'buttondownfcn','bcd;');
    addline(h_psi(m));
end;
set(a_psi,'tag','psi_win');
grid on;
ylabel('\Psi(^circ)');

% plot del
axes(a_del);
hold on;
for m=1:no_par
    h_del(m)=line(wl,del(:,m),'linestyle','-','color',rainbow(1+(m-
1)*step,:),'linewidth',lw,'marker',marker,'markerfacecolor',mfc,'buttondownfcn','bcd;');
    addline(h_del(m));
end;
set(a_del,'tag','del_win');
xlabel('Wavelength (nm)');
ylabel('\Delta(^circ)');
grid on;
end;
case 'fit_box'
    Par = plot_gp({'p_fit_sr', 'p_fit_tr', 'p_fit_n', 'p_fit_k', 'p_fit_e', 'p_fit_1m',
'p_fit_2m', 'p_fit_3m'});
    eval(Par);
    %%% source %%%
    no_files=0;
    clear file_stack;
    %% hightlighted in fitbox
    switch p_fit_sr
        case {1, 2}
            box_tag='fit_box';

```

```

h_box=findobj(gcf,'tag',box_tag);
cur_use=get(h_box,'userdata');
box_val=get(h_box,'value');
%% case 1 highlighted
if box_val<=length(cur_use)-1
    file_stack(1)=cur_use(box_val);
    no_files=1;
end;
if p_fit_sr==2
    %% all in fit_box%%
    no_files=length(cur_use)-1;
    for j=1:no_files
        file_stack(j)=cur_use(j);
    end;
end;
case 3
    %% all in fit_dat%%
    dir_tag='chd_fit';
    h_dir=findobj(gcf,'tag',dir_tag);
    path=get(h_dir,'userdata');
    dat_tag='fit_dat';
    h_dat=findobj(gcf,'tag',dat_tag);
    long_list=get(h_dat,'string');
    no_files=length(long_list);
    for j=1:no_files
        file_stack{j}=[path long_list{j}];
    end;
end;
if exist('file_stack')
    clear str;
    for j=1:no_files
        FileType='dat';
        %[file_name path_name] = uigetfile([pwd '\data\*' FileType], 'nkmsc
FILE',40,110);
        pos1=findstr(file_stack{j},'\d');
        pos_str=findstr(file_stack{j},'_');
        pos2=pos_str(length(pos_str));
        str=file_stack{j}((pos1+2):(pos2-1));
        lgd_str{j}=['d= ' str ' nm'];
    end;
end;

%% target figure %%
switch p_fit_tr
case 1
case 2
%% separate %%
    h_fig=figure;
    no_axes=p_fit_n+p_fit_k+p_fit_e;
    left=0.07;

```

```

width=0.88;
base=0.08;
box_offset=0.015;
height=0.9/no_axes;
h_win(3)=axes('pos',[left 0.01 width 0.01],'tag','n_win','vis','off');
h_win(4)=axes('pos',[left 0.01 width 0.01],'tag','k_win','vis','off');
h_win(5)=axes('pos',[left 0.01 width 0.01],'tag','lsq_win','vis','off');
if no_axes>0
    j=1;
    if p_fit_e == 1
        level=base+(j-1)*height;
        %set(ha_lsq,'pos',[left level width height-box_offset],'vis','on');
        set(h_win(5),'box','on','pos',[left level width height-
box_offset],'vis','on');
        axes(h_win(5));
        ylabel('LSQ');
        xlabel('Wavelength (nm)');
        j=j+1;
    end;
    if p_fit_k == 1
        level=base+(j-1)*height;
        %set(ha_k,'pos',[left level width height-box_offset],'vis','on');
        set(h_win(4),'box','on','pos',[left level width height-
box_offset],'xticklabel','', 'vis','on');
        axes(h_win(4));
        ylabel('k');
        j=j+1;
    end;
    if p_fit_n == 1
        level=base+(j-1)*height;
        %set(ha_n,'pos',[left level width height-box_offset],'vis','on');
        set(h_win(3),'box','on','pos',[left level width height-
box_offset],'xaxislocation','top','vis','on');
        axes(h_win(3));
        ylabel('n');
    end;
end;
end;

% rainbow step
if no_files>1
    step=floor((len-1)/(no_files-1));
else
    step=0;
end;

for j=1:no_files
    cur_ffln=file_stack{j};
    fid=fopen(cur_ffln,'r');
    %header=fgetl(fid);

```

```

line_no=1;
while ~feof(fid)
    linie=fgetl(fid);
    vec(1:10)=sscanf(linie,'%f');
    wv(line_no)=vec(1);
    n(1,line_no)=vec(2);
    k(1,line_no)=vec(3);
    lsq(1,line_no)=vec(4);
    n(2,line_no)=vec(5);
    k(2,line_no)=vec(6);
    lsq(2,line_no)=vec(7);
    n(3,line_no)=vec(8);
    k(3,line_no)=vec(9);
    lsq(3,line_no)=vec(10);
    line_no=line_no+1;
end;
fclose(fid);

if p_fit_n == 1
    %axes(ha_n);
    axes(h_win(3));
    hold on;
    if p_fit_1m == 1
        hl=line(wv(:),n(1,:),'color',rainbow(1+(j-1)*step,:),'linestyle','-
', 'buttondownfcn','bcd;');
        addline(hl);
    end;
    if p_fit_2m == 1
        hl=line(wv(:),n(2,:),'color',rainbow(1+(j-1)*step,:),'linestyle','--
', 'buttondownfcn','bcd;');
        addline(hl);
    end;
    if p_fit_3m == 1
        hl=line(wv(:),n(3,:),'color',rainbow(1+(j-
1)*step,:),'linestyle',':', 'buttondownfcn','bcd;');
        addline(hl);
    end;
    set(h_win(3),'tag','n_win');
end;
if p_fit_k == 1
    %axes(ha_k);
    axes(h_win(4));
    hold on;
    if p_fit_1m == 1
        hl=line(wv(:),k(1,:),'color',rainbow(1+(j-1)*step,:),'linestyle','-
', 'buttondownfcn','bcd;');
        addline(hl);
    end;
    if p_fit_2m == 1

```

```

        hl=line(wv(:),k(2,:),'color',rainbow(1+(j-1)*step,:),'linestyle','--
', 'buttondownfcn','bcd;');
        addline(hl);
        end;
        if p_fit_3m == 1
            hl=line(wv(:),k(3,:),'color',rainbow(1+(j-
1)*step,:),'linestyle',':', 'buttondownfcn','bcd;');
            addline(hl);
            end;
            set(h_win(4),'tag','k_win');
        end;
        if p_fit_e == 1
            %axes(ha_lsq);
            axes(h_win(5));
            hold on;
            if p_fit_1m == 1
                ln_lsq(j)=line(wv(:),lsq(1,:),'color',rainbow(1+(j-1)*step,:),'linestyle','-',
', 'buttondownfcn','bcd;');
                addline(ln_lsq(j));
            end;
            if p_fit_2m == 1
                hl=line(wv(:),lsq(2,:),'color',rainbow(1+(j-1)*step,:),'linestyle','--
', 'buttondownfcn','bcd;');
                addline(hl);
            end;
            if p_fit_3m == 1
                hl=line(wv(:),lsq(3,:),'color',rainbow(1+(j-
1)*step,:),'linestyle',':', 'buttondownfcn','bcd;');
                addline(hl);
            end;
            set(h_win(5),'tag','lsq_win');
            legend(ln_lsq,lgd_str,0);
        end;
    end;

case 'clear_lsq'
    haxes=findobj(gcf,'tag','lsq_win');
    h=get(haxes,'children');
    delete(h);
    set(haxes,'userdata','');
case 'clear_n'
    haxes=findobj(gcf,'tag','n_win');
    h=get(haxes,'children');
    delete(h);
    set(haxes,'userdata','');
case 'clear_k'
    haxes=findobj(gcf,'tag','k_win');
    h=get(haxes,'children');
    delete(h);
    set(haxes,'userdata','');

```

```

case 'clear_psi'
    haxes=findobj(gcf,'tag','psi_win');
    h=get(haxes,'children');
    delete(h);
    set(haxes,'userdata','');
case 'clear_del'
    haxes=findobj(gcf,'tag','del_win');
    h=get(haxes,'children');
    delete(h);
    set(haxes,'userdata','');

case 'clear_all'
    ha=findobj(gcf,'type','axes');
    for j=1:length(ha)
        axes(ha(j));
        grid off;
        hold off;
        set(ha(j),'userdata',[]);
        h=get(ha(j),'children');
        delete(h);
    end;
end;

%%%%%%%%%%%% function %%%
function addline(h_new)
ha=get(h_new,'parent');
h_old=get(ha,'userdata');
if ~isempty(h_old)
    set(h_old,'marker','none');
end;
set(ha,'userdata',h_new);

```

```

function par=plot_gp(CELL)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
%   function par=plot_gp
%
%   Get parameters used for curve plotting
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
par=[];
for n=1:length(CELL),
    eval('h = findobj(gcf,"Tag",CELL{n});');
    par=[par CELL{n} ' ' eval('get(h,"Userdata")') ''];
end;

```

```

function push_fcn(action)
%%%%
%
% function push_fcn
%
% change directory of
% model and measurement
%
%%%%
switch action
%%%% change directory %%%
case {'chd_mat', 'chd_sim', 'chd_mea', 'chd_fit'}
    [filename, pathname] = uigetfile('*.dat', 'Choose a directory');
    files=dir(pathname);
    disp(files);
    i=1;
    j=1;
    while i<=length(files)
        pos=findstr(files(i).name, '.');
        len=length(files(i).name);
        if length(pos)==1 & ~isempty(pos) & pos<len
            ext=files(i).name(pos+1:len);
            if strcmp(ext,'dat')==1 | strcmp(ext,'DAT')==1
                list{j}=files(i).name;
                j=j+1;
            end;
        end;
        i=i+1;
    end;

    tag=[action(5:7) '_dat'];
    h=findobj(gcf,'tag',tag);
    set(h,'string',list,'value',1,'userdata',list(1));
    set(gcbo,'userdata',pathname);
%% add & del data or mat %%%
case {'add_mat', 'del_mat', 'add_sim', 'del_sim', 'add_mea', 'del_mea', 'add_fit',
'del_fit'}
    tar_tag=[action(5:7) '_box'];
    h_tar=findobj(gcf,'tag',tar_tag);
    old_val=get(h_tar,'value');
    old_str=get(h_tar,'string');

    old_use=get(h_tar,'userdata');

    len=length(old_str);
    switch action(5:7)
    case 'mat'
        src_tag='mat_dat';
        dir_tag='chd_mat';
        upper_lim=3;

```

```

case 'sim'
    src_tag='sim_dat';
    dir_tag='chd_sim';
    upper_lim=10;
case 'mea'
    src_tag='mea_dat';
    dir_tag='chd_mea';
    upper_lim=10;
case 'fit'
    src_tag='fit_dat';
    dir_tag='chd_fit';
    upper_lim=10;
end;

switch action(1:3)
case 'add',
    if len<=upper_lim
        h_src=findobj(gcf,'tag',src_tag);
        add_str=get(h_src,'userdata');
        h_dir=findobj(gcf,'tag',dir_tag);
        cur_dir=get(h_dir,'userdata');
        add_use=[cur_dir add_str{:}];
        new_use=[old_use(1:old_val-1); {add_use}; old_use(old_val:len)];
        new_str=[old_str(1:old_val-1); add_str; old_str(old_val:len)];
        set(h_tar,'userdata',new_use,'string',new_str);
    end;
case 'del',
    if old_val~=len
        new_use=[old_use(1:old_val-1); old_use(old_val+1:len)];
        new_str=[old_str(1:old_val-1); old_str(old_val+1:len)];
        set(h_tar,'string',new_str,'userdata',new_use);
    end;
end;
%%%% highlight item in listbox %%%%%%%%%%%%%%%
case 'mark'
    val=get(gcbo,'value');
    str=get(gcbo,'string');
    set(gcbo,'userdata',str(val));
case 'mrk_tar'
    val=get(gcbo,'value');
    str=get(gcbo,'string');
end;

```

```

function save_fcn(action)
%%
% function save_fcn
% save data
%
%%
load optics.mat;
Par = plot_gp({'p_fit_sr', 'p_fit_tr', 'p_fit_n', 'p_fit_k', 'p_fit_e', 'p_fit_1m', 'p_fit_2m',
'p_fit_3m'});
eval(Par);

switch action
case 'save_nk'
    switch p_fit_sr
    case 1
        box_tag='fit_box';
        h_box=findobj(gcf,'tag',box_tag);
        cur_use=get(h_box,'userdata');
        box_val=get(h_box,'value');
        no_files=length(cur_use)-1;
        if box_val<=no_files
            src_fln=cur_use{box_val};
            fid_src=fopen(src_fln,'r');
            x=1;
            while ~feof(fid_src)
                linie=fgetl(fid_src);
                if linie(1)~=';'
                    vec(1:10)=sscanf(linie,'%f');
                    prnt_res(1:3,x)=vec(1:3)';
                    x=x+1;
                end;
            end;
            fclose(fid_src);
            [filename, pathname] = uiputfile('* .dat', 'save a file');
            tar_fln=[pathname filename];
            fid_tar=fopen(tar_fln,'w');
            header=['; wavelength n k\n'];
            fprintf(fid_tar, header);
            fprintf(fid_tar,'%f %f %f\n',prnt_res);
            fclose(fid_tar);
        end;
    case 3
    end;
case 'save_sim'
    tar_tag='sim_box';
    h_tar=findobj(gcf,'tag',tar_tag);
    cur_use=get(h_tar,'userdata');
    if length(cur_use)>1

```

```
cur_val=get(h_tar,'value');
src_fln=cur_use{cur_val};
[filename, pathname] = uinputfile('*.dat', 'save a file');
tar_fln=[pathname filename];
fid_src=fopen(src_fln,'r');
fid_tar=fopen(tar_fln,'w');
while ~feof(fid_src)
    c=fread(fid_src);
    fwrite(fid_tar,c);
end;
fclose(fid_src);
fclose(fid_tar);
end;
case 'save_pd'
end;
```

```

function
set_par(p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,p8,p9,p10,p11,p12,p13,p14,p15,p16,p17,p18,p19,p20,p21)
%%
%
% function set_par
%
% Set parameters
%
%%
PARCMD = str2mat('value=p1; tag="coh";, ...
    'value=p2; tag="nbr";, ...
    'value=p3; tag="wlfr";, ...
    'value=p4; tag="wlin";, ...
    'value=p5; tag="wlto";, ...
    'value=p6; tag="ang";, ...
    'value=p7; tag="ang_fr";, ...
    'value=p8; tag="ang_in";, ...
    'value=p9; tag="ang_to";, ...
    'value=p10; tag="d";, ...
    'value=p11; tag="d_fr";, ...
    'value=p12; tag="d_in";, ...
    'value=p13; tag="d_to";, ...
    'value=p14; tag="n";, ...
    'value=p15; tag="n_fr";, ...
    'value=p16; tag="n_in";, ...
    'value=p17; tag="n_to";, ...
    'value=p18; tag="k";, ...
    'value=p19; tag="k_fr";, ...
    'value=p20; tag="k_in";, ...
    'value=p21; tag="k_to";');
for n=1:21
    eval(PARCMD(n,:));
    if ~isempty(value)
        eval('h = findobj(gcf,"Tag",tag);');
        eval('set(h,"String",num2str(value),"value",value,"userdata",num2str(value));');
    end;
end;

```

```

function
set_wpar(p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,p8,p9,p10,p11,p12,p13,p14,p15,p16,p17,p18,p19,p
20)
%%
%
% function set_wpar
%
% Set window parameters
%
%%
PARCMD = str2mat('value=p1; tag="psi_win_l";', ...
    'value=p2; tag="psi_win_r";', ...
    'value=p3; tag="psi_win_b";', ...
    'value=p4; tag="psi_win_t";', ...
    'value=p5; tag="del_win_l";', ...
    'value=p6; tag="del_win_r";', ...
    'value=p7; tag="del_win_b";', ...
    'value=p8; tag="del_win_t";', ...
    'value=p9; tag="n_win_l";', ...
    'value=p10; tag="n_win_r";', ...
    'value=p11; tag="n_win_b";', ...
    'value=p12; tag="n_win_t";', ...
    'value=p13; tag="k_win_l";', ...
    'value=p14; tag="k_win_r";', ...
    'value=p15; tag="k_win_b";', ...
    'value=p16; tag="k_win_t";', ...
    'value=p17; tag="lsq_win_l";', ...
    'value=p18; tag="lsq_win_r";', ...
    'value=p19; tag="lsq_win_b";', ...
    'value=p20; tag="lsq_win_t";');

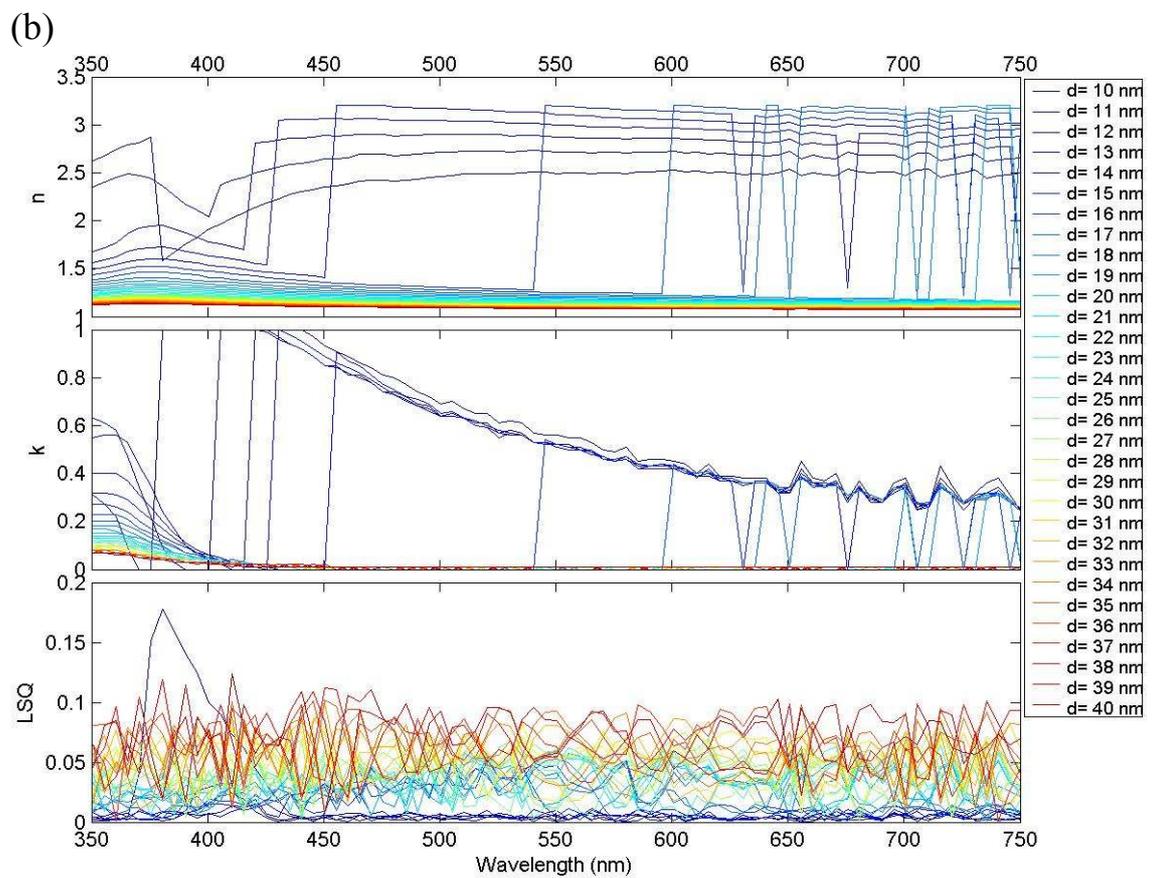
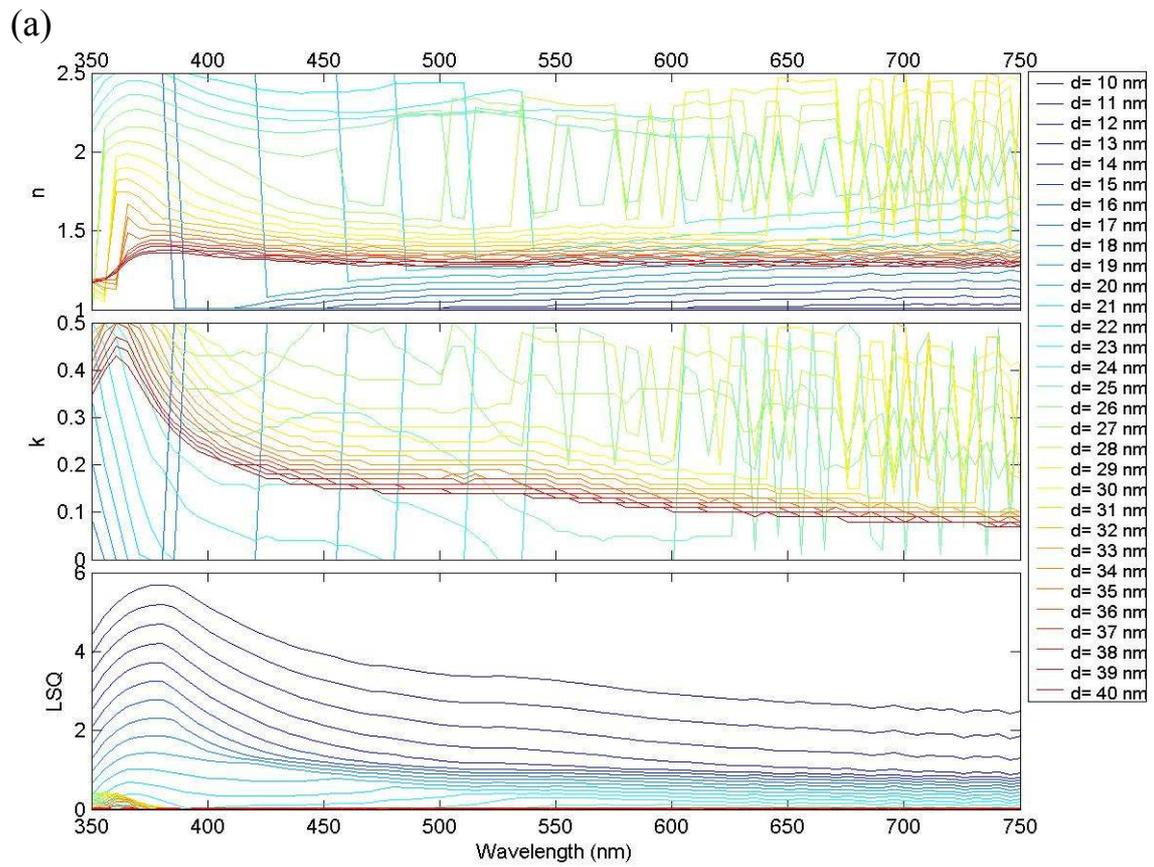
for n=1:20
    eval(PARCMD(n,:));
    if ~isempty(value)
        eval('h = findobj(gcf,"Tag",tag);');
        eval('set(h,"String",num2str(value),"value",value,"userdata",num2str(value));');
    end;
end;

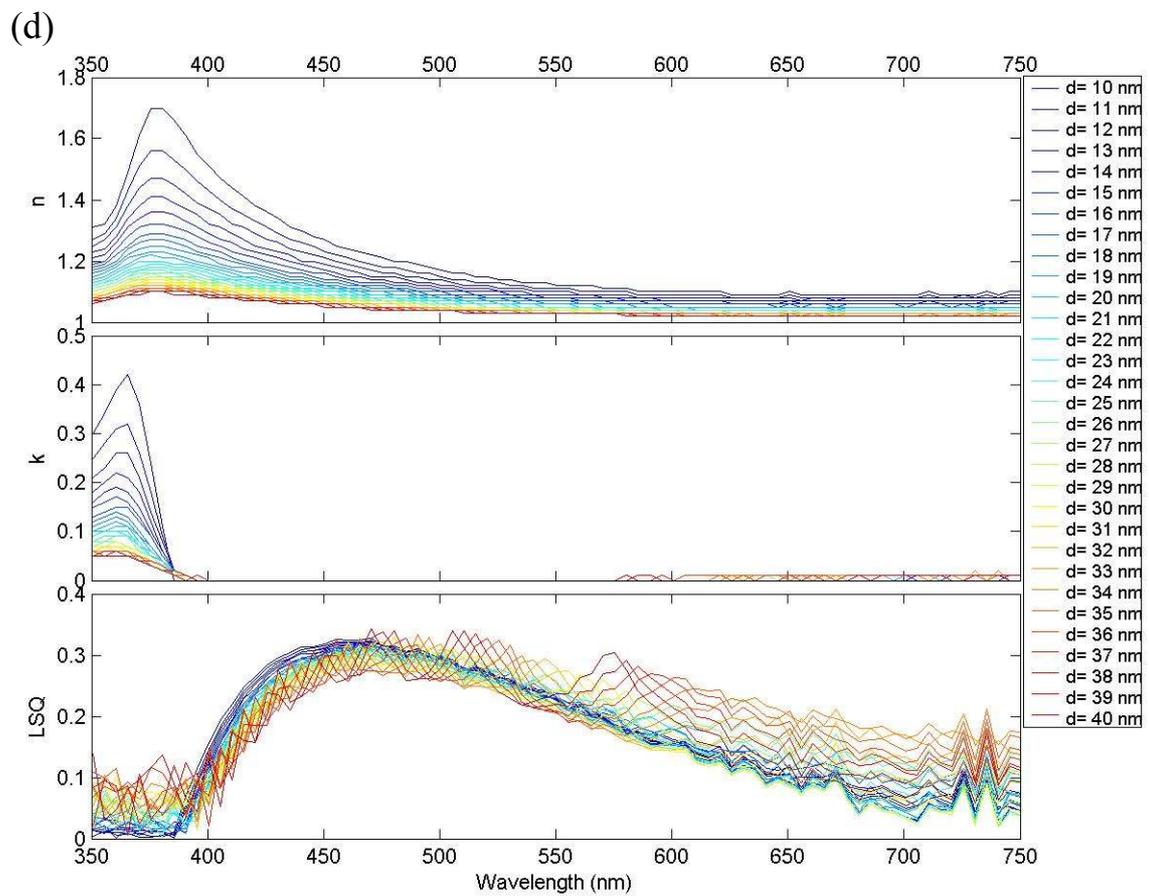
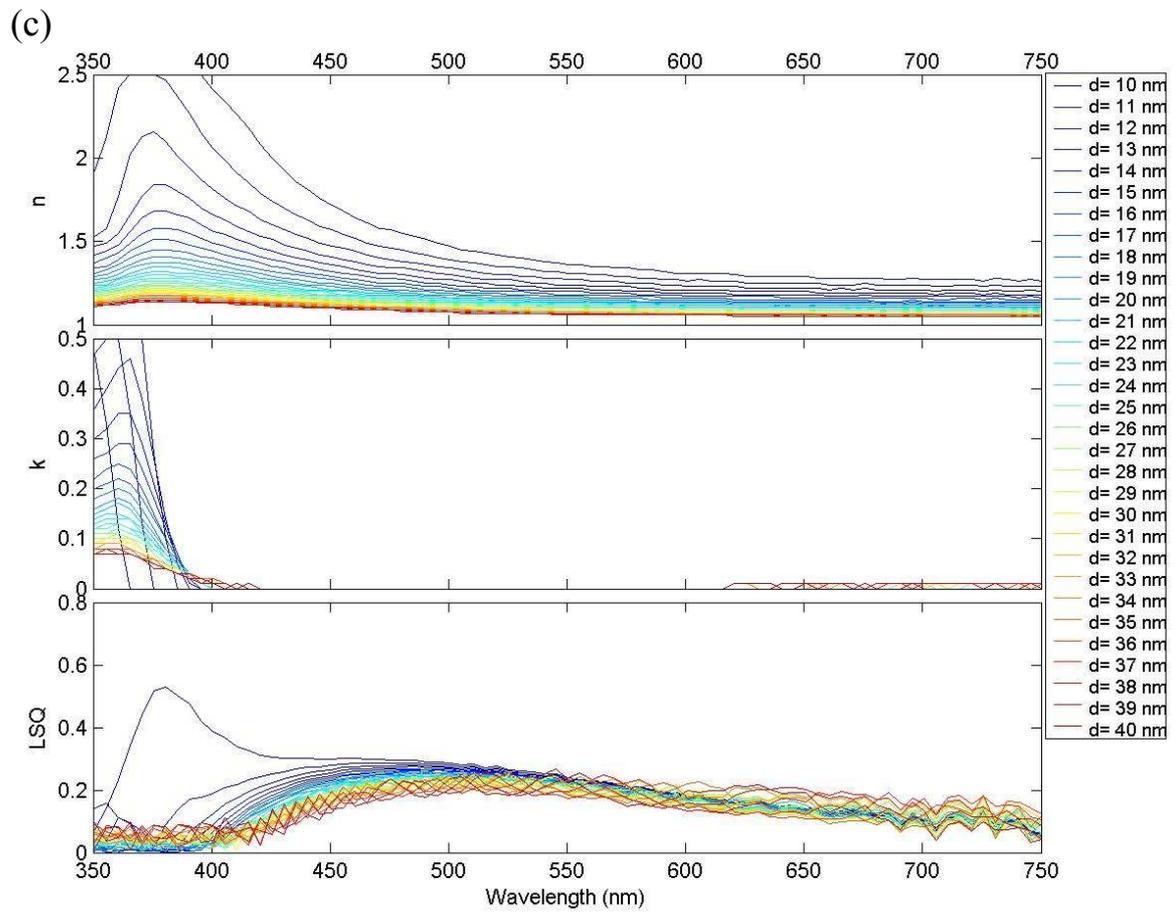
```

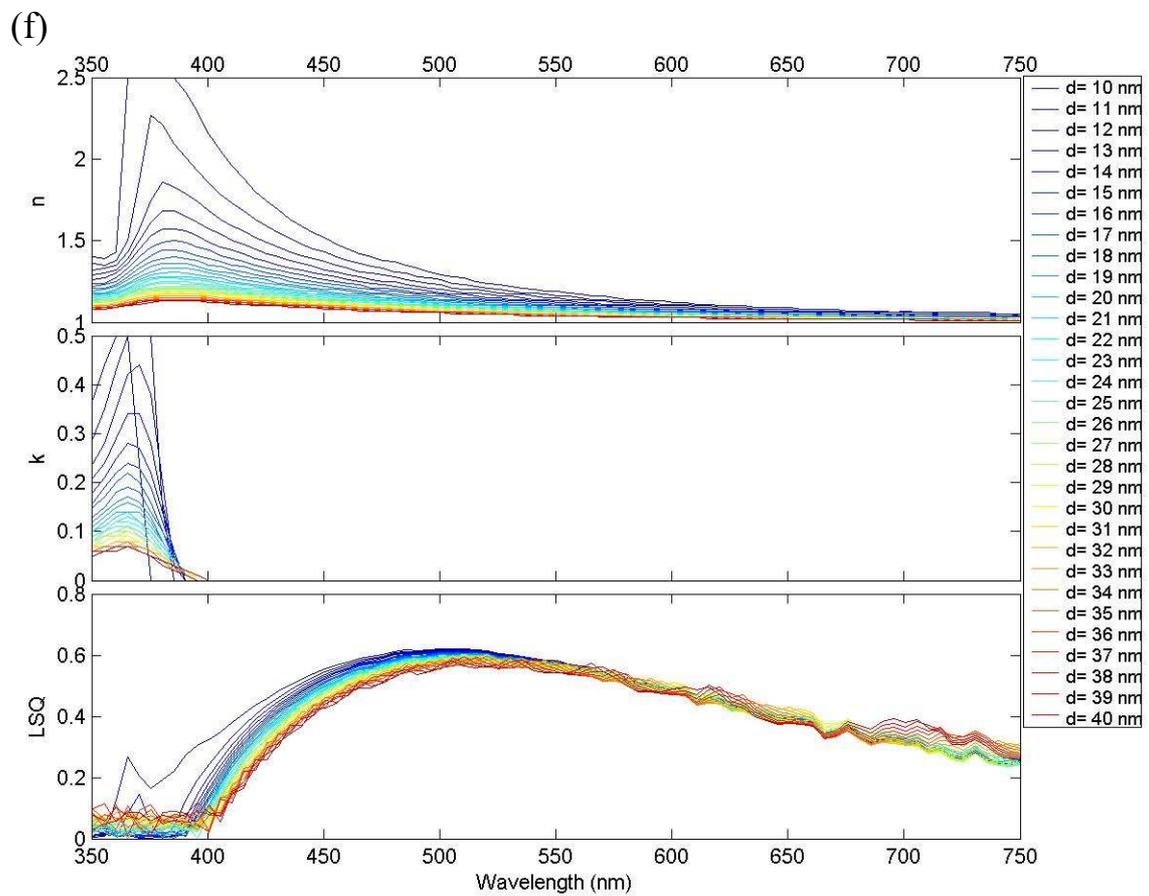
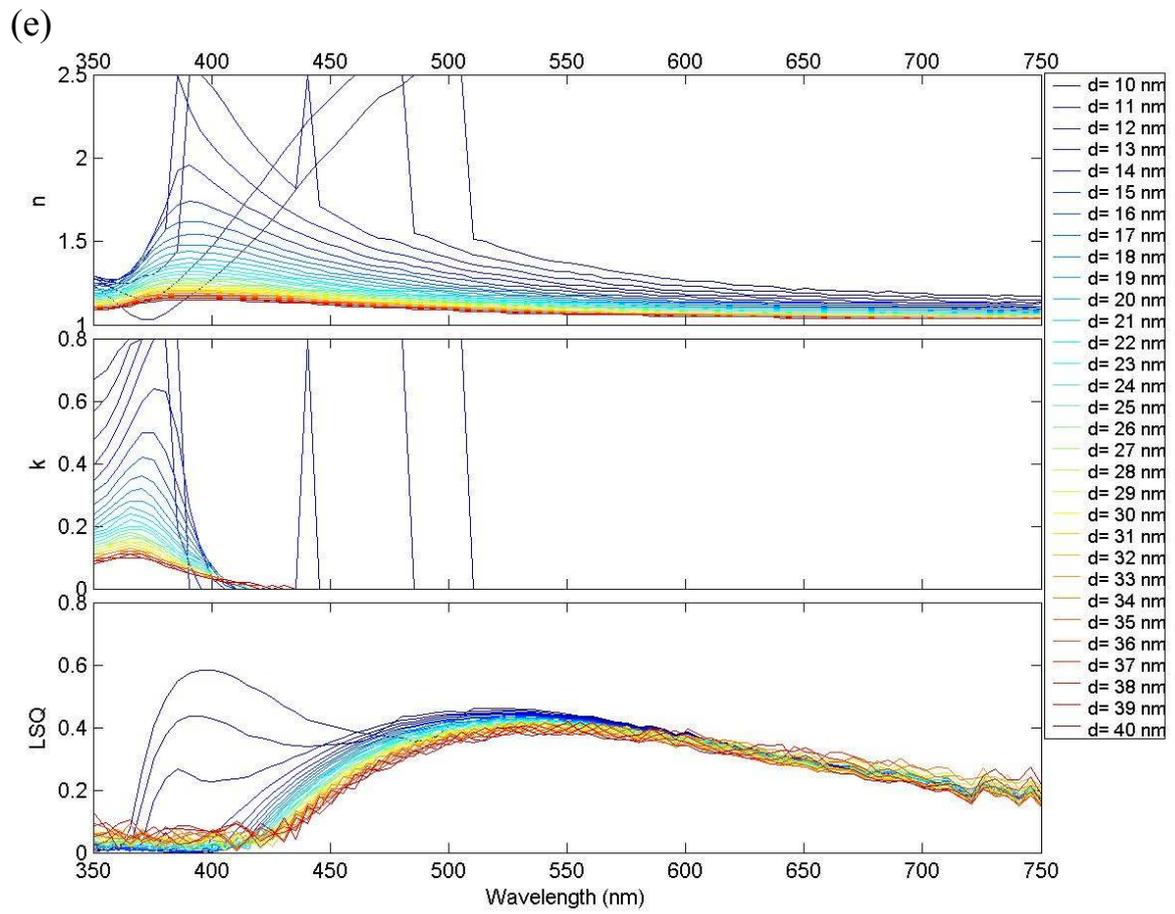
Anhang E Erste Anpassungsergebnisse

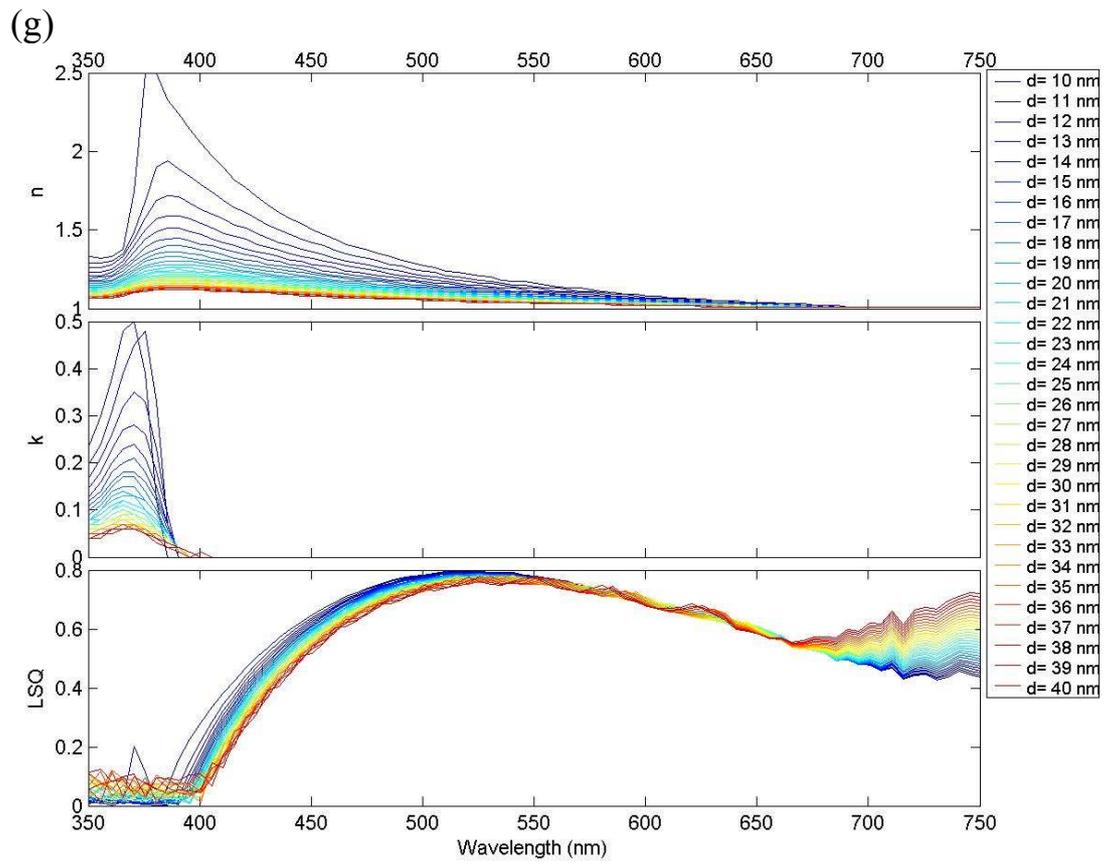
Abb	Messung	$n_{\lambda_i}^{(low)}$	$n_{\lambda_i}^{(int)}$	$n_{\lambda_i}^{(up)}$	$k_{\lambda_i}^{(low)}$	$k_{\lambda_i}^{(int)}$	$k_{\lambda_i}^{(up)}$	$d_{\lambda_i}^{(low)}$	$d_{\lambda_i}^{(int)}$	$d_{\lambda_i}^{(up)}$
7.1.1a	Simulation	0.1	0.1	2.5	1.5	0.1	5.4	8	1	12
7.1.1b	Simulation	0.05	0.05	2.5	1.5	0.05	5.4	8	1	12
7.1.1c	Simulation	0.01	0.01	2.5	1.5	0.01	5.4	8	1	12
7.1.1d	Simulation	0.005	0.005	2.5	1.5	0.005	5.4	8	1	12
7.1.2a	Simulation	3	0.01	4.5	0	0.01	1	100	0	100
7.1.4a										
7.1.2b	Simulation	3	0.005	4.5	0	0.005	1	100	0	100
7.1.4b										
7.1.2c	Simulation	3	0.001	4.5	0	0.001	1	100	0	100
7.2.6a & 7.2.6a	0418j	1.005	0.005	1.7	0	0.005	0.7	33	1	37
	0418a	1.005	0.005	2.005	0	0.005	0.5	9	1	16
	0418b	0.005	0.005	1.4	0	0.005	0.2	10	1	25
	0418c	0.005	0.005	1.4	0	0.005	0.2	15	1	25
	0418d	0.005	0.005	1.4	0	0.005	0.2	14	1	28
	0418e	0.005	0.005	1.4	0	0.005	0.2	14	1	28
	0418f	0.005	0.005	1.4	0	0.005	0.2	23	1	33
	0418g	1.005	0.005	2.4	0	0.005	1	17	1	24
E1a	0418j	1.01	0.01	2.5	0	0.01	0.5	10	1	40
E1b	0418a	1.01	0.01	3.2	0	0.01	1	10	1	40
E1c	0418b	1.01	0.01	2.5	0	0.01	0.5	10	1	40
E1d	0418c	1.01	0.01	3	0	0.01	0.5	10	1	25
E1e	0418d	1.01	0.01	2.5	0	0.01	0.8	10	1	40
E1f	0418e	1.01	0.01	2.5	0	0.01	0.5	10	1	40
E1g	0418f	1.01	0.01	2.5	0	0.01	0.5	10	1	40
E1h	0418g	1.01	0.01	2.5	0	0.01	0.5	10	1	40
E2a	1n16a	1.8	0.001	2.2	0	0.001	0.5	540	2	570
E2b	1n16d	1.8	0.001	2.2	0	0.001	0.5	318	2	332
E2c	1n16e	1.8	0.001	2.2	0	0.001	0.55	90	1	105
E2d	1n18b	1.8	0.001	2.2	0	0.001	0.55	293	1	308
E2e	1n19b	1.8	0.001	2.2	0	0.001	0.55	296	1	310

Tabelle E.1 Anpassungsbedingungen, die in den erwähnten Invertierungsversuchen verwendet werden.









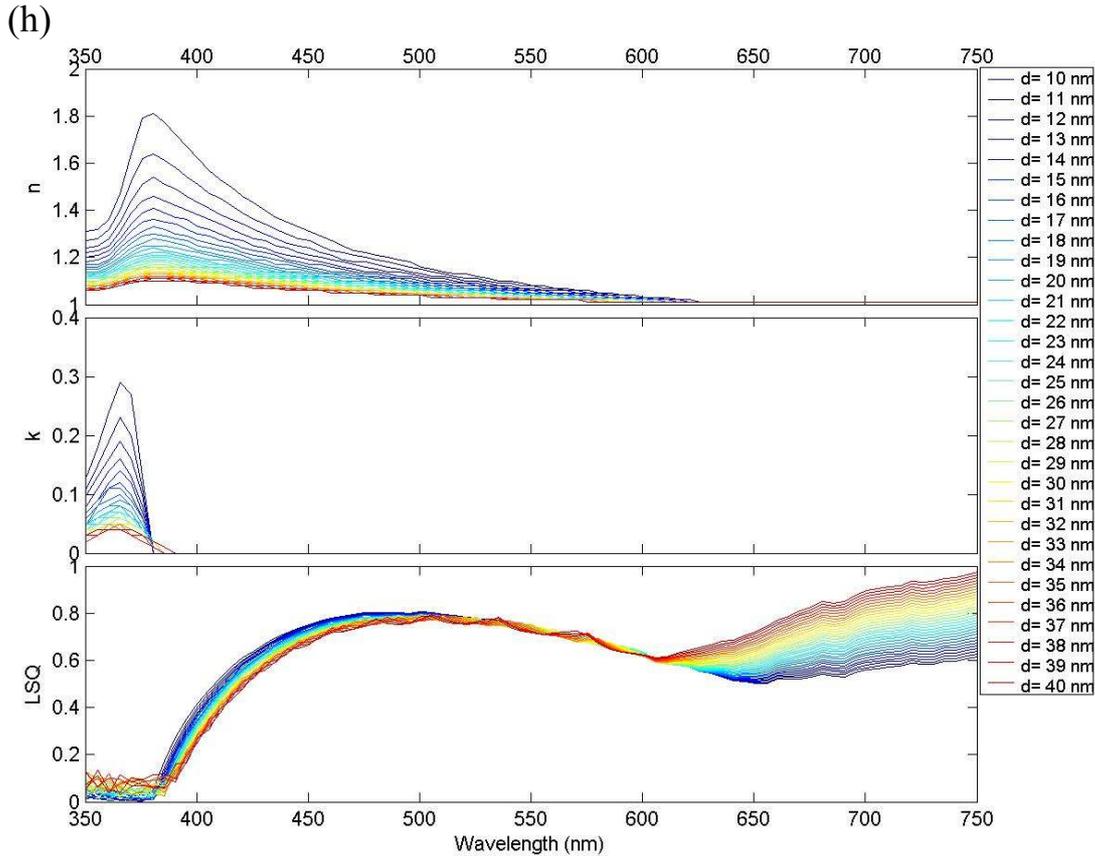
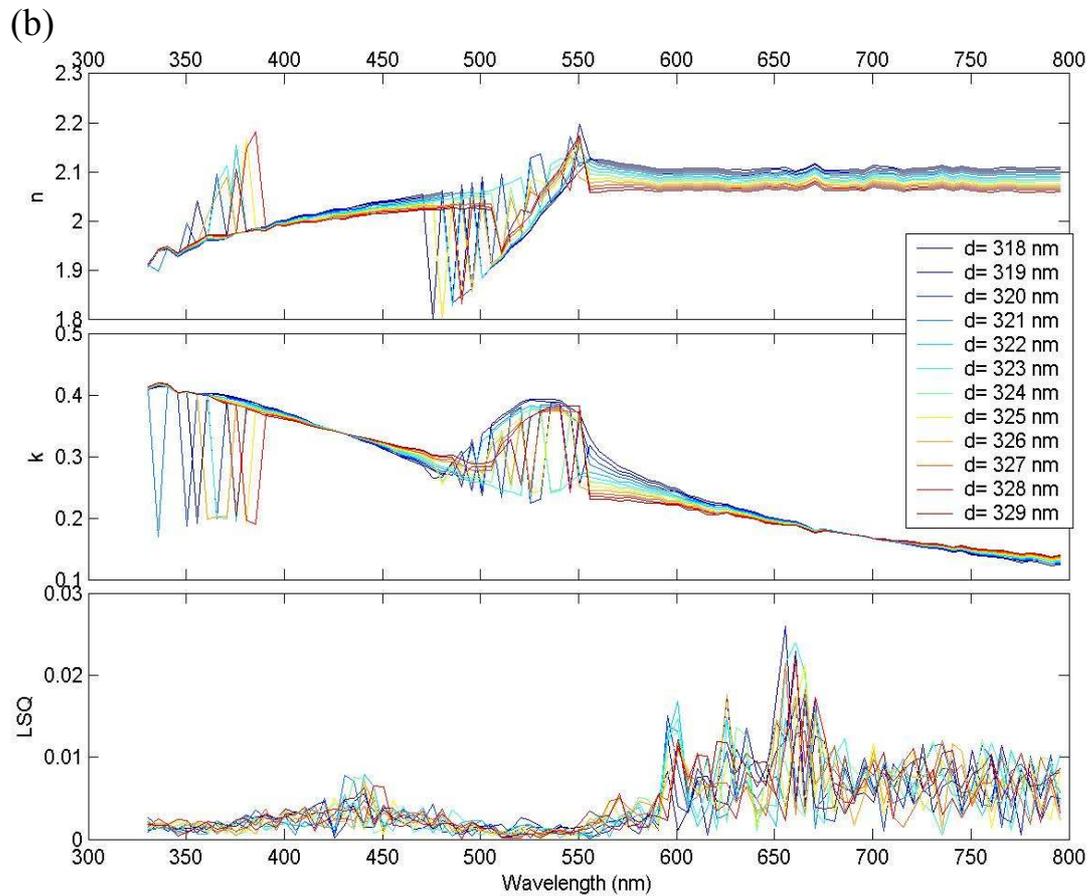
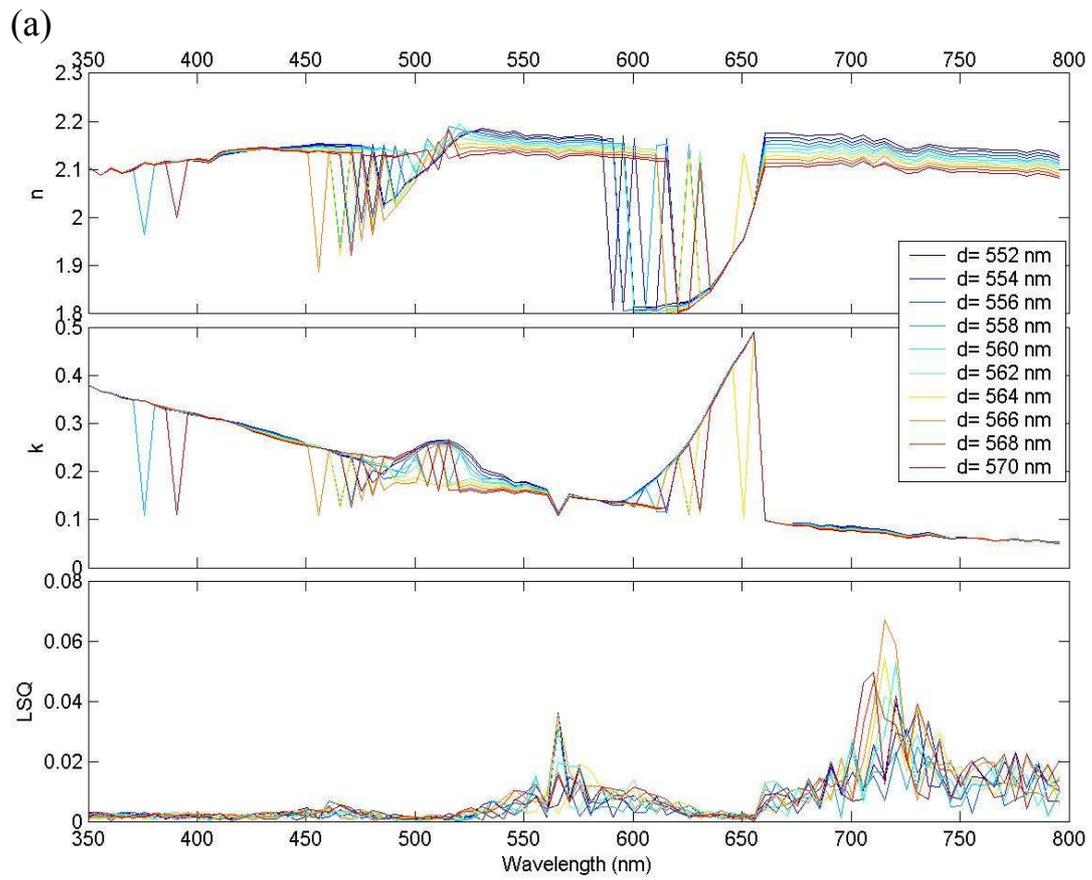
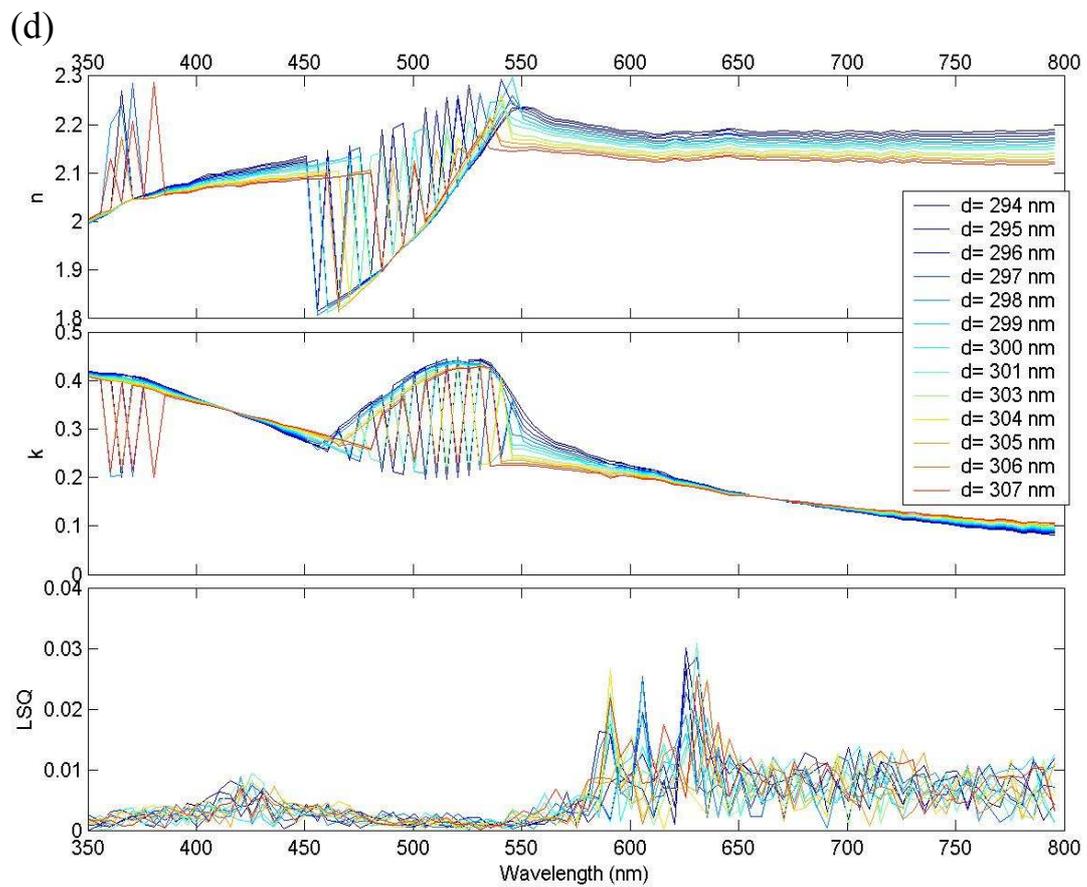
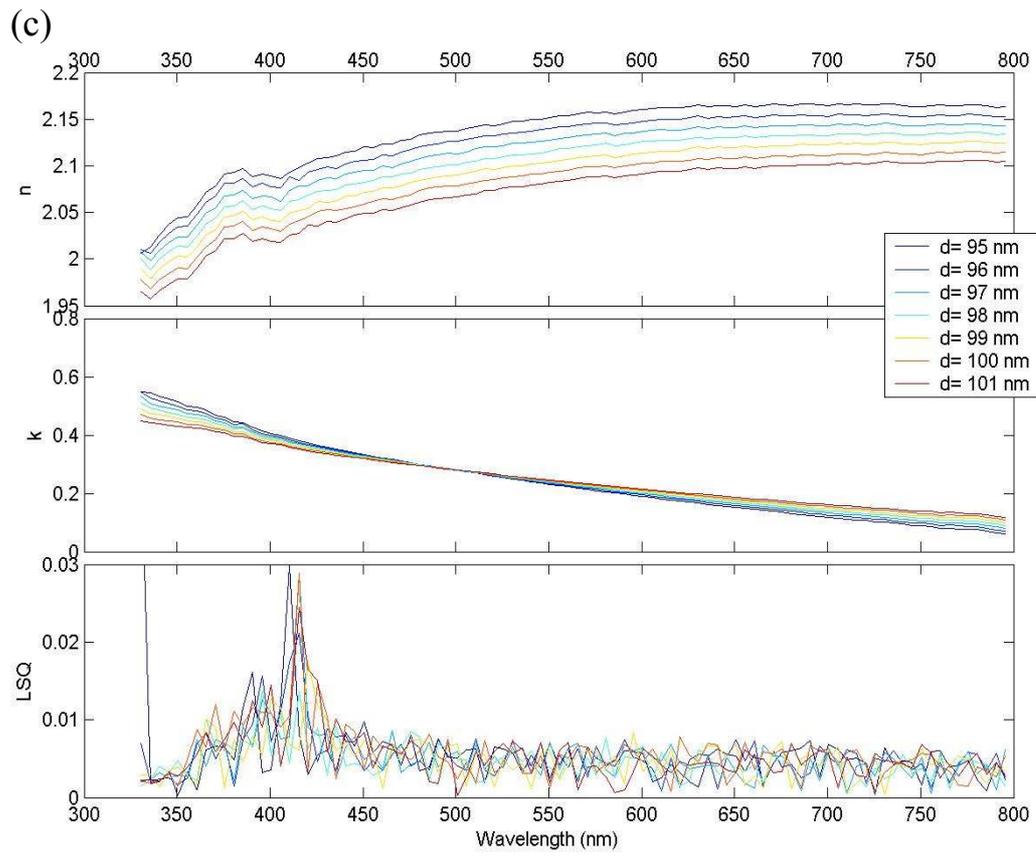


Abb. E1: Erste grobe Ergebnisse der spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\left[\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n(\lambda) & k(\lambda) & d \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si[Pa185]}}(\lambda) & k_{\text{Si[Pa185]}}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \right)^\dagger$, ϑ) für $F_\vartheta^{\text{meas}} \{ \text{Luft} \mid \text{a-Si/C}_{60} \mid \text{Si-Substrat} \}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ mittels hoelp Programms mit den in Tabelle E1 aufgelisteten Anpassungsbedingungen. Abbildungen (a) bis (h) entsprechen den a-Si/C₆₀ Proben: {0418j}, {0418a}, {0418b}, {0418c}, {0418d}, {0418e}, {0418f}, {0418g} bzw. {0418h}. Dargestellt sind nur $n^*(\lambda)$, $k^*(\lambda)$, und $lsq^*(\lambda)$.





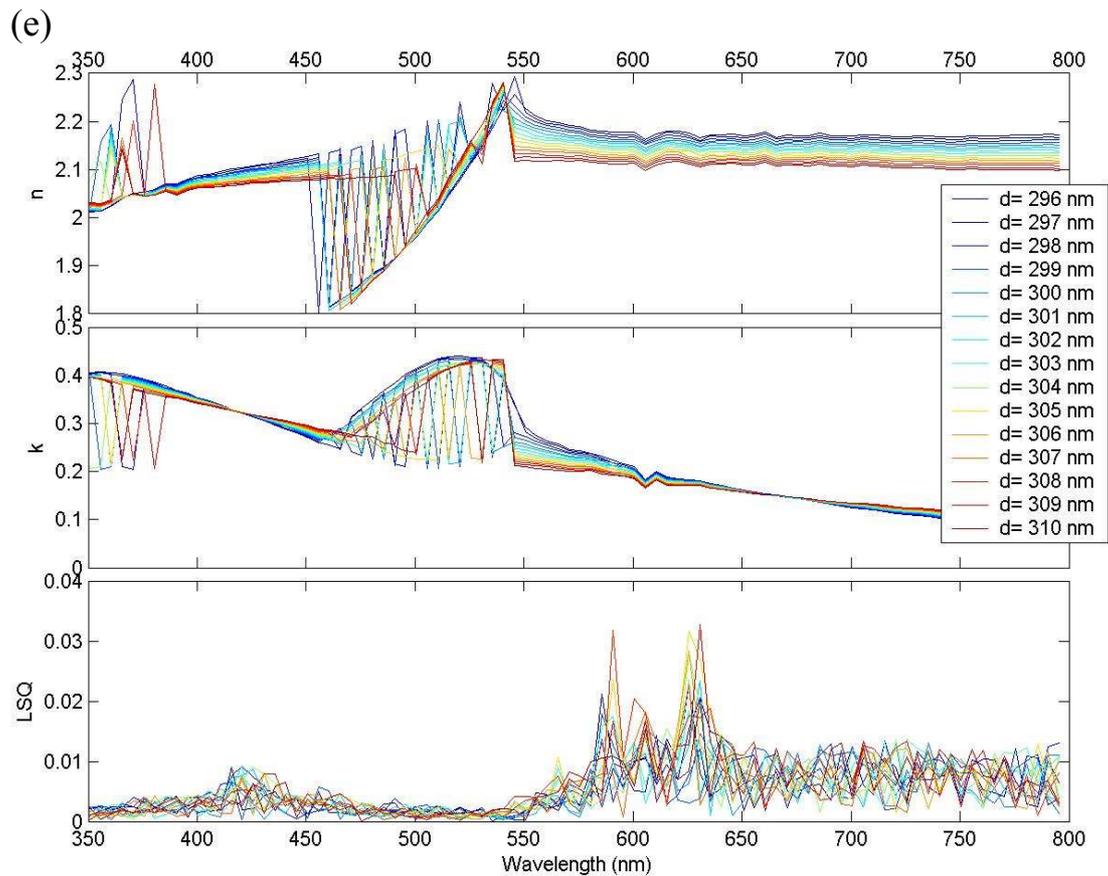


Abb. E2: Erste grobe Ergebnisse der spektroskopischen Wellenlänge-für-Wellenlänge Anpassung $F(\left[\begin{matrix} 1 & 0 & \infty \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n(\lambda) & k(\lambda) & d \end{matrix} \right]^\dagger \left[\begin{matrix} n_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) & k_{\text{Si[Pal85]}}(\lambda) & \infty \end{matrix} \right]^\dagger)^\dagger$, ϑ) für $F_\vartheta^{\text{meas}}\{\text{Luft} \mid \text{a-C:H:N} \mid \text{Si-Substrat}\}$, wobei $F = \Psi, \Delta$; $\vartheta = 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ mittels hoelp Programms mit den in Tabelle E1 aufgelisteten Anpassungsbedingungen. Abbildungen (a) bis (e) entsprechen den a-C:H:N Proben: {1n16a}, {1n16d}, {1n16e}, {1n18b} bzw. {1n19b}. Dargestellt sind nur $n^*(\lambda)$, $k^*(\lambda)$, und $lsq^*(\lambda)$.

Anhang F Proben

Bezeichnung	System	Methode	Beschichtungsdauer [min]
2820e	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	65'33''
2821a	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	62'38''
2826d	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	27'
2827b	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	19'18''
2827c	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	13'23''
2827d	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	34'
2828g	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	34'
2902b	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	27'
2905b	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	7'51''
2912g	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	7'45''
2129c	{ SiO ₂ Si }	Sputtering	60'
2523a	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	3'10''
2524a	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	29'41''
2822b	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	9'15''
2822d	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	18'30''
2822f	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	27'45''
2828c	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	65'
2828d	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	20'
2828e	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	71'
2828f	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	20'
2905d	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	18'42''

Bezeichnung	System	Methode	Beschichtungsdauer [min]
2911a	{ SiO ₂ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	18'30'', 7'45''
2911e	{ SiO ₂ Al ₂ O ₃ SiO ₂ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	18'30'', 7'45'', 18'30'', 7'45''
2912e	{ Al ₂ O ₃ Si }	Sputtering	18'30''
2123c	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	50'43''
2125a	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	54'
2128c	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	60'
2129b	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	110'
3211c	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	85'
3212b	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	60'
3213b	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	47'
3407a	{ TiO ₂ Si }	Sputtering	23'

Bezeichnung	System	Methode	Druck (x10 ⁻² mbar)	CH ₄ Fluss (sccm)	N ₂ Fluss (sccm)
1n16a	{ a-C:H Si }	Sputtering	1.45	7	0
1n16d	{ a-C:H:N Si }	Sputtering	1,4	4.2	2.8
1n16e	{ a-C:H:N Si }	Sputtering	1.4	4.2	2.8
1n18b	{ a-C:H:N Si }	Sputtering	1.4	5.6	1.4
1n19b	{ a-C:H:N Si }	Sputtering	0.96	5.6	1.4

Bezeichnung	System	Methode	[Si]:[C]	Dicke [nm] (Abschätzung mittels Schwingquarz)	Dicke [nm] (Ellipsometrische Bestimmung)
0418a	{ a-Si:C ₆₀ Si }	Bedampfen	0.37 : 0.62	11.9	13.5nm
0418b	{ a-Si:C ₆₀ Si }	Bedampfen	0.55 : 0.44	18.3	19.5nm
0418c	{ a-Si:C ₆₀ Si }	Bedampfen	0.70 : 0.29	21.8	19nm
0418d	{ a-Si:C ₆₀ Si }	Bedampfen	0.73 : 0.26	22.2	23nm
0418e	{ a-Si:C ₆₀ Si }	Bedampfen	0.79 : 0.19	21.6	20nm
0418f	{ a-Si:C ₆₀ Si }	Bedampfen	0.92 : 0.06	26.4	28nm
0418g	{ a-Si Si }	Bedampfen	1 : 0	19.4	19.5nm
0418j	{ C ₆₀ Si }	Bedampfen	0 : 1	32	34.5nm

Bezeichnung	System	Methode	Beschichtungsdauer [min]	Bemerkung
02121294	{ Dicke Au Glas }	Sputtering		Sechs Jahre alt
0513a	{ Dicke Au Si }	Sputtering	60'	
au_ditt1	{ Dicke Au Si }	Bedampfen	50'	Zur Verfügung gestellt von SENTECH
au_ditt2	{ Dicke Au Si }	Bedampfen	50'	Zur Verfügung gestellt von SENTECH
0908a	{ Dicke Au Si }	Sputtering	60'	0 V
0908b	{ Dicke Au Si }	Sputtering	60'	Biaspannung 98V
0909c	{ Au Si }	Sputtering	30'	0 V
0909d	{ Au Si }	Sputtering	15'	0 V

Literaturverzeichnis

- [Abe50a] F. Abelès, J. Phys. Radium **11**, 310 (1950).
[Abe50b] F. Abelès, Ann. De Physique **5**, 596 (1950).
[Alt98] S. A. Alterovitz, B. Johs, Thin solid films **313/314**, 124 (1998).
[Arc57] R. J. Archer, J. Electrochem. Soc. **104**, 619 (1957).
[Arc62] R. J. Archer, J. Opt. Soc. Am. **52**, 970 (1962).
[Arc67] R. J. Archer & C. V. Shank, J. Opt. Soc. Am. **57**, 191 (1967).
[Ard94] H. K. Ardakani, Thin Solid Films **248**, 234 (1994).
[Asp79] D. E. Aspnes, J. B. Theeten, Phys. Rev. Lett. **43**, 1046 (1979).
[Asp80] D. E. Aspnes, E. Kinsborn & D. D. Bacon, Phy. Rev. B **21**, 3290 (1980).
[Azz75] R. M. A. Azzam, A. R. M. Zaghloul & N. M. Bashara, J. Opt. Soc. Am. **65**, 252 (1975).
[Azz79] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light* (North-Holland, Amsterdam, (1979).
[Azz83] R. M. A. Azzam, J. Opt. Soc. Am. **73**, 1080 (1983).
[Bal97] A. R. Bally, K. Prasad, R. Sanjinès, P. E. Schmid, F. Lévy, J. Benoit, C. Barthou, P. Bernalloul, Mat. Res. Soc. Symp. **424**, 471 (1997).
[Bat51] J. B. Bateman & M. W. Harris, Annals New York Academy Sci. **53**, Art. 5, 1064 (1951).
[Bha89] C. S. Bhatia, G. Guthmiller, A. M. Spool, J. Vac. Sci. Tech. **A7** (3) 1298 (1989).
[Bha98] S. Bhattacharyya, C. Cardinaud, G. Turban, J. Appl. Phys. **83**, 4491 (1998).
[Bor59] M. Born & E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press. (1959).
[Bor93] A. Borghesi, A. Sassella, S. Rojas, Thin solid films, **233**, 227 (1993).
[Bos96] S. Bosch, F. Monzonís, E. Masetti, Thin solid films **289**, 54 (1996).
[Bos98] S. Bosch, J. Pérey, A. Canillas, Appl. Opt. **37**, 1177 (1998).
[Bou03] J. Boudaden, R.S-C. Ho, P. Oelhafen A. Schüler, C. Roecker and J.L. Scartezzini, Proceedings of ISES World 2003 Conference, June 14-20, Göteborg, Sweden (2003).
[Bru35] D.A.G. Bruggemann, Ann. Phys. **24**, 636 (1935).
[Bub83] A. Bubenzer, B. Dischler, G. Brandt, P. Koidl, J. Appl. Phys **54**, 4590 (1983).
[Car79] M. Cardona, L. Ley, Photoemission in Solids I+II, Springer, Berlin (1978/79).
[Cel76] J. Celý, Scripta Fac. Sci. Nat. UJEP Brunensis, Physica **6**, 15 (1976).

- [Cha85] D. Charlot & A. Maruani, *Appl. Opt.* **24**, 3368 (1985).
- [Cha91] T. S. Chao, C. L. Lee, T. F. Lee, *J. Electrochem. Soc.* **138**, 1756 (1991).
- [Cho90] S. Chongsawangvirod, E. A. Irene, A. Kalnitsky, S. Tay, J. Ellul, J. Andrews, *J. electrochem. Soc.* **137** (11), 35536 (1990).
- [Cla75] R. A. Clarke, R. L. Tapping, M. A. Hooper, L. Young, *J. Electrochem. Soc.* **122**, 1347 (1975).
- [Cla94] J. P. Clarke, *J. Vac. Sci. Tech. A* **12** (2) 594 (1994).
- [Coh73] R. W. Cohen, G. D. Cody, M. D. Coutts, B. Abeles, *Phys. Rev.* **B8** 3689 (1973).
- [Cor00] G. Corner, R. Boudreau, *J. Opt. Soc. Am. A* **17** 129 (2000).
- [Cue95] R. Cueff, G. Baud, J. P. Besse, M. Jacquet, *Thin solid Films* **266**, 198 (1995).
- [Dem95] F. Demishclis, X. F. Rong, S. Schreiter, A. Tagliferro, C. Demartino, *Diamond Relat. Mat.* **4**, 361 (1995).
- [Det94] J. Dettmann, *Fullerene: die Buckys erobern die Chemie*, Birkhäuser, Basel, (1994).
- [Dir77] A. G. Dirks, H. J. Leamy, *Thin Solid Films*, **47**, 219 (1977).
- [Dit76] R. W. Ditchburn, *Light*. 3rd ed. London: Academic Press 1976.
- [Dit97] G. Dittmar, U. Richter, U. Wielsch, *Manual for Spectraray software for ellipsometers of SE 800 / SE850 and SE900 / SE950 series*. Sentech Instruments GmbH, Berlin, (1997).
- [Dro94] J.-P. Drolet, S. C. Russev, M. I. Boyanov, R. M. Leblanc, *J. Opt. Soc. Am A*, **11**, 3284 (1994).
- [Dru89a] P. Drude, *Ann. Physik* **272**, 532 (1889).
- [Dru89b] P. Drude, *Ann. Physik* **272**, 865 (1889).
- [Dru90] P. Drude, *Ann. Physik* **275**, 481 (1890).
- [Eas88] T. Easwarakhanthan, C. Michel, S. Ravelet, *Surf. Sci.* **197**, 339 (1988).
- [Edl93] S. M. Edlou, A. Smajkiewicz, G. A. Al-Jumaily, *Appl. Optics* **32** (28), 5601 (1993).
- [Ell00] D.E. Ellis, K.C. Mundim, D. Fuks, S. Dorfman, A. Berner, *Mater. Sci. Semicon. Proc.* **3**, 123 (2000).
- [Fau58] J. A. Faucher, G. M. McManus, and H. J. Trurnit, *J. Opt. Soc. Am.* **48**, 51 (1958).
- [Fel89] A. Felske, W. J. Plieth, *Raman spectroscopy of titanium dioxide layers*, *Electrochimica Acta*, **34**, 75 (1989).
- [Fie96] F. Fietzke, K. Goedicke, W. Hempel, *Surf. Coat. Tech.* **86/87**, 657 (1996).
- [Flu98] D. U. Fluckeiger, *J. Opt. Soc. Am. A* **15**, 2228 (1998).
- [For86] A. R. Forouhi, I. Bloomer, *Phys. Rev. B* **34**, 7018 (1986).
- [Fra93] P. Frach, U. Heisig, C. Gottfried, H. Walde, *Surf. Coat. Tech.* **59**, 177 (1993).

- [Gal98] C. G. Galarza, P. P. Khargonekar, N. Layadi, T. L. Vincent, E. A. Rietman, and J. T. c. Lee, *Thin solid Film* **313**, 156 (1998).
- [Gam96] R. Gampp, *Deposition und Charakterisierung von metallhaltigen, amorphen Kohlenwasserstofffilmen zur Anwendung in Sonnenkollektoren*, VDI Verlag, Düsseldorf, (1996).
- [Gas94] B. Gasser, R. Mathys jun., R. Mathys sen., *Zur Oberfläche der Ha-Ti-Implantate*, Wissenschaftlicher Bericht, Dr.h.c.Robert Mathys Stiftung, (1994).
- [Gen00] J. Geng, *Spectral Selective Coatings based on Aluminium Oxide and Related Materials*, Dissertation, Universität Basel, Basel, (2000).
- [Ghe68] M. Ghezzi, *J. Opt. Soc. Am.* **58**, 368 (1968).
- [Gol94] M. G. Goldiner, G. S. Was, L. J. Parfitt, J. W. Jones, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **316**, 941 (1994).
- [Gut99] R.F. Gutterres, M. Argollo de Menezes, C.E. Fellows, O. Dulieu, *Chem. Phys. Lett.* **300**, 131 (1999).
- [Han73] W. N. Hansen, *J. Opt. Soc. Am.* **63**, 793 (1973).
- [Har92] A. W. Harris, B. P. Ludden, D. C. W. Blaikley, *Vacuum* **43**, 143 (1992).
- [Hay64] P. C. S. Hayfield, G. W. T. White, in E. Passaglia, R. R. Stromberg, J. Kruger (eds.), *Natl. Bur. Std. Misc. Publ. 256*, US Government Printing Office, Washington, DC, p.157 (1964).
- [Hea70] O. S. Heavens, *Thin Film Physics*. London Methuen (1970).
- [Heu89] F. M. d'Heurle, J. M. E. Harper, *Thin Solid Films*, **171**, 81 (1989).
- [Ho99] R. S.-C. Ho, *Textabhängige Sprecheridentifikation*, Diplomarbeit, ETH Zürich (1999).
- [Ho04] R. S.-C. Ho, *The European Physical Journal Applied Physics*, **26** (3), 161 (2004).
- [Hol67a] D. A. Holmes, *Appl. Opt.* **6**, 168 (1967).
- [Hol67b] D. A. Holmes & d. L. Feucht, *J. Opt. Soc. Am.* **57**, 466 (1967).
- [Hos97] N. Hosaka, T. Sekiya, M. Fujisawa, C. Satoko, S. Kurita, *J. Phys. Soc. Japan* **66**, 877 (1997).
- [Hüf95] S. Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy*, Springer, Berlin (1995).
- [Ibr71] M. M. Ibrahim & N. M. Bashara, *J. Opt. Soc. Am.* **61**, 1622 (1971).
- [Ind87] G. Indlekofer, *Systematics in the electronic structure of polyvalent liquid metals determined by electron spectroscopy*, Dissertation, Universität Basel, Basel (1987).
- [Jel93] G. E. Jellison, *Thin solid films*, **234**, 416 (1993).
- [Jel97] G. E. Jellison, F. A. Modine, L. A. Boatner, *Optics Letters* **22**, 1808 (1997).

- [Jel03] G.E. Jellison, Jr., L.A. Boatner, J. D. Budai, B. S. Jeong, D. P. Norton, *J. Appl. Phys.* **93**, 9537 (2003).
- [Jun93] T. Jung, A. Westphal, *Surf. Coat. Tech.* **59**, 171 (1993).
- [Kai92] U. Kaiser, N. Kaiser, P. Weissbrodt, U. Mademann, E. Hacker, H. Müller, *Thin Solid Films* **217**, 7 (1992).
- [Kal89] A. Kalnitsky, S. P. Tay, J. P. Ellul, S. Chongsawangvirod, J. Andrews, E. A. Irene, *J. electrochem. Soc.* **137**, 234 (1989).
- [Kih97] L. Kihlberg, I. Olovsson, *Acta Cryst.* **A53**, 103 (1997).
- [Kir83] Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi, *Science* **220**, 671 (1983).
- [Kof83] P. Kofstad, *Nonstoichiometry, diffusion, and electrical conductivity in binary metal oxides*. John Wiley & Sons, Inc., New York (1983).
- [Koi87] P. Koidl, P. Oelhafen (Ed.) *Amorphous Hydrogenated Carbon Films*, Les Editions de Physique, Paris (1987).
- [Koi89] P. Koidl, Ch. Wild, B. Dischler, J. Wagner, M. Ramsteiner, in *Properties and characterization of amorphous carbon films* (J.J. Pouch, S. A. Alterovitz, Eds.) Trans Tech Publications, Zürich, p. 41 (1989).
- [Krä90a] W. Krätschmer, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Chem. Phys. Lett.* **170** 167 (1990).
- [Krä90b] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Nature* **347** 354 (1990).
- [Kro85] W. Kroto, J. R. Heath, S. C O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **318**, 162 (1985).
- [Leb39] C. E. Leberknight, B. Lustman, *J. Opt. Soc. Am.* **29**, 59 (1939).
- [Lee97] S. Lee, B. H. Park, S. G. Oh, *J. Korean Phys. Soc.* **31**, 352 (1997).
- [Lek90] J. Lekner, *J. Opt. Soc. Am. A* **7**, 1875 (1990).
- [Lew64] A. E. Lewis, *J. Electrochem. Soc.* **111**, 1007 (1964).
- [Luc48] F. A. Lucy, *J. Chem. Phys.* **16**, 167 (1948).
- [Mac01] H. A. McCleod, *Thin-film optical filters*. Adam Hiliger Ltd., Bristol (2001).
- [Mar00] J. C. Martínez-Antón, *Appl. Opt.* **39**, 4557 (2000).
- [Max04] J. C. Maxwell-Garnett, *Phil. Trans. Roy. Soc.* **203** 385 (1904).
- [Mcc63] F. L. McCrackin, *Journal of Research of the National Bureau of Standards. A.* **67A**, 363 (1963).
- [Mcc69] F. L. McCrackin, *A Fortran program for analysis of ellipsometer measurements*, Natl. Bur. Std., Technical Note 479 (U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., (1969).
- [Mck91] D. R. Mckenzie, D. A. Muller, B. A. Pailthorpe, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 773 (1991).

- [Mel89] C. A. Melendres, A. Narayanasamy, V. A. Maroni, R. W. Siegel, *Raman spectroscopy of nanophase TiO₂*, J. Mater. Res., **4**, 1246 (1989).
- [Mun98] K.C. Mundim, T.J. Lemaire, A. Bassrei, Physica A **252**, 405 (1998).
- [Nil74] P.-O. Nilsson, Solid State Phys. **29** 139 (1974).
- [Oga94] K. Ogata, J. F. D. Cubaci, F. Fujimato, J. Appl. Phys. **76**, 3791 (1994).
- [Old67] W. G. Oldham, J. Opt. Soc. Am. **57**, 617 (1967).
- [Old68] W.G. Oldham, *A Numerical Technique for the Analysis of Lossy films*, Proceedings of the Symposium on Recent Developments in Ellipsometry. (1968).
- [Ori97] X. Orignac, H. C. Vasconcelos, X. M. Du, R. M. Almeida, J. Sol Gel Sci & Tech. **8**, 1 (1997).
- [Pal85] E. D. Palik, ed., *Handbook of Optical Constants of Solids* (Academic, San Diego, Calif., (1985).
- [Pan89] T. M. Pang, M. Scherer, B. Heinz, C. Williams, G. N. Chaput, J. Vac. Sci. Tech. **A7** (3), 1254 (1989).
- [Par95] L. Parfitt, M. G. Goldiner, J. W. Jones, G. S. Was, J. Appl. Phys. **77** (7) 3029 (1995).
- [Pel69] Pells, G. P. & Shiga, M. J. Phys. **C2**, 1835 (1969).
- [Pol91] F. C. M. Van de Pol, F. R. Blom, T. J. A. Popma, Thin Solid Films **204**, 349 (1991).
- [Pol98] V.G. Polovinkin and S.N. Svitashcheva, Thin Solid Films **313-314**, 128 (1998).
- [Pol00] Polgar, M. Fried, T. Lohner, I. Barsony, Surf. Sci. **457**, 157 (2000).
- [Pou89] J. J. Pouch, S. A. Alterovitz (Ed.). *Properties and characterization of amorphous carbon films*, Trans Tech Publications, Zürich (1989).
- [Rad93] M. Radecka, K. Zahrzewska, H. Czternastek, T. Stapinski. Appl. Surf. Sci., **65/66**, 227 (1993).
- [Rei72] A. R. Reinberg, Appl. Opt. **11**, 1273 (1972).
- [Rei02] P. Reinke, P. Oelhafen, S. Christiansen, Surf. Sci. **507-510**, 630 (2002).
- [Ren91] S. L. Ren, Y. Wang, A. M. Rao, E. McRae, J. M. Holden, T. Hager, K. Wang, W.-T Lee, W.-F. Ni, J. Selegue, P. C. Erlund, Appl. Phys. Lett. **59** 2678 (1991).
- [Rob92] J. Robertson, Surf. and Coat. Tech. **50**, 185 (1992).
- [Rob94] M. S. Al-Robaee, M. Ghanashyam Krishna, G. N. Subanna, K. Narasimha Rao, S. Mohan, J. Mat. Res. **9** (10) 2668 (1994).
- [Rot49] A. Rothen, & M. Hanson, Rev Sci Instr. **20**, 66 (1949).
- [Rot57] A. Rothen, & M. Hanson, Rev Sci Instr. **28**, 283 (1957).

- [Rot87] T. Roth, K. H. Kloos, E. Broszeit, *Thin Solid Films* **153**, 123 (1987).
- [Sax65] A. N. Saxena, *J. Opt. Soc. Am.* **52**, 1061 (1965).
- [Sch96] M. Schubert, B. Rheinlander, J. A. Woollam, B. Johs, C. M. Herzlinger, *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 875 (1996).
- [Sch97] J. M. Schneider, M. D. Sproul, R. W. J. Chia, M. S. Wong, A. Matthews, *Surf. Coat. Tech.* **96**, 262 (1997).
- [Sch00a] A. Schüler, *Nanocomposite and nanocrystalline thin films for thermal solar energy applications- deposition and physical characterization*, Dissertation, Universität Basel. Basel (2000).
- [Sch00b] A. Schüler, C. Ellenberger, P. Oelhafen, C. Haug & R. Brenn, *J. Appl. Phys.* **87**, 9, 4285 (2000).
- [Sch03] A. Schüler, C. Roecker, J.L. Scartezzini, J. Boudaden, I.R. Videnovic, R. S-C. Ho and P. Oelhafen, *Interference filters for colored glazed thermal solar collectors*, Proceedings of ISES World 2003 Conference, June 14-20, Göteborg, Sweden (2003).
- [She80] P. Sheng, *Phys. Rev. B* **22** 6364 (1980).
- [She81] P. Sheng, *Opt. & Las. Tech.* 253 (1981).
- [Shu96] G. Shuwen, G. Gustafsson, O. J. Hagel, H. Arwin, *Appl. Opt.* 35 (10) (1996).
- [Sie90] K. L. Siefeling, G. L. Griffin, *J. Electrochem. Soc.* **137**, 1206 (1990).
- [Sil97] S. R. P. Silva, J. Robertson, G. A. J. Amaratunga, B. Rafferty, L. M. Brown, J. Schwan, D. F. Franceschini, G. M. Mariotto, *J. Appl. Phys.* 81, 2626 (1997).
- [Sit98] C. E. Sittig, *Charakterisierung der Oxidschichten auf Titan und Titanlegierungen sowie deren Reaktionen in Kontakt mit biologisch relevanten Modellösungen*, Eidgenössische Technische Hochschule ETHZ, Zürich (1998).
- [Smi86] M. K. Smit, G. A. Acket, C. J. Van Der Laan, *Thin Solid Films* **138**, 171 (1986).
- [So72] S. So and K. Vedam, *J. Opt. Soc. Am.* **62**, 16 (1972).
- [Sop01] <http://www.sspectra.com/sopra.html>
- [Spr95] W. D. Sproul, M. E. Graham, M. S. Wong, S. Lopez, D. Li, R. A. Scholl, *J. Vac. Sci. Tech. A* **13** (3) 1188 (1995).
- [Sro88] D. J. Srolovitz, A. Mazor, B. G. Bukiet, *J. Vac. Sci. Tech. A* **6**, 2371 (1988).
- [Svi96] S. N. Svitashva, *Optoelectron. Instrum. Data Process.* 4, **80** 108 (1996).
- [Szu87] Szu, R. Hartley, *Phys. Lett. A* **122**, 157 (1987).
- [The89] A. J. Thelen, *Design of Optical Interference Coatings*, McGraw Hill, New York (1989).
- [Thè70] M.-L. Thèye, *Phy. Rev. B* **2**, 3060 (1970).

- [Thi95] J.-U. Thiele, *Zur Charakterisierung von lithiumhaltigen amorphen Kohlenwasserstoffschichten*, Dissertation, Universität Basel, Basel (1995).
- [Tho77] J. A. Thornton, *Ann. Rev. Mat. Sci.* **7**, 239 (1977).
- [Tho86] J. A. Thornton, *J. Vac. Sci. Tech. A* **4**, 3059 (1986).
- [Tho89] J. A. Thornton, D. W. Hoffman, *Thin Solid Films*, **171**, 5 (1989).
- [Tiw00] T. Tiwald, M. Schubert, *Proc. SPIE* **4103**, 19 (2000).
- [Tro29] L. Tronstad, *Zeitschrift der Physikalischen Chem. A* **142**, 241 (1929).
- [Tro31] L. Tronstad, *The Royal Norwegian Scientific Society Report No. 1*, 1151 (1931).
- [Tro33] L. Tronstad, *Trans. Faraday Soc.* **29**, 502 (1933).
- [Tsa87] H. Tsai, D. B. Bogy, *J. Vac. Sci. Tech. A* **5**, 3287 (1987).
- [Tsa96] Tsallis, D.A. Stariolo, *Physica A* **233**, 395 (1996).
- [Urb93] F. K. Urban III, *Appl. Opt.* **32**, 2339 (1993).
- [Van86] J. Vamfleteren, A. Van Calster, *Thin Solid Films* **138**, 171 (1986).
- [Vas60] A. Vasicek, *Optics of Thin Films*, North-Holland, New York, (1960).
- [Ved68] K. Vedam, R. Rai, F. Lukes, R. Srimvasan, *J. Opt. Soc. Am.* **58**, 526 (1968).
- [Vid03] I. R. Videnović, *Surface characterization of amorphous hydrogenated carbon thin films containing nanoclusters of noble metals*, Dissertation, Universität Basel, Basel, (2003).
- [Vis01] T. M. R. Viseu, B. Almeida, M. Stchakovsky, B. Drevillon, M. I. C. Ferreira, J. B. Sousa, *Thin Solid Films* **401**, 216 (2001).
- [Vuo89] P. Vuoristo, T. Mäntylä, P. Kettunen, in E. Broszeit, W. D. Münz, H. Oechsner, K. T. Rie, G. K. Wolf (eds.), *Plasma Surface Engineering*, **1**, 60 (1989).
- [Was30] E. W. Washburn, *International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology*. McGraw-Hill, (1930).
- [Win46] A.B. Winterbottom, *Trans. Faraday Soc.* **42**, 487 (1946).
- [Win55] A.B. Winterbottom, *Optical Studies of Metal Surfaces*, Royal Norwegian Scientific Society Report No. 1, published by F. Bruns. Trondheim. Norway. (1955).
- [Win89] B. Window, K. H. Müller, *Thin Solid Films*, **171**, 183 (1989).
- [Xia97] Y. Xiang, D.Y. Sun, W. Fan, X.G. Gong, *Phys. Lett. A* **233**, 216 (1997).
- [Yam75] T. Yamaguchi and H. Takahashi, *Appl. Opt.* **14**, 2000 (1975).
- [Yol67] T. Yolken, R. Waxler & J. Kruger, *J. Opt. Soc. Am.* **57**, 283 (1967).
- [Yor83] Y. Yoriome, *J. Opt. Soc. Am.* **73**, 888 (1983).

- [You89] M. S. A. Youself & A. R. M. Zaghoul, J. Opt. Soc. Am. A **6**, 355 (1989).
- [Yu03] Z.-X. Yu and D. Mo, Thin Solid Films **425**, 108 (2003).
- [Zag99] A.-R. M. Zaghoul and M. S. A. Yousef, J. Opt. Soc. Am. A **16**, 2029 (1999).

Lebenslauf

1. Angabe zur Person

Familienname:	Ho	Geburtsdatum:	29. Dez 1966
Vorname:	Shui-Ching	Geburtsort:	Hongkong (Kronkolonie, Grossbritannien)
Zusatzname:	Rerrario	Heimatort:	Hongkong (Spezielle Administrative Region, Volksrepublik China)
Geschlecht:	männlich		

2. Schulen

1972-1979	Primarschulung bei „Alliance Primary School, Sheung Shui, Hongkong“
1979-1984	Sekundarschulung bei „La Salle College“, absolviert mit „Hong Kong Certificate of Examination“
1984-1987	„Pre-University“ Schulung bei „La Salle College, Hongkong“ und „Li Ka Shing College, Hongkong“, absolviert mit „Advanced Level Examination of Hong Kong“

3. Universitätsstudium

1988-1991	Studium an „University of Hong Kong“ absolviert mit „Bachelor of Arts“, Hauptfach Sprachwissenschaft
1994-1999	Physikstudium an der Universität Bern, Basel, Innsbruck und der Eidgenössischen Technischen Hochschule (ETH) Zürich
Apr 1998-Mär 1999	Schweizerische Mobilität zur Abteilung der Elektrotechnik, ETH
Dez 1998-Mär 1999	Diplomarbeit zum Thema „Textabhängige Sprecheridentifikation“, ETH
Dez 1999	Abschluss mit Diplomexamen in Experimenteller Physik (Hauptfach: Physik; Nebenfach: Mathematik, Wahlfach: Astronomie)
2000-2004	Doktoratstudium der Experimentellen Physik bei Herrn Prof. Dr. P. Oelhafen an der Philosophischen Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Basel.

4. Berufstätigkeit

1991– 1994	-- Englisch Lehrer bei „Hsin Cheng Middle School“, „Kap Yan Directors' College“, „Adult Education Section, Little Flower's Evening School“
	-- Sprachlehrer der Phonetik- Deutsch- und Französischkurse bei „Yuen Long Town Hall, Hongkong“
Sep 1996–Apr 1997	Ersatzlehrer für verschiedene Schule in Hongkong
1991-1999	freiberuflicher Übersetzer
Sep 1998	Technischer Mitarbeiter (11 Wochen) bei „Brookhaven National Laboratory, New York“
2000-2003	-- wissenschaftlicher Mitarbeiter im Rahmen des Doktoratstudiums in Experimenteller Physik bei der Forschungsgruppe von Herrn Prof. Dr. P. Oelhafen im Institut für Physik, Universität Basel