

dc_726_13

Spektroellipszometria a mikroelektronikai rétegminősítésben

MTA doktori értekezés

Petrik Péter

Magyar Tudományos Akadémia

Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

Budapest, 2014

dc_726_13

Tartalomjegyzék

1. Irodalmi áttekintés	3
1.1. Az ellipszometria fejlődése	3
1.2. Nanoszerkezet-kutatás ellipszometriával	4
2. Kísérleti módszerek	7
2.1. Ellipszometria	7
2.2. A dielektromos függvény parametrizálása	9
2.3. Ionimplantáció	12
2.4. Ionsugaras analitika	13
3. Mélységprofilozás	15
3.1. Továbbfejlesztett Gauss profil	17
3.2. Átlapoló dupla profil	19
3.3. Eltemetett getterező üregprofil	22
3.4. A dielektromos függvény modellezése	27
4. Nanokristályos félvezetők optikai modellezése	31
4.1. Hagyományos marással készült pórusos szilícium rétegek	32
4.2. Változó nanoszemcse-méretű pórusos szilícium rétegek	34
5. Ultravékony rétegek vizsgálata	43
5.1. Eltemetett diffúziós gát	44
5.2. Ultravékony oxidok szilícium karbidon	48
6. Vegyület félvezetők ionimplantációja	57
6.1. SiC ionimplantációja és hőkezelése	57
6.2. Roncsolt SiC szerkezet vizsgálata nagy foton energiákon	61
6.3. CdTe ionimplantációja	67
6.3.1. Implantáció Xe^+ ionokkal	67
6.3.2. Implantáció Bi ionokkal	70
7. Összetett dielektrikum rétegek vizsgálata	75
7.1. $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ vékonyrétegek optikai tulajdonságai	75
7.2. $\text{Sr}_x\text{Bi}_y\text{Ta}_2\text{O}_9$ vékonyrétegek optikai tulajdonságai	77
7.3. CN_x rétegek szerkezete és dielektromos függvényének parametrizálása	80
8. Összefoglalás	85
8.1. Tézisek	85
8.2. Hasznosulás	89

Jelölések és rövidítések	91
Köszönetnyilvánítás	93
Hivatkozások	106

Bevezetés

Az első ellipszometriainak tekinthető mérést Paul Drude végezte a 19. század végén [1] fémek felületi oxidjain, amelyben felírta az alapvető egyenleteket és az ellipszometriai szögek ma is használt jelölését. Az ellipszometria fejlődésének felgyorsulásához mégis az 1980-as évekig kellett várni¹, ugyanis ekkorra vált a kiértékelésekhez és az automatikus forgóelemes hardver vezérléséhez elengedhetetlenül szükséges számítástechnikai háttér a mikroszámítógépek fokozatos elterjedése folytán széles körben megfizethetővé [4, 5]. Az ellipszometria fejlődése azóta is töretlen, ami nem csak az ellipszometriai konferenciák hallgatóságának, hanem az ellipszometriával foglalkozó közlemények számának növekedésében is lemérhető. Azóta jelentős fejlemény, hogy az ellipszometria kulcsszó a címből egyre inkább átkerül a kivonatba és a cikk szövegébe. Ez azt jelenti, hogy a kutatás tárgya már nem csak a módszer fejlesztése hanem egyre inkább az alkalmazása is. Emellett azonban számos területen folynak fejlesztések mind a hardverrel mind a kiértékelési módszerekkel kapcsolatban, és mára az ellipszometria a gyors, olcsó, nagy érzékenyséű és roncsolásmentes mikroelektronikai rétegminősítés egyik legfontosabb módszere.

Ez az értekezés a PhD dolgozat megírása óta elért, főként metodikafejlesztési eredményeimet foglalja össze. A dolgozat 18 cikk anyagát dolgozza fel, amelyekből 17-nek első szerzője vagyok. A 2006-ig elért eredményeimért a 4. Nemzetközi Ellipszometriai Konferencián alapított Drude díj első kitüntetettje lehettem.² 2004-ben én voltam a második, aki a 2003-ban alapított posztdoktori MFA-díjat megkapta.³ 2010-re az MFA Ellipszometria Laboratórium vezetésével egy Európai Unió projekt keretében akkreditált státuszt kapott.⁴

A tematikai egységesség kedvéért a dolgozathoz kimaradt számos jelentős eredmény. Többek között a bioellipszometria téma, amelyet közel öt éve kezdtünk el művelni hallgatóimmal. Már az első években számos szép eredmény született: a cikkeken és előadásokon túl [6, 7, 8, 9] Kozma Péter PhD Hallgatói Díjat⁵ nyert az Európai Anyagtudományi Társulat tavaszi konferenciáján Strasbourban,⁶ Németh Andrea pedig 2011-ben első lett a XXX. Tudományos Diákköri Konferencia országos döntőjében. A témában már számos diplomamunka és egy PhD dolgozat is született.

¹A SOPRA 1983-ban kezdett el ellipszométereket árulni, a Woollam pedig 1987-ben alakult. 1987-ben jelentek meg a piacon az első spektroszkópiai ellipszométerek. P. S. Hauge az IBM-nél 1973-ban épített forgó elemes ellipszométert [2], D. E. Aspnes pedig 1975-ben építette meg az első spektroszkópiai ellipszométert [3].

²Ezt a díjat 2004 óta minden nemzetközi ellipszometriai konferencián egyetlen fiatal kutató kapja. Annak ítélik oda, akinek a hattergő, a téma legjelesebb szakembereiből álló zsűri megítélése szerint legjelentősebb a hozzájárulása az ellipszometria fejlesztéséhez és alkalmazásához. (<http://www.mfa.kfki.hu/~petrik/drude-petrik.pdf>)

³<http://www.mfa.kfki.hu/>

⁴<http://www.ellipsometry.hu>

⁵Graduate Student Award

⁶Spring Meeting of the European Materials Research Society, 2008 Strasbourg.

Vizsgálataim gerincét a 90-es évek közepétől Lohner Tivadar és Fried Miklós kutatásaihoz kapcsolódva az ionimplantált és nanokristályos szerkezetek vizsgálata jelenti. Ez kiegészült (a bioellipszometriai kutatások mellett) ultra-vékony és magas dielektromos állandójú vékonyrétegek, felületi érdesség, rendezett felületi struktúrák, hardverfejlesztés és számos további, más laboratóriumokkal kooperációban végzett témával. Kezdetben a kutatási területeink jelentős része a mikroelektronikához kapcsolódott, mert ez a technológia volt képes optikai minőségű vékonyréteg szerkezetek előállítására, másrészt a szilícium félvezető rétegek szerkezeti tulajdonságai nagy érzékenységgel mérhetők az optikai hullámhossztartományban. A számos sikeresen lezárt projektben olyan intézetekkel és cégekkel dolgoztunk együtt, mint az Intel, ST Microelectronics, AIXTRON, Fraunhofer Intézet, SOPRA, SEMILAB, OSRAM, Firs Solar. Jelenleg a kutatásaink hangsúlya áttolódik a szenzorika, napelemtechnológia és egyéb "egzotikus" szerkezetek vizsgálatára. A berendezésfejlesztés mellett az ellipszometria fontos fejlődési iránya az egyre összetettebb szerkezetek vizsgálata. Ez az egyébként is komplex optikai modellek további fejlesztését és verifikálását teszi szükségessé.

Az irodalmi áttekintés és a kísérleti módszerek bemutatása után a dolgozat egy-egy fejezete egy-egy tézispont anyagát fejti ki részletesen. Ezek az összefoglalásban felsorolt cikkekre épülnek. Ugyanitt találhatóak a dolgozat tézispontjai. Az értekezésben az egyes és többes szám első személy használatával igyekeztem elkülöníteni a saját és szerzőtársaimmal közös eredményeket.

1. fejezet

Irodalmi áttekintés

1.1. Az ellipszometria fejlődése

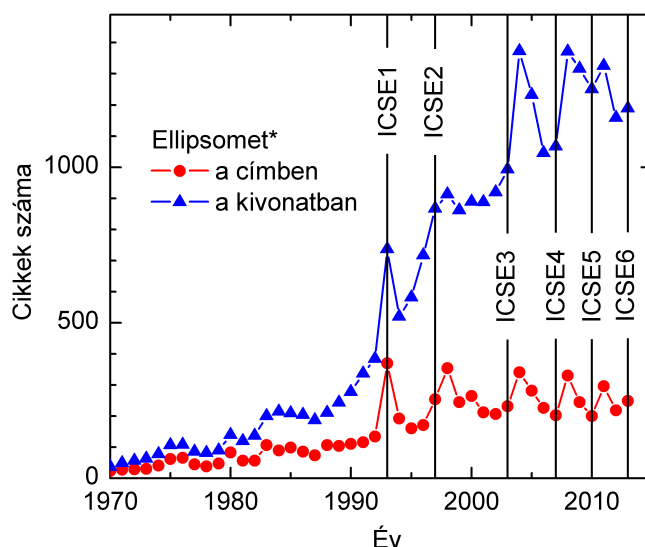
Bár az ellipszometria elmélete – legfőképpen Paul Drude munkásságának köszönhetően [1] – már a 19. század végén ismert volt, a módszer fejlesztése majd alkalmazása rendre az 1970-es illetve 1990-es években gyorsult fel. Az ellipszometriai mérés technika fejlesztésének két mérföldköve az automatikus polarizáció-modulált [10, 11, 12], majd a spektroszkópiai berendezések [3, 13, 14] kifejlesztése volt. Mindkét fejlesztés úttörője D. E. Aspnes. Ezen áttörések ellenére a fejlődés fő motorja az 1990-es évek elején a személyi számítógépek elterjedése és ezáltal a számítási kapacitás elérhető áron való beszerezhetősége volt – az ellipszometriai mérések kiértékelése ugyanis az esetek döntő többségében csak számítás-igényes numerikus módszerekkel oldható meg, valamint a forgó elemes automatizált mérés végrehajtásához is szükség volt a mikroszámítógépekre. Ennek is köszönhető, hogy ugyanebben az időszakban kereskedelmi forgalomban is kezdtek megjelenni az első spektroszkópiai ellipszométerek. Az úttörők itt a SOPRA, a Woollam, majd a Jobin Yvon és a Sentech cégek voltak. Jelenleg számos egyéb szereplővel is találkozhatunk a piacon. A SOPRA céget néhány évvel ezelőtt felvásárolta a magyar SEMILAB Zrt., amely így az ellipszometriai mérés technikában az egyik meghatározó piaci szereplő lett.

Az 1.1. ábrán azon cikkek számának alakulása látható 1970-től kezdődően, amelyek a címben vagy a kivonatban tartalmazzák az "ellipsomet" karaktorsorozatot¹. Az ellipszometriára vonatkozó keresőszavakat a címben illetve a kivonatban tartalmazó cikkek számának (az 1.1. ábrán látható görbéknek) a különbsége olyan közleményekre utal, amelyek már nem annyira az ellipszometria fejlesztésével, mint inkább annak alkalmazásával foglalkoznak. Ezen alkalmazások számának növekedésére utal a két görbe között az 1990-es évek elejétől rohamosan kinyíló olló.

Az ellipszometriai konferenciákat a vártan megfelelően a publikációkban jelentkező csúcsok követik. 1993-ban ez a csúcs a konferencia évébe esett, mert akkor a konferencia februárban került megrendezésre, így a konferencia kötet még ugyanabban az évben megjelent.

A 6. Nemzetközi Ellipszometriai Konferencia 2013-ban közel 300 résztvevővel került megrendezésre Japánban. A konferencia tematikája jól tükrözi az aktuális trendeket: THz ellipszometria, vékonyrétegek és valós idejű mérés, nanoszerkezetek és plazmonok, Müller mátrix ellipszometria és anizotropia, ipari kutatások, szerves anya-

¹vagyis találatot adnak az "ellipsometry", "ellipsometric", "ellipsometer" és hasonló szavakra egyaránt



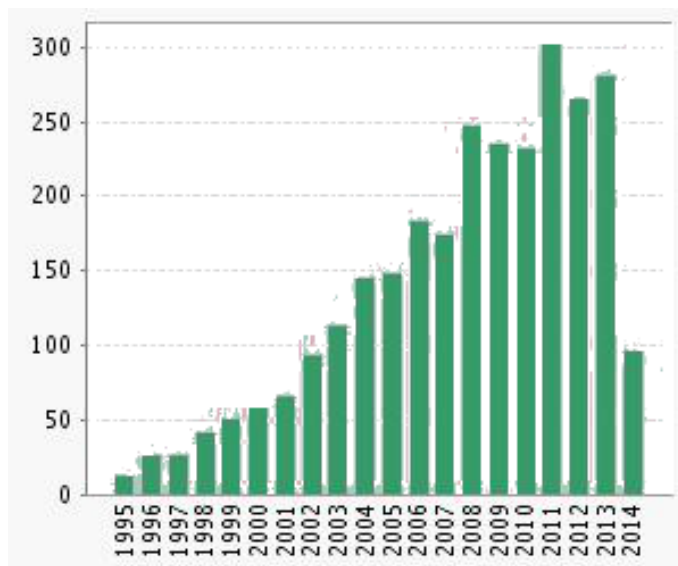
1.1. ábra. Az "ellipsomet" karaktersorozatot a címben vagy a kivonatban tartalmazó cikkek száma 1970 óta (forrás: <http://www.scopus.com>). Az ICSE1..ICSE6 (International Conference on Spectroscopic Ellipsometry) rövidítésekkel jelölt években kerültek megrendezésre a nemzetközi ellipszometria konferenciák.

gok és alkalmazásaik, nanoanyagok és nanofelületek, félvezető alkalmazások, napelem alkalmazások, metaanyagok, biológiai anyagok, anyagtudomány és dielektromos függvény. A konferencián tartott beszédben D. E. Aspnes kiemelte a forgó kompenzátoros alkalmazásokat, a hullámhossztartomány kiterjesztését, a laterális térképezést és képalkotást (ezen a területen kutatócsoportunk jelentős saját fejlesztésekkel rendelkezik divergens fényforrású térképező ellipszometria terén [15]), a Müller mátrix ellipszometriát, a valós idejű alkalmazásokat, a fényszórás mérést, a biológiai és anizotróp minták mérését [16].

1.2. Nanoszerkezet-kutatás ellipszometriával

Az ellipszometria fejlődése a nanoszerkezet kutatásokban is töretlen az utóbbi húsz évben. Erre becslést kaphatunk a tudományos adatbázisok fentiekhez hasonló lekérdezésével. A "nano" és "ellipso" karaktersorozatokat egyaránt tartalmazó cikkek számának alakulását mutatja az 1.2. ábra, amely amellett, hogy ugyancsak tartalmazza az ellipszometria konferenciák hozományaként megjelenő csúcsokat, töretlen fejlődést mutat napjainkig. A bemutatott időszak előtt és kezdetekor – ahogy ezen dolgozatban is – az ellipszometriát még többnyire mikroelektronikai vonatkozású vékonyrétegek vizsgálatára alkalmazták². Ennek oka, hogy abban az időben megfelelő anyagi és szerkezeti minőséget még csak ebben az iparágban tudtak előállítani – illetve megfordítva: ez volt az a kutatási és ipari terület, ahol igény volt mikron alatti struktúrák geometriai és anyagi tulajdonságainak nagy érzékenységgű vizsgálatára. Azóta az ellipszometria – megtartva ezen kutatási terület fontosságát – az előző fejezetben a 6. Ellipszometria Konferencia tematikája kapcsán bemutatott számos terület irányába továbbfejlődik – folyamatosan változó és alkalmazkodó módon. A nanoszerkezet kuta-

²A processzor és memória lapkák gyártásának több mint 200 technológiai lépése során több tíz alkalommal végeznek a szeleteken ellipszometriai ellenőrző vizsgálatot.



1.2. ábra. Az "nano" és "ellipso" karaktersorozatot egyaránt tartalmazó cikkek számának alakulása 1995 óta.

tás ellipszometriai vonatkozásával kapcsolatban számos hasznos információ található a NanoCharm projekt honlapján [17].

Általánosságban elmondható, hogy az ellipszometriai hardverek kiforrottsága messze túlmutat a modellezési módszerek fejlettségén. A Ψ és Δ ellipszometriai szögeket bármelyik gyártó ellipszométerével 0.05 foknál nagyobb pontossággal meg lehet határozni, ami nanométer alatti rétegvastagság-érzékenységet eredményez. Ezzel szemben az anyag és rétegszerkezetek modellezése visszatérő és máig egyre növekvő probléma, különösen az anyagrendszerek és struktúrák komplexitásának folyamatos növekedése miatt.

A dolgozatban bemutatott eredmények főként ilyen modellfejlesztések abból a célból, hogy az ellipszometria módszerével a mintákról szerezhető információk mennyiségét és megbízhatóságát növeljük, valamint ezek alapján a mintakészítést optimalizálhassuk. A mélységprofilozás, a nanokristályos félvezetők modellezése, az ultra-vékony rétegek vizsgálata, a vegyület félvezetők ionimplantációja valamint az összetett dielektrikum rétegek vizsgálata mind olyan témák, melyek nem csak a dolgozat gerincét adó közlemények írása idején, hanem ma is számos kérdést és megoldatlan problémát vetnek fel a mikroelektronikában és más alkalmazásokban is. A bemutatott eredmények döntő többsége alkalmazott kutatási projektek keretében született olyan ipari partnerek bevonásával, mint az Intel, a kék LED-ek gyártásában kulcsfontosságú fém-organikus kémiai gőzfázisú rétegleválasztás (MOCVD) vezető berendezésgyártója, az AIXTRON, vezető európai mikroelektronikai vállalatok (ST Microelectronics, Infineon), vezető félvezetőipari mérés-technikai cégek, mint a SOPRA vagy a SEMILAB.

Mivel az ellipszometria a felület közeli rétegek vastagságát nanométeres érzékenységgel képes mérni, jól felhasználható mélységprofilozásra. Ionimplantált félvezetők esetében különösen nagy érzékenység érhető el, mert a beérkező ionok roncsoló hatása következtében megváltozó kristályszerkezet nagy mértékben befolyásolja az anyag elektronszerkezetét, és ezáltal az optikai tulajdonságait is az általunk vizsgált hullámhossztartományban. Ezt a tényt már az 1990-es évek elején felismerték, amikor az ionimplantáció által keltett roncsoltságot (elsőként Lohner Tivadar kollégám [18, 19, 20])

és annak mélységfüggését (K. Vedam [21] és J. Vanhellemont [22]³) határozták meg, amit Fried Miklós csatolt fél-Gauss [23, 24], W. Fukarek pedig hibafüggvény közelítésekkel [25, 26] fejlesztettek tovább. Én ezeket az eljárásokat tökéletesítettem a profilt a meredekebb tartományokban jobban közelítő modellel [27, 28].

A kristályszerkezet változására a fenti ionimplantációs vizsgálatokban kihasznált érzékenység nanokristályos félvezetők ellipszometriai vizsgálatában is jelentkezik. A nanokristályok mérete és a szemcsehatárokon bekövetkező elektronszóródás jelentős mértékben megváltoztatják az optikai tulajdonságot, ami ugyancsak nagy érzékenységhez vezet. A nanokristályos félvezetők ellipszometriai modellezésével kapcsolatos legújabb eredményeket egy-egy frissen megjelent könyvfejezetben [29] és cikkben [30] foglaltam össze. A 4. fejezetben a nanokristályos félvezetők dielektromos függvényének modellezésével kapcsolatos eredményeimet összegzem, valamint ezen modellek alkalmazását mikroelektronikai és egyéb nanostruktúrák mérésére. Az ultra-vékony rétegek vizsgálata kezdetben főként a nano-érdesség [14], határfelületek [31], a felületi szennyezettség [32] illetve vékonyrétegek épülésének [33] feltérképezését jelentette, majd a mikroelektronika és a leválasztási módszerek (pl. atomi réteg leválasztás [ALD]) fejlesztésével számos alkalmazás előtérbe került [34, 7, 35, 36, 37]. A polikristályos és ion implantált szilícium vizsgálata során ugyancsak számos vezető európai ipari partnerrel (ST Microelectronics, Infineon) együttműködtünk.

A szilícium mellett a vegyület félvezetők optikai tulajdonságai is nagy mértékben függnak a kristályszerkezeti változásoktól. A kristályszerkezet szisztematikus és kontrollálható megváltoztatásának mindmáig egyik legprecízebb módja az ionimplantáció. Nem véletlen, hogy a vegyület félvezetők korai ellipszometriai vizsgálatainak jelentős része is az ionimplantációhoz kötődik [38, 39, 40]. A dielektromos függvény modellezésére felvonultatott eszköztár itt is hasonló a szilíciuméhoz [41, 30]. Nagy előny, hogy az elektron sáv szerkezet direktátmeneteihez tartozó abszorpciós csúcsok többnyire az ellipszometria által könnyen elérhető hullámhossztartományba esnek [42]. A széles tiltott sávú félvezetők esetében a hullámhossz tartomány kiterjesztése [43] vagy szinkrotron forrás használata jelentett előrelépést (6. fejezet).

A dielektrikum szerkezetek ellipszometria vizsgálata ugyancsak nagy hagyományokkal rendelkezik. Az ellipszometria legfontosabb alkalmazása sokáig a termikusan növesztett SiO₂ rétegek mérése volt⁴ [44]. Bár ezen rétegek törésmutató diszperziója az optikai tartományban alacsony, vagyis a félvezetők esetében az anyagszerkezet meghatározását érzékennyé tevő direkt átmenetek abszorpciós csúcsai nem jelennek meg a vizsgált hullámhossztartományban⁵, a határfelületek minősége [31], a felületi nanoérdesség [14, 30], az optikai sűrűség és az ebben a dolgozatban ismertetett számos lezármaztatott fizikai tulajdonság [46, 47] meghatározható a dielektromos függvény változásából.

Az egyes tárgyalt témákhoz szorosabban kapcsolódó irodalmi hivatkozásokat a vonatkozó fejezetekben tárgyalom.

³J. Vanhellemont szellemes megjegyzése szerint ezen a területen az ellipszometria mint „szegény ember RBS-e” használható.

⁴A mikroelektronikában máig ez és a különböző dielektrikum rétegek vastagságmérése a legfontosabb alkalmazási terület.

⁵A nagy foton energiákon (9 eV-ig, ld. [45]) végzett szinkrotron ellipszometriai méréseink során már a SiO₂ esetében is figyelembe kellett vennünk az abszorpciós csúcsot.

2. fejezet

Kísérleti módszerek

2.1. Ellipszometria

Az ellipszometria a fény polarizációjának a mintán történő visszaverődés vagy áthaladás során bekövetkező változását méri [48, 49, 50, 51, 52, 53]. Az általánosan használt forgó polarizátoros vagy az ezzel ekvivalens forgó analizátoros elrendezésben az ellipszometria által a minta közvetlenül mért jellemzője a komplex reflexiók együttható:

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{\chi}_r}{\bar{\chi}_i} = \frac{\bar{r}_p}{\bar{r}_s} = \tan \Psi e^{i\Delta}, \quad (2.1)$$

ahol $\bar{\chi}_r$ és $\bar{\chi}_i$ rendre a visszavert és beeső fény polarizációs együtthatója, $\bar{r}_p$ és $\bar{r}_s$ rendre a beesési síkkal párhuzamos és arra merőleges polarizációs irányok reflexiók együtthatói, Ψ és Δ pedig az ellipszometriai szögek. Az utóbbi években egyre elterjedtebb Müller mátrix ellipszometria ezen túlmenően számos, a minta anizotrópiájával összefüggő tulajdonság mérésére is alkalmas.

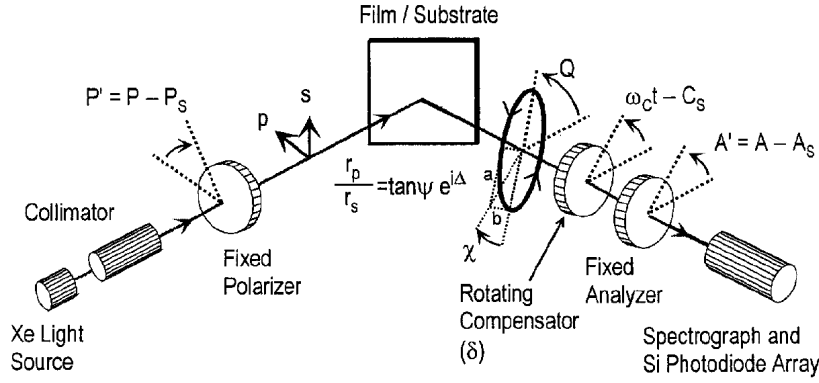
A dolgozatban szereplő mérések egy része (a legkorábbi mérések) forgó polarizátoros SOPRA ES4G ellipszométerrel készült. Az ES4G rendkívül megbízható ellipszométer, amellyel dupla monokromátorának köszönhetően kiváló hullámhossz felbontású méréseket lehetett végezni a 250-840 nanométeres hullámhossztartományban. Hátránya az, hogy egy spektrum felvétele a minta reflexiójától függően 10-30 percig is eltart.

A későbbi méréseket forgó kompenzátoros (2.1. és 2.2. ábrák) Woollam¹ M-2000F² vagy M-2000DI³ ellipszométerekkel készítettem. Míg a forgó polarizátoros ellipszometria esetében a mintára eső lineárisan polarizált fény polarizációs irányának beesési síkkal bezárt szögét moduláljuk, addig a forgó kompenzátoros ellipszometria esetében a fázisát változtatjuk (2.1. ábra). A forgó kompenzátoros mérési elv lehetővé teszi, hogy az érzékenység a mért ellipszometriai szögek minden értékére nagy legyen. Ez különösen fontos akkor, ha az összes hullámhosszon egy időben mérünk (optikai ráccsal és CCD-vel). Ilyenkor ugyanis nincs rá lehetőség, hogy minden hullámhosszra a minta optikai válaszától függően külön beállítsuk az optimális kompenzátorszöveget.

¹<http://www.jawoollam.com>

²Az ellipszométer használatának lehetőségéért és a mérések végzésében nyújtott segítségért köszönettel tartozom Tóth Zsolt-nak és Budai Judit-nak (Szegedi Tudományegyetem, Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék, MTA Lézerfizikai Tanszéki Kutatócsoport).

³Ezt a berendezést 2008 novemberében telepítettük az MFA-ban. Röviddel ezután az EU FP6-os ANNA projekt keretében történt akkreditációval a labor kulcsfontosságú főberendezésévé vált (<http://www.ellipsometry.hu>).



2.1. ábra. Forgó kompenzátoros spektroszkópiai ellipszométer felépítése [54].



2.2. ábra. Az MFA Ellipszometria Labor Woollam M-2000DI típusú forgó kompenzátoros spektroszkópiai ellipszométere. (<http://www.ellipsometry.hu>)

Így a forgó kompenzátoros ellipszométerrel széles hullámhossztartományban néhány másodperc alatt végezhetünk az ES4G-vel összemérhető, vagy bizonyos ellipszometriai szögértékekre annál nagyobb pontosságú méréseket. A két fényforrás és két detektor alkalmazása lehetővé teszi, hogy egy időben a 191-1690 nanométeres hullámhossztartományban mérjünk.

Az ellipszometriai modellek jóságának fontos mérőszáma a mért és illesztett spektrumok pontjai közötti eltérések négyzetösszege. A SOPRA mérések esetében a forgó polarizátoros ellipszométerrel közvetlenül a $\tan\Psi$ és $\cos\Delta$ mennyiségeket mérjük, ezért az illesztés is ezekre történik. A forgó kompenzátoros Woollam ellipszométeres méréseknél az illesztés a közvetlenül meghatározott N (2Ψ), C ($\sin(2\Psi)\cos(\Delta)$) és S ($\sin(2\Psi)\sin(\Delta)$) értékekre vagy Ψ -re és Δ -ra történik. Emellett a súlyozás és a normalás is eltérő. Így a dolgozatban megtartottam a SOPRA és Woollam gyártók által eredetileg is használt jelöléseket,⁴ amelyek rendre

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{(N_m - P - 1)} \sum_{j=1}^n [(\tan \Psi_j^{meas} - \tan \Psi_j^{calc})^2 + (\cos \Delta_j^{meas} - \cos \Delta_j^{calc})^2]}, \quad (2.2)$$

⁴amelyek a cikkekben is ebben a formában szerepelnek

és⁵

$$MSE = \sqrt{\frac{1}{(N_m - P)} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{\Psi_j^{meas} - \Psi_j^{calc}}{\sigma_{\Psi,j}^{meas}} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_j^{meas} - \Delta_j^{calc}}{\sigma_{\Delta,j}^{meas}} \right)^2 \right]}, \quad (2.3)$$

ahol MSE a "mean squared error" rövidítése, N_m a mért mennyiségek, P pedig az illesztett paraméterek száma. σ_{Ψ} és σ_{Δ} a mért Ψ és Δ ellipszometriai szögek Woollam ellipszométerrel mért szórását jelölik. Vagyis az illesztés során nagyobb súllyal vesszük figyelembe a kisebb hibával mért értékeket.⁶

2.2. A dielektromos függvény parametrizálása

Az ellipszometriában a rétegek törésmutatóját az esetek egy részében referencia mintákon végzett mérések során előállított adatbázisokból vesszük. Ez a módszer az esetek szűk körében alkalmazható (pl. egykristályos anyagok vagy kontrollált módon előállított rétegek, mint pl. termikus oxid réteg egykristályos szilícium szeleten), ugyanis az anyagtulajdonságok az esetek döntő többségében nagyban függnak az előállítási paraméterektől.

Amennyiben a vizsgálandó anyag olyan összetett szerkezet, amelyben az összetevők dielektromos függvényére rendelkezünk referencia adatokkal, úgy alkalmazhatók az effektív közeg módszerek (angolul az "effective medium approximation" és az ennek megfelelő "EMA" rövidítés használatos), amelyek segítségével az anyag dielektromos függvénye a komponensek dielektromos függvényéből kiszámolható. A módszer alkalmazhatóságának feltétele, hogy a komponensek mérete jelentősen kisebb legyen a vizsgáló fény hullámhosszánál, de elegendően nagy legyen ahhoz, hogy egyedi (akár tömbi anyagnak megfelelő) dielektromos függvényt lehessen hozzárendelni.

A mikroszkópikus és makroszkópikus polarizálhatóság között a Clausius-Mosotti egyenlet teremt kapcsolatot:

$$\frac{\bar{\epsilon} - 1}{\bar{\epsilon} + 2} = \frac{4\pi}{3} n\alpha, \quad (2.4)$$

ahol $\bar{\epsilon}$ a makroszkópikus dielektromos függvény⁷, α a kristályrács elemi rácspontjainak polarizálhatósága, n pedig a térfogategységben lévő rácspontok száma. Két komponens esetén a 2.4. egyenlet a következő formában írható:

$$\frac{\bar{\epsilon} - 1}{\bar{\epsilon} + 2} = \frac{4\pi}{3} (n_a\alpha_a + n_b\alpha_b), \quad (2.5)$$

ahol α_a és α_b a kétféle anyag elemi rácspontjainak a polarizálhatósága, $\bar{\epsilon}$ pedig az effektív dielektromos függvény. Ebben a képletben α_a és α_b olyan mikroszerkezeti paraméterek, amelyek nem mérhetők közvetlenül. Ha azonban az "a" és "b" komponens dielektromos függvényei ($\bar{\epsilon}_a$ és $\bar{\epsilon}_b$) rendelkezésre állnak, a 2.4. képletből ezek értékei behelyettesíthetők:

⁵Itt a gyakrabban alkalmazott $\Psi - \Delta$ illesztés képletét közlöm.

⁶A Woollam ellipszométer kompenzátora 20 Hz-el forog, egy tipikus mérés pedig 1 másodpercig tart. Mivel a Ψ és Δ ellipszometriai szögek már egy periódusból kiszámíthatók, így az 1 másodperces mérés során is jó pontossággal meghatározható σ_{Ψ} és σ_{Δ} , azaz Ψ és Δ szórása.

⁷a felülvonás a komplex mennyiséget jelöli

$$\frac{\bar{\epsilon} - 1}{\bar{\epsilon} + 2} = f_a \frac{\bar{\epsilon}_a - 1}{\bar{\epsilon}_a + 2} + f_b \frac{\bar{\epsilon}_b - 1}{\bar{\epsilon}_b + 2}. \quad (2.6)$$

Az így kapott összefüggés a Lorentz-Lorenz effektív közeg egyenlet, ahol $f_a = n_a/(n_a + n_b)$ és $f_b = n_b/(n_a + n_b)$ rendre az "a" és "b" komponens térfogataránya. Ha feltételezzük, hogy az "a" és "b" fázisok nem atomi skálán keverednek, hanem olyan méretűek, hogy saját dielektromos függvénnel rendelkeznek, akkor a képletben háttérként nem vákuumot ($\bar{\epsilon} = 1$), hanem $\bar{\epsilon}_h$ dielektromos állandójú hordozót kell feltételeznünk:

$$\frac{\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}_h}{\bar{\epsilon} + 2\bar{\epsilon}_h} = f_a \frac{\bar{\epsilon}_a - \bar{\epsilon}_h}{\bar{\epsilon}_a + 2\bar{\epsilon}_h} + f_b \frac{\bar{\epsilon}_b - \bar{\epsilon}_h}{\bar{\epsilon}_b + 2\bar{\epsilon}_h}. \quad (2.7)$$

Ha a "b" fázis térfogataránya elhanyagolható az "a" fáziséhoz képest, akkor alkalmazhatjuk az $\bar{\epsilon}_h = \epsilon_a$ behelyettesítést:

$$\frac{\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}_a}{\bar{\epsilon} + 2\bar{\epsilon}_a} = f_b \frac{\bar{\epsilon}_b - \bar{\epsilon}_a}{\bar{\epsilon}_b + 2\bar{\epsilon}_a}. \quad (2.8)$$

Ez az egyenlet, valamint az $\bar{\epsilon}_h = \bar{\epsilon}_b$ behelyettesítést alkalmazó változata a Maxwell-Garnett effektív közeg kifejezés [55]. Ha nincs kitüntetett fázis, akkor $\bar{\epsilon}_h = \bar{\epsilon}$ behelyettesítéssel az önkonzisztens Bruggeman effektív közeg képletet kapjuk:

$$0 = f_a \frac{\bar{\epsilon}_a - \bar{\epsilon}}{\bar{\epsilon}_a + 2\bar{\epsilon}} + f_b \frac{\bar{\epsilon}_b - \bar{\epsilon}}{\bar{\epsilon}_b + 2\bar{\epsilon}}. \quad (2.9)$$

Amennyiben az anyag nem tekinthető ismert dielektromos függvénnel rendelkező komponensek keverékének, a dielektromos függvényt a sáv szerkezettől (dielektrikum, fém, félvezető) függően különböző analitikus összefüggésekkel írhatjuk le. Dielektrikumok esetén a törésmutató valós részére (n) leggyakrabban az empirikus Cauchy formulát, a törésmutató képzetes részére (extinkciós együttható, k) pedig exponenciális (Urbach) diszperziót használtam:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, k = De^{E\lambda}, \quad (2.10)$$

a komplex törésmutatóra pedig fennáll, hogy $\bar{N} = n + i \cdot k$.

A félvezetők dielektromos függvénye a sáv szerkezet ismeretében megadható analitikus formában a kritikus pontokra alkalmazott S. Adachi által bevezetett [56, 57] oszcillátorokkal (ú.n. "model dielectric function", MDF). Szilícium esetében a 3,4 eV energiánál lévő kritikus pontra (E_1) az

$$\bar{\epsilon}_{A,1}(E) = -B_1 \chi_1^{-2} \ln(1 - \chi_1^2) \quad (2.11)$$

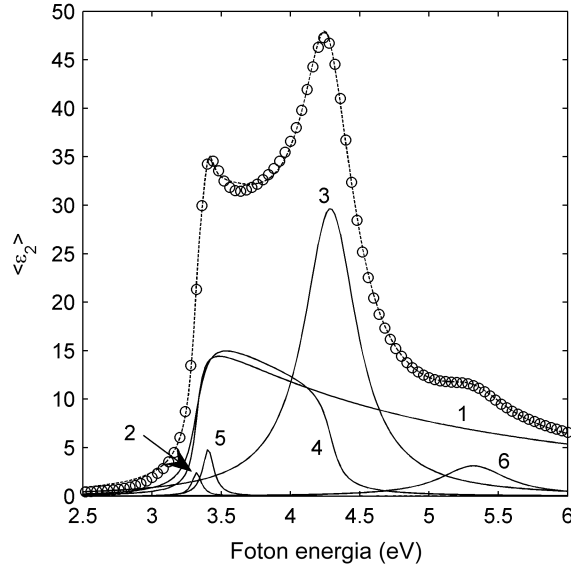
egyenlet alkalmazható, ahol $\chi_1 = (E + i\Gamma_1)/E_1$, B_1 az oszcillátor erőssége, Γ_1 pedig a kiszélesedése. Ugyanezen az energián az exciton átmenetet egy harmonikus oszcillátorral közelíthetjük:

$$\bar{\epsilon}_{A,2}(E) = \frac{B_{1x}}{E_1 - E - i\Gamma_1}, \quad (2.12)$$

ahol B_{1x} és Γ_1 rendre az oszcillátor erőssége és kiszélesedése.

A 4,3 eV (E_2) energiánál lévő kritikus pontra az

$$\bar{\epsilon}_{A,3}(E) = -F \chi_{2m}^{-2} \ln \frac{1 - \chi_{cl}^2}{1 - \chi_{2m}^2} \quad (2.13)$$



2.3. ábra. Az egykristályos szilícium dielektromos függvényének (körök) képzetes része a 2.11. (egyes számú görbe), a 2.12. (kettes, hármás, ötös és hatos számú görbe) és a 2.13. (négyes számú görbe) képlet alapján. A körökre illesztett szaggatott vonal az egyes oszcillátorok görbéinek összegét mutatja.

összefüggést alkalmaztam, ahol $\chi_{2m} = (E + i\Gamma_2)/E_2$ és $\chi_{cl} = (E + i\Gamma_2)/E_{cl}$, F és Γ rendre az oszcillátor erőssége és kiszélesedése, E_{cl} a levágási energia E_1 értékénél. Az E'_0 , E'_1 és E'_2 kritikus pontokra további harmonikus oszcillátorokat (2.12. képlet) alkalmaztam (2.3. ábra). A módszer hatékonyságát jól szemlélteti a finomszemcséjű polikristályos szilícium referencia dielektromos függvényének [58] kiváló illeszthetősége (2.4. ábra).

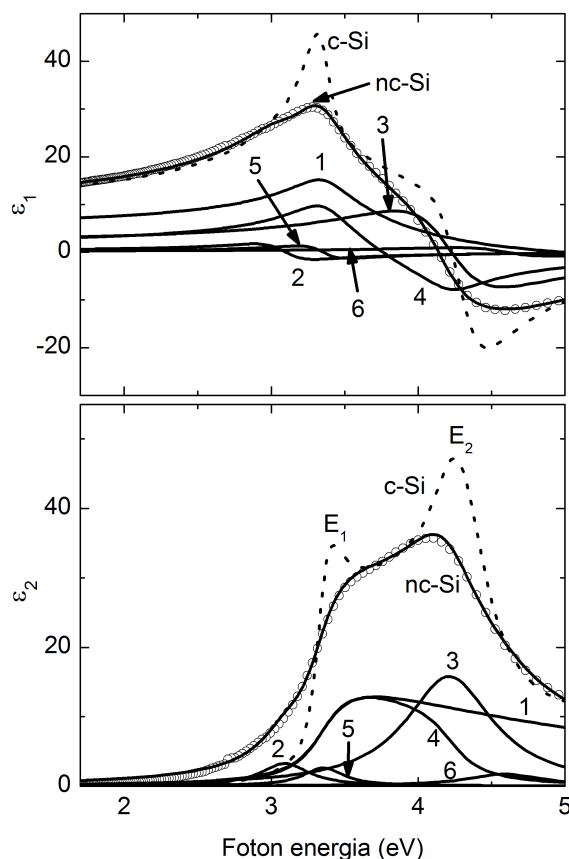
A dielektromos függvény modellezésére számos esetben használt módszer Lorentz oszcillátorok használata:

$$\epsilon_L(E) = \epsilon_{L,\infty} + \sum_{i=1}^n \frac{A_{i,L}^2}{(E_{i,L}^2 - E^2) - i\Gamma_L E}, \quad (2.14)$$

ahol E , A_L , Γ_L és E_L rendre a foton energiát, az amplitúdót, a kiszélesedést és az oszcillátor energiát jelentik. Ezt a módszert sokszor csak mint empirikus modellt használják az abszorpciós csúcsok pozíciójának és kiszélesedésének meghatározására. A módszer G. E. Jellison és társszerzői által javasolt ún. „Tauc-Lorentz” változata [59] elterjedten használt amorf félvezetők modellezésére. Az ötlet lényege módosított Lorentz oszcillátor használata, amelyben az anyag eredő válasza a fenti oszcillátor és a sávélnél négyzetes abszorpciós függést leíró Tauc formula [60] konvolúciója:

$$\epsilon_{2,T}(E) = \frac{A_T E_{0,T} \Gamma_T (E - E_{g,T})^2}{(E^2 - E_{g,T}^2)^2 + \Gamma_T^2 E^2} \Theta(E - E_{g,T}), \quad (2.15)$$

ahol $\Theta(x < 0) = 0$, $\Theta(x \geq 0) = 1$; A_T , Γ_T , $E_{g,T}$ és $E_{0,T}$ pedig rendre az amplitúdót, a kiszélesedést, a tiltott sávot és a csúcsponti energiát jelölik. A dielektromos függvény valós részét megadó korrigált képlet az [59] cikkben található.



2.4. ábra. Nanokristályos referencia dielektromos függvényének [58] illesztése a 2.11. (egyes számú görbe), a 2.12. (kettes, hármass, ötös és hatos számú görbe) és a 2.13. (négyes számú görbe) képlet alapján. A körökre illesztett folytonos vonal az egyes oszcillátorok görbéinek összegét mutatja. A szaggatott vonal az egykristályos Si (c-Si) dielektromos függvényét mutatja.

2.3. Ionimplantáció

Ionimplantáció során adott energiára felgyorsított ionokat lövünk a céltárgyba [61, 62]. Az ionimplantációnak a mikroelektronika fejlődésében jelentős szerepe volt és van máig is, ugyanis a félvezető eszközök tulajdonságait döntően az adalékatomok bejuttatásának pontossága határozza meg. Kezdetben az n- és p-típusú adalékolást diffúzióval végezték, ezzel azonban az eszközök méretcsökkenésével egy idő után már nem lehetett elegendően sekély, mélységben gyorsan változó adalékkoncentrációt létrehozni. Az ionimplantáció ma már lehetővé teszi az adalékatomok felülettől néhányszor 10 vagy akár csak néhány nanométeres távolságba való célzott és precíz bejuttatását. Az ionimplantáció alkalmazása olyan félvezetők esetében is elkerülhetetlen, amelyekben az adalékatomok diffúziós állandója túlságosan alacsony (pl. SiC [63, 64]). Az ionimplantáció során belőtt atomok a hordozó kristályszerkezetét ronsolják. A kristályrács helyreállítása és az adalékatomok elektromos aktiválása hőkezeléssel érhető el.

A mikroelektronikában minden egyes technológiai lépéshez fontos a megfelelő analitikai ellenőrző méréstechnika használata. Az olyan univerzális szerkezeti ellenőrző módszerek mellett, mint az optikai vagy elektronmikroszkópia nagy szerepet kap szá-

mos vékonyréteg vizsgálati módszer is. Az ellipszometria jelentősége itt abban áll, hogy gyors, roncsolásmentes és nagy érzékenységű gyártásközi rutinellenőrzést tesz lehetővé, ami hosszadalmas preparációt igénylő módszerekkel nem valósítható meg.

2.4. Ionsugaras analitika

Az ionok által a kristályrácsban keltett roncsoltság méréséhez kontrollmódszerként Rutherford visszaszórásos spektrometriát (RBS) és csatornahatással kombinált RBS módszert (RBS/C) használtunk. Az RBS monoenergetikus ionok mintáról való visszaszóródásának mérésén alapul [65, 66]. Az adott irányban visszaszóródó ionok energia eloszlásának méréséből meghatározható a mintában jelenlévő atomok tömege és (a réteg sűrűségének ismeretében) azok mélységeloszlása a felülettől néhány mikronos mélységig terjedő tartományban. RBS/C esetében csatorna irányból lőjük be a vizsgáló ionokat a kristályba. A becsatornázódott ionok csak akkor szóródnak vissza, ha rácshibával találkoznak, így ezzel a módszerrel a kristályrács roncsoltságának mélységeloszlása is mérhető.

Ahol külön nem említem, ott a mérések a Wigner kutatóközpont Részecske és Magfizikai Kutatóintézetének 5 MV-os Van de Graaff gyorsítójánál, felületi zárórétes ORTEC detektorral, Cornell geometriában (165° -os szórási szög) készültek. A mélységfelbontás növelésére 97° -os detektálási szöget is használtunk. A csatorna irányú mérések $\langle 100 \rangle$, a véletlen beesésű mérések ehhez képest 7° -kal elforgatott irányból készültek. A méréseket N. Q. Khánh, Szilágyi Edit és Zolnai Zsolt végezték. Az RBS/C spektrumok kiértékelése a Kótai Endre által írt RBX szoftverrel történt [67].

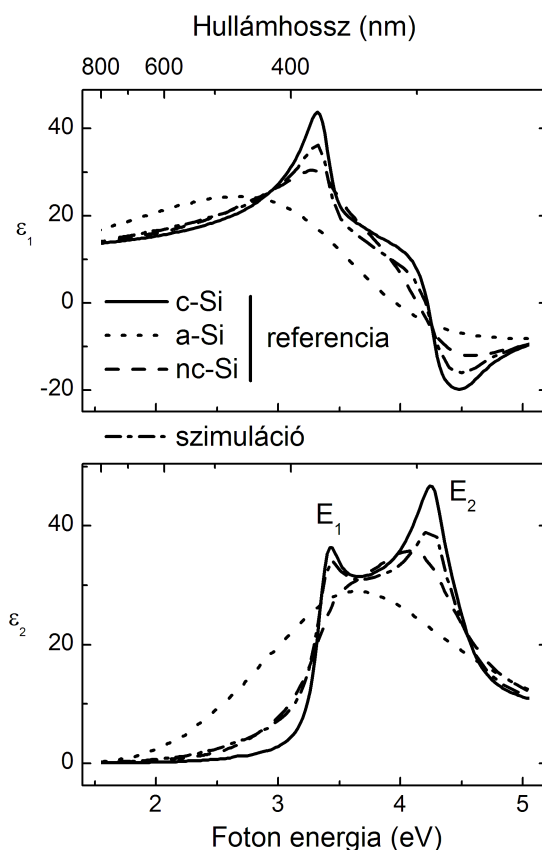
3. fejezet

Mélységprofilozás

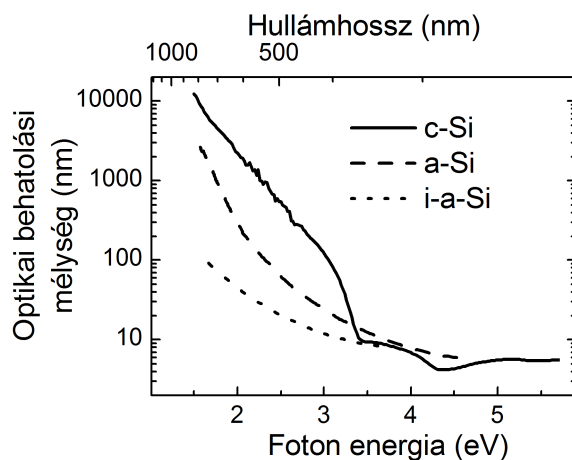
A félvezetők szerkezetének mélységfüggése a felület közelében¹ nagy érzékenységgel mérhető ellipszometriával. Ennek egyik oka az akár tizednanométeres érzékenység a felületi vékonyrétegek vastagságának mérésére. Ez az ortogonális polarizációjú reflexiók összehasonlító mérésére vezethető vissza a 2. fejezetben tárgyalt módon. A másikkok a félvezetők optikai tulajdonságainak nagymértékű függése a kristályszerkezettől az optikai hullámhosszak tartományában. Ellipszometriai mérés a jelenlegi technológiákkal kb. 9 eV fotonenergiáig végezhető, ami még a széles tiltotsávú félvezetők direktátmeneti energiáit is tartalmazza.

A kristályrácsban a hibák, vagyis a hosszú távú rend változása jelentős hatással van az elektronszerkezetre. A dielektromos függvény képzetes része viszont egyenesen arányos a csatolt állapotok sűrűségével, ami ugyancsak nagyban függ a kristály elektron sáv szerkezetétől. Így az optikai mérés a dielektromos függvény (azaz ekvivalens módon a törésmutató) szerkezetfüggése miatt kiemelkedő érzékenységet mutat a kristályhibákat, nanokristályokat vagy amorf tartományokat tartalmazó vékonyrétegek mérésére. A 3.1. ábrán az egykristályos (c-Si), nanokristályos (nc-Si) és amorf (a-Si) szilícium dielektromos függvényeinek összehasonlítását láthatjuk. A hosszú távú rend megszűnése a kritikus pontok abszorpciós csúcsainak kiszélesedését és amplitúdójának csökkenését okozza. Az amorf esetben a kritikus pontok csúcsai teljesen eltűnnek, és helyettük egyetlen széles púp jelenik meg a spektrumban. Az amorf és nanokristályos szilícium dielektromos függvénye a tiltott sávnál nagyobb fotonenergiákra jelentősen eltér az egykristályos szilíciumétól. Fontos azonban megjegyezni, hogy mivel a kritikus pontok környékén (E_1 -gyel és E_2 -vel jelölt csúcsok a 3.1. ábra alsó grafikonján) az abszorpciós csúcsok alakja is fontos információt hordoz a kristályszerkezetről, a legérzékenyebb mérések ezen fotonenergiák tartományában végezhetők. Érthető módon viszont éppen ezen fotonenergiák környékén legkisebb a fény optikai behatolási mélysége ($d = \lambda/(4\pi k)$, ahol λ a fény hullámhossza, k pedig az extinkciós együttható). A 3.2. ábra alapján szilícium esetén az E_1 és E_2 helyeken rendre megközelítőleg 10 és 5 nm. Egykristályos szilíciumban a behatolási mélység nagymértékben növekszik 3 eV alatt, míg amorf szilíciumban ez a növekedés sokkal kisebb. Ennek az a következménye, hogy az ellipszometriai mérés szerkezetre való érzékenysége nagymértékben függ a vizsgálandó szerkezet felülettől való távolságától. A következő fejezetekben látni fogjuk, hogy az eltemetett roncsoltsági vagy üreg profil ennek ellenére néhány száz nanométeres felülettől való távolságokban is megbízhatóan (RBS és TEM mérésekkel

¹A felülettől számított néhány száz nanométer mérhető, de kiemelkedően nagy érzékenység a kritikus pontokhoz tartozó behatolási mélység nagyságrendjébe eső, tipikusan néhányszor tíz nanométeres tartományban érhető el.



3.1. ábra. Az egykristályos (c-Si), nanokristályos (nc-Si) és amorf (a-Si) szilícium dielekromos függvénye. A pontozott vonal ("szimuláció") az 50 % c-Si és 50 % a-Si összetevőarányval számolt EMA modell eredményét mutatja, és azt hivatott szemléltetni, hogy a nanokristályos referencia nem keverhető ki ezekből a komponensekből.



3.2. ábra. A fény optikai behatolási mélysége egykristályos (c-Si), nanokristályos (nc-Si) és amorf (a-Si) szilíciumban.

jól egyező módon) mérhető ellipszometriával.²

3.1. Továbbfejlesztett Gauss profil

Mivel az ellipszometria nagy pontossággal képes mérni nanométeres vagy akár az alatti rétegvastagságokat, már a nyolcvanas években felmerült az az ötlet, hogy a módszer felhasználható lehet mélységben folyamatosan változó szerkezetek mérésére. A fentiek alapján ez szilícium szerkezetekre különösen nagy érzékenységgel megvalósítható. Először az ionimplantáció által keltett roncsolt szerkezetekre való érzékenység ellenőrzése szükséges [70, 21], majd az az ötlet, hogy a mélységben változó szerkezetet mérjük meg a tartomány alrétegekre bontásával [71]. Az alrétegekben az anyagot amorf és egykristályos fázisok keverékének tekintjük, és a dielektromos függvényt ezen komponensek dielektromos függvényeiből számoljuk az effektív közeg módszerrel, amelynek egyetlen paramétere a komponensek térfogataránya. Ebben az esetben a relatív roncsoltságot az amorf komponens térfogataránya fejezi ki. Ha az amorf komponens térfogataránya 100 %, az teljesen amorfizált szerkezetet jelent.

Ha az amorf komponens térfogatarányát minden alrétegben független paraméterként illesztjük, az jó felbontás³ esetén jelentős számú illesztett paramétert jelent. Feltételezve azonban, hogy az ionimplantációval roncsolt tartomány mélységprofilja Gauss függvénnyel közelíthető, az illesztett paraméterek száma négy paraméterre korlátozható az alrétegek számától függetlenül.⁴ Ezt az úgynevezett "csatolt fél-Gauss" modellt (1. modell, [23]) a 3.3. ábra mutatja. A roncsoltsági profilt két különböző szórási paraméterrel rendelkező Gauss függvény csatolásával kapjuk (3.3. ábra).

A csatolt fél-Gauss modellt olyan módon fejlesztettem tovább, hogy az alrétegek vastagsága a függvény meredekségével fordítottan arányos legyen (2. modell, [27, 72]). Ezzel a modellel az előző modellel megegyező alrétegszám esetén pontosabban le lehet írni a roncsolt profilt. A különbség főként akkor jelentős, ha a profil meredek szakaszokat tartalmaz. A modell felépítését a 3.4. ábra mutatja. Az adott szakaszra vett alrétegszámot rögzíteni lehet; ezek után a szoftver az alrétegek vastagságát automatikusan számolja a függvény meredekségétől függően.

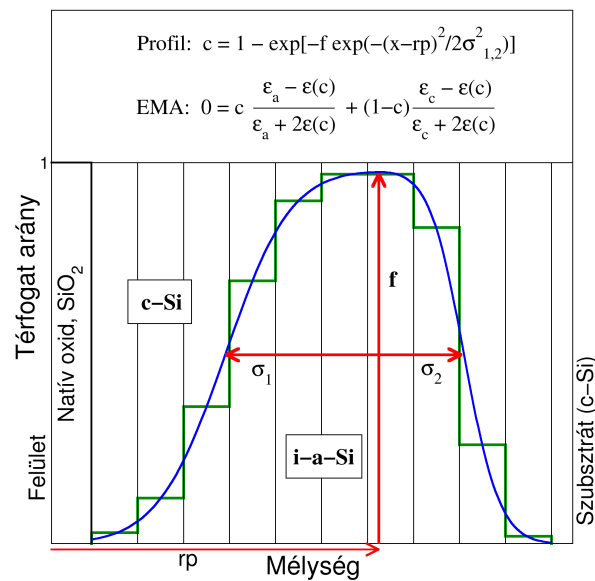
A modell jóságát többféle ion és energia esetre is összehasonlítottam a korábbi modellel. Az illesztés javulását a 3.5 ábra mutatja 100 keV energiával implantált Ar esetre. A modell jobb használhatóságát igazoltam 100 keV Xe, 100 keV Ar és 400 keV N₂, valamint a roncsoltsági csúsnál a teljes amorfizációt biztosító fluenciák⁵ esetre (3.6. ábra). Az illesztés minősége minden esetben jelentős javulást mutat (3.1. táblázat).

²A mélységprofilozásra doktoranduszommal, Fodor Bálinttal újabb, jelen dolgozatban nem szereplő módszereket fejlesztettünk ki [68, 69].

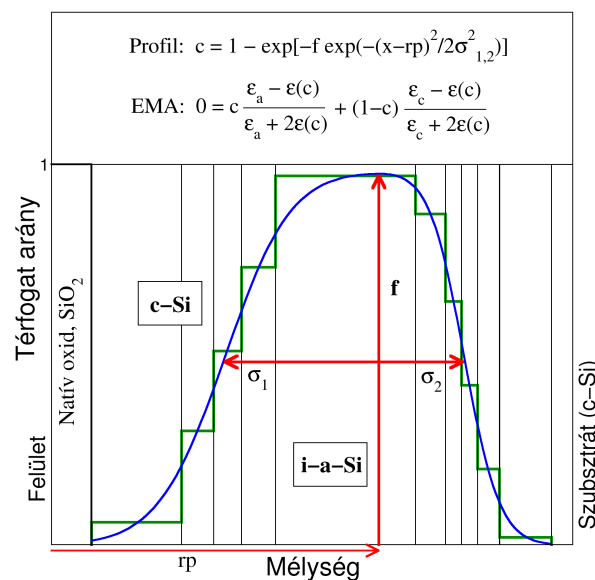
³sok réteg

⁴Fontos megjegyezni, hogy az alrétegek száma ettől függetlenül fontos szempont, mert a számolás gyorsaságát jelentősen befolyásolja.

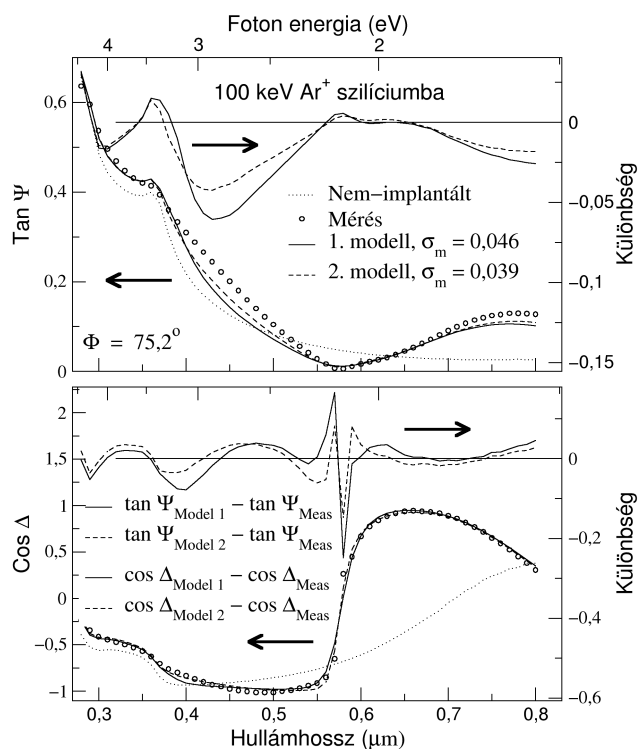
⁵A régebbi cikkekben "fluencia" helyett a "dózis" kifejezés szerepel az egységnyi felületen áthaladó ionok számára. Az értekezésben "dózis" helyett igyekszem következetesen a "fluencia" szót használni.



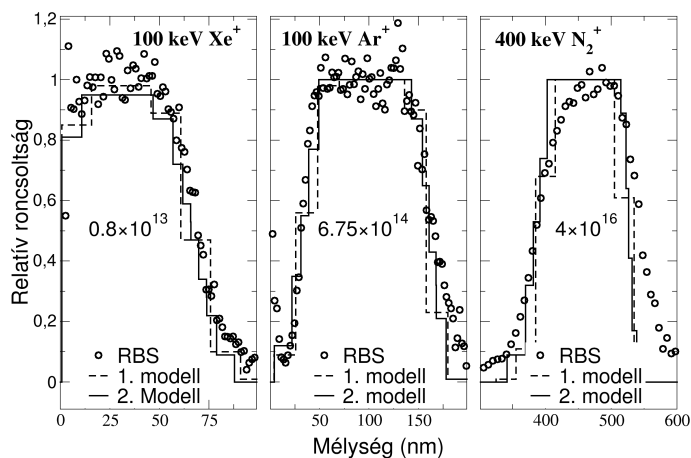
3.3. ábra. Csatolt fél-Gauss modell (1. modell) ionimplantációval létrehozott roncsoltsági profil számolásához. A felületen a modellben natív SiO₂ réteg szerepel. Az alrétegekben c-Si és i-a-Si az egykristályos és amorf Si komponensek dielektromos függvénye. f , σ és rp az i-a-Si komponens térfogatarányának mélységfüggését leíró paraméterek, rendre a roncsoltsági csúcs maximuma, szórása és a csúcs mélységbeli pozíciója.



3.4. ábra. Továbbfejlesztett csatolt fél-Gauss modell (2. modell) dinamikusan változó alrétegvastagságokkal.



3.5. ábra. Az illesztés javulása 100 keV energiával implantált Ar esetére.



3.6. ábra. A továbbfejlesztett modell használata 100 keV Xe, 100 keV Ar, és 400 keV N₂ esetére. A görbék alatt az implantált fluenciák láthatók 1/cm²-ben.

3.2. Átlapoló dupla profil

Hélium ionok nagy fluenciájú implantációjakor a ronsolt profil mellett üregprofil is kialakul.⁶ Az üregprofil a hélium ionok hozzájárulása a ronsoltsági profilnál nagyobb mélységben. Az általam vizsgált minták 40 keV energiájú 1x10¹⁶ cm⁻²-től

⁶A hélium nagy fluenciájú implantációját getterezésre vagy az úgynevezett "smart cut" eljárásban használják. Mindkét esetben a hőkezelés után kialakuló nagy mennyiségű eltemetett üreg a főszereplő. Ez egyrészt megköti az oda diffundáló szennyezőket [getterezés], másrészt az üregeket tartalmazó tartomány fölötti réteg leválasztható és szigetelőre köthető ["szilícium szigetelőn" szerkezetek létrehozása "smart cut"-tal].

3.1. táblázat. Illesztett paraméterek és az illesztés jóságának összehasonlítása a profilokra (σ_p) és a mért spektrumokra (σ_m). Az 1-es index a hagyományos, a 2-es a javított modellt jelenti.

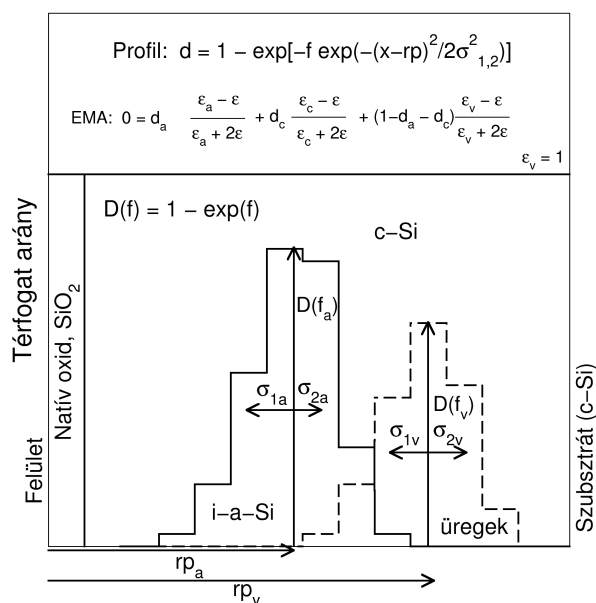
Energia és ion	100 keV Xe ⁺	100 keV Ar ⁺	400 keV N ₂ ⁺
Fluencia	$8,0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$	$6,75 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$	$4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$
Felületi oxid	$0,70 \pm 0,05 \text{ nm}$	$2,3 \pm 0,4 \text{ nm}$	$3,8 \pm 0,3 \text{ nm}$
Amorf réteg	—	$1,4 \pm 0,2 \text{ nm}$	$3,6 \pm 0,3 \text{ nm}$
Részben roncsolt réteg	—	—	$333,9 \pm 1,5 \text{ nm}$ 69% c-Si 31 $\pm$ 16% p-Si
Roncsoltsági profil	rp = $34,8 \pm 2,2 \text{ nm}$ f = $3,0 \pm 0,2$ $\sigma_1 = 45,6 \pm 2,0 \text{ nm}$ $\sigma_2 = 9,2 \pm 0,7 \text{ nm}$	rp = $102,1 \pm 0,2 \text{ nm}$ f = $10,7 \pm 0,8$ $\sigma_1 = 31,5 \pm 0,7 \text{ nm}$ $\sigma_2 = 24,0 \pm 0,7 \text{ nm}$	rp = $145,2 \pm 1,4 \text{ nm}$ f = $14,3 \pm 1,7$ $\sigma_1 = 41,4 \pm 0,9 \text{ nm}$ $\sigma_2 = 16,5 \pm 1,3 \text{ nm}$
$\sigma_{m,1}$	0,0103	0,046	0,0168
$\sigma_{m,2}$	0,0097	0,039	0,0139
$\sigma_{p,1}$	0,75	1,27	2,34
$\sigma_{p,2}$	0,36	0,62	0,83

$1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ -ig terjedő fluenciájú héliummal implantált egykristályos Si szeletek voltak, amelyek a későbbiekben hőkezelésnek lettek alávetve a getterező He-buborékok kialakításához.

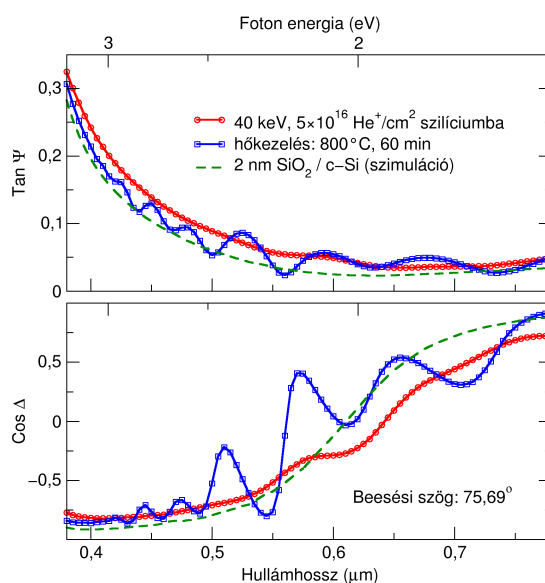
Az ebben a fejezetben alkotott modellek még a rögzített rétegvastagságú csatolt fél-Gauss alapmodellre építenek, abból két profilt használva [73]. A dupla átlapoló profil felépítése a 3.7. ábrán látható. Mindkét profil esetében 4-4 illesztett paraméterünk van.⁷ A mért spektrum jelentősen eltér a 2 nm natív oxiddal szimulált alapszelet spektrumától, ami bizonyítja a mérés érzékenységet (3.8. ábra).

A dupla Gauss modell felépítéséhez először egyszerűbb alapmodellből indultam ki, majd növeltem a komplexitását (3.9. ábra). Az 1. modell egyetlen rétegnek feltételezi az implantált tartományt, ami rossz illesztést eredményez (3.10. ábra), arra viszont kiválóan megfelel, hogy a következő bonyolultsági fokozatú modell kezdő paramétereit megkapjuk belőle. A 2. modell 7 alrétegre osztja fel a vizsgált tartományt, és mindegyikben illeszti a roncsoltságot és az üregtartalmat egyaránt. Ez 14 illesztett paramétert jelent az ionimplantált tartományon. Ennek ellenére az illesztés továbbra sem javul jelentősen (3.10. ábra). A 3. modell egyszerre használ roncsoltsági és üreg profilt, amivel az illesztés jelentősen javul - annak ellenére, hogy az illesztett

⁷A későbbi fejezetekben látható, hogy 10-15 paraméter illesztése is lehetséges nagy paraméter-bizonytalanságok és korrelációk nélkül, ha a dielektromos függvény[ek] és a mért spektrumok megfelelően strukturáltak - vagyis a hullámhossz függvényében olyan jellegzetes és összetett alakjuk van, ami sok paraméterrel írható csak le. A paraméterek érzékenysége a paraméterbizonytalanság és korrelációs mátrix alapján ellenőrizhető. A paraméterek érzékenysége és egyedisége ugyancsak jól vizsgálható, ha a nominális paraméterérték körüli tartományban az illesztés hibáját ábrázoljuk a paraméter értékének függvényében. Minél meredekebb görbét kapunk, annál kisebb a paraméter hibája.



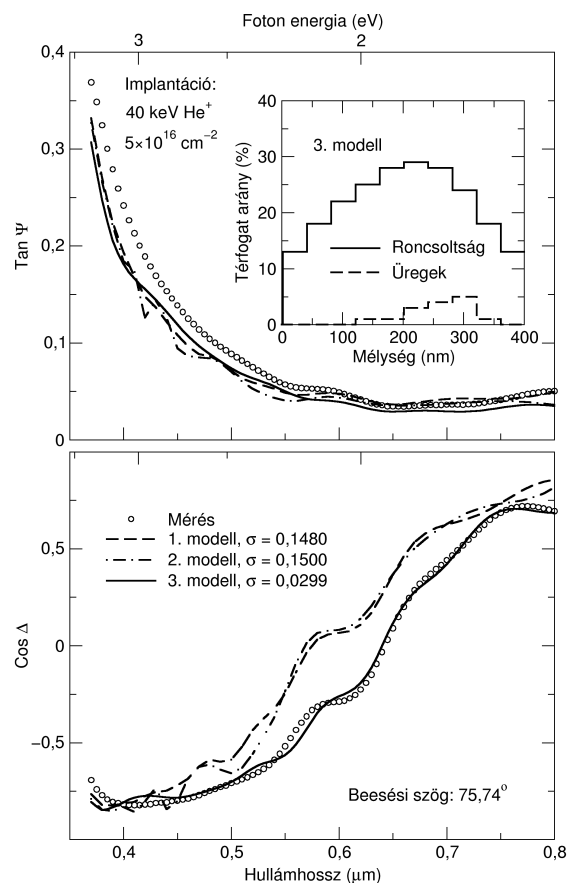
3.7. ábra. Dupla, átlapoló csatolt fél-Gauss profilokat használó optikai modell. A felületen a modellben natív SiO₂ réteg szerepel. Az alrétegekben c-Si, i-a-Si és üregek ($n = 1$) dielektromos függvényeinek effektív közeg keverékéből számoljuk az eredő dielektromos függvényt. f , σ és rp az i-a-Si ("a" index) vagy üreg ("v" index) komponens térfogatarányának mélységfüggését leíró paraméterek, rendre a roncsoltsági csúcs maximuma, szórása és a csúcs mélységbeli pozíciója.



3.8. ábra. A 40 keV energiájú He ionokkal 5×10^{16} cm⁻² fluencia mellett implantált és 800°C-on 60 percig hőkezelt mintákon mért, valamint a 2 nm natív oxiddal szimulált spektrumok összehasonlítása.

SZERKEZET	1.MODELL	2.MODELL	3.MODELL
Felületi oxidréteg	SiO ₂	SiO ₂	SiO ₂
Roncsolt tartomány: Roncsolt + Üregek Üregek	Roncsoltság és üregek	Roncsoltság és üregek (7 alréteg)	Átlapoló roncsoltság és üreg profilok
Szubsztrát	c-Si	c-Si	c-Si

3.9. ábra. A hőkezelés nélküli minták kiértékeléséhez használt optikai modellek.

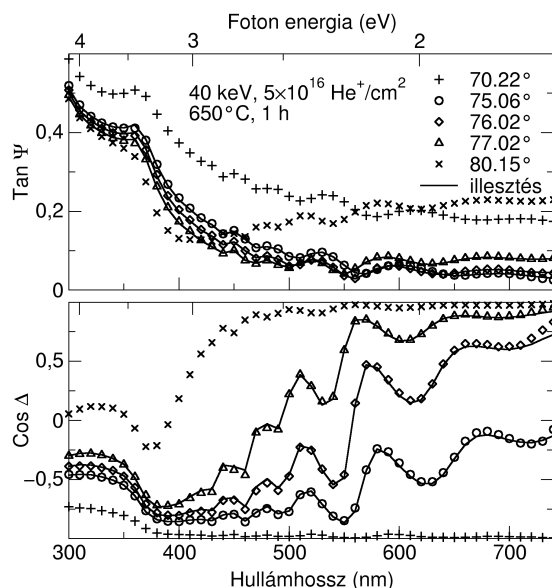


3.10. ábra. A különböző optikai modellekkel mért és illesztett spektrumok.

paraméterek száma a két profilra csak 4+4 (3.10. ábra). A 3. modellel a mért és számolt görbék már jó egyezést mutatnak. A 3.10. ábra betéttábráján látható, hogy az üregprofil csúcsa a roncsoltsági profilnál mélyebben van, jó egyezésben a TEM eredményekkel [73].

3.3. Eltemetett getterező üregprofil

A nagy fluenciájú hélium implantáció legfontosabb alkalmazása a fentiekben leírtaknak megfelelően a hőkezelés után kialakuló üregprofil. Ennek pontos mérése fontos a technológia fejlesztéséhez és ellenőrzéséhez. Ezt hagyományosan elektronmikroszkóppal végzik, ami fokozottan erőforrás- és időigényes. Az ellipszometria a kifejlesztett modellekkel [45] alkalmas arra hogy a több-száz nanométeres mélységben eltemetett



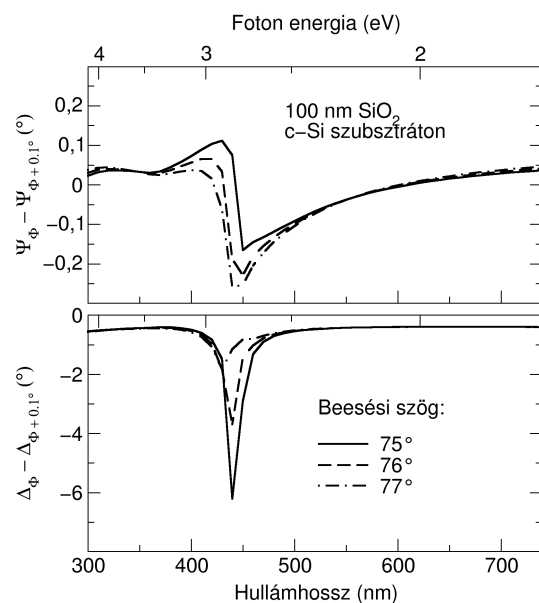
3.11. ábra. Mért és (a "10" jelű modellel) illesztett spektrumok a 40 keV energián, $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ fluencia mellett héliummal implantált, 650°C-on 60 percig hőkezelt mintán.

üregprofil néhány nanométeres pontossággal néhány perc alatt roncsolásmentesen meghatározható.

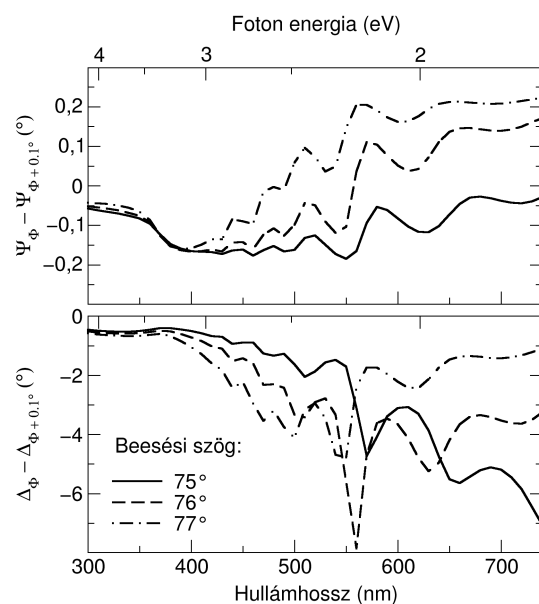
A megfelelő érzékenységre méréshez szűk beesési szög-tartományt volt célszerű használni, 75° és 77° között (3.11. ábra). A 3.11 ábráról jól látszik az is, hogy 70°-os és 80°-os beesési szögeknél mennyire strukturálatlanok a spektrumok, ami a mérés érzékenységét jelentősen csökkenti. Azaz a megfelelő érzékenységre mérés elvégzésének fontos eleme a megfelelő beesési szögek alkalmazása. A pontosságot tovább növeli, ha az illesztést egyszerre több beesési szögre végezzük el. Esetünkben a 75°, 76° és 77° beesési szögekre. Az, hogy a mérés érzékenysége az implantált-hőkezelt minták esetében széles hullámhossztartományban is erősen függ a beesési szögtől, nagy mértékben a többrétegű, mélységben inhomogén szerkezet eredménye. Míg homogén termikus SiO₂ esetében csak egy szűk hullámhossztartományban térnek el a fenti három beesési szögnél mért spektrumok (3.12. ábra), addig az implantált minták esetében széles hullámhossztartományban nagyobb eltérést tapasztaltam (3.13. ábra).

A bonyolult szerkezet miatt az optikai modelleket az előzőekhez hasonlóan lépésről lépésre fejlesztettem (3.2 táblázat). Először a felületi réteg vastagságát és a beesési szög pontos értékét állapítottam meg egy a többenél szűkebb hullámhossztartományban (300-380 nm). Ebben a hullámhossztartományban a fény az elnyelés miatt nem ér el az eltemetett üregekig, ezért egyszerű optikai modellt lehet használni, amely az oxidréteg alatti területet tömbi c-Si-nek tekint. A felületi réteg modellezésére SiO₂ törésmutató referenciát használtam. A kapott réteg vastagsága nagyobb, mint a natív oxid várható vastagsága. Ennek oka az, hogy az ionimplantáció következtében a minta felületén 1-2 nm érdesség is megjelenik. A modellben azért nem használtam erre külön réteget, mert a mérés érzékenysége nem teszi lehetővé az 1-2 nanométeres érdességréteg elkülönítését a natív oxid rétegtől.

A következő lépésben ("H" modell) három homogén réteget használtam, már a teljes hullámhossztartományban: az eltemetett üregprofil tartalmazó réteget c-Si és üregek EMA keverékével modelleztem, míg a natív oxid és az eltemetett üregprofil



3.12. ábra. Beesési szögre való érzékenység 100 nm-es termikus oxid esetén c-Si szubsztráton.

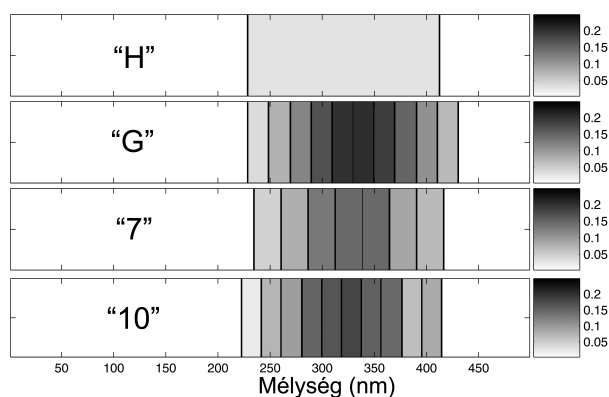


3.13. ábra. Beesési szögre való érzékenység 40 keV energián, $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ fluencia mellett héliummal implantált, 650°C-on 60 percig hőkezelt mintán.

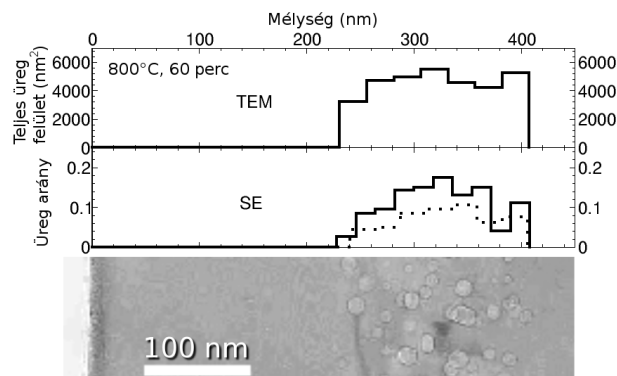
között illesztett vastagságú c-Si réteg található. Amennyiben ennek a rétegnek a törésmutatóját c-Si és üreg komponensek keverékével illesztjük, az üreg komponens térfogatarányára 0.004 %-ot kapunk. Ez jó egyezésben van a Fukarek és társszerzői által közölt eredményekkel [26], és jó minőségű, "smart-cut" eljáráshoz használható réteget jelez. A felületi réteg vastagságát ebben és a további modellekben már nem illesztettem. Ez a modell már alkalmas arra, hogy támpontot nyújtson a várható teljes vastagságok értékeihez. A 3.14. ábrán látható, hogy ez a modell az összetettebb és pontosabb modellekkel jó egyezésben lévő értéket ad az eltemetett üregprofil teljes vastagságára. Ezért a "H" modellből kapott értékeket a további összetettebb modellek bemenő paramétereiként lehetett használni.

3.2. táblázat. Növekvő bonyolultságú optikai modellek az eltemetett üregprofilok meghatározására. Az illesztett paraméterek a 650°C-on 60 percig hőkezelt mintán végzett mérés eredményei. λ , Φ és σ rendre a mérő fény hullámhosszát, a beesési szöget és az illesztés négyzetes középhibáját jelölik. rp , f , w és s a csatolt fél-Gauss profil paraméterei: rendre a mélység, a magasság, a szélesség és az aszimmetria. A "7" és "10" modellek esetében az alrétegek vastagsága csatolt. A profilok a 3.14. ábrán láthatók.

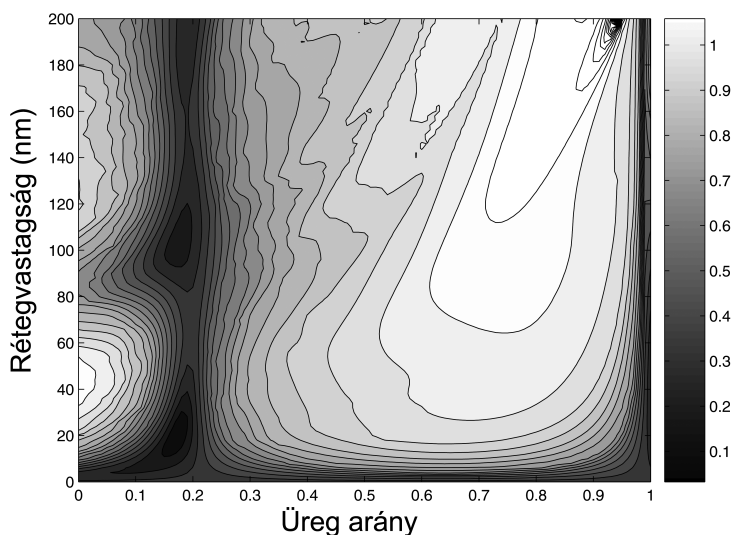
Modell:	O	H	G	7	10
12. réteg					3,9 ± 0,02 nm 100 % SiO ₂
11. réteg					219,1 ± 14,6 nm 100 % c-Si
10. réteg					19,2 ± 1,9 nm 97,7 ± 2,7 % c-Si 2,3 ± 2,7 % voids
9. réteg				3,9 ± 0,04 nm 100 % SiO ₂	19,2 ± 1,9 nm 92,5 ± 1,3 % c-Si 7,5 ± 1,3 % voids
8. réteg				235,4 ± 0,7 nm 100 % c-Si	19,2 ± 1,9 nm 90,0 ± 2,0 % c-Si 10,0 ± 2,0 % voids
7. réteg				26,0 ± 0,4 nm 95,5 ± 0,4 % c-Si 4,5 ± 0,4 % voids	19,2 ± 1,9 nm 84,7 ± 2,3 % c-Si 15,3 ± 2,3 % voids
6. réteg				26,0 ± 0,4 nm 91,8 ± 1,1 % c-Si 8,2 ± 1,1 % voids	19,2 ± 1,9 nm 83,3 ± 4,0 % c-Si 16,7 ± 4,0 % voids
5. réteg				26,0 ± 0,4 nm 86,7 ± 1,6 % c-Si 13,3 ± 1,6 % voids	19,2 ± 1,9 nm 81,2 ± 3,3 % c-Si 18,8 ± 3,3 % voids
4. réteg				26,0 ± 0,4 nm 84,8 ± 1,9 % c-Si 15,2 ± 1,9 % voids	19,2 ± 1,9 nm 84,4 ± 4,4 % c-Si 15,6 ± 4,4 % voids
3. réteg		4,0 ± 0,06 nm 100 % SiO ₂	3,9 ± 0,3 nm 100 % SiO ₂	26,0 ± 0,4 nm 93,4 ± 1,6 % c-Si 14,6 ± 1,6 % voids	19,2 ± 1,9 nm 85,3 ± 2,4 % c-Si 14,7 ± 2,4 % voids
2. réteg		227,4 ± 1,0 nm 100 % c-Si	225,4 ± 4,2 nm 100 % c-Si	26,0 ± 0,4 nm 90,9 ± 1,2 % c-Si 9,1 ± 1,2 % voids	19,2 ± 1,9 nm 93,5 ± 2,8 % c-Si 6,5 ± 2,8 % voids
1. réteg	3,9 ± 0,1 nm 100 % SiO ₂	181,0 ± 1,4 nm 96,9 ± 0,2 % c-Si 3,1 ± 0,2 % voids	201,6 ± 3,9 nm rp = 108,1 ± 9,1 nm f = 0,23 ± 0,05 w = 106,0 ± 5,3 nm s = 0,0 ± 0,04 nm	26,0 ± 0,4 nm 93,2 ± 0,4 % c-Si 6,8 ± 0,4 % voids	19,2 ± 1,9 nm 91,4 ± 0,7 % c-Si 8,6 ± 0,7 % voids
Szubsztrát	100 % c-Si	100 % c-Si	100 % c-Si	100 % c-Si	100 % c-Si
λ	300 - 380 nm	300 - 740 nm	300 - 740 nm	300 - 740 nm	300 - 740 nm
Φ_1	75,06 ± 0,07°	75,13 ± 0,03°	75,06°	75,07 ± 0,03°	75,06 ± 0,01°
Φ_2	76,01 ± 0,06°	76,04 ± 0,03°	76,02°	76,04 ± 0,03°	76,02 ± 0,01°
Φ_3	77,03 ± 0,05°	77,04 ± 0,03°	77,02°	77,03 ± 0,03°	77,02 ± 0,01°
σ	0,0066	0,0434	0,0246	0,0180	0,0123



3.14. ábra. A 3.2. táblázatban látható illesztett paraméterekből kapott üregprofilok.



3.15. ábra. Transzmissziós elektronmikroszkópiával (TEM) és ellipszometriával (SE) mért eltemetett üregprofilok összehasonlítása. Az ellipszometria esetében a szaggatott vonal a 7-rétegű ("7"), míg a folytonos vonal a 10-rétegű ("10") modellt jelöli.



3.16. ábra. Kétdimenziós hibafelület (σ értékek) a 3.2. táblázat "10" modelljének 5. rétegét használva.

A "G" modellben kísérletet tettem a Gauss-profillal való illesztésre. Az illesztés jósága (σ) ebben az esetben 0,024, míg a 7 és 10 független réteget tartalmazó modellek esetében rendre 0,018 és 0,012. Bár a profilok e három modellben nagyon hasonlóak (3.14. ábra), σ javulása egyértelműen a "7" és "10" modellek mellett szól. Ennek legfőbb oka, hogy a profilok nem Gauss jellegűek, valamint hogy a határfelületeken az üregkoncentráció megnövekszik (3.15. ábra), ami jobban leírható a független koncentrációjú rétegeket tartalmazó modellekkel.

A "7" és "10" modellekben az illesztett paraméterek száma rendre 9 és 12. Az illesztett paraméterek nagy száma ellenére a paraméterek érzékenysége nagy, az illesztett értékek bizonytalansága kicsi ($\pm$ értékek a 3.2. táblázatban). Ennek az az oka, hogy az üregek és a c-Si törésmutatója közti különbség a teljes hullámhossztartományban nagy; a nagy optikai kontraszt pedig kiemelkedő érzékenységet eredményez. A nagy számú paraméter illesztése során lokális minimumokba kerülhetünk. A 3.16. ábra hibafelületén az látható, hogy míg az üregarány jól definiált, addig több alréteg vastagságra is lokális minimumba juthat az illesztés. Az összes paraméter illesztésekor

bonyolultabb, több-dimenziós hibafelületet kapunk. Az illesztés stabilitását javítja, hogy a többretegű modellekben az alrétegek vastagsága csatolt: vagyis az alréteg vastagságát illesztettem, de az összes alrétegre ugyanazt a vastagságot használtam. A lokális minimumok elkerülése érdekében kiemelt hangsúlyt fektettem a paraméterkeresésre. A paraméterkeresés során minden paraméter számára definiáltam egy várható tartományt. A paramétereket ezeken a tartományokon belül adtam meg véletlenszerűen, és átlagosan nagyságrendileg 10^6 különböző kombináció esetére kiszámoltam σ értékét. Az illesztést a legalacsonyabb σ értéket adó paraméterkombinációk értékeiről indítottam el, növelve annak valószínűségét, hogy ezek az értékek már a globális minimumhoz tartozó völgy oldalában helyezkednek el, ahonnan a regressziós algoritmus már betalál a globális minimumba. A számításokat az MFA 128 processzoros ATXBLADE klaszterén végeztem, amihez MATLAB/Octave kiértékelő szoftvert írtam.

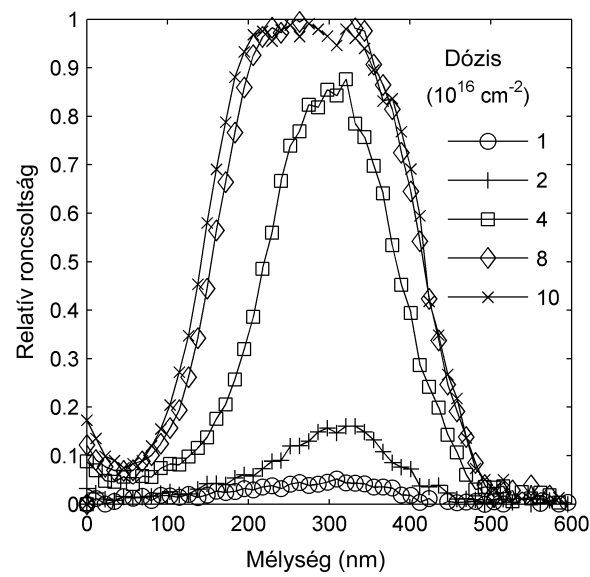
A "10"-es model relevanciáját nem csak az alacsonyabb σ érték igazolja, hanem az a tény is, hogy a határrétegnél a TEM mérésből is megállapított üregcsúcs is kimutathatóvá vált (3.15. ábra). Ehhez azonban megfelelő mélységfelbontású modellt (ld. "10"-es modell) kell alkalmazni, mert a 7-rétegű modell (szaggatott vonal a 3.15. ábrán) még nem alkalmas ennek a határfelületi csúcsnak a kimutatására.

3.4. A dielektromos függvény modellezése

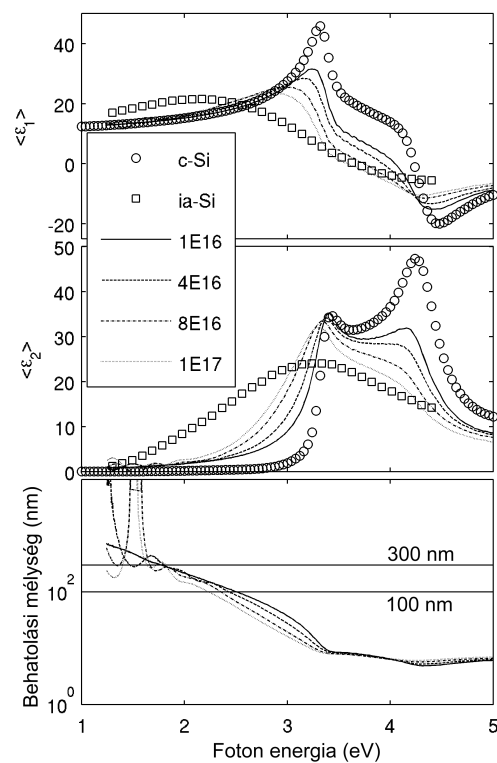
Az ionimplantált Si dielektromos függvényének modellezésére kezdetben az ionimplantációval amorfizált (i-a-Si) és egykristályos Si (c-Si) dielektromos függvényeit használtuk, az eredő dielektromos függvényt az effektív közeg (2.2. fejezet) módszerrel számolva [74]. Azonban a dielektromos függvény pontosabban modellezhető az Adachi-féle parametrizálással ([57, 75, 76], 2.2. fejezet). Ez különösen igaz a héliummal implantált Si esetében, ahol többnyire ponthibák jönnek létre, amelyek dielektromos függvénye eltérhet az amorf szilíciumétól.

A c-Si szeleteket 40 keV energiájú, 1×10^{16} cm²-től 1×10^{17} cm²-ig terjedő fluenciájú He⁺ ionokkal implantáltuk [75]. A fluenciától függő roncsoltsági profilt a 3.17. ábra mutatja. A nagyobb fluenciákra a relatív roncsoltság eléri az 1-et. A csúcs maximuma a felülettől megközelítőleg 300 nm-re van. A felület és a profil között van egy kis roncsoltságú tartomány, de a felület felé haladva a diffúzió miatt a ponthibák mennyisége újra növekszik.

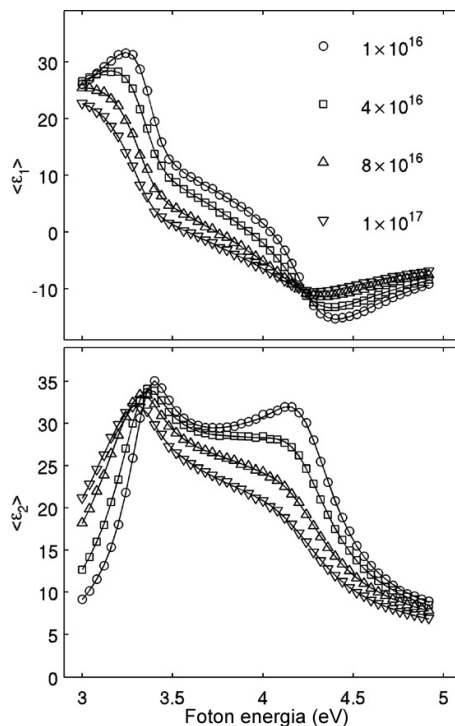
Az ellipszometriai mérésekből meghatározott pseudo-dielektromos függvényeket a 3.18. ábra mutatja a fluencia függvényében. A pseudo-dielektromos függvény a mért Ψ és Δ ellipszometriai szögekből tömbi anyagot feltételezve minden hullámhosszra közvetlenül számolható. A 3,4 eV energiájú E₁ kritikus pontnál lévő abszorpciós csúcs a nagyobb fluenciák esetében is megmarad, ami arra utal, hogy a felület közelében nem következik be teljes amorfizáció. A behatolási mélység a kritikus pontok abszorpciós csúcsait tartalmazó tartományban (szerkezet-érzékeny hullámhossztartomány) 100 nm alatt marad. Ennél nagyobb behatolási mélységeket csak a 2,5 eV-nál kisebb foton energiákra kapunk. A nagyobb fluenciák esetében a 2 eV alatti tartományban megjelenő interferencia oszcillációk azt mutatják, hogy ebben a tartományban már az eltemetett roncsolt réteg is látható. A behatolási mélységeket a 3.18. ábrával összehasonlítva látható, hogy a 2,5 eV fölötti tartományban csak a profil felület közeli tartománya látható. Ezért ebben a hullámhossztartományban a rétegszerkezetet egyszerű optikai modellel tudtam leírni, amelyben a felületi oxidot, az alatta lévő



3.17. ábra. RBS/C roncsoltsági profilok 165° -os szórási szögnél (≈ 15 nm-es felbontás) különböző fluenciákra. N. Q. Khanh mérése.



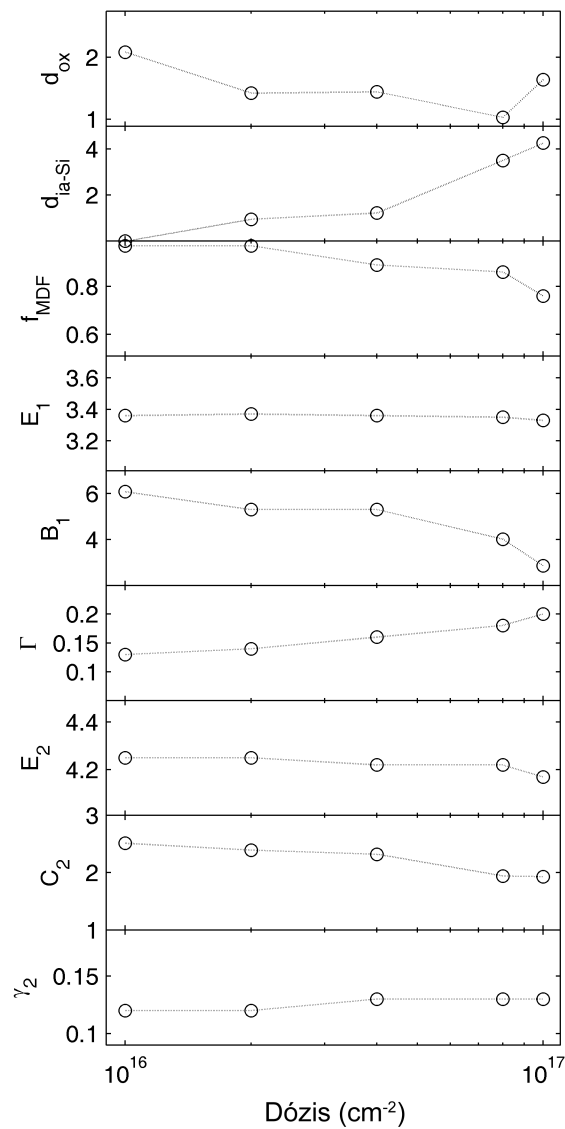
3.18. ábra. Az egykristályos (c-Si) és amorf (ia-Si) szilícium, a különböző fluenciákkal implantált minták pszeudo-dielektromos függvénye valamint az ebből számolt behatolási mélység.



3.19. ábra. Mért (szimbólumok) és illesztett (vonalak) dielektromos függvények a különböző fluenciákra.

felületi amorf réteget (ia-Si, [77, 74]) és az ez alatt elhelyezkedő részlegesen roncsolt tartományt veszem figyelembe. Utóbbit egykristályos és Adachi-féle módszerrel parametrizált szilícium effektív közeg keverékeként (2.2. fejezet, 2.3. ábra). Az illesztett pszeudo-dielektromos függvényeket és az illesztett paramétereket rendre a 3.19. és a 3.20. ábra mutatja.

A felületi amorf réteg vastagsága a legkisebbtől a legnagyobb fluenciáig 0-ról 4,3 nm-re növekszik, összhangban az RBS/C mérésből meghatározott 0→3,2 nm tartománnyal. A kisélesedési paraméterek szisztematikusan növekednek a fluenciával. Ez azzal áll összefüggésben, hogy az elektronok élettartama a hibahelyeken való szóródás következtében csökken. A kisélesedés és az oszcillátorenergiák fluenciafüggő változása összhangban áll az Adachi és szerzőtársai által publikált eredményekkel [78].



3.20. ábra. Illesztett modell paraméterek. d_{ox} : felületi oxid réteg vastagsága (nm); d_{ia-Si} : felületi amorf réteg vastagsága (nm); f_{MDF} : az Adachi-féle féle parametrizált komponens térfogataránya (ld. 10. oldal); E_1 : az E_1 oszcillátor energiája; B_1 : az E_1 oszcillátor erőssége; Γ : az E_1 oszcillátor kiszélesedése; E_2 : az E_2 oszcillátor energiája; C_2 : az E_2 oszcillátor erőssége; γ_2 : az E_2 oszcillátor kiszélesedése.

4. fejezet

Nanokristályos félvezetők optikai modellezése

A legelterjedtebb vékonyréteg készítési technikákkal (porlasztás, párologtatás, gőzfázisú leválasztás) létrehozott félvezető rétegek általában polikristályosak vagy amorfak. Ezért az optikai tulajdonságok szerkezetfüggésének modellezése számos alkalmazásban elsődleges fontosságú. Ez nem csak a rétegvastagság pontos megméréséhez szükséges, hanem magáról a szerkezetről is fontos indirekt információt szolgáltat (kristályosság, szemcseméret, homogenitás, tömörség, anizotrópia, stb.). Korábbi, részben a PhD dolgozatomhoz kötődő munkáimban megmutattam, hogy az általam vizsgált, főként poli- [79, 80, 81, 82, 83] és pórusos [84, 85] szilícium rétegek jól modellezhetők az effektív közeg módszerrel (2.2. fejezet). Ebben a modellben a réteg dielektromos függvényét egykristályos, polikristályos és amorf szilícium, valamint a vákuum dielektromos függvényének segítségével számoltam ki, a réteget ezen fázisok keverékének tekintve. Azt találtam, hogy az illesztés minősége függ a morfológiától. Abban az esetben jó az illesztés, ha a szemcseszerkezet hasonlít a referenciaként használt polikristályos szilíciuméra.

Általánosabb leírás valósítható meg az egyes fázisok dielektromos függvényének elektronszerkezetet figyelembe vevő modellezésével [56]. Ebben a megközelítésben a kritikus pontok típusától függő oszcillátorok összessége adja a dielektromos függvényt (2.2. fejezet). Ez a modell lehetőséget ad szélesebb tartományban mozgó anyagtulajdonságok modellezésére. Továbbá az anyag szerkezetére nem csak az összetevők térfogatarányából következtethetünk (mint az effektív közeg módszer esetében), hanem az elektronszerkezet megváltozását leíró számos modellparaméteren keresztül is.

A fejezet első részében még a hagyományos effektív közeg módszer alkalmazását mutatom be elektrokémia nélkül mart (stain etching) pórusos szilíciumra a Lohner Tivadar által javasolt finomszemcsés polikristályos szilícium referencia alkalmazásával [84]. A második részben már az Adachi-féle parametrizálás használata látható szisztematikusan változó szemcseméretű pórusos szilícium vizsgálatára [82]. A szemcseméret mindkét esetben a tipikusan néhány nanométertől néhányszor tíz nanométerig terjedő mérettartományban mozgott.¹

¹A témában doktoranduszommal, Agócs Emillel, számos új eredményt publikáltunk [86, 87, 88], amelyek terjedelmi okokból nem szerepelnek ebben az értekezésben.

4.1. Hagyományos marással készült pórusos szilícium rétegek

A Vázsonyi Éva által kezdeményezett, és az általa hagyományos (nem elektrokémiai) marással készített pórusos szilícium mintákon végrehajtott kísérletsorozatban a rétegépülés folyamatának a hordozó adalékoltságától és a marási időtől való függését vizsgáltuk. A kísérletsorozatban az én feladatom az ellipszometria modellek meghatározása és az ellipszometria eredmények értelmezése volt.

A hagyományos minták 2×10^{15} atom/cm³ adalékoltságú bór (p), 2×10^{15} atom/cm³ adalékoltságú foszfor (n), 2×10^{18} atom/cm³ adalékoltságú bór (p^+) és 2×10^{18} atom/cm³ adalékoltságú foszfor (n^+) hordozókon készültek 50:1 és 500:1 között változó koncentrációjú HF és NaNO₂ alkalmazásával.

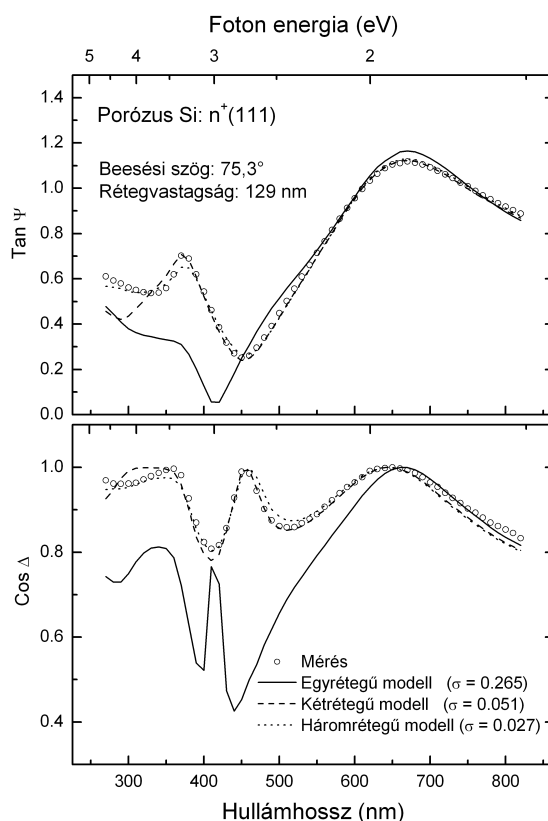
A pórusos szilícium dielektromos függvénye jól modellezhető az effektív közeg közelítés módszerével, azt feltételezve, hogy a szerkezet kristályos szilícium és üregek keveréke. Az effektív közeg módszer részletei és használatának feltételei a 2.2. fejezetben olvashatók. A modellek fejlesztésében az egyik legnagyobb előrelépés a nanokristályos szilícium referencia bevezetése volt [89, 90, 84, 76]. Ahogy polyszilícium vékonyrétegek vizsgálata során is megmutattam, a nanokristályos szilícium referencia használata különösen előnyös finomszemcsés szerkezetek modellezéséhez, mert az elektronok szemcsehatárokon való szóródása miatt bekövetkező abszorpciós csúcs kiszélesedés az egykristályos referenciával nem írható le [79, 82].

A pórusos szilícium megfelelő ellipszometria modellezésének másik fontos eleme a réteghatárok eltérő tulajdonsága. Általánosságban is elmondható, hogy a vékonyréteg készítmények döntő többsége nem eredményez az ellipszometria érzékenységi szintjén² tökéletes rétegeket, vagyis nanométeres vastagság és 10^{-4} -es törésmutató skálán a rétegek mélységben nem tekinthetők homogénnek. Pórusos szilícium esetén a vizsgált rétegek döntő többségében figyelembe kell venni egy porozitásban és szemcsézettségben eltérő, néhányszor tíz nanométer vastagságú felületi és alsó határfelületi réteget [91]. Ennek jelentőségét szemlélteti a 4.1. ábra. Míg az egyrétegű modellel rossz az illesztés a teljes hullámhossztartományban, addig a kétrétegű modell a nagyobb (350 nm feletti) hullámhosszak tartományában már jó illesztést ad. A háromrétegű modellel jó illesztést kapunk a 350 nm alatti hullámhossztartományban is. Ennek az az oka, hogy szilíciumban a fény behatolási mélysége a kritikus pontokhoz tartozó foton energiákon ($\approx 3,3$ és $\approx 4,2$ eV, azaz rendre ≈ 375 és ≈ 295 nanométeres hullámhosszak) jelentősen (5-10 nm) lecsökken.³ Így a rövidebb (≈ 400 nm alatti) hullámhosszak tartományában az illesztés különösen érzékenyvé válik a felület megfelelő modellezésére (a bevezetett harmadik réteg pedig éppen ezt a célt hivatott szolgálni).

A 4.1. táblázatban látható, hogy az ehhez a (csakúgy mint a többi) mintához tartozó alrétegekben az üregek térfogatszázaléka (porozitás) nagymértékű és monoton csökkenést mutat a hordozó irányában, összhangban azzal az elképzeléssel, hogy a reagensek koncentrációja és a marási idő a felületnél nagyobb, mivel ezen vegyületek a felülettől diffundálnak az alsó határfelület irányába. A porozitás csökkenésével párhuzamosan a nanokristályos szilícium komponens monoton növekedést mutat, amelynek mértéke a térfogategységre jutó szemcsehatárok számával arányos, és a szemcseméret csökkenésére utal [76].

²Rétegvastagságban nanométer alatti, törésmutatóban 10^{-4} körüli az érzékenység.

³Mivel a pórusos szilícium optikailag "hígabb", mint az egykristályos, így a behatolási mélység pórusos szilíciumban ennek többszöröse.



4.1. ábra. Mért és különböző rétegszámú modellekkel illesztett ellipszometriai spektrumok nem elektrokémiaailag (HF:HNO₃/500:1) mart n^+ típusú pórusos szilíciumon.

A rétegek vastagsága n , n^+ és p típusú hordozók esetén gyorsan növekszik a marási idővel, és hamar (néhányszor tíz másodperc alatt) beáll egy egyensúlyi állapot. A vizsgált tartományban a porozitás és a szemcseszerkezet is változatlan maradt. Gravimetriai mérések azt mutatták, hogy az eltávolított anyagmennyiség az idővel lineárisan nő. A stacionárius állapotban a felszínen és a réteg alsó határán azonosak a marási sebességek, a réteg vastagsága és szerkezete nem változik. A felületen lévő alrétegek a többinél vékonyabbak, ami arra utal, hogy a morfológia gyorsabban változik a felszín közelében. A felszíni alréteg porozitása igen magas, 80 % körüli - kivéve a p^+ sorozatot (4.2. táblázat), ahol alacsony, 20-30 % körüli porozitást kapunk, (a vizsgált tartományban) nem szaturálódó vastagsággal.

A p -típusú szeletek adalék koncentrációja nagyban befolyásolja a maximális rétegvastagságot. Az adalék koncentráció 2×10^{15} atom/cm³-ről 2×10^{16} atom/cm³-re való növelése a rétegvastagságot 300-400 nm-ről 700-800 nm-re növelte. A 4.2. táblázatban szereplő, 2×10^{18} atom/cm³ koncentrációhoz tartozó sorozat tanúsága szerint az ehhez és efölötti koncentrációkhoz tartozó vastagságok nem állnak be egy egyensúlyi állapotba, hanem határtalanul növekednek. 5 perc marási idő után a rétegek vastagsága 6-8 μm volt.

4.1. táblázat. Az ellipszometriai modell és illesztett paramétereit 2×10^{15} atom/cm³ (n) és 5×10^{18} atom/cm³ (n^+) foszfor adalékolású hordozók esetében. T_m a marási időt, σ az illesztés jóságát, d az egyes rétegek vastagságát, f_n az nc-Si, f_v pedig az üreg komponens térfogatarányát jelöli. d_t a teljes rétegvastagság.

Minta	T_m (s)	σ	1. réteg (felület)			2. réteg			3. réteg			d_t (nm)
			d_1 (nm)	$f_{n,1}$ (%)	$f_{v,1}$ (%)	d_2 (nm)	$f_{n,2}$ (%)	$f_{v,2}$ (%)	d_3 (nm)	$f_{n,3}$ (%)	$f_{v,3}$ (%)	
n(100)												
1	20	0,045	47	19	81	41	29	71	80	39	61	168
2	25	0,056	50	18	82	43	27	73	88	39	61	181
3	35	0,068	52	20	80	47	28	72	91	39	61	190
4	50	0,072	63	19	81	51	29	71	97	41	59	211
n ⁺ (111)												
1	10	0,027	22	78	46	31	69	56	56	42	58	129
2	20	0,048	38	20	80	44	31	69	82	42	58	164
3	25	0,046	38	19	81	44	30	70	86	41	59	168
4	35	0,045	38	19	81	44	30	70	86	41	59	168
5	60	0,062	64	21	79	56	32	68	94	44	56	214

4.2. táblázat. Az ellipszometriai modell és illesztett paramétereit 2×10^{15} atom/cm³ (p) és 5×10^{18} atom/cm³ (p^+) bór adalékolású hordozók esetében. T_m a marási időt, σ az illesztés jóságát, d az egyes rétegek vastagságát, f_n az nc-Si, f_v pedig az üreg komponens térfogatarányát jelöli. d_t a teljes rétegvastagság. (A p(100) minta esetében az első oszlopban az NaNO₂ koncentrációk vannak megadva g/l-ben.)

	1. réteg (felület)					2. réteg			3. réteg			d_t
	T_m (s)	σ	d_1 (nm)	$f_{n,1}$ (%)	$f_{v,1}$ (%)	d_2 (nm)	$f_{n,2}$ (%)	$f_{v,2}$ (%)	d_3 (nm)	$f_{n,3}$ (%)	$f_{v,3}$ (%)	
p(100) [NaNO ₂ (g/l)]												
-	120	0,057	73	23	77	58	35	65	87	49	51	218
0,1	120	0,042	114	19	81	114	26	74	24	56	44	252
0,3	120	0,078	85	18	82	109	27	73	21	50	50	215
0,6	120	0,079	104	17	83	118	27	73	25	54	46	247
p ⁺ (111)												
1	15	0,085	46	71	29	348	73	27	49	76	24	443
2	30	0,097	287	68	32	216	74	26	303	80	20	806
3	60	0,095	438	68	34	512	72	28	415	82	18	1365

4.2. Változó nanoszemcse-méretű pórusos szilícium rétegek

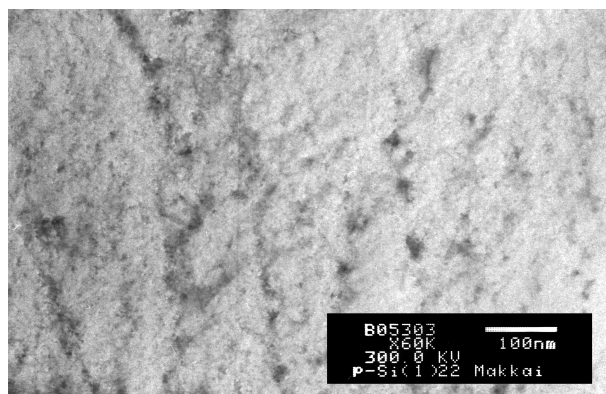
Elektrokémiai marással készült pórusos szilícium esetében a szemcseszerkezet nagymértékben függ a szubsztrát adalékoltságától. Ez kihasználható kontrollált és szisztematikus módon változtatott méretű nanokristályokat tartalmazó mintasorozat előállítására, és a parametrikus modellek tesztelésére.

A szubsztrát p-típusú, bórral adalékol (3 × 10¹⁷-8 × 10¹⁹ atom/cm³) egykristályos szilícium volt. A négyzetes ellenállás 0,01 és 0,09 Ωcm között változott (4.3. táblázat).

A rétegvastagság és a nanokristályok mérete rendre 100-1000 nm és 3-12 nm között

4.3. táblázat. Különböző méretű nanokristályokat tartalmazó pórusos szilícium minták előállítási paramétereit.

Minta	Szubsztrát ellenállása (Ωcm)	Nominális vastagság (nm)	Nominális kristálméret (nm)
13	0,01	120	12
14	0,01	850	12
16	0,03	200	6
17	0,03	550	6
21	0,09	400	3
22	0,09	990	3

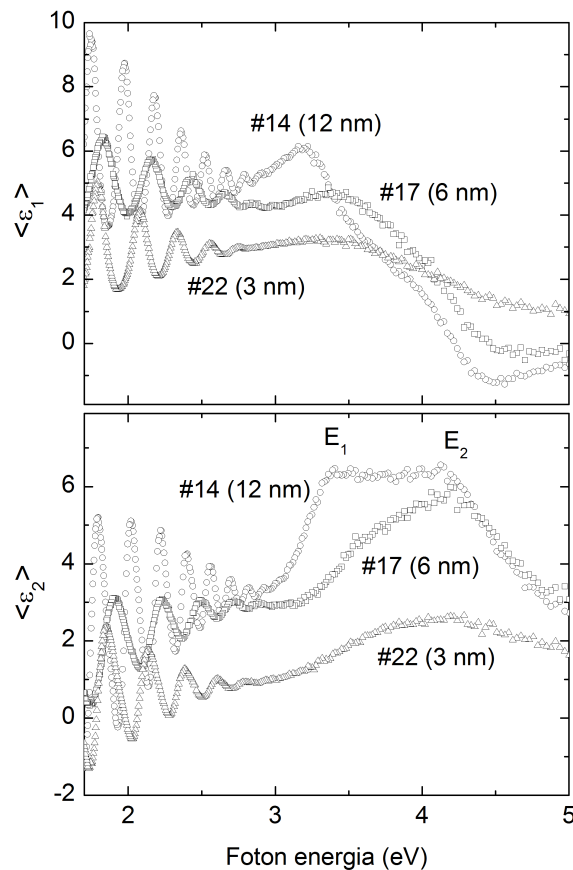


4.2. ábra. A 22-es mintáról készült pásztázó elektronmikroszkópos felvétel. Jól látható a finom szemcsészetű szivacsos szerkezet. A felvételt Makkai Zsolt készítette.

volt. Az elektrokémiai marás 50 %-os HF és 100 %-os etanol 1:1 arányú keverékével történt. A legkisebb adalékoltság esetében létrejövő homogén, finomszemcsészetű, szivacsos szerkezetet a 4.2. ábra mutatja.

Az ellipszometriával mért pseudo-dielektromos függvényeken jól látszik a legkisebb szemcseméret esetében az abszorpciós csúcsok eltűnése a kritikus pontoknál (4.3. ábra). A csúcsok a szemcseméret csökkenésével egyre jobban lekerekednek. A kiértékelések legfőbb célja, hogy ezt a lekerekedést az illesztett oszcillátorok kiszélesedési paraméterein keresztül kvantitatív módon is ki tudjam fejezni. Az ábrán jól megfigyelhető, amit a 3.2. ábra kapcsán korábban már hangsúlyoztam. A 3 eV fotonenergia alatti tartományban megjelenő hullámszás mutatja, hogy a réteg alsó határa csak ezen a hullámhosszakon látható. A kritikus pontokat is tartalmazó 3-5 eV közötti hullámhossztartományban a fény nem jut el a réteghatárig. Ez egyben azt is jelenti, hogy mélységben változó szerkezet esetén a kritikus pontok abszorpciós csúcsaihoz tartozó behatolási mélységeknél található szerkezet mérhető legérzékenyebben.

A pórusos szilícium réteg határfelületei nanométeres skálán optikailag nem tökéletesek. Ez az ellipszometriai modellalkotás szempontjából azt jelenti, hogy mind a felső mind az alsó határfelületen figyelembe kell venni egy átmeneti réteget, amelynek dielektromos függvénye a határ két oldalán elhelyezkedő anyagok dielektromos függvényének effektív közeg modellel számolt keveréke. A lokális minimumok elkerü-



4.3. ábra. Ellipszometriával mért pseudo-dielektromos függvények.

lése érdekében a modellalkotásban a szokásos módszert alkalmaztam: az egyszerűbb modellektől haladtam a bonyolultabbak felé (4.4. ábra).

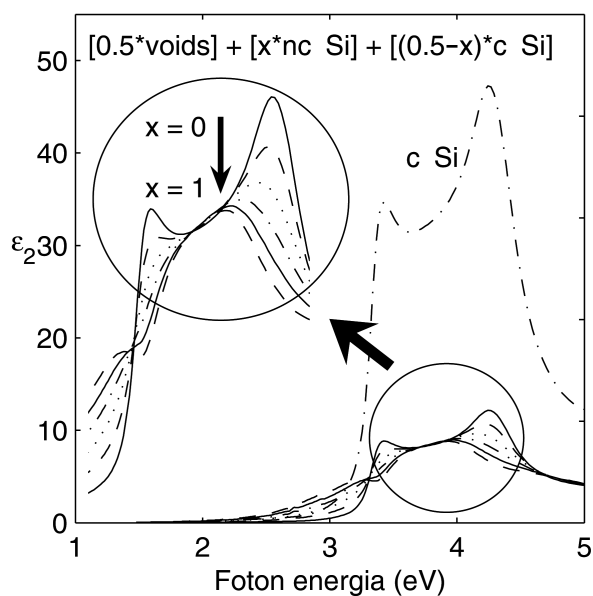
A 4.4. táblázat a 17-es számú minta illesztett paramétereit mutatja a dielektromos függvény parametrizálása nélküli, irodalmi dielektromos függvény referenciákat használó modellekre. Az MSE (mean squared error) értékek az illesztés hibáját mutatják. 10 alatti érték már jó illesztést jelez. Az eredményekből az látszik, hogy igazán jó illesztést csak a határrétegek (érdeesség a pórusos szilícium réteg alsó és felső határán) figyelembe vételével lehet kapni. Figyelemre méltó azonban, hogy az illesztésben a legnagyobb javulást a nanokristályos referencia bevezetése jelenti. A jelenség könnyebben megérthető a 4.5. ábra alapján: egykristályos szilícium, nanokristályos szilícium és üreg komponensek térfogatarányainak megfelelő változtatásával a kritikus pontok csúcsainak lekerelkedéséhez és amplitúdó-csökkenéséhez hasonló hatás érhető el. Ez a modell azonban a nanokristályos referenciánál (nc-Si) kisebb szemcseméretű minták esetében nem megfelelő, továbbá a spektrum bizonyos részein ($\approx 3,3$ eV) anomális jelek jelennek meg.

Ezeket a problémákat megoldja a dielektromos függvény Adachi-féle parametrizálása (3e modell a 4.4. ábrán - a modell részletes leírása a 2.2. fejezetben található). A nagyszámú illesztett paraméter miatt (4.5. táblázat) saját kiértékelőprogramot készítettem MATLAB nyelven, így lehetővé vált a futtatás az MFA 128 processzoros grid számítógépén Octave⁴ alatt. A programban minden paraméterhez definiálni lehet

⁴Az Octave olyan nyílt kódú matematikai programcsomag, amely utasítás szinten kompatibilis a MATLAB programmal.

FELTÉTELEZETT SZERKEZET			
c-Si szubsztrát	Határfelületi érdesség	PorSi réteg	Felületi érdesség
OPTIKAI MODELLEK			
Nr.			
12:	c-Si	c-Si + voids	
13:	c-Si	c-Si + voids + nc-Si	
26:	c-Si	c-Si + voids + nc-Si	c-Si + voids + nc-Si
39:	c-Si	c-Si + voids + nc-Si	c-Si + voids + nc-Si
3e:	c-Si	c-Si + voids + MDF	c-Si + voids + MDF

4.4. ábra. A pórusos szilícium minták kiértékeléséhez használt optikai modellek. A számozásban az első karakter a rétegek, a második pedig a paraméterek számát jelöli. Az "MDF" jelölés az Adachi-féle parametrizálásra utal (2.2. fejezet).



4.5. ábra. A dielektromos függvény képzetes része különböző egykristályos (c-Si), nanokristályos (nc-Si) és vákuum (void) dielektromos függvények keverékeként. A c-Si dielektromos függvénye referenciaként pontozott vonallal látható.

4.4. táblázat. Növekvő komplexitású optikai modellek illesztett paramétereire a 17-es számú mintára. ("Mod." az optikai modell számát, "Szub." a hordozót jelenti). A modellek számozásában az első karakter a rétegek számát, a második karakter a paraméterek számát jelöli. MSE (mean squared error) az illesztés hibája (kisebb számérték jobb illesztést jelent - általában 10 alatti érték már jó illesztést mutat). A 12, 13 és 26 modellek nem eredményeznek elfogadható illesztést. "c-Si", "nc-Si" és "voids" rendre az egykristályos és nanokristályos szilícium, valamint a vákuum dielektromos függvényét jelölik.

Mod.	Szub.	Határréteg	PorSi réteg	Felületi érdesség	MSE
12	c-Si		d = 703,4±4,4 nm c-Si + 0,60±0,002 voids		256,7
13	c-Si		d = 702,5±9,7 nm c-Si + 0,59±0,001 voids + 2,47±0,01 nc-Si		67,9
26	c-Si		d = 508,5±1,1 nm c-Si + 0,44±0,001 voids + 2,28±0,04 nc-Si	d = 32,7±0,3 nm c-Si + 0,55±0,001 voids + 1,37±0,02 nc-Si	18,2
39	c-Si	d = 68,4±4,8 nm c-Si + 0,36±0,03 voids + 1,59±0,92 nc-Si	d = 456,0±7,5 nm c-Si + 0,45±0,002 voids + 0,97±0,03 nc-Si	d = 29,1±0,2 nm c-Si + 0,57±0,001 voids + 0,66±0,02 nc-Si	8,9

egy tartományt, amelyen belül az minden lépésben választ egy véletlenszerű értéket. Közel 10^6 paraméterkombinációra kiszámolja az MSE értékét, majd az 50 legkisebb MSE-hez tartozó paraméterkombinációról indulva elvégzi a Levenberg-Marquardt iterációt, amely az induló értékhez legközelebb eső minimumba viszi a paramétereket. A kereskedelmi szoftverekben sem az Adachi-féle parametrizálás, sem a fenti paraméterkereső algoritmus nem található meg, pedig mindez a 4.6. ábra tanúsága szerint elengedhetetlenül fontos a megfelelő illesztés eléréséhez. A 3e modell előnye különösen a 4-5 eV foton energia tartományban számottevő. A pszeudo-dielektromos függvényre való illesztés ugyancsak megnöveli az érzékenységet ebben a kritikus pontokhoz tartozó foton energia tartományban. Az illesztett paraméterek értékei és a paraméterek bizonytalansága a 4.6. táblázatban található.

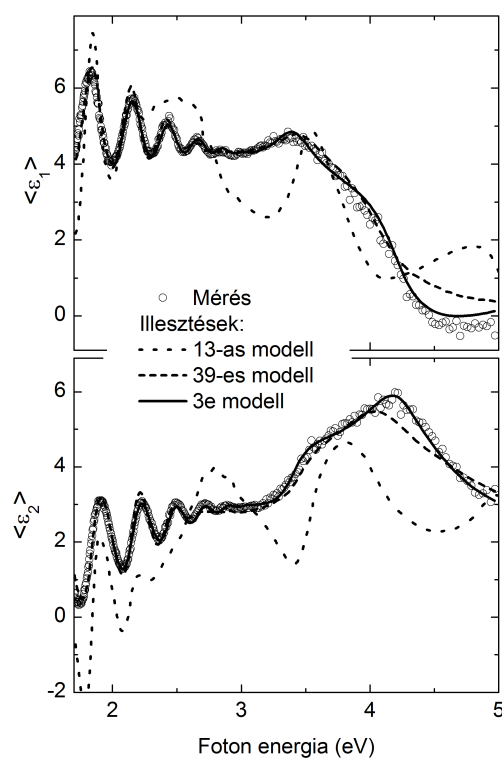
A 3e modellből számolt dielektromos függvényeken jól látszik a csúcsok kiszélesedése (laposodása) és eltolódása a szemcseméret függvényében (4.7. ábra). A 3 nm szemcseméretű minta dielektromos függvénye már közel áll az amorf szilícium dielektromos függvényéhez (3.1. ábra). Az E_1 (Γ_1) és E_2 (Γ_2) kritikus pontokhoz tartozó kiszélesedések egyaránt jó korrelációt mutatnak a szemcsemérettel, amit befolyásol a rétegek vastagsága (4.8. ábra). Vékonyabb rétegek esetében minden szemcsemérethez szisztematikusan nagyobb kiszélesedést kapunk, ami arra utal, hogy a szemcseméret a felülettől a hordozó felé haladva növekszik.

A kiértékelésekkel demonstráltam, hogy megfelelő modellezéssel a pórusos szilícium vékonyrétegek számos tulajdonsága (rétegvastagság, határrétegek tulajdonságai, szemcsézettség, porozitás) nagy érzékenységgel meghatározható [91, 76]. Az eredmények azonban azt is megmutatták, hogy a pórusos szilícium vékonyrétegek nem a legtokéletesebbek, ha a mérési módszer "kalibrálásához" használható nanokristályos referenciát keresünk. Ennek legfőképpen az az oka, hogy a réteghatárok nem tökéle-

4.5. táblázat. A 3e modell paraméterillesztési mátrixa. "F" az illesztett paramétereket jelöli (1, ha illesztett, 0 ha rögzített), "C" a csatolt paramétereket (a számérték a hozzá csatolt paraméter sorszámát jelöli), "X" pedig a csatolási állandót. "AH" és "FH" rendre a paraméterek alsó határa és felső határa. A paraméterkeresés során ebből a tartományból választ a program véletlenszerűen.

Paraméter	AH	FH	F	C	X
1. d1 (nm)	22,00	32,00	1	0	0,000
2. d2 (nm)	500,00	520,00	1	0	0,000
3. d3 (nm)	40,00	55,00	1	0	0,000
4. fv1	0,52	0,63	1	0	0,000
5. fv2	0,38	0,48	1	0	0,000
6. fv3	0,28	0,40	1	0	0,000
7. E_0p (eV)	3,35	3,35	0	0	0,000
8. C_0p	0,07	0,07	0	0	0,000
9. gm_0p	0,09	0,09	0	0	0,000
10. E_1 (eV)	3,30	3,46	1	0	0,000
11. A_1	3,18	3,30	1	0	0,000
12. A_1x	0,90	0,90	0	11	0,280
13. Gm_1 (eV)	0,10	0,25	1	0	0,000
14. E_1p (eV)	5,33	5,33	0	0	0,000
15. C_1p	0,30	0,30	0	0	0,000
16. gm_1p	0,12	0,12	0	0	0,000
17. E_2 (eV)	4,20	4,35	1	0	0,000
18. A_2	4,80	5,20	1	0	0,000
19. C_2	3,00	4,00	0	18	0,750
20. Gm_2 (eV)	0,08	0,20	1	0	0,000
21. gm_2	0,15	0,25	1	0	0,000
22. ei	0,30	1,00	1	0	0,000

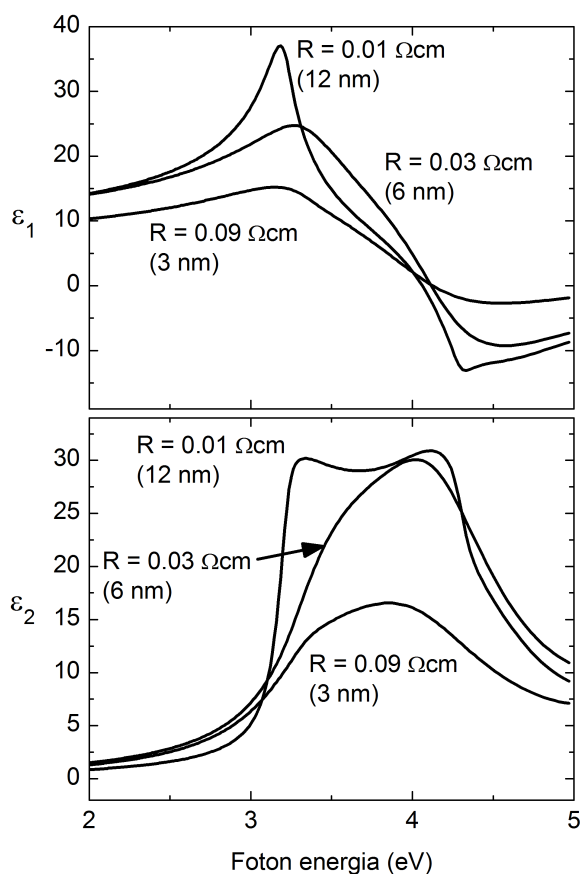
tesek (a nanométeres skálán), valamint a réteg szerkezete mélységben nem tökéletesen homogén (ezt legjobban a 4.6. ábrán a 13-as modell tökéletlen illesztése példázza). Azóta ígéretes kísérleteink vannak CVD leválasztással, hőkezeléssel és oxidálással [86] valamint PECVD-vel készített multiréteg referencia mintákkal [92].



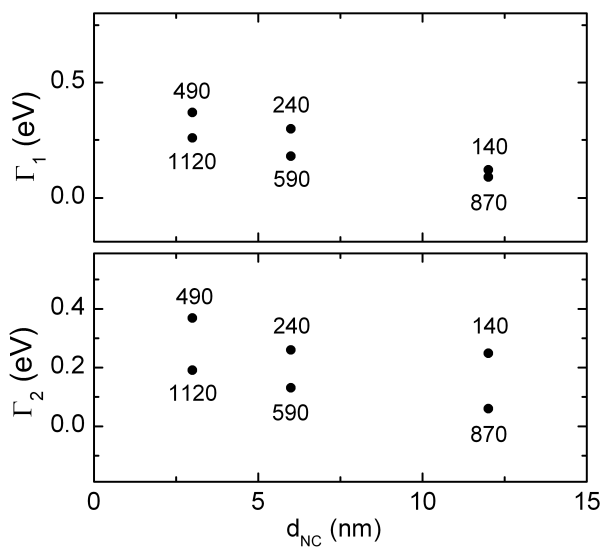
4.6. ábra. Ellipszometriai illesztések a 17-es minta pszeudo-dielektromos függvényeire különböző optikai modellekkel.

4.6. táblázat. A 3e modell paramétereinek illesztett értékei a 17-es számú mintára (az illesztés hibája $\text{MSE} = 3,8$).

Paraméter	Illesztett érték	Hiba
d1 (nm)	27,068	0,023
d2 (nm)	516,787	0,625
d3 (nm)	49,117	0,381
fv1	0,570	0,002
fv2	0,426	0,004
fv3	0,349	0,006
E_0p (eV)	3,350	-
C_0p	0,070	-
gm_0p	0,090	-
E_1 (eV)	3,410	0,007
A_1	3,240	0,128
A_1x	0,907	-
Gm_1 (eV)	0,179	0,009
E_1p (eV)	5,330	-
C_1p	0,300	-
gm_1p	0,120	-
E_2 (eV)	4,270	0,004
A_2	5,080	0,162
C_2	3,600	-
Gm_2 (eV)	0,133	0,007
gm_2	0,198	0,002
ei	0,589	0,043



4.7. ábra. Különböző kristálméretű minták dielektromos függvénye a 3e modellből.



4.8. ábra. Az E_1 (Γ_1) és E_2 (Γ_2) kritikus pontok kiszélesedési paraméterei a szemcseméret (d_{NC}) függvényében. A pontok mellett található számok a rétegvastagságot mutatják. A kiszélesedési paraméterek hibája 0,002, azaz jóval kisebb, mint a körök mérete.

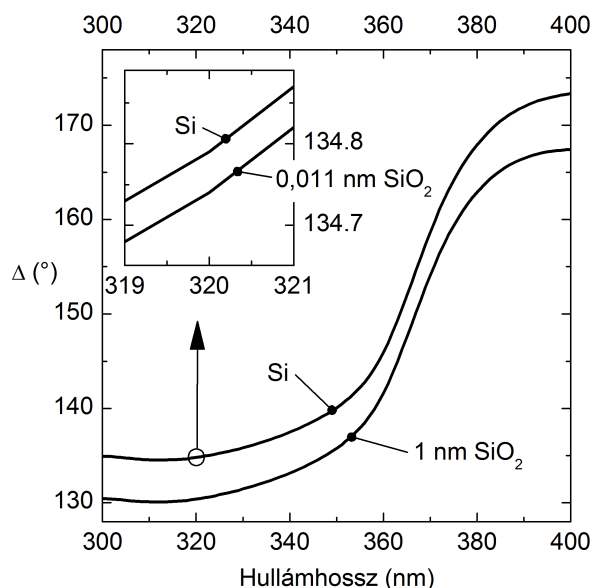
5. fejezet

Ultravékony rétegek vizsgálata

Az ellipszometria egyik legfontosabb potenciális - jelenleg még kevésbé kiaknázott - alkalmazási területe az ultra-vékony (tipikusan nanométer alatti, de maximum néhány nanométer vastagságú) rétegek vizsgálata. Jelenleg az egyik legfontosabb alkalmazási terület a kapuelektrodok egyre vékonyabbá (néhány nanométer) váló szigetelő rétegeinek (SiO_2 és magas dielektromos állandójú szigetelők) a nagyérzékenységű mérése. De a rétegvastagság csökkenésével a felület és a felületi ultravékony rétegek mérése egyre fontosabbá válik. Napjainkban az ellipszometria egyre fontosabb szerepet kap a grafén kutatásban is.

Főleg az *in situ* alkalmazási lehetőségek perspektivikusak [93]. Legnagyobb probléma a megfelelő optikai modellek megalkotása, mert ezekhez a rétegekhez tömbi anyagra vonatkozó irodalmi törésmutató referenciák csak korlátozottan használhatók. Ebben az esetben megoldást jelent a törésmutató hullámhosszfüggésének parametrizálása (diszperziós formulák), vagy bonyolultabb hullámhosszfüggés esetében egy szűkebb hullámhossztartományban diszperziós formula felhasználásával meghatározott vastagság, és ezen vastagság ismeretében szélesebb hullámhossztartományban a törésmutató hullámhosszfüggésének meghatározása minden hullámhosszra egymástól függetlenül, több beesési szögű mérésből. Ennek a módszernek egy kiváló módon továbbfejlesztett változata a B-Spline modell [94], amely azt használja ki, hogy kis mértékű diszperzió esetén szűk hullámhossztartományban a törésmutató alacsony rendű polinomokkal illeszthető. Ebben a fejezetben a szilícium oxidjának kis diszperziója miatt egyszerű diszperziós formulák és helyenként irodalmi referenciák is megfelelő eredményt szolgáltatnak.

Az ellipszometria kiemelkedő érzékenységét hivatott érzékeltetni az 5.1. ábra, amely szimulált Δ spektrumokat ábrázol optikai minőségű egykristályos szilícium hordozóra (Si) valamint az ezen a hordozón létrehozott 1 nanométeres és 0,011 nanométeres termikus szilícium dioxida (SiO_2). A betétábra a 320 nanométeres hullámhossz közelében kinagyítva mutatja, hogy 0,011 nanométer SiO_2 mennyivel tolja el a spektrumot. Ez az a vastagság, amely a módszer érzékenységének megfelelő értékkel tolja el a spektrumot (az érzékenység – ismételhetőség – Δ -ra 0,05°). Az 1 nanométeres SiO_2 réteg a módszer érzékenységi határánál két nagyságrenddel (5°) nagyobb változást okoz a Δ spektrumban (320 nanométeres hullámhossznál). Ez az eltolás más rétegrendszerre eltérő lehet, mivel függ a hordozó, a réteg és a közeg törésmutatójától, továbbá a beesési szögtől is.



5.1. ábra. Szimulált Δ spektrumok optikai minőségű egykristályos szilícium hordozóra (Si) valamint az ezen a hordozón létrehozott 1 nanométeres és 0,011 nanométeres termikus szilícium dioxidra (SiO₂). A betétábrán látható 0,011 nm-es SiO₂ réteg a legérzékenyebb, 320 nm körüli hullámhosszak tartományában éppen a mérési érzékenységnek (0,05° Ψ -re és Δ -ra egyaránt) megfelelő eltérést okoz Δ -ban.

5.1. Eltemetett diffúziós gát

Az ebben a fejezetben leírt munkában az ellipszometriai méréstechnikát továbbfejlesztettem polikristályos és amorf szilícium vékonyrétegek alatt diffúziós gát céljából létrehozott ultra-vékony szilícium oxid rétegek vastagságának meghatározására. A vizsgálatokat az Infineon cég munkatársaival végeztem a cég által poliszilícium emitteres tranzisztorok gyártására használt technológia fejlesztése céljából. A kérdés a közel 100 nanométeres polikristályos vagy amorf szilícium alatt létrehozott néhány tized nanométeres oxid réteg vastagsága és a vastagság-mérés érzékenysége volt.

A technológia sekély átmenetes tranzisztorok előállítására alkalmas. Első lépés HF marás után egy néhány tized nanométeres oxid réteg elkészítése RTP (rapid thermal processing) eljárással a p-típusú (bórral adalékolt) hordozón, amely a tranzisztor bázisul szolgál (5.1. táblázat, 36., 39. és 42. minta). A második lépés a finom szemcséjű polikristályos szilíciumréteg (nc-Si) létrehozása alacsony nyomású kémiai gőzfázisú leválasztással (LPCVD, 5.1. táblázat, 35., 38. és 41. minta, NPOLY). A harmadik lépésben a réteget 20 keV energiájú, $9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ fluenciájú As ionok implantációjával amorfizálják, majd mintegy 1600 nm BPSG (borophosphosilicate glass) leválasztása után RTP eljárással hőkezelik, és szelektív marással eltávolítják a BPSG réteget (5.1. táblázat, 34., 37. és 40. minta). A hőkezelés alatt az ionimplantáció során amorfizált szilícium réteg az eredeténél nagyobb szemcseméretben visszakristályosodik. A BPSG réteg lehetővé teszi, hogy a felületi érdesség a kristályosodás közben alacsony maradjon. Az arzénnel n-típusúra adalékolt szilícium rétegből a hőkezelés során az arzén bediffundál a p-típusú hordozóba. A kezdő lépésben létrehozott vékony oxid réteg diffúziós gátként szolgál, lehetővé téve a sekély bázis-emitter átmenet létrehozását.

A mérések előtt a várható érzékenységet szimulációval ellenőriztem. Az 5.2. ábrán a folytonos vonal egykristályos szilícium szubsztrátra leválasztott 100 nanométeres na-

5.1. táblázat. Mintakészítési paraméterek. d_n az RTP oxid rétegek megcélzott nominális vastagságát jelöli. Csak a rétegépítő műveleteket tüntettem fel.

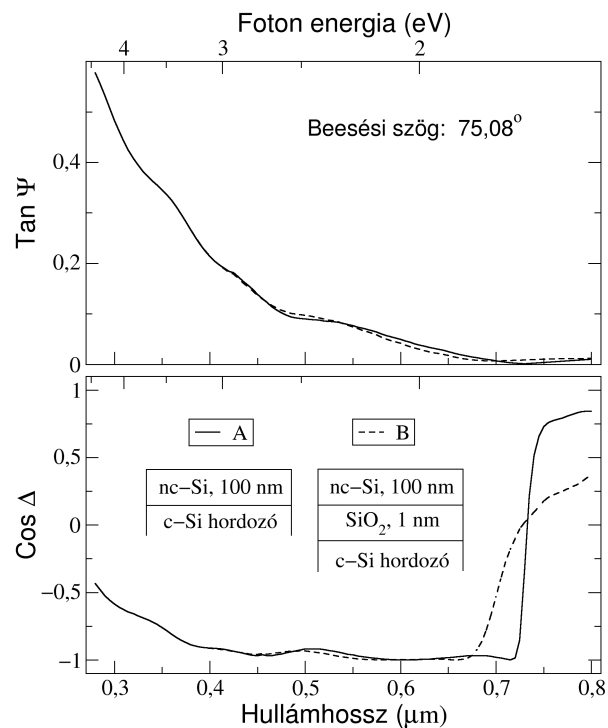
Minta	d_n	Műveletek
34	0,76	RTP + NPOLY + BPSG
35	0,76	RTP + NPOLY
36	0,76	RTP
37	0,81	RTP + NPOLY + BPSG
38	0,81	RTP + NPOLY
39	0,81	RTP
40	0,86	RTP + NPOLY + BPSG
41	0,86	RTP + NPOLY
42	0,86	RTP
44	-	NPOLY

nokristályos szilícium réteg számolt $\tan\Psi$ és $\cos\Delta$ spektrumait mutatja. A szaggatott görbe 1 nanométeres eltemetett oxidréteget is figyelembe vesz. Jól látható, hogy a rövidebb hullámhosszaknál a nanokristályos szilícium elnyelése miatt nem várható különbség. Ellenben a 680-800 nanométeres hullámhossztartományban a $\cos\Delta$ spektrum alapján a Brewster szöghöz közeli 75° -os beesési szögnél jelentős érzékenység várható.

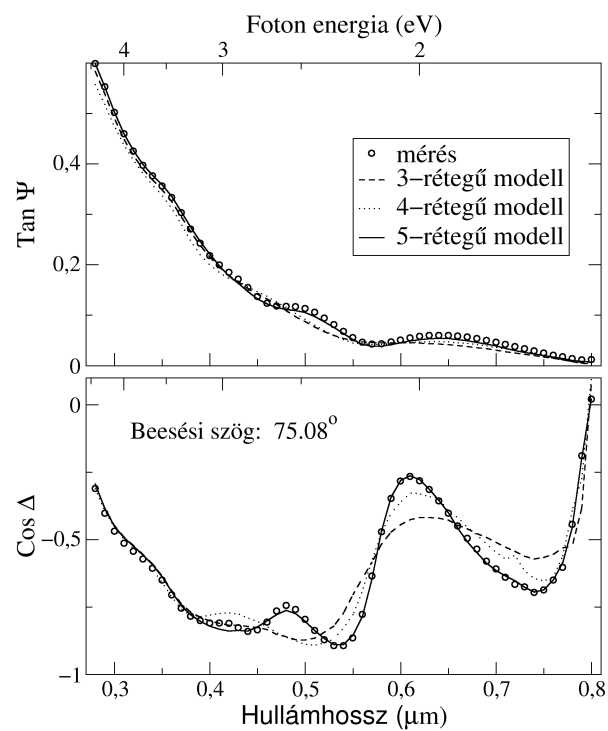
A közvetlenül az RTP oxid létrehozása után végzett mérések a nominálisnál megközelítőleg 0,1 nanométerrel nagyobb vastagságot mutattak. A 36-os, 39-es és 42-es számú mintákon mért oxid vastagságok rendre $0,85 \pm 0,02$, $0,90 \pm 0,02$ és $0,98 \pm 0,02$ nm voltak. Mivel az ellipszometriai mérések nem vákuumban történnek, ultra-vékony rétegek ellipszometriai mérése esetén a felületi (többnyire szerves) szennyeződések miatt általában a referencia vastagságoknál néhány angströmmel nagyobb értéket kapunk [32, 95].

A nanokristályos szilíciumrétegek leválasztás utáni állapotának leírásához modellfejlesztésre volt szükség. Az 5.2. táblázat a vizsgált növekvő komplexitású optikai modelleket mutatja. A réteg törésmutatójának effektív közeg módszerrel való leírásában már a nanokristályos CVD szilícium vizsgálatára korábban legalkalmasabbnak talált "nc-Si+a-Si+üreg" (4. fejezet, [82]) modellt alkalmaztam. Nagyon fontos azonban megjegyezni, hogy az illesztés jósága a többrétegű modellek irányában rohamosan növekszik (egyre kisebb σ értékek az 5.2. táblázatban, valamint egyre jobban illeszkedő görbék az 5.3. ábrán). Az 5-rétegű modellben jól látható, hogy az nc-Si komponens térfogataránya a felület felé növekszik, az a-Si komponens rovására, ami egybevág azzal a képpel, hogy a határfelületnél kisebb szemcseméretű nukleációs tartomány található, majd a szemcseméret a rétegvastagsággal növekszik. A minta jól leírható a felületen egyetlen vékony oxidréteg figyelembevételével, felületi érdekesség réteg használata nem szükséges: ez jó felületi simaságra utal.

A különböző technológiai műveletek után létrejött szerkezeteket leíró optikai modelleket foglalja össze az 5.3. táblázat. A modellekből számolt spektrumok minden esetben jól illeszkednek a mért görbékre (5.4. ábra). Az implantálás és hőkezelés (azaz az amorfizálás és újrakristályosítás) után létrejövő nagyobb szemcseméretű szerkezetet (5.3. táblázat 34-es minta) jobban leírja az effektív közeg módszerben "c-Si+a-Si+üreg" komponenseket használó optikai modell [82]. A jobb minőségű, nagyobb



5.2. ábra. A betétábrákon látható modellekkel készült szimulációk. Az nc-Si referencia az [58] publikációból származik.



5.3. ábra. Az 5.2. táblázatban található modellekkel illesztett görbék a 35-ös mintára. Csak az 5-rétegű modellel érhető el elfogadható illesztés.

5.2. táblázat. A 35-ös minta leírására használt optikai modellek. A SiO_2 és a-Si rendre a termikusan oxidált és a CVD leválasztással készült amorf szilícium dielektromos függvényét jelölik [96]. nc-Si az ugyancsak CVD leválasztással készült finomszemcsés nanokristályos szilícium dielektromos függvénye [58]. Az "üreg" komplex dielektromos függvénye 1 a teljes hullámhossztartományban.

	3-rétegű modell	4-rétegű modell	5-rétegű modell
1. réteg	$1,3 \pm 0,3$ nm 100% SiO_2	$0,7 \pm 1,8$ nm 100% SiO_2	$1,9 \pm 0,3$ nm 100% SiO_2
2. réteg	$82,8 \pm 2,3$ nm 56% nc-Si $12 \pm 7\%$ a-Si $6 \pm 1\%$ üreg	$12,0 \pm 3,7$ nm 27% nc-Si $39 \pm 15\%$ a-Si $4 \pm 8\%$ üreg	$60,1 \pm 3,4$ nm 95% nc-Si $2 \pm 4\%$ a-Si $3 \pm 1\%$ üreg
3. réteg	$2,7 \pm 0,2$ nm 100% SiO_2	$50,9 \pm 27,7$ nm 37% nc-Si $79 \pm 16\%$ a-Si $12 \pm 2\%$ üreg	$46,9 \pm 1,2$ nm 74% nc-Si $19 \pm 6\%$ a-Si $7 \pm 1\%$ üreg
4. réteg		$0,2 \pm 0,9$ nm 100% SiO_2	$40,6 \pm 9,0$ nm 71% nc-Si $25 \pm 7\%$ a-Si $4 \pm 1\%$ üreg
5. réteg			$1,2 \pm 1,5$ nm 100% SiO_2
Szubsztrát	c-Si	c-Si	c-Si
σ	0,0916	0,0614	0,0142

arányú kristályos komponenst tartalmazó réteg létrejöttét mutatja a 34-es minta 35-ösnél jóval alacsonyabb a-Si tartalma (5.3. táblázat 35-ös és 34-es minta), főként a határfelületnél (4. réteg). A határfelületi oxidréteg a várákosoknak megfelelően csaknem teljesen eltűnik (34-es minta 5. rétege).

Az RTP oxidok egyes műveletek utáni szisztematikus vastagságváltozását az 5.5. ábra mutatja. Az oxidréteg vastagsága az amorf szilícium leválasztása után egyértelműen nem magyarázható okokból növekszik. A technológusok szerint ezt a felületen a levegő páratartalma hatására létrejövő vékony vízréteg is okozhatja, amely a magas leválasztási hőmérséklet következtében a művelet elején az oxidréteg további növekedését okozhatja [32]. Az amorfizálás és hőkezelés után azonban az oxidréteg vastagsága az elvárásoknak megfelelően néhány angströmnyire zsugorodik.

A vizsgálatsorozat egyik legfontosabb tanulsága a mérési hibák alakulása. Az 5.5. ábrán jelölt hibák nem abszolút hibák, hanem az illesztett paraméter érzékenységére jellemző mennyiségek. Míg a polyszilícium nélküli esetben (RTP, körökkel jelölve a 5.5. ábrán) az érzékenység tized nanométer alatti, addig a leválasztott nem hőkezelt polyszilícium alatt megnövekszik néhány nanométerre (RTP+NPOLY, négyzetekkel jelölve a 5.5. ábrán), majd az amorfizálás és hőkezelés után (RTP+NPOLY+BPSG, háromszögekkel jelölve a 5.5. ábrán) lecsökken néhány tized nanométerre. A leválasztott polyszilícium réteg alatt az érzékenység drasztikus csökkenésének oka a fény

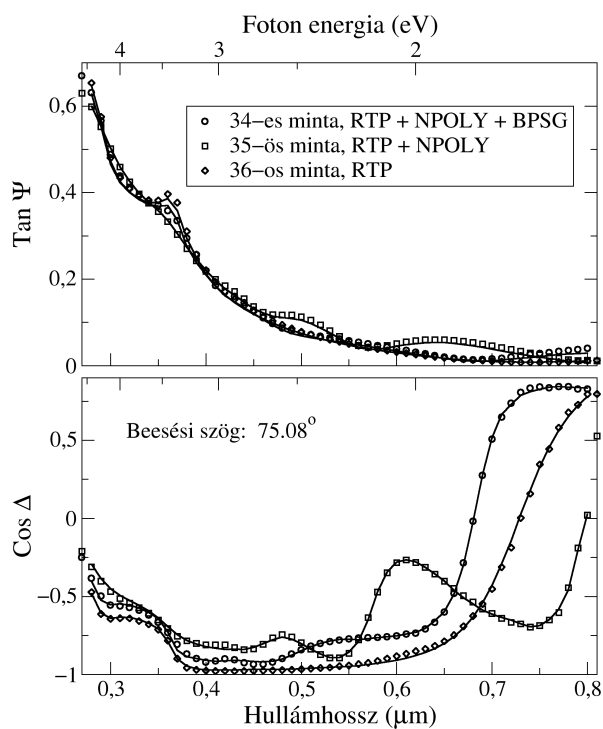
5.3. táblázat. Illesztett modellek a különböző technológiai lépések után.

	36-os minta	35-ös minta	34-es minta
Művelet	RTP	RTP + NPOLY	RTP + NPOLY + BPSG
1. réteg	0,85±0,02 nm 100% SiO ₂	1,9±0,3 nm 100% SiO ₂	1,0±0,4 nm 100% SiO ₂
2. réteg		60,1±3,4 nm 95% nc-Si 2±4% a-Si 3±1% üreg	48,0±6,7 nm 78% c-Si 17±6% a-Si 5±1% üreg
3. réteg		46,9±1,2 nm 74% nc-Si 19±6% a-Si 7±1% üreg	42,6±40,1 nm 90% c-Si 7±6% a-Si 3±2% üreg
4. réteg		40,6±9,0 nm 71% nc-Si 25±6% a-Si 4±1% üreg	64,6±49,9 nm 87% c-Si 9±3% a-Si 4±1% üreg
5. réteg		1,2±1,5 nm 100% SiO ₂	0,3±0,3 nm 100% SiO ₂
Hordozó	c-Si	c-Si	c-Si
σ	0,0164	0,0142	0,0171

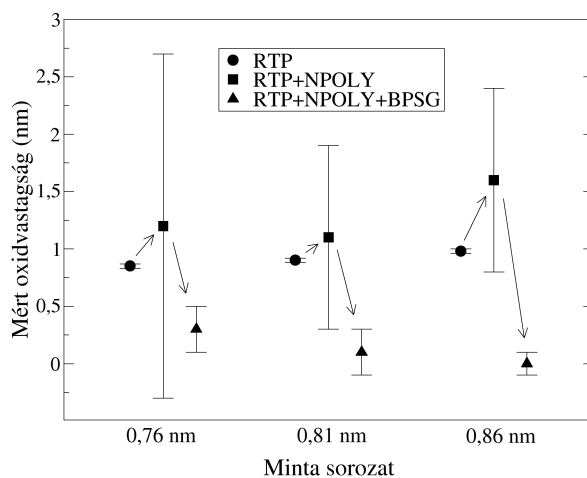
behatolási mélységében keresendő. A kristályos rend csökkenésével a kritikus pontok környékén az abszorpciós csúcsok kiszélesednek, így a fényt a szilícium nem csak a kritikus pontok foton energiájának szűk környezetében (3,4 és 4,2 eV, azaz rendre 413 és 295 nanométeres hullámhosszak) hanem egy ezen foton energiák körüli szélesebb környezetben is elnyeli. Ennek következtében a határfelület csak egy szűk hullámhossztartományban látható, ahogy azt már az 5.2. ábra is sugallta. A hőkezelés után a kristályos rend újra megnövekszik (ezt mutatta a modellben jobb illesztést adó "c-Si+a-Si+void" kombináció jobb használhatósága, és az amorf komponensek arányának csökkenése), ennek következtében a behatolási mélység is növekszik, és a határfelület szélesebb hullámhossztartományban látszik, ami nagyobb érzékenységet eredményez. Ez az oka annak, hogy míg az 5.4. ábrán látható 34-es hőkezelt minta határfelületi oszcillációt mutat (főként $\cos \Delta$ -ban), addig a nem-hőkezelt 35-ös minta spektruma inkább a pusztán egy vékony oxidréteget tartalmazó 36-os mintára hasonlít.

5.2. Ultravékony oxidok szilícium karbidon

A szilícium karbid az optoelektronikában, szenzorikában, magas hőmérsékletű és nagy teljesítményű elektronikában széleskörűen használt félvezető. Előnyös tulajdonságai közé tartozik a szilíciummal szemben többek között a nagyobb letörési feszültsége,

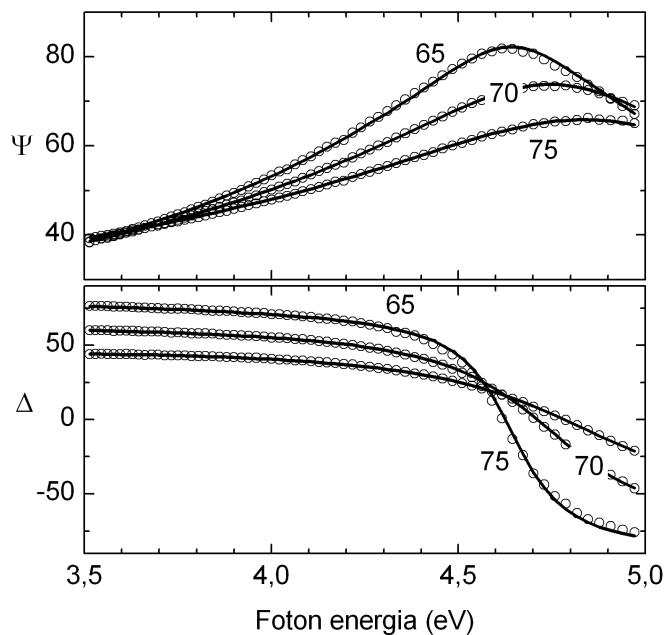


5.4. ábra. A különböző technológiai lépések után mért, és az 5.3. táblázatban található modellekkel illesztett spektrumok.



5.5. ábra. Az RTP oxid vastagsága a különböző technológiai lépések után. A minták a vízszintes tengelyen feltüntetett módon, a kezdeti nominális oxidvastagság alapján kerültek csoportosításra.

nagyobb elektronmozgékonyossága és hővezető képessége. A szilícium germániummal szembeni térhódításának legfontosabb technológiai oka a felületén képződő stabil oxid volt. A szilícium karbid egyik nagyon fontos technológiai előnye ugyancsak a felületén képződő stabil szilícium dioxid. A szilícium karbid oxidációs folyamata azonban korántsem olyan alaposan feltárt, mint a szilíciumé. Ez annak is köszönhető, hogy a szilícium karbid oxidációja annak politípusától is függ. A hexagonális módosulat poláros kristály, vagyis a (0001) felület és a (000 $\bar{1}$) felületek nem azonosak, mivel a (0001) felületet Si atomok (SiC-Si oldal), a (000 $\bar{1}$) felületet C atomok (SiC-C oldal) borítják. A két felület oxidációja jelentősen eltér [97, 98, 63]. Az oxidáció kineti-



5.6. ábra. Mért és illesztett ellipszometriai spektrumok a 3,5-5,0 eV-ra korlátozott foton energia tartományban az 1000 mbar oxigénben hőkezelt ≈ 60 nm vastagságú mintára. A görbékre írt számok a beesési szöget mutatják fokokban.

kája leírható a módosított Deal-Grove modellel. Az ebben a kérdéskörben végzett vizsgálatainkat 2008-ban publikáltuk [63]. Megállapítottuk, hogy a két kristályfelület eltérő oxidációjának leírásához szükséges a módosított Deal-Grove modell használata [97]. A vastagabb rétegeknél parabolikus növekedés, azaz diffúzióvezérelt folyamat mutatható ki [98, 99].

Mindkét oldalán polírozott, n-típusú, 4H-SiC(0001) rétegeket oxidáltunk Ar-O₂ keveréket tartalmazó atmoszférikus nyomású gázban 1100°C-on. A SiC lapok egyik oldala Si, másik oldala C lezárású volt. Így ugyanolyan oxidációs paraméterek mellett lehetett mindkét típusú felületet oxidálni. Az O₂ parciális nyomása 100 és 1000 mbar volt, az oxidálás időtartama pedig 0,5-45 óra.

A méréseket forgó kompenzátoros Woollam M2000 ellipszométerrel végeztem a Brewster szög közelében, 65, 70 és 75 fokok beesési szögek mellett. A hátoldali reflexió elkerülésére a 3,5-5,0 eV foton energia tartományt használtam, ugyanis a tiltott sáv fölötti foton energia tartományban a szilícium karbid elnyelése elegendően nagy ahhoz, hogy a minta hátoldaláról érkező fény ne jusson vissza a detektorba. A kiértékelésekből látható lesz, hogy ez a leszűkített foton energia tartomány is elegendő érzékenységet biztosít a legfontosabb rétegtulajdonságok meghatározására. Az 5.6. ábrán látszik, hogy ebben a leszűkített foton energia tartományban is jelentős adatmennyiséggel¹ és a jelentős diszperzió miatt strukturált spektrumokkal van dolgunk.

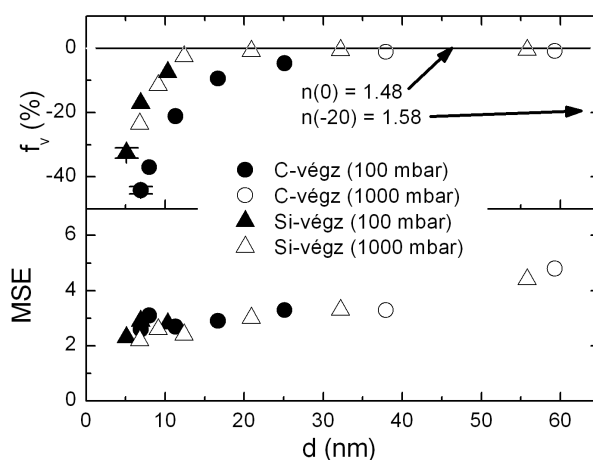
Az illesztésekhez megvizsgált optikai modellek az 5.7. ábrán láthatók. A legegyszerűbb és legkézenfekvőbb modell egy szilícium dioxid réteg használata egykristályos szilícium karbid hordozón. Ettől a modelltől annyiban tértem el, hogy a szilícium dioxidra sűrűség kompenzációt használtam, vagyis a réteg törésmutatóját az effektív közeg módszerrel [100] SiO₂ [101] és "üreg"² kombinációjával számoltam. Ez

¹A szűkített tartományban is számos (66) mérési pontból áll egy-egy spektrum, azaz $2 \times 3 \times 66$ mérési adatunk van összesen.

²Azaz a vákuum törésmutatója ($n = 1$, $k = 0$) segítségével.

SiOx (2)	EMA (SiO ₂ +üreg)		Szubsztrát
SiOxTr (3)	EMA (SiO ₂ +üreg)	Határ réteg	Szubsztrát
CauTr (4)	Cauchy diszperzió	Határ réteg	Szubsztrát
SellTr (4)	Sellmeier diszperzió	Határ réteg	Szubsztrát
CauTrM (4)	Cauchy diszperzió "sokmintás" módszer	Határ réteg	Szubsztrát

5.7. ábra. A szilícium karbidra növesztett vékony SiO₂ rétegek kiértékeléséhez használt ellipszometriai modellek. A határréteg dielektromos függvényét az effektív közeg közelítéssel számoltam 50 % réteg anyag és 50 % hordozó anyag összekeverésével. Az illesztett modellparaméterek száma a modellek neve mögött látható zárójelben.



5.8. ábra. Az 5.7. ábra SiOx modelljéből számolt rétegparaméterek a vastagság függvényében. f_v és MSE rendre az üreg térfogatarányt, és az illesztés hibáját (mean squared error) jelölik. A nyilak a 0 és -20 százalékos üregarányhoz tartozó törésmutatót mutatják (320 nm-es hullámhosszon). A negatív üreg arány olyan anyagot feltételez, amelyik optikailag sűrűbb a referenciaként használt SiO₂-nél.

lehetőséget ad a törésmutató illesztésére (lényegében az optikai sűrűség hangolására [31, 102]). Ebben a modellben illesztett paraméter az üregek térfogatszázaléka és a réteg vastagsága.

Az 5.8. ábra az üreg térfogatarányt mutatja a rétegvastagság függvényében. A negatív üreg arány olyan anyagra utal, amely optikailag sűrűbb a referenciaként használt SiO₂-nél. Ennek illusztrálására az 5.8. ábrán bejelöltem a 0 és -20 %-os üreg térfogatarányhoz tartozó törésmutató értékeket 320 nanométeres hullámhosszon. Ez a modell arra hivatott felhívni a figyelmet, hogy a határfelületek elhanyagolása jelentős hibát okoz. A vékonyrétegek ellipszometriai vizsgálatában kevés kivételtől eltekintve azt találjuk, hogy jelentősen jobb illeszkedést adnak azok a modellek, amelyek figyelembe veszik a határfelületeket. Ez igaz még olyan, szinte tökéletes minőségű rétegek készítésére alkalmas technikákra is, mint a termikus oxidáció vagy az atomi rétegleválasztás (atomic layer deposition, ALD).

Ez a robusztus egyrétegű modell egy látszólagos törésmutató változás formájában egyszerre tartalmazza a határfelület és a felületi érdesség hatását. Az összes modell

közül talán itt követhető nyomon legjobban, hogy hozzávetőlegesen 30 nanométeres rétegvastagság alatt drasztikusan megnövekszik a határfelület hatása a réteg optikai tulajdonságaira [103, 31, 102, 104, 105, 44], és jelentős eltérés mutatkozik a kétféle oldal között [97, 63, 106]. A határfelületi hatás jelentősen nagyobb a C-lezárású oldalon.

Ugyancsak szembetűnő az illesztés minőségének romlása (MSE növekedése) a nagyobb rétegvastagságok irányában. Ez ellipszometriában szinte minden vékonyrétegre megfigyelhető, hogy vastagabb rétegek esetén romlik az illesztés minősége³; aminek többek között a mélységbeli inhomogenitás az oka. A legtöbb réteg homogenitása az ellipszometria érzékenységi skáláján mérve⁴ nem tekinthető ideálisnak, azaz az egyrétegű modell egyre kevésbé érvényes a vékonyréteg szerkezetére. Az alrétegek és újabb paraméterek bevezetése azonban körültekintést, a paraméterek korrelációjának és érzékenységének ellenőrzését igényli.

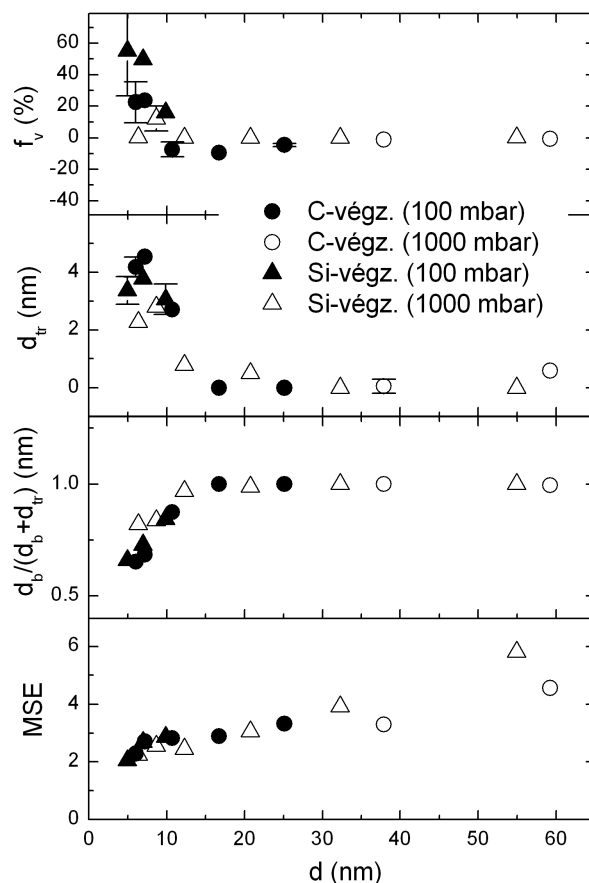
A következő lépésben a réteg törésmutatójára megtartjuk az előző lépésben használt modellt, de a réteg és a hordozó között bevezetünk egy határréteget, amely a hordozó és a réteg anyagának 50-50 % arányú effektív közeg keveréke (SiOxTr modell az 5.7. ábrán). Ebben az esetben az illesztett paraméterek száma az előző esethez képest eggyel (a határréteg vastagságával) növekszik. Az illesztett paraméterek ehhez a modellhez az 5.9. ábrán láthatók a rétegvastagság függvényében. Az ábra ebben az esetben és a további modellek esetében is kiegészült a d_b/d értékkel, ahol d_b a réteg vastagsága a határréteg nélkül, d pedig a teljes rétegvastagság a határréteggel együtt.

Az 5.9. ábra tanúsága szerint a határréteg relatív vastagsága a rétegvastagság csökkenésével növekszik. Ez ellentétes a szilícium oxidációja esetén nagyobb (20 nm fölötti) rétegvastagságokra tapasztalt vastagságfüggéssel [102, 107]. Esetünkben a 30-60 nanométeres vastagságtartományban a határréteg vastagsága 1 nm alá csökken és nem mutat szignifikáns változást a rétegvastagság függvényében. Az üreg térfogatarány (a SiOx modellel ellentétben) növekszik a rétegvastagság csökkenésével, mert a határfelületet külön réteggel figyelembe vettük, így ennek hatása nem módosítja a réteg számolt optikai tulajdonságait. Az üreg térfogatarány növekedése (vagyis az optikai sűrűség csökkenése) a felületi érdesség növekedésének köszönhető, amit a későbbiekben részletezett összetettebb modellek és az atomerő mikroszkópos mérések eredményei is megerősítenek. Abban a tartományban, ahol d_b/d jelentősen egy alá csökken, a határréteg vastagsága összemérhetővé válik a rétegvastagsággal. Az 5.9. ábrán az is megfigyelhető, hogy a C-lezárású oldalon jelentősen nagyobb a határréteg vastagsága. Ez a különböző felületi és határfelületi reakcióknak, a szén monoxid és oxigén eltérő diffúziójának, valamint az alapszeletek eltérő felületi érdességének a következménye [97, 63]. A kinetikát a [63] cikkben tárgyaltuk. Érdekes kiemelni a C- és Si-lezárású oldalak oxidációs idejének nagymértékű eltérését: 10 nm oxidvastagság eléréséhez a Si- és C-oldalakon rendre tíz és két órára volt szükség 100 mbar parciális oxigén nyomáson.

A "CauTr" modellben (5.7. ábra) az oxidréteg törésmutatóját a Cauchy diszperziós modellel számoltam: $n = A + B/\lambda^2$, ahol λ a fény hullámhossza, A és B a Cauchy paraméterek. A határréteg vastagságfüggése jó egyezést mutat az előző, SiOxTr modellel kapotthoz. A Sellmeier ("SellTr") diszperzió ($n = A\lambda^2\lambda_0^2/(\lambda^2 - \lambda_0^2)$, ahol A és λ_0 a Sellmeier paraméterek) használatával az 5.10. ábrán bemutatottal nagymértékben egyező vastagságfüggést kapunk az átmeneti réteg vastagságára és MSE-re is, kis

³Egykristályos szilícium hordozóra termikusan növesztett szilícium dioxidra ugyancsak megfigyelhető.

⁴Törésmutatóban az érzékenység anyagtól és mérési körülményektől függően $10^{-3} - 10^{-4}$.

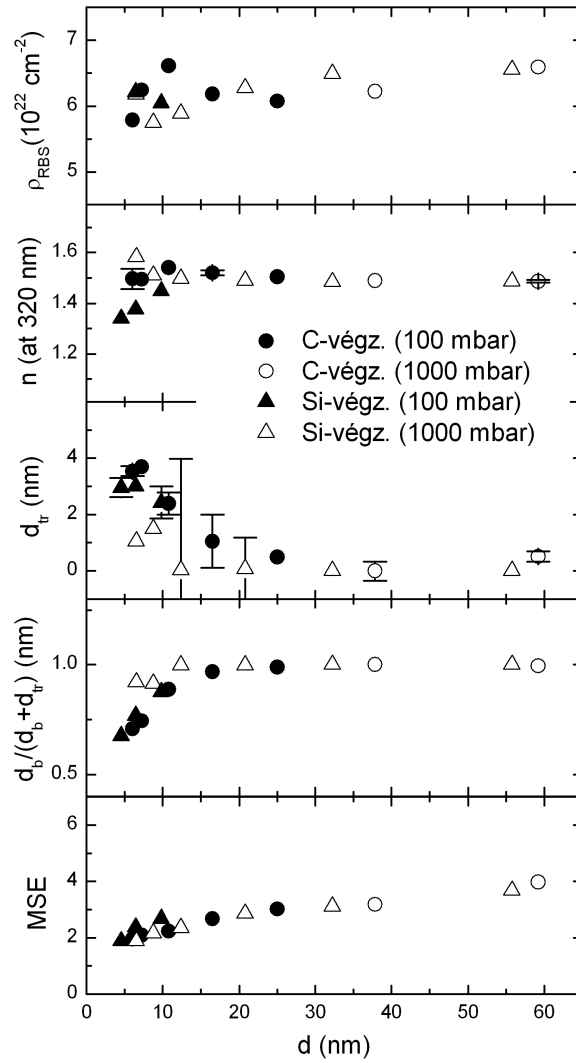


5.9. ábra. Az 5.7. ábra SiOxTr modelljéből számolt rétegparaméterek a vastagság függvényében. f_v , d_{tr} , d_b és MSE rendre az üreg térfogatarányt, a határréteg vastagságát, a SiO₂ réteg vastagságát és az illesztés hibáját (mean squared error) jelölik.

mértékben megnövekedett paraméter bizonytalanságokkal. A sűrűség adatokat Rutherford visszaszórásos spektrometria (RBS) és ellipszometria kombinálásával kaptuk, ugyanis az RBS egységnyi felületre eső atomszámot, míg az ellipszometria rétegvastagságot határoz meg. A közelítőleg 20 nanométer alatti mérettartományban hibát okoz a felületi érdesség. Mivel a réteg felülete nem atomi simaságú, az ellipszometriai rétegvastagságba viszont beletartozik a felületi érdesség réteg egy része is, így a réteg effektív sűrűsége látszólag lecsökken. Ez látszik az 5.10. ábra legfelső grafikonján a megközelítőleg 20 nanométer alatti vastagságtartományokban, ahol az effektív sűrűség a rétegvastagsággal csökken. Azokban a vastagságtartományokban, ahol a felületi érdesség mértéke elhanyagolható a rétegvastagsághoz képest, ez a módszer pontos sűrűség értékeket szolgáltat [63].

Feltételezve, hogy a szubsztrát felé eső határfelületről és a felületi érdességtől eltekintve az összes minta SiO₂ rétege azonos, a különböző mérések együtt illesztésével jelentősen csökkenteni lehet a meghatározott paraméterek bizonytalanságát. Az 5.11. ábrán ennek a modellnek ("CauTrM" az 5.7. ábrán) az alkalmazása látható. Az ábrán szereplő 9 mérési spektrumot⁵ egyszerre illesztettem. A modellben a rétegvastagságok különbözőek, a SiO₂ réteg törésmutatóját leíró Cauchy paraméterek azonosak voltak az egyes mintákra. Az egyes oldalak határrétegeinek vastagságfüggése konzisztens a korábbi modellekkel. Ebben a modellben bevezethető volt egy felületi érdesség is. A

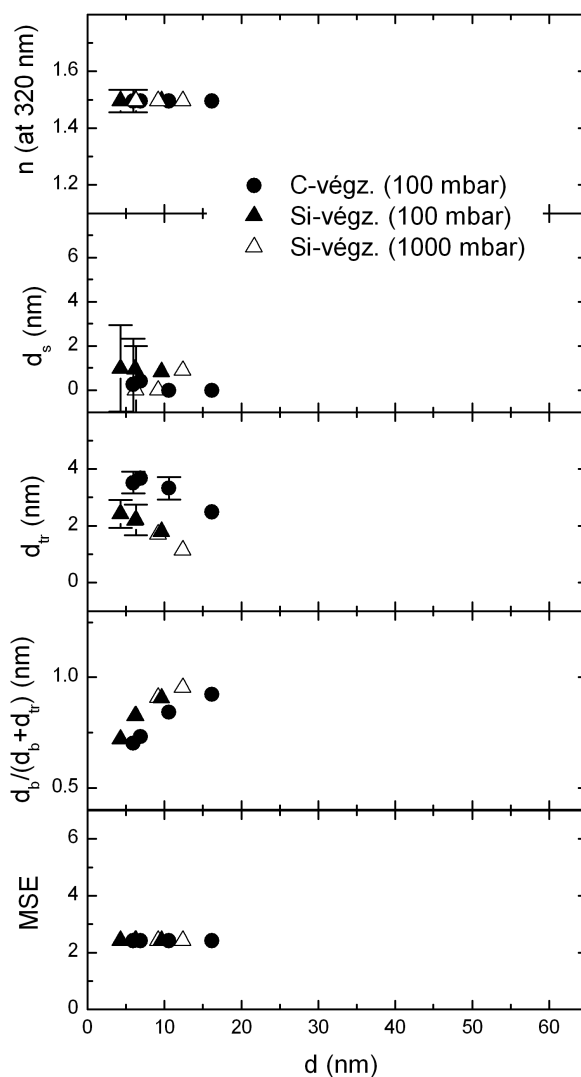
⁵mindegyik esetben három beesési szögnél



5.10. ábra. Az 5.7. ábra CauTr modelljéből számolt rétegparaméterek a vastagság függvényében. n , d_{tr} , d_b és MSE rendre a törésmutatót, a határréteg vastagságát, a SiO_2 réteg vastagságát és a négyzetes középhibát jelölik. ρ a Rutherford visszaszórásos spektrometriával (RBS) számolt sűrűséget jelöli [63]. Az RBS mérést Szilágyi Edit végezte.

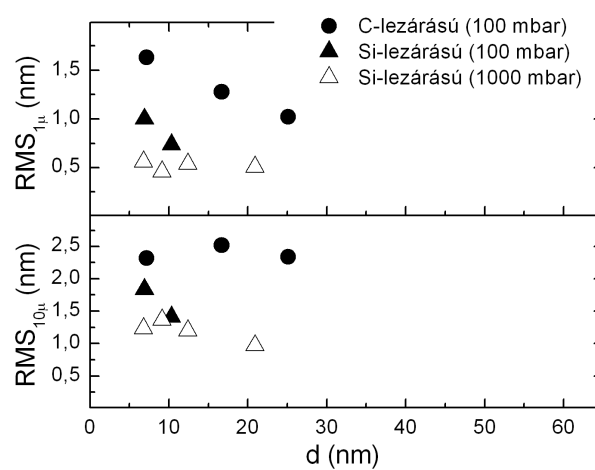
felületi érdesség ellipszometriai mérésének immár jelentős az irodalma. Egy korábbi, a PhD értekezésemben bemutatott munkában részletesen vizsgáltam a felületi érdességről ellipszometriával meghatározható információt, és azt találtam, hogy a felületi érdességet modellező réteg vastagsága jól korrelál az atomerő mikroszkópiával meghatározott RMS érdességgel⁶ [108]. Ebben a vizsgálatban is jó egyezést és korrelációt találtam az atomerő mikroszkópos eredményekkel (5.12. ábra), azonban az ellipszometriai mérések felületi érdesség meghatározására mutatott érzékenysége az ilyen alacsony törésmutatójú dielektrikum rétegek esetében elmarad a poliszilíciumon [108] kapott érzékenységektől. Ahogy korábban kimutattuk, ebben az esetben is érdemes kiemelni, hogy az atomerő mikroszkópiai mérések eredménye kismértékben függ az alkalmazott ablakmérettől. Mindezen bizonytalanságok figyelembe vételével szignifikáns korreláció mutatható ki az ellipszometriai és atomerő mikroszkópiai mérési eredmé-

⁶root mean squared roughness



5.11. ábra. Az 5.7. ábra CauTrM modelljéből számolt rétegparaméterek a vastagság függvényében. n , d_s , d_{tr} , d_b és MSE rendre a törésmutatót, a határréteg vastagságát, a SiO₂ réteg vastagságát és a négyzetes középhibát jelölik. MSE = 2,4 az összes vastagságra, mivel ebben az esetben sokmintás illesztés történt az összes spektrum egyidejű használatával.

nyek között. Az 5.10. ábrán látható látszólagos törésmutató- és sűrűség-csökkenés (a felső két grafikon) ezzel a néhány nanométeres felületi érdességgel magyarázható.



5.12. ábra. Atomerő mikroszkópiával mért RMS (root mean square) érdesség egymikronos és tízmikronos ablakban. A mérést Dobrik Gergely végezte. [64]

6. fejezet

Vegyület félvezetők ionimplantációja

Ebben a fejezetben a szilícium karbid (SiC) és a kadmium tellurid (CdTe) ionimplantációjával foglalkozok. A SiC technológiai jelentőségét az optoelektronikától a nagy teljesítményű elektronikáig említettem az 5. fejezetben. A SiC az adalékanyagok lassú diffúziója miatt csak ionimplantációval adalékolható megfelelő hatékonysággal. Az ionimplantáció nem csak sebessége, hanem az adalékatomok pontos és jól kontrollálható bejuttatása miatt is nagy jelentőségű.

A CdTe többek között a napelemtechnológia fontos anyaga, és mint ilyen, intenzív kutatás tárgya. A témával Robert W. Collins professzor laboratóriumában¹ találkoztam féléves ösztöndíjam idején a Toledoi Egyetemen (Ohio, USA). A munka célja a mikro és nanokristályos CdTe rétegek ellipszometriai modellezésének a fejlesztése volt azzal a céllal, hogy az ellipszometria gyors és roncsolásmentes módszerét rétegminősítési eljárásként lehessen alkalmazni, akár a rétegekészítési művelet közben.

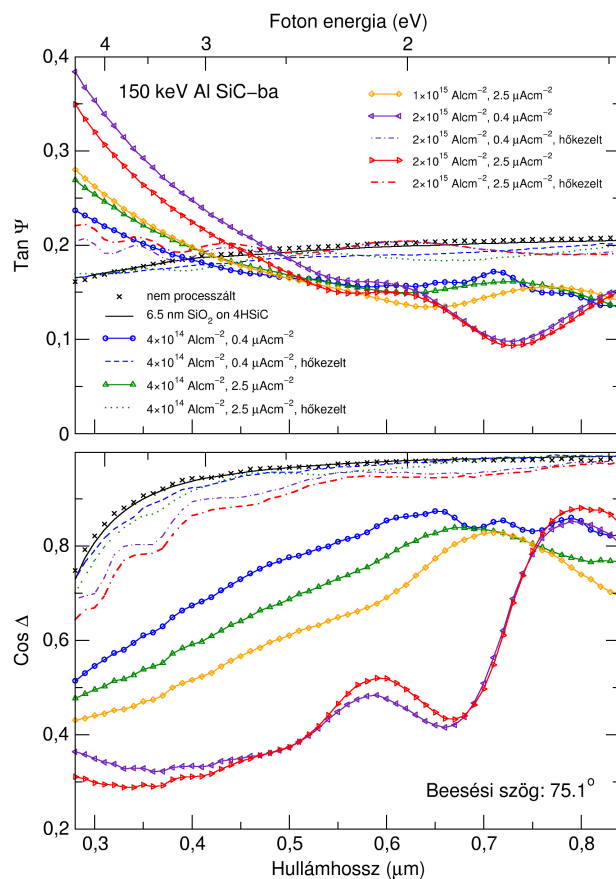
A szilícium ionimplantációjával kutatócsoportunk behatóan foglalkozott a múltban [18, 20, 109, 110, 111, 74, 23, 112, 80, 27, 113, 73, 114, 75]. Ezt a tudást terjesztettem ki SiC és CdTe ionimplantáció hatására bekövetkező szerkezeti változásának vizsgálatára. Mivel ezen félvezetők elnyelési csúcsai és kritikus pontjai is az általunk használt foton energia tartományába esnek, a szerkezeti változások nagy érzékenységgel vizsgálhatók optikai spektroszkópiákkal [39, 29].

6.1. SiC ionimplantációja és hőkezelése

Az alumínium a SiC fontos akceptor adaléka. Alacsony diffúziós együtthatója miatt csak ionimplantációval lehet a szilícium karbidba bejuttatni. Az implantáció során az implantációs paraméterektől (ionáram sűrűsége, dózis, energia) függően a SiC kristályrács roncsolódik. A kristályrács helyreállítására és az adalék elektromos aktiválására hőkezelést kell alkalmazni. Ezért a hibakeltési és a hőkezelés helyreállítási mechanizmusának megértése elsődleges fontosságú a SiC alapú eszközök gyártásához. A szilíciumhoz hasonlóan a SiC optikai tulajdonságai is nagyban függenek a kristályrács rendezettségétől. Ezért az ion-implantáció által keltett roncsoltság nagy érzékenységgel vizsgálható SiC-ban [115, 116, 117, 118].

Ebben a kísérletsorozatban 4H-SiC (c-SiC) hordozókat implantáltunk 150 keV energiájú Al^+ ionokkal, $4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ és $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ között változó fluencia mellett, $0,4\text{--}2,5 \mu\text{A cm}^{-2}$ ionáramsűrűséggel. Az implantáció szobahőmérsékleten történt, majd a mintákat 1000°C -on, argonban, egy óráig hőkezeltük. Az ellipszometriai és

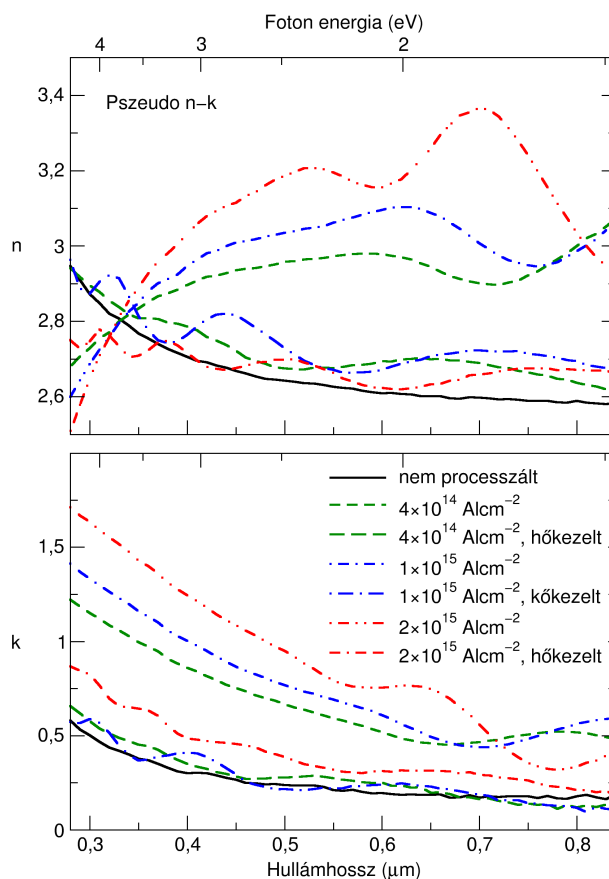
¹amely együttműködik a világ legértékesebb napelemtechnológiai cégével, a First Solar-ral



6.1. ábra. Ellipszometriai mérések az összes dózisra és hőkezelésre.

RBS mérések rendre a 2.1. és 2.4. fejezetekben leírt módokon történtek. A ellipszometriai mérésekhez SOPRA ES4G típusú műszert használtam. Az RBS ionárama a minta mérés által okozott roncsolódásának elkerülése céljából 5 nA-re volt korlátozva.

Az implantált és hőkezelt mintákon végzett méréseket a 6.1. ábra mutatja a különböző fluenciákra és ionáramsűrűségekre. Ugyancsak ábrázoltam a nem kezelt egykristályos c-SiC hordozón mért mérési eredményt is. A hőkezelt spektrumok ehhez közelítenek, és annál távolabb vannak tőle, minél nagyobb a fluencia és az ionáram. Az ionimplantációs paraméterekre, azaz a rendezetlenség mértékére való érzékenység már a nem-hőkezelt spektrumokon is látszik, amelyek a hőkezelt mintákon mért spektrumoknál jelentősebb eltérést mutatnak a fluencia és ionáram függvényében. CosΔ-ban például a 0,4 és 0,5 μm közötti hullámhossztartományban a $4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ fluenciájú és $0,4 \mu\text{Acm}^{-2}$ ionáramsűrűségű spektrum valamint a $4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ fluenciájú és $2,5 \mu\text{Acm}^{-2}$ ionáramsűrűségű spektrumok közötti eltérés nagyobb, mint 0,1, míg a mérési pontosság cosΔ-ban jobb, mint 0,001. A $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ fluenciájú és $0,4 \mu\text{Acm}^{-2}$ ionáramsűrűségű, valamint a $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ fluenciájú és $1,5 \mu\text{Acm}^{-2}$ ionáramsűrűségű, azaz legnagyobb roncsoltságú esetekben a spektrumok (különösen cosΔ) hullámzása a 0,5-0,84 μm hullámhossztartományban egy optikailag különálló réteggként megjelenő roncsolt tartomány létrejöttére utal. Ugyanezen spektrumok hőkezelt megfelelőin a 0,5 μm alatti hullámhossztartományban figyelhető meg hullámzás, ami vékony visszamaradó roncsolt tartományokra utal. A görbéken (különösen a cosΔ spektrumokon) jól látható a szisztematikus változás mind a fluencia, mind az ionáram sűrűség függvényében.

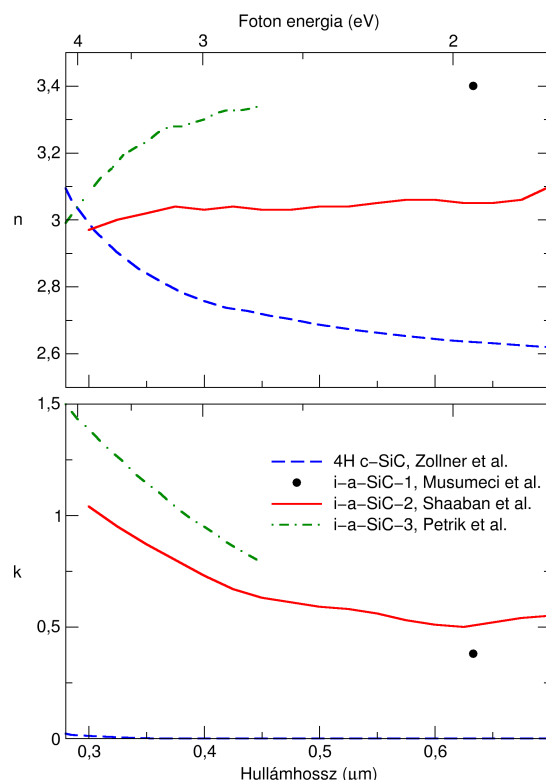


6.2. ábra. A pszeudo törésmutató valós (n) és képzetes (k) része $2,5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ ionáram-sűrűségre.

A pszeudo² törésmutató valós (n) és képzetes (k , extinkciós együttható) része hasonlóan szisztematikus változást mutat a fluencia és az ionáram sűrűség függvényében (6.2. ábra). k értéke a fluenciával és az ionáram sűrűséggel - azaz a roncsoltsággal - növekszik. A pszeudo n -ben és k -ban ugyancsak megjelennek a fent említett hullámzások.

A roncsolt SiC kristály dielektromos függvényét a szilícium ionimplantációjánál sikerrel alkalmazott Bruggeman-féle effektív közeg módszerrel határoztam meg. A modell a roncsolt kristályt amorf és kristályos fázisok keverékének tekinti, ahol az egyes fázisok dielektromos függvényére tömbi dielektromos függvény referenciákat használunk. Az implantált amorf SiC referenciát a legnagyobb fluenciájú és ionáram sűrűségű nem-hőkezelt minta kiértékeléséből számoltam. Ezen a mintán az RBS mérésből is igazolható módon teljes amorfizációt értünk el. Mivel a vizsgálatokban polírozott hátoldalú hordozókat vizsgáltunk, a hátoldali reflexió kiküszöbölésére a $0,45 \mu\text{m}$ alatti hullámhosszak tartományát használtam, ahol a SiC elnyelése miatt a hátoldalról visszaverődő fény nem jut a detektorba. A hullámhossztartomány ilyen lehatárolásának további előnye, hogy egyszerű optikai modellek használhatók, mivel a roncsolt réteg alsó határa az elnyelés miatt nem látható. Így a törésmutató meghatározásakor egy egyszerű optikai modell használható egyetlen felületi oxid réteggel. A modellben a szubsztrát törésmutatójának valós és képzetes része az ismeretlen paraméterek, amelyek a mért $[\tan\Psi, \cos\Delta]$ értékpárokból minden spektrális pontban külön külön

²Tömbi ekvivalens törésmutató (ld. "Jelölések és rövidítések")

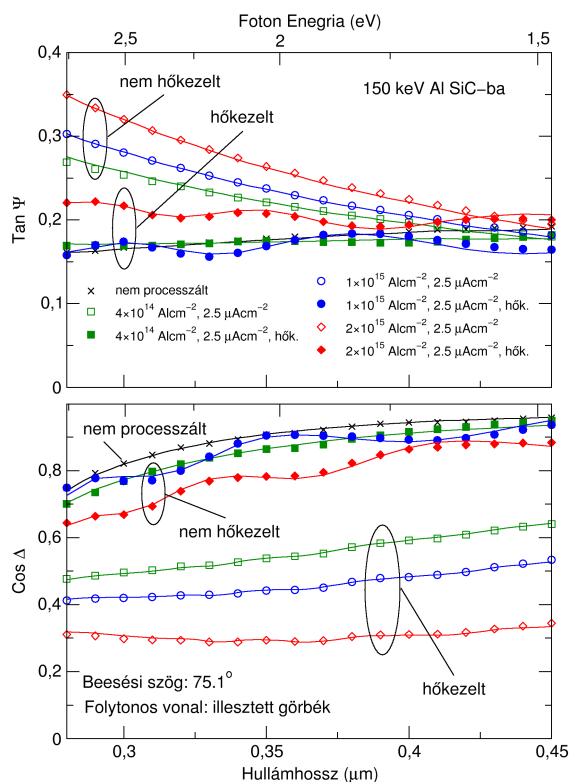


6.3. ábra. Kristályos és amorf SiC törésmutatók.

(azaz diszperziós modell használata nélkül) meghatározhatók. A 6.3. ábra tanúsága szerint a roncsolt SiC törésmutatója³ még inkább függ az előállítási körülményektől, mint szilícium esetében (ld. az ionimplantált és hőkezelt amorf szilícium törésmutatójának eltérését [74]). Bár az általam vizsgált legnagyobb hullámhossz $0,45 \mu\text{m}$ volt, a görbék képzeletbeli extrapolálása alapján a Musumeci-féle egyhullámhosszas mérések eredményeivel az én eredményeim jó egyezést látszanak mutatni [118].

A fenti módon meghatározott amorf SiC (ia-SiC) referencia használatával az egyes minták relatív roncsoltsága az effektív közeg közelítéssel meghatározható (6.4. ábra). a 6.1. táblázat azt mutatja, hogy az RBS a kis fluenciával implantált minták roncsoltságát felülbecsli. A hőkezelt mintáknál ez az eltérés a fluencia növekedésével nő. Ennek egyik lehetséges magyarázata, hogy az implantálás során a még nem teljesen amorfizálódott kiristályszemcsék orientációja megváltozik, ezért a hordozóhoz orientált csatorna hatású RBS vizsgálatban ezek a szemcsék amorfnak látszanak. Az ellipszometria azonban nem érzékeny erre az orientációs eltérésre, így képes kimutatni a valódi kristályosságot. A nagyobb fluenciával végzett implantációt követő hőkezelés során a kristály orientáció rosszabbul rekonstruálódik - ennek köszönhető a hőkezelt minták esetében az ellipszometriával és RBS-sel meghatározott relatív roncsoltság eltérések növekedése a nagyobb fluenciák irányába.

³és dielektromos függvénye



6.4. ábra. Mért (szimbólumok) és illesztett (folytonos vonalak) spektrumok a $2,5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ ionáramsűrűséggel implantált és hőkezelt mintákra.

6.2. Roncsolt SiC szerkezet vizsgálata nagy foton energiákon

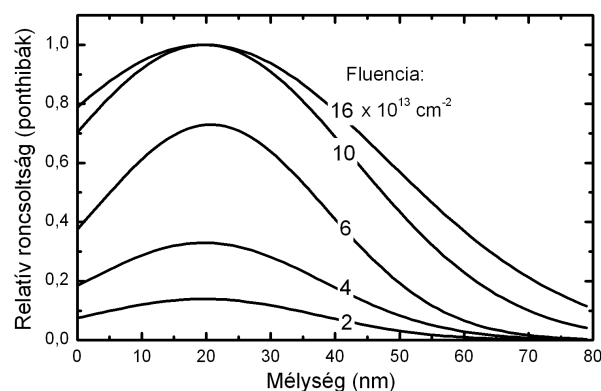
Ahogy szilícium esetére láthattuk, a félvezetők szerkezeti tulajdonságai legérzékenyebben a kritikus pontokhoz tartozó foton energiák környékén vizsgálhatók. 4H-SiC-ban 7, 7,5 és 8,5 eV környékén jelennek meg elnyelési struktúrák [119]. A legelterjedtebb asztali ellipszométerek, amelyek xenon lámpát használnak fényforrásként 5, legfeljebb 5,5 eV foton energiáig képesek mérni. Deutérium lámpa használatával a vákuum ultraviola foton energia határáig, 6,5 eV-ig lehet kitolni a mérési határt. Az ebben a fejezetben bemutatott mérések a berlini BESSY II szinkrotronnál telepített ellipszométerrel készültek az 5-9 eV foton energia tartományban, amely lehetőséget kínált rá hogy elsőként vizsgáljam a SiC-ban ionimplantáció hatására bekövetkező szerkezeti változásokat ilyen nagy fotonenergiákon.

A 4H-SiC minták 100 keV energiájú Xe^+ ionokkal kerültek besugárzásra 2×10^{13} -tól $16 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ -ig terjedő fluencia tartományban. Az RBS mérésből meghatározott roncsoltsági csúcs maximuma 20 nm-es mélység körül van (6.5. ábra). Mivel a mélységbeli felbontás az alkalmazott mérési beállítások mellett 10-20 nm, így az RBS mérésből nem tudjuk nagy biztonsággal megmondani, hogy a csúcs és a felület közelében pontosan milyen a profil alakja. Ezért a SRIM [120] szoftverrel végzett szimulációra támaszkodva az illesztést Gauss profil használatával végezte Zolnai Zsolt (6.6. ábra).

A pseudo-dielektromos függvény képzetes része jól mutatja a 7, 7,5 és 8,5 eV foton energiánál meglévő fent említett jellegzetes struktúrát (6.7. ábra). Természetesen

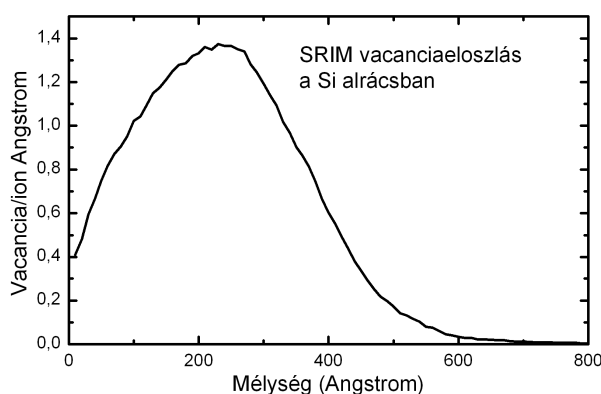
6.1. táblázat. Ellipszometriával és Rutherford visszaszórásos spektrometriával mért relatív roncsoltság. Az ionáramsűrűség minden esetben $2,5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ volt.

Fluencia ($\times 10^{15} \text{ Al}/\text{cm}^2$)	Hőkezelés	Relatív roncsoltság	
		% SE	% RBS
0,4	nem	60	100
0,4	igen	11	9
1,0	nem	76	100
1,0	igen	13	76
2,0	nem	100	100
2,0	igen	12	95

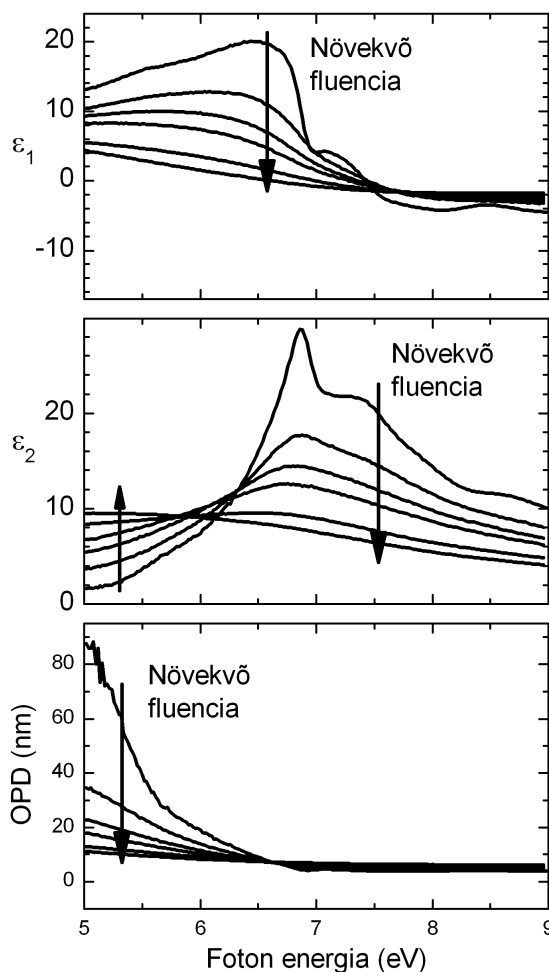


6.5. ábra. Relatív roncsoltság RBS/C mérése Gauss-os mélységeloszlást feltételezve. A görbéken látható számok a fluenciát mutatják 10^{13} cm^{-2} egységben.

leginkább a nem-implantált esetre, majd a csúcsok a fluencia növekedésével ellaposodnak, ahogy az ion implantált szilícium esetében korábban látható volt. SiC esetében is lényeges kérdés a behatolási mélység. A 6.7. ábra legalsó grafikonján látszik, hogy a roncsoltsági csúcs mögötti (annál mélyebben lévő) tartomány csak a 6 eV alatti



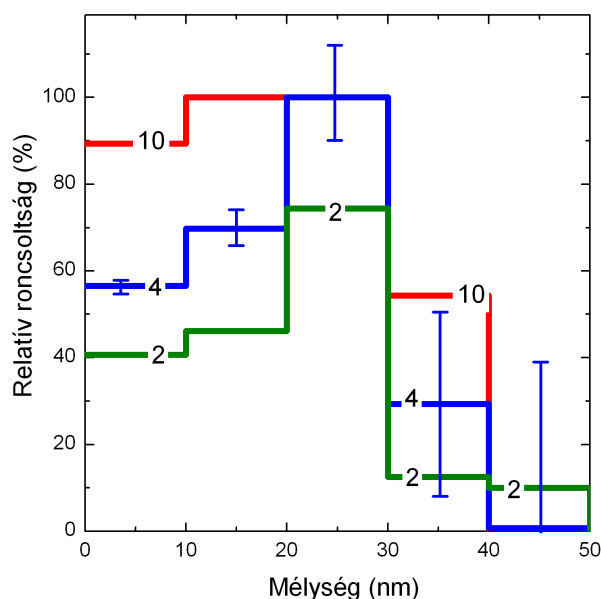
6.6. ábra. A Si alrác vakanciaeloszlása SRIM [120] programmal 100 keV Xe^+ ionok SiC-ba implantálására.



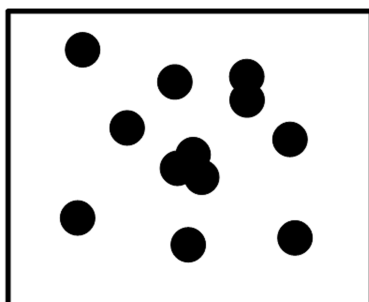
6.7. ábra. Spektroszkópiai ellipszometriával meghatározott pseudo-dielektromos függvény. "OPD" (optical penetration depth) az optikai behatolási mélységet jelöli. A nyilak a növekvő fluencia értékek (rendre 0, 2, 4, 6, 10 és $16 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) irányába mutatnak.

foton energiákon látható. Érdekes itt is kihangsúlyozni, hogy az abszorpciós csúcsoknál megjelenő szerkezetérzékenység egyben nagyfokú felületérzékenységet is jelent. A tipikus behatolási mélység ezeken a foton energiákon 10 nm környéki.

Az ellipszometriai mélységprofilozásban használt optikai modellek hasonlóak a szilíciumnál használtakhoz [20, 23, 27]. A felülettől lefelé haladva a modell tartalmaz egy felületi érdesség réteget (melynek vastagsága 0,5 nm és 50 %-on rögzített térfogatarányban tartalmaz SiO_2 és üreg komponenseket), 1 nm felületi SiO_2 réteget, felületi amorf réteget (a legnagyobb fluenciájú teljesen roncsolt mintából meghatározva), és egy öt alrétegből álló roncsoltsági profilt, amelyek mindegyikében a roncsoltságot az egykristályos és amorf SiC effektív közeg módszerrel számolt térfogataránya írja le. A felületi amorf réteg vastagsága 1 nm-ről 3 nm-re növekszik $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ -ről $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ -re növekvő fluencia mellett. Az alrétegek vastagsága csatolt: az illesztés során értékük azonos. Az amorf SiC térfogataránya azonban függetlenül változott minden egyes alrétegben (6.8. ábra). A $4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ fluenciára ábrázolt paraméter bizonytalanságokból ugyancsak látszik, hogy a felület közelében sokkal érzékenyebb a mérés a roncsoltságra. A bizonytalanság a mélységgel folyamatosan növekszik, ami összhangban van a 6.7. ábra alsó grafikonján látható behatolási mélységekkel. Az



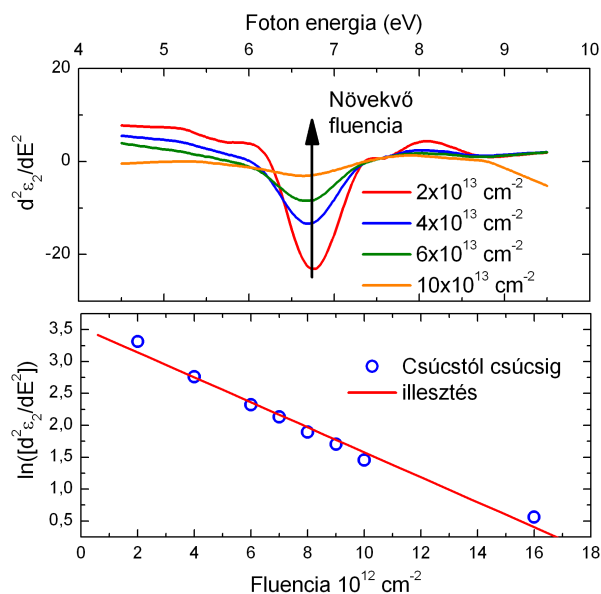
6.8. ábra. Spektroszkópiai ellipszometriával meghatározott mélységprofilok 5 egyforma vastagságú alréteg és az alrétegeken belül függetlenül illesztett i-a-SiC térfogatarányok (vagyis relatív roncosság) használatával. A roncossági profilokat mutató vonalakon szereplő számok a fluenciát mutatják 10^{13} cm^{-2} egységben. A $4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ fluenciához láthatók a roncosság (amorf komponens térfogat aránya az alrétegben) értékek bizonytalanságai is.



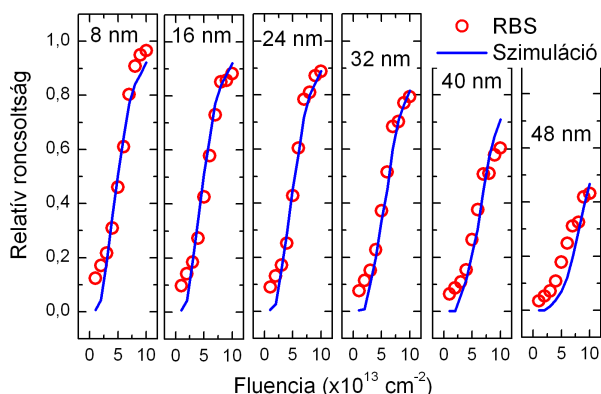
6.9. ábra. Modell az ionnyom méretének számolásához. Az ábra a minta felületét mutatja. A fekete körök a véletlenszerűen beeső ionok által keltett amorf tartományok. A modellben az ionnyomok mérete egyforma, méretük az ismeretlen modellparaméter.

ellipszometriai mérés így megbízhatóan igazolta az RBS profil illesztésénél használt feltevés helyességét, és összhangban van a SRIM [120] szimuláció eredményével is. A roncossági profilok RBS-nél magasabb értékei feltehetően a roncolt szerkezet sűrűségváltozására vezethetők vissza.

A 6.7. ábra alapján becslést tehetünk az ionnyom méretére [38, 121, 122]. Feltételezve, hogy az ionok véletlenszerű helyeken csapódnak be a céltárgy felületébe, a folyamatban annak a valószínűsége, hogy egy következő ion még nem roncolt területet talál (6.9) arányos a maradék érintetlen (nem roncolt) területtel. Így a folyamat az $A \propto \exp(-Fa)$ összefüggéssel közelíthető, ahol A az épen maradt felület, F a fluencia, a pedig az ionnyom mérete (területe). A kritikus pontoknál megjelenő elnyelési csúcsok eltűnése ugyancsak arányos a kristályban létrejövő roncossággal (pl. a 6,8 eV foton energián található csúcs a 6.7. ábrán). A csúcs eltűnését jól jellemzi a



6.10. ábra. A dielektromos függvény második deriváltja (felső ábra) és a második derivált csúcspozíciója (6,7 eV-nál) fél-logaritmikus ábrázolásban (alsó ábra). A nyíl a növekvő fluencia irányába mutat (értékei rendre 2, 4, 6 és $10 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$).



6.11. ábra. Relatív roncsoltság különböző mélységekben az RBS mérésből, és az erre illesztett numerikus szimuláció.

dielektromos függvény második deriváltja, a csúcsnál számolt görbület (6.10. ábra). A második derivált amplitúdójának logaritmusát a fluencia függvényében ábrázolva a fenti elmélettel összhangban jó közelítéssel lineáris összefüggést kapunk. Az illesztett egyenes meredekségéből becsülhető az ionnyom felülete (a), kör keresztmetszetet feltételezve pedig annak átmérője.

A 6.5. ábrán látható RBS mérésből ugyancsak meghatározható a relatív roncsoltság a fluencia függvényében. Az RBS mérés ezen túlmenően alkalmas a mélységfüggés feltérképezésére is. A Polgár Olivér kollégám által elvégzett numerikus szimuláció a fent említett exponenciális telítődés mellett a mélységfüggést is figyelembe veszi. A modell véletlenszerű helyen Gauss eloszlásnak megfelelő véletlenszerű mélységig roncsoló ionpályákkal számol. Az illesztett paraméter az ionnyom mérete és a roncsoltsági maximum mélysége. Az ionnyom mérete a fluenciafüggés dinamikáját befolyásolja. A modell segítségével a paramétereket a 6.11. ábrán látható módon illeszteni lehet az RBS mérésre, amiből meghatározható az ionnyom mérete. Az ellipszometriai (6.10.

ábra illesztése) és RBS (6.11. ábra illesztése) mérésekből meghatározott ionnyom
átmérők rendre 1,8 és 1,6 nm voltak, vagyis a két független módszerből kapott ered-
mények jó egyezést mutattak.

6.3. CdTe ionimplantációja

A spektroszkópai ellipszometria alkalmazhatóságát napelem célokra fejlesztett vékonyréteg szerkezetek vizsgálatára, optimalizálására, és a többlépcsős eszközkészítési folyamat kontrolljára Si [123] és CdS/CdTe [124] napelemek esetében egyaránt igazolták. Porlasztással készült CdS/CdTe vékonyréteg szerkezetek alkalmazásával 14 % hatásfokú napelemek készítését publikálták [125]. Ezen anyagok megbízható optikai méréséhez szükség van a dielektromos függvény kritikus pontok környékén való megfelelő modellezésére minél szélesebb szemcseméret tartományban. A következő vizsgálat célja annak kiderítése volt, hogyan hozható létre roncsoltság CdTe-ban kontrollált módon, ionimplantáció használatával. Korábbi vizsgálatainkban megmutattuk, hogy a hosszútávú rend megszűnése a kristályrácsban hasonlóképpen változtatja meg az anyag optikai tulajdonságait a polikristályos anyagban lévő szemcseméret csökkenése és az ionimplantációs dózis növekedése hatására (ez jól látszik pl. a 3.1. és a 3.18. ábrák összehasonlításából). Ionimplantációval nagy pontossággal lehet adott roncsoltságot létrehozni és olyan modell anyagokat előállítani, amelyek később referenciaként szolgálhatnak a polikristályos CdTe vékonyrétegek modellezéséhez.

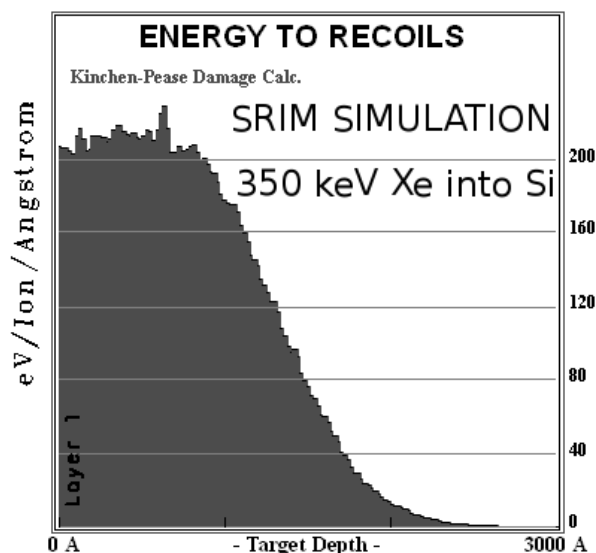
6.3.1. Implantáció Xe^+ ionokkal

Az egykristályos (c-CdTe, Nippon Mining & Metals Co., (111)B) és polikristályos (pc-CdTe) kadmium tellurid valamint c-Si kontrollmintákat egyaránt 350 keV Xe^+ ionokkal implantáltuk $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ -től $16 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ -ig terjedő fluenciákkal. A pc-CdTe minták magnetronos porlasztással készültek natív oxiddal borított egykristályos szilícium szeleteken. A leválasztást CdCl_2 és Br_2 -metanol kezelés követte. A CdCl_2 kezelés megnöveli a szemcseméretet, így a pc-CdTe optikai tulajdonságai közel azonosakká válnak a c-CdTe optikai tulajdonságaival [124].

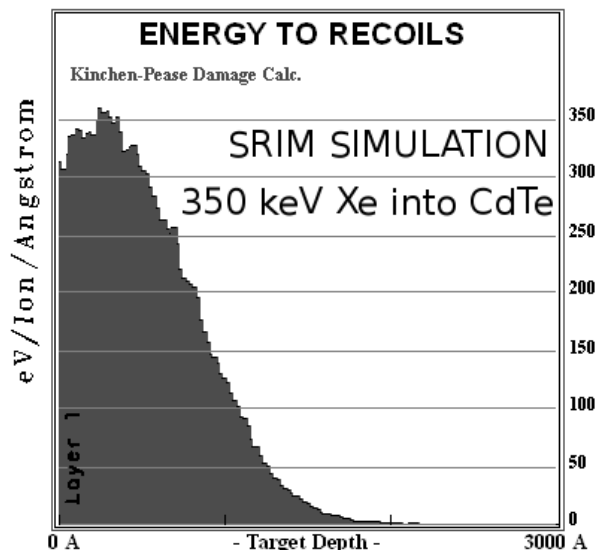
A minták kezelése 8 lépésben történt. Ezek mindegyike 5 másodpercig tartott. Minden lépés után tiszta metanolos öblítés és ellipszometriai mérés következett, amely során megközelítőleg 50 nm került eltávolításra a CdTe rétegből. A kezelés során a felületi érdesség 6 nanométerről 1 nanométerre csökkent, majd újra növekedett - ezzel együtt a réteg optikai sűrűsége a felület közelében növekedett (az üreg tartalom mennyisége csökkent). Az üregtartalmat a 3-6 eV fotonenergia tartományban végzett illesztésből határoztam meg. Ebben a tartományban a fény behatolási mélysége kisebb 50 nanométernél. A felületi érdesség csökkentését és az optikai sűrűség növelését egyaránt szem előtt tartva a legjobb minta felületi érdessége 2 nm, üregtartalma 4 % volt. Az üregtartalom csökkenését a kezelés folyamán nagy valószínűséggel a felület közelében kisebb sűrűségű anyag eltávolítása okozza.

Az ellipszometriai spektrumokat a kezeletlen és implantált mintákon egyaránt az 1-6 eV foton energia tartományban vettem fel. Ez a tartomány lefedi az E_0 ($\approx 1,5$ eV), E_1 ($\approx 3,3$ eV), $E_1 + \Delta_1$ ($\approx 3,9$ eV), és az E_2 ($\approx 5,1$ eV) kritikus pont energiákat. A mérésekhez a korábban Si:H alapú napelemek vizsgálatához is alkalmazotthoz [126, 127, 128] hasonló felépítésű forgó kompenzátoros ellipszométert használtam (Woollam M-2000DI). Az ionsugaras kiértékelések a 2.4. fejezetben leírtak szerint történtek.

A 350 keV energiájú Xe^+ ionok szilíciumba és kadmium telluridba történő implantációja során a SRIM [120] szimuláció alapján várható roncsoltsági profilokat a 6.12. és 6.13. ábrák mutatják. A könnyebb szubsztrát atomok következtében szilíciumban mélyebb a roncsolt tartomány. A nagy tömegű Xe^+ ionok implantációjának előnye, hogy a roncsoltság a felületig terjed (nem olyan eltemetett roncsolt réteg jön létre,



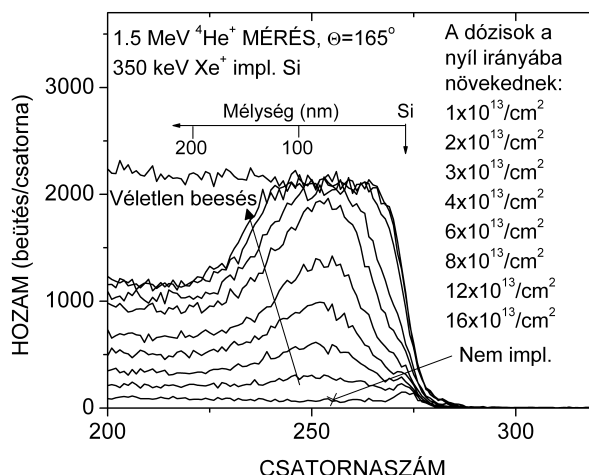
6.12. ábra. A 350 keV energiával implantált Xe^+ ionok ütközése során egységnyi úthossz alatt átlagosan leadott energia mélységfüggése szilíciumban.



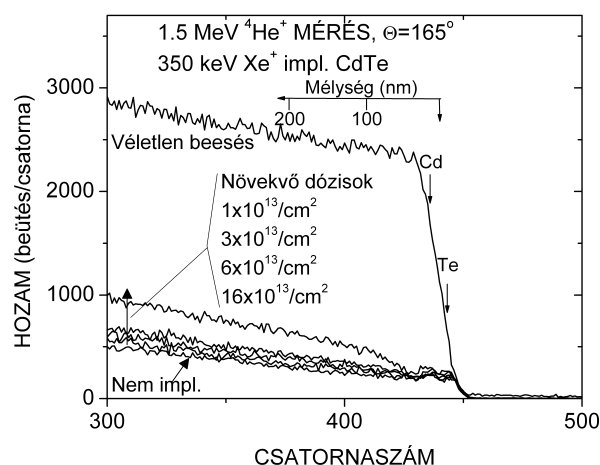
6.13. ábra. A 350 keV energiával implantált Xe^+ ionok ütközése során egységnyi úthossz alatt átlagosan leadott energia mélységfüggése kadmium telluridban.

mint könnyebb ionok implantációja esetén – a különböző tömegű ionok által keltett roncsoltsági profilok jól összevethetők a 3.6. ábrán). A felületig terjedő roncsoltság azért fontos, mert CdTe-ben az E_1 és E_2 kritikus pontok fotonenergiáján a behatolási mélység rendre 18 és 10 nm.

A roncsoltságot direkt módon csatorna hatással kombinált RBS méréssel lehet meghatározni [129]. Míg szilícium esetében jó egyezést mutat az RBS mérés (6.14. ábra) és a SRIM szimuláció (6.12. ábra), addig kadmium tellurid esetében nagy eltérést tapasztalunk (6.15. és 6.13. ábra). A kadmium telluridban mért roncsoltság alacsony szinten marad még a szimuláció által amorfizáltnak ígérkező esetben is. A szóródási (kicsatornázódási - dechanneling) tartomány jellege kiterjedt rácshibák jelenlétére utal [130]. A szóródás jelenségére utaló adott meredekségű szakasz abban a mélységben indul, amely a 6.13. ábrán látható szimuláció alapján a roncsolt tarto-



6.14. ábra. RBS módszerrel mért relatív roncsoltság 350 keV Xe^+ ionokkal különböző fluenciák mellett implantált szilíciumban. A mérést N. Q. Khánh végezte.



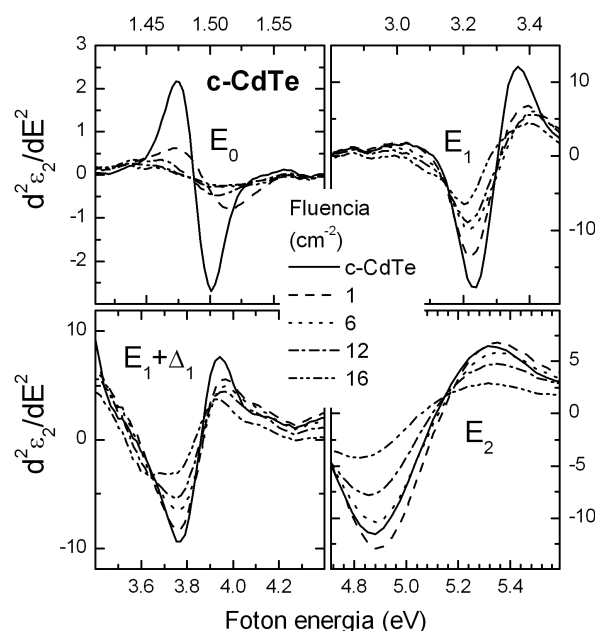
6.15. ábra. RBS módszerrel mért relatív roncsoltság 350 keV Xe^+ ionokkal különböző fluenciák mellett implantált kadmium telluridban. A mérést N. Q. Khánh végezte.

mány félértékszélessége.

A dielektromos függvény képzetes részének második deriváltja (vagyis lényegében az abszorpciós csúcsok görbülete⁴) szisztematikusan változik a fluencia függvényében (6.16. ábra). Azonban az RBS eredménnyel összhangban az optikai mérés eredménye is azt mutatja, hogy a minta roncsoltsága nem éri el az amorfizációt, mivel a második deriváltak a legnagyobb dózis esetén is oszcillációt mutatnak. Emellett az eredmények arra is rámutatnak, hogy az optikai mérések kis roncsoltság esetén is érzékenyen követik a rendezetlenség változását, legyen az kiterjedt hiba vagy ponthiba. Utóbbi esetére szilíciumban mutattunk rá az ellipszometria kiemelkedő érzékenységre kis implantált dózisok esetében is [131]. A második deriváltak amplitúdójának csökkenése megfelel a kritikus pontok hosszútávú rendezettség megszűnése miatti kiszélesedésének (elektronok szóródása a rácshibákon és emiatt bekövetkező élettartam rövidülésük).

Az ionnyom méretének előző fejezetben ismertetett meghatározási módszere ebben az esetben is alkalmazható a második derivált amplitúdócsökkenésének logaritmusát ábrázolva a fluencia függvényében (6.17. ábra). Az illesztett egyenes meredekségéből

⁴lásd pl. a 4.5. ábrát



6.16. ábra. Különböző fluenciák mellett 350 keV energiájú Xe^+ ionokkal implantált CdTe ellipszometriával mért dielektromos függvényének második deriváltja a kritikus pontok környékén.

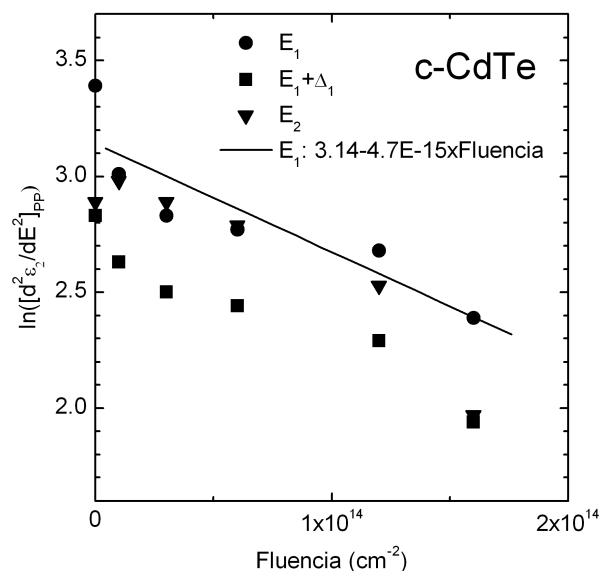
becsült ionnyom méret $4,7 \times 10^{-15} \text{ cm}^2 (\approx 7\text{\AA})^2$.

6.3.2. Implantáció Bi ionokkal

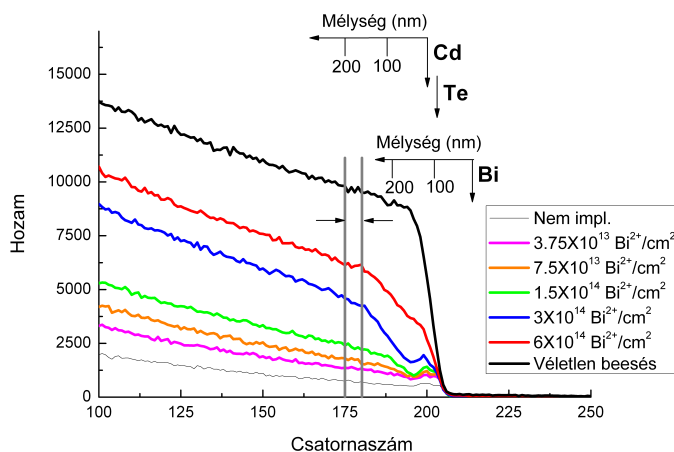
Az előző fejezetben leírt munka folytatásaként Bi^+ ionokkal implantált kadmium telluridot vizsgáltam. Azért esett a bizmutra a választás, mert ez olyan ionnak ígérkezett, ami nagyobb tömege miatt a xenonnál jelentősebb roncsoltságot képes létrehozni, és az implantációja az intézetben elérhető implanterrel technikailag kivitelezhető. A fentiekben leírt c-CdTe hordozókat ebben az esetben 175 keV energiájú Bi^{2+} ionokkal implantáltuk. Így az egy ionra jutó energia a xenonnál alkalmazott 350 keV-vel megegyezett. A fluencia tartomány $3,75 \times 10^{13}$ és $6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ között változott.

A 6.15. ábrával összehasonlítva a Bi implantáció által keltett roncsoltság RBS mérését bemutató 6.18. ábrán jól látszik, hogy a Xe implantációval ellentétben ebben az esetben a nagyobb dózisok tartományában jelentős roncsoltságot sikerült elérni a felület közelében. Mindezt úgy, hogy a Bi atomok koncentrációja a csúcs közelében is kisebb, mint 0,3 %, így a Bi csúcs az RBS mérésben nem kimutatható, nem okoz háttér. Az alacsony csatornaszámok irányában lineárisan emelkedő RBS hozam azonban ebben az esetben is kiterjedt hibákat, diszlokációkat mutat. A roncsoltság dózissal arányos növekedése a 6.19. ábra tanúsága alapján ebben az esetben is jól nyomon követhető az optikai tulajdonságok megváltozásával. A kristályrácsban meglévő hosszútávú rend csökkenése a szilícium (3.18. ábra) és szilícium karbid (6.7. ábra) esetéhez hasonlóan a kritikus pontoknál megjelenő abszorpciós csúcsok kiszélesedésében jelentkezik (6.19. ábra).

Az implantált szerkezetet a 6.20. ábrán látható módon modelleztem. A létrejövő szerkezet fő elemei feltételezhetően a felületi érdesség és egy roncsolt réteg (a 6.20. ábra bal oldalán látható szerkezeti modell). Az ehhez tartozó (jobb oldalt látható) optikai modell egyszerűbb, mert a mérő fény behatolási mélysége a vizsgálathoz hasz-



6.17. ábra. A csatolt állapotsűrűség második deriváltjának fél-logaritmikus ábrázolása a fluencia függvényében.



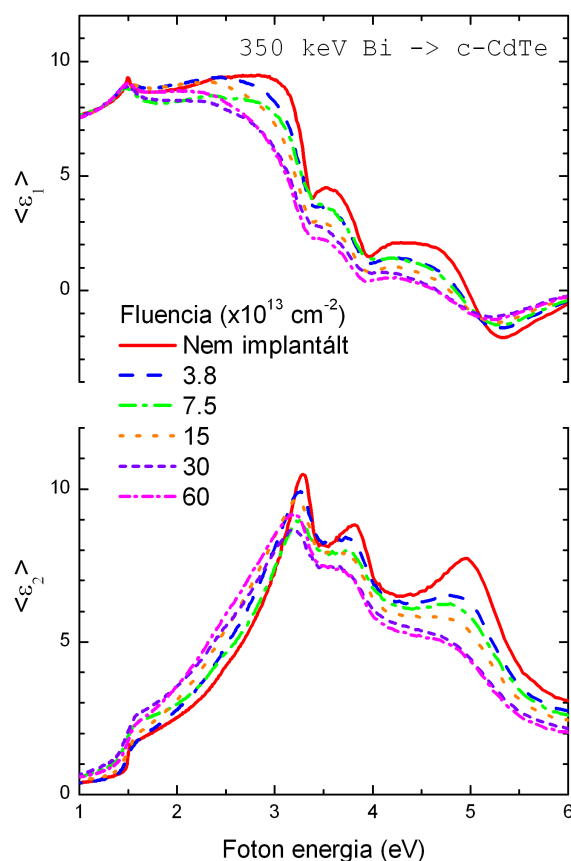
6.18. ábra. Különböző fluenciájú, 350 keV energiájú Bi⁺ ionokkal implantált CdTe 1.5 MeV He⁺ ionokkal felvett RBS/C spektrumai. A Bi, Te és Cd atomok mélységskálái külön láthatóak (a Cd és Te atomtömege közel megegyező). A SRIM szimuláció alapján a 175-180 csatornaszámok között található a roncsolt régió csúcs mögött megjelenő kiterjedt hibák.

nált foton energia tartományban sokkal kisebb, mint a roncsolt réteg vastagsága. Így a szerkezet egyetlen felületi érdeklődés réteggel és egy tömbinek tekinthető félvégteles közeggel modellezhető. Ennek a megközelítésnek nagy előnye, hogy egyetlen réteg vastagságát kell csak illeszteni, az összes többi paraméter anyagszerkezeti paraméter, amelyek így pontosabban meghatározhatók.

A roncsolt CdTe szerkezet dielektromos függvényének illesztésére az úgynevezett "standard critical point" modellt használtam [132, 133]:

$$\epsilon(E) = Ae^{i\Phi}(E_{CP} - E - i\Gamma)^\mu, \quad (6.1)$$

ahol A , E_{CP} , Γ és Φ rendre az oszcillátor amplitúdója, energiája, kiszélesedése és fázisa. A kitevőben lévő μ a kritikus pont típusára jellemző paraméter. Az E_1 , $E_1 + \Delta_1$

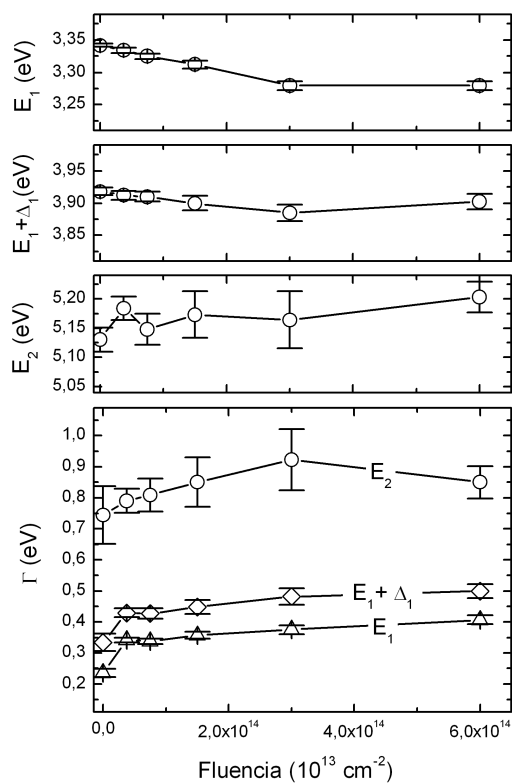


6.19. ábra. Különböző fluenciájú 350 keV-es Bi^+ ionokkal implantált egykristályos CdTe pseudo-dielektromos függvénye.

SZERKEZET	MODELL
Felületi érdesség	Cauchy + üreg
CdTe roncsoltsági profil	Standard CP modell
CdTe szubsztrát	

6.20. ábra. Az ionimplantált CdTe feltételezett rétegszerkezete és ellipszometriai modellje.

és E_2 kritikus pontokhoz tartozó illesztett oszcillátor energiákat és kiszélesedéseket a 6.21. ábra foglalja össze. Az oszcillátor energiák szisztematikus csökkenést mutatnak növekvő fluenciával. Ez hasonló ahhoz, ahogy a csúcsok egykristályos szilíciumban változnak (ld. 3.18. ábra). E_2 változása a paramétermeghatározás (feltehetően a felületi érdesség által okozott) hibájához képest nem jelentős. Itt fontos újra kihangsúlyozni, hogy az optikai behatolási mélység az E_1 és E_2 kritikus pontokhoz tartozó fotonenergiákon rendre 18 és 10 nm. A kritikus pontok kiszélesedése az elektron élet-tartam csökkenés alapján várható módon [39] növekszik a fluencia, azaz a roncsoltság növekedésével. Az E_2 kritikus pont kiszélesedésének újra csökkenése a legnagyobb fluenciánál feltételezhetően a felület közeli újra kristályosodásnak köszönhető. Ez lehet részben az oka az E_2 csúcspozíció E_1 és $E_1 + \Delta_1$ -től eltérő viselkedésének is. A felületi



6.21. ábra. A standard kritikus pont modellel illesztett energia és kiszélesedési paraméterek a fluencia függvényében.

érdesség réteg vastagsága a fluencia növekedésével 8-ról 20 nm-re, az érdesség réteg üregtartalma pedig 20-ról 45 %-ra növekszik. Utóbbi összhangban van azzal az elképzeléssel, hogy a becsapódó ionok növekvő fluenciával növekvő számú krátert hoznak létre a felületen.

7. fejezet

Összetett dielektrikum rétegek vizsgálata

Az ebben a fejezetben vizsgált összetett dielektrikum rétegek különleges optikai tulajdonságaik miatt számos alkalmazás potenciális vagy már széles körűen alkalmazott anyagai (pl. DRAM memóriák [134], hullámvezetők, kapuelektrodok dielektrikumai, optikai kapcsolók). A következő fejezetekben a fémorganikus és kémiai gőzfázisú rétegleválasztással előállított dielektrikum vékonyrétegek előállítás- és szerkezetfüggő optikai tulajdonságainak meghatározására végzett kísérleteket mutatok be. Megmutatom, hogy az optikai tulajdonságok korrelációt mutatnak a referencia módszerekkel meghatározott számos egyéb kritikus fizikai rétegtulajdonsággal, mint az elemösszetétel vagy a kristályosság. Ez rámutat a szeletek gyors, pontos, olcsó, roncsolásmentes gyártásközi optikai minősítésének lehetőségére és ezáltal jól kézben tartható tulajdonságú rétegek előállítására. Az ellipszometria akár rétegekészítés közbeni *in situ* mérést és a rétegekészítési paraméterek ez alapján történő szabályozását is lehetővé teszi.

7.1. $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ vékonyrétegek optikai tulajdonságai

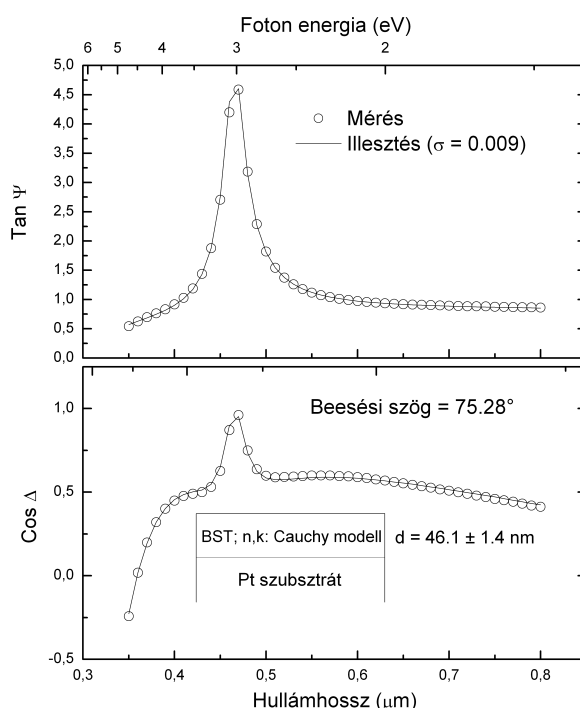
A bárium stroncium titanát (BST) rétegek számos fizikai és kémiai módszerrel előállíthatók. Ilyen a fémorganikus kémiai gőzfázisú leválasztás (MOCVD) [135, 136], a porlasztás [137], a szol-gél eljárás [138] vagy a lézerabláció [139, 140, 141]. A különböző leválasztási eljárásokkal készült BST rétegek irodalmi referencia adatai jelentős szórást mutatnak, ami arra utal, hogy a rétegtulajdonságok nagyban függnek a leválasztási eljárástól.

A minták fémorganikus alacsony nyomású kémiai gőzfázisú rétegleválasztással készültek 7 mbar nyomáson. A leválasztási hőmérsékleteket és a rétegvastagságokat a 7.1. táblázat mutatja. Az RBS mérések a 2.4. fejezetben leírt módon, míg a röntgendiffrakciós (XRD) mérések Philips PW 1050 diffraktométerrel a $\text{CuK}\alpha$ vonalat és a PDF pordiffrakciós adatbázist használva készültek [142]. Az ellipszometriai méréseket SOPRA ES4G típusú forgó polarizátoros ellipszométerrel végeztem. A szilícium hordozó miatt a nominális beesési szög 75° volt.

Mivel a fenti módszerekkel készült vékonyrétegek tulajdonságai nagy mértékben függnek a készítési eljárástól és az eljárásokban alkalmazott mintakészítési paramérektől, az irodalmi referencia törésmutató adatbázisok a legritkább esetben használhatók. A dielektrikumok modellezésére széles körben elterjedt eljárás olyan hullám-

7.1. táblázat. A BST minták főbb készítési paramétereit. T a leválasztási hőmérséklet, d a rétegvastagság.

Minta	T (°C)	d (nm)
BST85	530	119
BST82	590	89
BST115	620	57
BST116	620	46



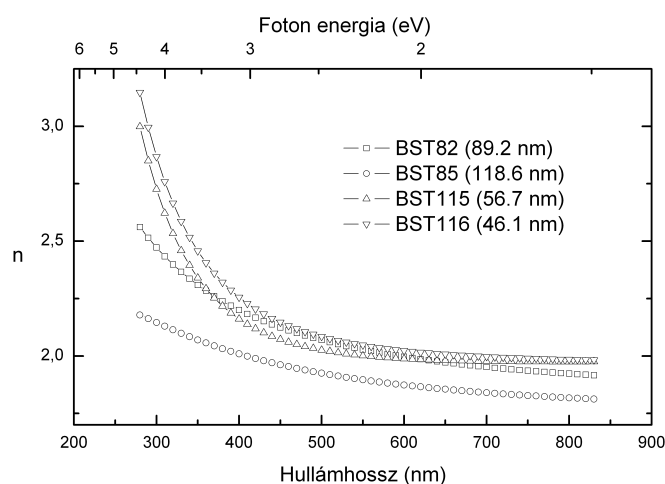
7.1. ábra. Tipikus mért és illesztett ellipszometriai spektrumok a 46 nm-es BST mintára.

hossztartomány választása, amelyen belül diszperziója kicsi és jól közelíthető valamilyen polinommal. Ebben az esetben a Cauchy diszperziós modell alkalmazható (2.10. képlet). A BST rétegek platina rétegeken kerültek leválasztásra, amelyek elegendően vastagok ahhoz, hogy az alkalmazott hullámhossztartományban átlátszatlanok legyenek. Ez jelentősen leegyszerűsíti az alkalmazott optikai modellt, mert a platina használható szubsztrátként. A platina réteg törésmutatóját egy BST réteg nélküli, platina réteget tartalmazó referencia minta mérésével határoztam meg. Az optikai modell és egy-egy tipikus mért és illesztett spektrum a 7.1. ábrán látható. A modelltől számolt spektrumok illeszkedése a többi minta esetén is hasonlóan jó volt. Ez azt mutatja, hogy egyetlen homogén vékonyréteg és a platina szubsztrát jól leírja a mérést.

Az illesztett vastagság és törésmutató értékeket a 7.2. táblázatban foglaltam össze. A törésmutatót az illesztett Cauchy paraméterekből (2.10. képlet) számoltam 630 nm hullámhosszra. A táblázat tartalmazza az RBS mérésekből meghatározott atomi összetételt is százalékban. A teljes diszperziók a 7.2. ábrán láthatók. A BST82 és

7.2. táblázat. A BST minták főbb illesztési paraméterei. A táblázatban a törésmutató 630 nm-es hullámhosszon számolt értékei láthatók. σ a mért és illesztett spektrumok pontjai közötti eltérések négyzetösszege.

Minta	Ba (%)	Sr (%)	Ti (%)	O (%)	d (nm)	n	σ
BST85	17,0	6,4	17,0	59,6	118,6 $\pm$ 4,4	1,86	0,040
BST82	16,9	7,1	20,3	55,7	89,1 $\pm$ 1,1	1,98	0,013
BST115	12,2	6,5	16,3	65,0	56,7 $\pm$ 5,2	1,98	0,031
BST116	12,2	6,8	20,3	60,7	46,1 $\pm$ 1,4	2,01	0,009



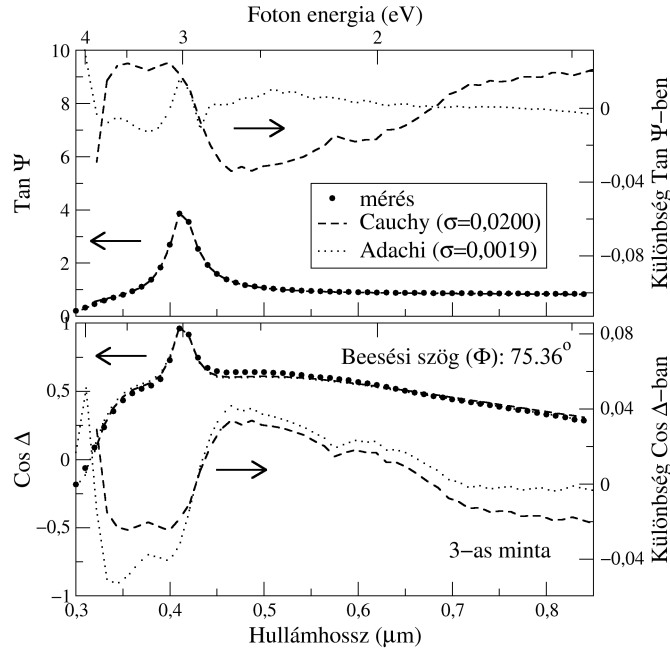
7.2. ábra. Az ellipszometriai mérésből a Cauchy modell alapján számolt törésmutató diszperziók.

BST85 minták törésmutatója elmarad a másik két minta törésmutatójától¹. Ezeket a mintákat a többenél magasabb Ba és alacsonyabb O koncentráció jellemzi (7.2. táblázat). Az XRD mérések (100) és (200) orientációjú köbös BST fázisokat mutatnak, kivéve a BST 85-ös mintát, amely esetében nem látszanak erős BST vonalak a röntgen diffrakciós spektrumban. A BST115 és BST116 minták törésmutatója a 350 nm alatti hullámhossztartományban jelentősen meghaladja a másik két (magasabb Ba és alacsonyabb O koncentrációval valamint kisebb intenzitású röntgendiffrakciós BST csúcsokkal jellemezhető) minta törésmutatóját. A BST116 minta BST115 mintáénál magasabb törésmutatója ugyancsak korrelál az XRD eredményekkel, ugyanis a röntgendiffrakciós mérések tanúsága szerint a BST116 minta a BST115 mintáénál intenzívebb BST csúcsokkal rendelkezik.

7.2. $\text{Sr}_x\text{Bi}_y\text{Ta}_2\text{O}_9$ vékonyrétegek optikai tulajdonságai

Az itt bemutatott stroncium bizmut tantalát (SBT) rétegek ugyanabban az MOCVD kemencében, ugyanolyan platínával bevont egykristályos szilícium hordozókra készül-

¹A BST85 minta extinkciós együtthatója is jelentősen magasabb, mint a többi mintáé (ezeket a korlátozott oldalszám miatt nem mutatom be a dolgozatban).



7.3. ábra. A 3. minta mért és Adachi valamint Cauchy modellekkel illesztett ellipszometriai spektrumai. σ a mért és illesztett spektrumok pontjai közötti eltérések négyzetösszege.

tek, mint az előző fejezet BST rétegei. Az ellipszometriai méréseket is hasonló módon SOPRA ES4G típusú forgó polarizátoros ellipszométerrel végeztem. A szilícium hordozó miatt a nominális beesési szög 75° volt. Az RBS és XRD mérések ugyancsak az előző fejezetben ismertetett módon készültek.

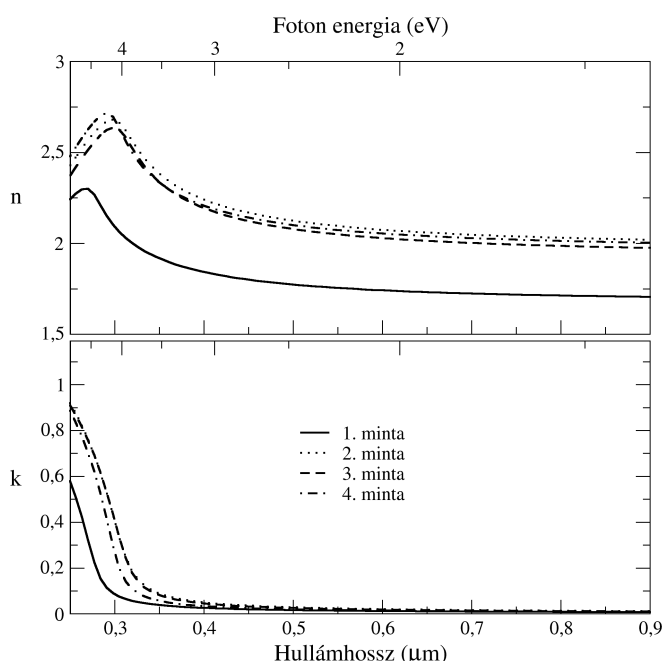
A platina réteg átlátszatlansága miatt az optikai modell a BST vizsgálatokhoz hasonlóan ebben az esetben is leegyszerűsödik, mert a modellben a platina réteg hordozónak tekinthető. Így egyréteges modellt használhatunk, amelyben az SBT réteg törésmutatóját a Cauchy (2.10. képlet) vagy az Adachi-féle [143]

$$\epsilon(E) = \frac{A_0}{E_0^{1.5}} \frac{2 - (1 - x_0)^{0.5} - (1 - x_0)^{0.5}}{\chi_0^2} \quad (7.1)$$

parametrizálással számolhatjuk. Az Adachi modellben $\chi_0 = (E + i\Gamma)/E_0$, A_0 , E_0 és Γ pedig rendre az amplitúdót, az oszcillátor energiát és a kiszélesedési paramétert jelölik. Az Adachi modell ezen 3 illesztett paraméterével szemben a Cauchy modellben 3-3 paramétert használunk a törésmutató valós és képzetes részére egyaránt. A 7.3. ábra tanúsága szerint bár mindkét modellel számolt spektrum jó illesztést eredményez, az Adachi modellel kismértékben jobb illesztés érhető el (a jobb illeszkedés különösen $\tan(\Psi)$ -ben érhető tetten) mint a Cauchy modell – annak ellenére, hogy az illesztett paraméterek száma fele annyi. Míg Cauchy modell csak a 320-840 nanométeres hullámhossztartományban (3,9-1,5 eV) volt használható, az Adachi modell fele annyi paraméterrel is a teljes 250-840 nanométeres hullámhossztartományban (5,0-1,5 eV). Az Adachi modellből ezen túlmenően olyan fizikailag releváns paraméterek is meghatározhatók, mint a tiltott sáv szélessége vagy az átmenet kiszélesedése. Az illesztett paramétereket a 7.3. táblázatban foglalom össze, míg az ezen paraméterekkel számolt diszperzió a 7.4. ábrán látható. A törésmutató csúcsértékei (2,6-2,7) és a tiltott sávra kapott 4,0-4,5 eV értékek rendre jó egyezést mutatnak a Watanabe és munkatársai

7.3. táblázat. Az Adachi modell illesztett paramétereit. A paramétereiből számolt törésmutató és extinkciós együttható értékek a 7.4. ábrán láthatók. σ a mért és illesztett spektrumok pontjai közötti eltérések négyzetösszege.

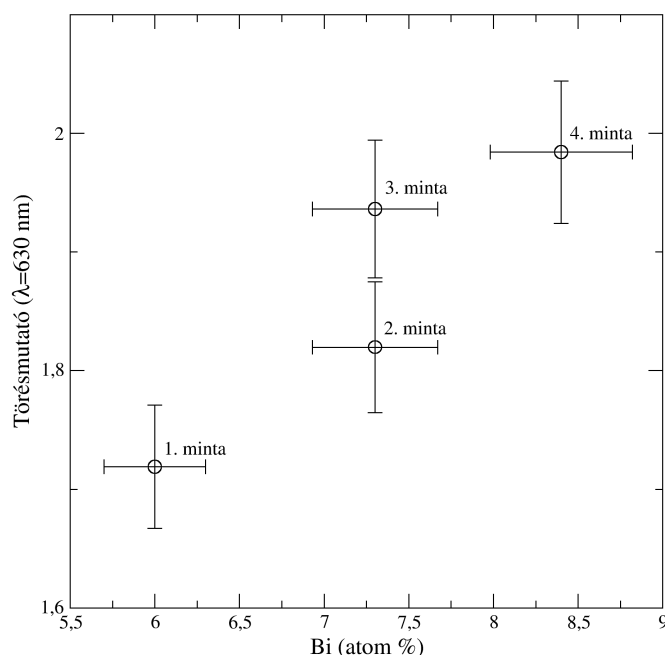
	1. minta	2. minta	3. minta	4. minta
Vastagság (nm)	$185,3 \pm 7,5$	$40,3 \pm 0,4$	$37,8 \pm 0,2$	$43,9 \pm 0,3$
A_0 (eV ^{1,5})	$107,5 \pm 5,2$	$126,4 \pm 2,5$	$120,3 \pm 1,0$	$129,7 \pm 1,6$
E_0 (eV)	$4,48 \pm 0,007$	$4,02 \pm 0,02$	$4,00 \pm 0,001$	$4,12 \pm 0,01$
Γ	$0,178 \pm 0,028$	$0,197 \pm 0,007$	$0,148 \pm 0,007$	$0,148 \pm 0,010$
σ	0,0096	0,0021	0,0019	0,0013



7.4. ábra. A vizsgált SBT minták Adachi modellel (7.3. táblázat) meghatározott törésmutatói (n) és extinkciós együtthatói (k).

[144] valamint Bahng és munkatársai [145] által publikált 2,5-2,7 eV valamint 4,0-4,3 eV értékekkel.

Az RBS mérésből meghatározott sztöchiometria $\text{SrBi}_{1,1}\text{Ta}_{3,1}\text{O}_x$ -tól $\text{SrBi}_{1,6}\text{Ta}_{2,7}\text{O}_x$ -ig terjed. A 7.5. ábra tanúsága szerint a Bi mennyisége korrelációt mutat a törésmutatóval, ami összhangban van Bahng és szerzőtársai eredményeivel [145]. Az XRD eredmények erősen orientált SBT szemcséket mutatnak. A jóval alacsonyabb törésmutatójú 1. mintára (7.4. ábra) az XRD kisebb szemcseméretet mutatott. A 7.4. táblázat utolsó oszlopából látható, hogy az átlagos atomsűrűség is csökken. Ennek kézenfekvő magyarázata, hogy kisebb szemcseméret esetén nagyobb az egységnyi térfogatban lévő szemcsehatárok mennyisége. A szemcsehatárokon lévő üregek és hibahelyek viszont csökkentik az optikai (és fizikai) sűrűséget és a törésmutatót. Ez egyben arra is utal, hogy az ilyen anyagok optikai vizsgálatából annak szemcsézettségére is következtetni lehet.



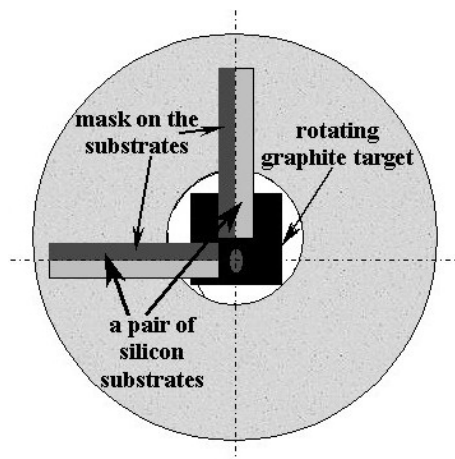
7.5. ábra. A vizsgált SBT minták törésmutatóinak korrelációja az RBS mérésből meghatározott Bi atomszázalékkal.

7.4. táblázat. Elemek RBS-sel meghatározott aránya atom százalékban és vastagsága atom/cm²-ben (d_{RBS}). d_{SE} az ellipszometriai mérésből kapott rétegvastagság, ρ pedig az SE és RBS kombinációjával meghatározott anyagsűrűség atom/cm³-ben (az RBS-ből felületegységre megállapított atomszám osztva az SE által mért rétegvastagsággal). Az RBS méréseket N. Q. Khánh végezte.

Minta	Sr (%)	Ta (%)	Bi (%)	d_{RBS} ($\times 10^{17}$ at/cm ²)	d_{SE} (nm)	ρ ($\times 10^{22}$ at/cm ³)
1	5,5	16,8	6,0	9,0	185,3	4,9
2	5,3	14,8	7,3	2,8	40,3	6,9
3	5,3	14,3	8,4	2,4	37,8	6,3
4	5,3	15,5	7,3	2,9	43,9	6,6

7.3. CN_x rétegek szerkezete és dielektromos függvényének parametrizálása

A szén nitrid (CN_x) kutatások legfőbb motivációja ezen anyag keménysége, így pl. bevonatként való alkalmazhatósága [146]. Előállítására számos módszer ismert a kémiai gőzfázisú leválasztástól a porlasztáson keresztül a lézeres leválasztásig [147]. Utóbbi módszerre Szörényi Tamás ú.n. inverz geometriát javasolt, amelyben a hordozó a lézerrel meglőtt céltárgy síkjában helyezkedik el [148, 149]. Az általam vizsgált minták is ebben a 7.6. ábrán bemutatott elrendezésben születtek [47] az SZTE MTA Lézerfizikai Tanszéki Kutatócsoportjában. Munkám célja a CN_x szerkezetet megfelelően leíró modell megalkotása valamint az ellipszometriával meghatározható rétegtulajdonságok



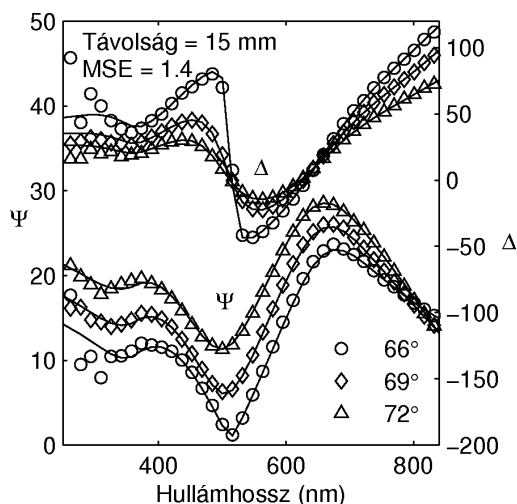
7.6. ábra. Inverz ablációs elrendezés [148]. Középen látható az ablációs folt a forgó grafit céltárggyal (rotating graphite target), a két egykristályos szilícium hordozóval (a pair of silicon substrates) és a kimaszkolt csíkokkal (mask on the substrates).

és vastagságok laterális térképezése és referencia mérésekkel való összehasonlítása volt.

A 10 fordulat/perc sebességgel forgó grafit céltárgy ablációja 10 Hz-es KrF lézer impulzusokkal történt 7 Jcm^{-2} energiasűrűséggel 50 Pa nyomású nagy tisztaságú (99.999%) N_2 atmoszférában szobahőmérsékleten. A leválasztott CN_x réteg laterális vastagságeloszlása elliptikus, az ellipszis tengelyei pedig egybeesnek az eltávolított elliptikus folt szimmetriatengelyeivel. A vastagságeloszlás mérése a lézerrel meglőtt folt szimmetriatengelyeinek folytatásában egymásra merőlegesen elhelyezett 8 mm széles, egyik oldalukon egy sávban lemaszkolt szilícium szeleteken történt. A maszkolás hatásán a rétegvastagság Talystep profilométerrel is mérhető volt.

A minta optikai válaszána kiszámolására és a mért $\Psi - \Delta$ spektrum illesztésére (7.7. ábra) három-rétegű optikai modell szolgált. Az egykristályos szilícium hordozón figyelembe kell venni a natív oxid réteget, azon pedig a d_b vastagságú CN_x réteget (7.8. ábra). A felületi érdesség modellezése a szokásos módon, az effektív közeg (EMA) módszerrel történik réteg és üreg komponensek használatával. Az érdesség réteg vastagságát d_s , az üreg komponens térfogatszázalékát f_v jelöli a 7.8. ábrán. Az érdesség figyelembe vételével az illesztés hibája (MSE) 0,8-1,5, míg annak figyelembe vétele nélkül jelentősen nagyobb, 3-5. A felületi érdesség figyelembe vételének fontosságát számos saját [108, 82, 36] és irodalmi [150, 151] eredmény is alátámasztja.

A CN_x réteg dielektromos függvénye jól leírható a Tauc-Lorentz (TL) parametrizálással (ld. 2.2. fejezet). Az MSE=1 körüli illesztési hibák a mért és számolt spektrumok közötti jó egyezésre utalnak, ahogy ez a 7.7. ábrán is látszik. A TL modellt sikerrel használták amorf szén [152] és CN [153] modellezésére. A 7.8. ábra a réteg makroszkopikus szerkezeti tulajdonságait (rétegvastagságok $[d]$ és a felületi érdesség réteg üreg százalékát $[f_v]$) és az illesztés hibáit (MSE) mutatja. A felületi érdességet is figyelembe véve (a teljes rétegvastagságot a $d_b + d_s/2$ képlettel számolva) az optikailag mért rétegvastagság jó egyezést mutat a profilometriai eredményekkel. Az ellipszometriával mért felületi érdesség ugyancsak a vártaknak ([108]) megfelelően korrelációt mutat az AFM által mért érdességgel. Az AFM által mért RMS érdesség (R) és az ellipszometria által az érdesség réteg vastagságaként definiált érdesség érték numerikus egyezése számos kísérleti paramétertől függ (pl. az AFM által pásztázott terület nagysága), így általában a korreláción túl ez a fajta pontosság nem garantálható. A [108] cikkben megmutattuk, hogy (a jelen esetnek megfelelő) nagyobb ablakméretek

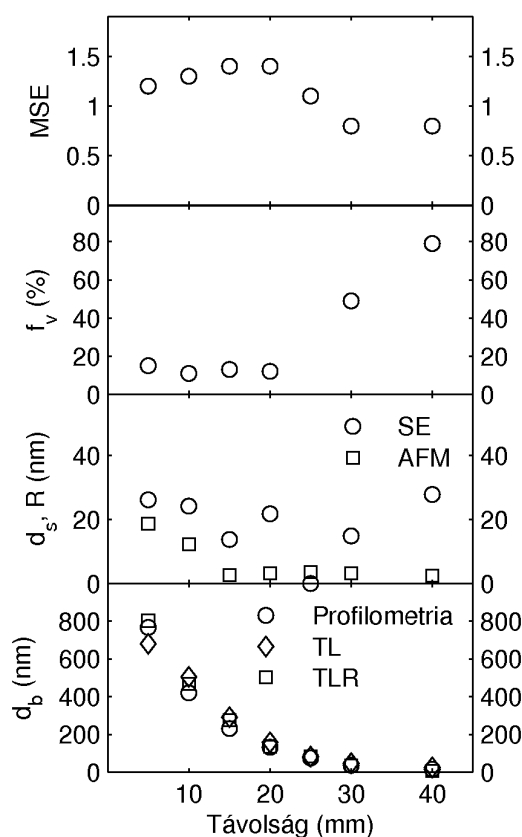


7.7. ábra. Mért és illesztett ellipszometriai spektrumok a 15 mm-es távolságon lévő pontban mérve. A jobb áttekinthetőség érdekében csak minden tizedik mért pont került ábrázolásra. A három beesési szög mellett az illesztés összesen 1443 mért Ψ - Δ értékpárra történt.

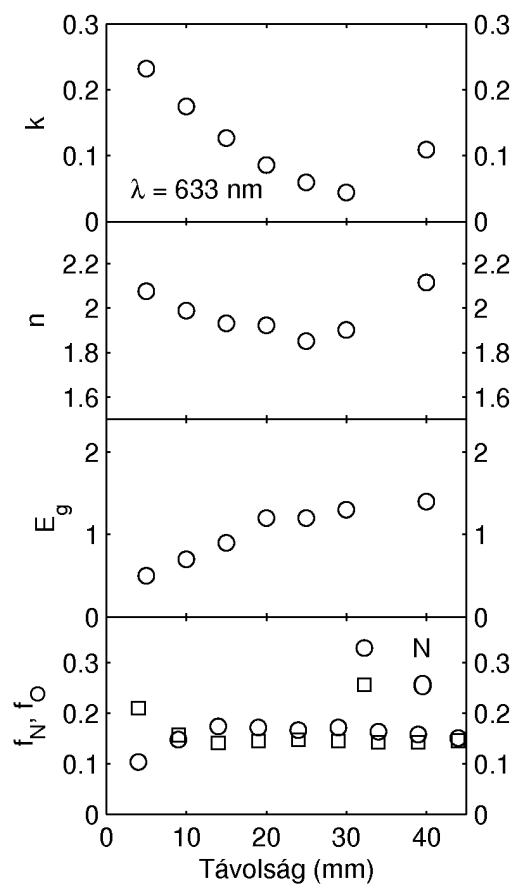
használata esetén az ellipszometriával meghatározott érdesség réteg vastagsága felülbecsli az AFM által mért RMS érdességet. A 30 és 40 mm-es távolságoknál kapott anomálishan magas értékek oka valószínűleg olyan nagyobb CN_x klaszterek kialakulása, amelyek az RMS értéknél jelentősen nagyobb vastagságú, kis sűrűségű érdesség réteget eredményeznek.

A 7.9. ábrán a CN_x réteg anyagtulajdonságai láthatók, ugyancsak a céltárgyon elhelyezkedő lézerfolttól való távolság függvényében. Az XPS-sel a rétegben² meghatározott O és N atom arányok rendre csökkenő és növekvő értéket mutatnak a forrástól távolodva, mintegy 15 mm-es távolságig. Ez megfelel az inverz impulzus üzemi lézeres leválasztási (IPLD) mechanizmusnak [154], amelyben a hordozóra leválasztott anyag a forrás közelében döntően a szén plazmából, míg a forrástól távolabbi tartományban (ahol az O és N arány a 7.9. ábrán konstans) ennek nitrogén közeggel való reakciójából származik. Az ellipszometriai kiértékelésekből meghatározott paraméterek 30 mm-es távolságig egyértelmű tendenciát mutatnak. A forrástól való távolság növekedésével a tiltott sáv szélességét megadó E_g növekszik, n és k pedig egyaránt csökken. A E_g növekedése nagyobb arányú sp^3 hibridizációra utal [47, 153, 155, 156], míg a törésmutató csökkenése az optikai és fizikai sűrűség csökkenésére (hasonló hatás tapasztalható a leválasztási nyomás csökkenésekor [156]).

²a felszínen - legfeljebb néhány nanométeres mélységben



7.8. ábra. Makroszkópikus mintatulajdonságok ellipszometriai (SE), atomerő mikroszkópiái (AFM) és profilometriai mérések eredményei alapján. d_b a réteg vastagsága a felületi érdességgel (TLR), anélkül (TL) és profilometriával, d_s az ellipszometriával meghatározott felületi érdesség réteg vastagsága, R a négyzetes közép-érdesség (root mean square roughness) az AFM mérésből, f_v az üreg komponens térfogataránya a felületi érdesség rétegben, MSE az illesztés hibája a felületi érdességet is figyelembe vevő modell (TLR) használatával. A mért értékek bizonytalansága minden esetben jelentősen kisebb a szimbólumok méreténél. a céltárgytól való távolság függvényében. A mérési elrendezés a 7.6. ábrán látható.



7.9. ábra. Anyagjellemzők ellipszometriai és XPS mérésekből. E_g : tiltott sáv; n és k : a törésmutató valós és képzetes része az ellipszometriai TLR modellből 633 nanométeres hullámhosszon. f_N és f_O az XPS-sel mért atom arányok. A vízszintes tengely a céltárgyon elhelyezkedő lézerfolttól való távolságot mutatja.

8. fejezet

Összefoglalás

8.1. Tézisek

Az értekezés legfontosabb eredményeit az alábbi tézispontokban foglalom össze. Az egyes bekezdések végén zárójelben a tézispontok felsorolása után számba vett vonatkozó közleményeim sorszámaára hivatkozok.

1. Tézispont (Mélységprofilozás)

Az ionimplantáció által egykristályos szilíciumban keltett rácskárosodás mélységeloszlására Fried Miklós által kidolgozott optikai modelleket olyan módon fejlesztettem tovább, hogy az a korábbi modellekben alkalmazottal megegyező alrétegszám esetén is jobb illesztést ad a roncsoltsági profilra, ezáltal gyorsabban és pontosabban meghatározható a mélységben változó szerkezet. A modell legfontosabb újdonsága, hogy a mélységben gyorsan változó szakaszokon vékonyabb, míg a kevésbé változó részen vastagabb alrétegeket alkalmaz, miközben a teljes profilra az alrétegek számának összege konstans. (T1,T2,T3)

Megmutattam hogy a 100 keV alatti energiájú He ionok esetén nem lehet a nehezebb ionok esetében használt egyprofilos optikai modellt alkalmazni, hanem dupla, egymást átlapoló roncsoltsági és üregprofilokat is figyelembe vevő modellre van szükség. A modell segítségével két átlapoló profil (üreg és roncsoltság) is alkalmazható. A modell jóságát 40 keV energiájú, nagy fluenciával (1×10^{16} He⁺/cm² - 1×10^{17} He⁺/cm²) implantált He⁺ ionok által keltett roncsoltsági és üregprofil meghatározására igazoltam. (T4)

Az előző bekezdésekben leírt modellek továbbfejlesztésével meghatároztam a hőkezelés során getterezés céljára létrehozott eltemetett üregprofil. Megmutattam, hogy az üregprofil nagy érzékenységgel meghatározható akár 400 nm-es eltemetett mélységben is, és a profil jó egyezést mutat az elektronmikroszkópiai mérések eredményével. Meghatároztam a roncsolt szilícium törésmutatóját. Megmutattam, hogy a He⁺ ionokkal roncsolt, főként ponthibákat tartalmazó szerkezet dielektromos függvénye leírható az Adachi-féle modellel. (T5, T6)

2. Tézispont (Nanokristályos félvezetők parametrizálása)

A Lohner Tivadar által az elektrokémiailag mart pórusos szilícium vizsgálatára javasolt, finomszemcséjű nanokristályos szilícium referencia és üreg keveréket alkalmazó modellt elsőként alkalmaztam nem a szokványos elektrokémiai marással, hanem az

úgynevezett "stain etching" eljárással készült pórusos szilícium vizsgálatára. A modell használatával mélységben jelentősen változó szerkezetet találtam. Ez alapján pontosan megmérhető volt a kimart anyag mennyisége, és annak lineáris időfüggése, melynek meredekségét befolyásolja a marószerszám és annak koncentrációja. (T7)

Különböző adalékoltságú egykristályos szilíciumban létrehozott szisztematikusan változó szemcseméretű pórusos szilícium rétegszerkezeteken igazoltam, hogy spektroszkópiai ellipszometriával a dielektromos függvény megfelelő parametrizálásával nem csak a rétegek vastagsága, porozitása és mélységbeli inhomogenitása, hanem a szemcse szerkezet is mérhető. Korrelációt mutattam ki mind az effektív közeg módszerrel illesztett, mind az Adachi-féle dielektromos függvény modellel számolt releváns modellparaméterek és a szemcseméret között. Módszert dolgoztam ki paramétercsatolási és rácskereső technikákra a globális minimum megtalálása érdekében. (T8, T9, T10)

3. Tézispont (Ultravékony rétegek modellezése)

A PhD munkámban megalkotott optikai modellek [79, 82] továbbfejlesztésével megmutattam, hogy az ellipszometria alkalmas diffúziós gátként használt, poliszilícium rétegek alatt létrehozott ultra-vékony (nanométernél vékonyabb) oxidrétegek vastagságának meghatározására. Megvizsgáltam hogyan változik az eltemetett oxid, és a fölötté lévő mintegy 150 nm-es poliszilícium réteg hőkezelés hatására. Meghatároztam hogyan függ az eltemetett oxidréteg vastagság-meghatározásának érzékenysége a fölötté lévő szerkezettől. (T11)

Többféle, növekvő komplexitású optikai modell használatával meghatároztam egykristályos 4H-SiC Si és C végződésű oldalain létrejövő ultra-vékony (néhány nanométertől 60 nanométerig terjedő rétegvastagságú) termikus oxid tulajdonságait. Megmutattam, hogy a hullámhossztartomány megfelelő megválasztásával mindkét oldalukon polírozott minták is megmérhetők és kiértékelhetők az ellenkező oldal mattítása vagy egyéb kezelése nélkül. Szisztematikusan összehasonlítottam az oxidrétegek többféle módon parametrizált és nem parametrizált illesztésének, valamint a határréteg figyelembe vételének hatását. Megmutattam, hogy a több mintán mért spektrum-sorozatok egyszerre való illesztésével, és a közös paraméterek csatolásával a határréteg és a felületi nanoérdeesség vastagsága egyszerre meghatározható. Az eredményeket atomerő mikroszkópiával és Rutherford visszaszórásos spektrometriával ellenőriztem. (T12)

4. Tézispont (Széles tiltott sávú félvezetők ionimplantációja)

Megmutattam, hogy SiC-ban az ion implantáció által keltett roncsoltság hőkezelés során bekövetkező visszakristályosodása nyomon követhető ellipszometriával. A rövid hullámhosszak használatával olyan optikai modellt alkottam, amellyel kevés paraméterrel is egyszerűen leírható a felület közeli szerkezet. Meghatároztam 150 keV energián 4×10^{14} Al^+/cm^2 -től 2×10^{15} Al^+/cm^2 -ig terjedő fluenciával implantált Al által egykristályos 4H SiC-ban keltett roncsoltságot. Kimutattam, hogy a Rutherford visszaszórásos spektrometria (RBS) és spektroszkópiai ellipszometria (SE) által meghatározott roncsoltságban szisztematikus eltérés található. Az RBS mind a hőkezelt, mind a nem hőkezelt mintákban felülbecsülte a roncsoltságot. A hőkezelt minták esetében ez az eltérés a fluencia növekedésével nőtt. Az eltérést azzal magyaráztam, hogy a nagydózisú ionimplantáció hatására bekövetkező térfogatváltozás és mechanikai feszültség miatt a létrejövő kristályszemcsék elveszítik eredeti orientációjukat,

emiatt az RBS amorfnek érzékeli őket. Az ellipszometria viszont, mivel független az orientációtól, ki tudja mutatni a roncsoltság valódi mértékét. A nagyobb ionáram-sűrűséggel implantált minták esetében a hőkezelés hatása azért volt RBS-sel kevésbé kimutatható, mert az erősebben torzult szerkezet "befagyott", és a hőkezelés nem tudta helyreállítani az eredeti kristályállapotot. (T13)

Elsőként határoztam meg a roncsolt SiC szerkezet dielektromos függvényét nagy foton energián (5-9 eV). Modelleket alkottam egykristályos 4H SiC-ban ionimplantáció által keltett hibaszerkezet kialakulásának vizsgálatára szinkrotron ellipszometriával. A modellek pontosságát igazoltam egykristályos 4H SiC-ban 100 keV energiájú, $2 \times 10^{13} \text{ Xe}^+/\text{cm}^2$ - $16 \times 10^{13} \text{ Xe}^+/\text{cm}^2$ fluenciájú Xe^+ ionok által keltett hibaszerkezet esetére. Megmértem a roncsoltság mélységfüggését, és összehasonlítottam Rutherford visszaszórásos spektrometriai eredményekkel. A dielektromos függvény deriváltjának elemzéséből becslést adtam az ionnyom méretére, valamint a roncsolódás dinamikájának mélységbeli eloszlására. (T14)

Megmutattam, hogy 100 keV nagyságrendű energiával implantált nehézionok használatával olyan hibaszerkezet hozható létre CdTe-ban, amelynek optikai tulajdonságai megegyeznek a különböző szemcseméretű polikristályos CdTe vékonyrétegek optikai tulajdonságaival. Egykristályos CdTe-ban nagy tömegű (Xe^+ és Bi^+) ionokkal kontrollált módon létrehozott hibaszerkezet optikai tulajdonságait vizsgáltam modellfejlesztés céljából. Eljárásokat dolgoztam ki az ionimplantáció során bekövetkező folyamatok szimulációjára. A dielektromos függvény deriváltjának analíziséből meghatároztam az ionnyomok méretét, míg a deriváltra illesztett analitikus oszcillátor paramétereiből a szemcseméretet és a rétegekben keletkező feszültséget. (T15, T16)

5. Tézispont (Dielektrikum vékonyrétegek modellezése)

Spektroszkópiai ellipszometriai, Rutherford visszaszórásos spektrometriai és röntgen-diffrakciós összehasonlító vizsgálatokkal meghatároztam különböző hőmérsékleten leválasztott $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ (BST) vékonyrétegek optikai tulajdonságait. Megmutattam, hogy a szerkezet leírható egyetlen réteggel, amelynek a törésmutatóját a Cauchy diszperziós formula segítségével számoltam. Meghatároztam a törésmutató spektrumát a 280-840 nm hullámhossztartományban, és összehasonlító vizsgálatokkal megmutattam, hogy a törésmutató érzékeny a Ba koncentrációra és a BST fázis jelenlétére. (T17)

Megmutattam, hogy fémorganikus kémiai gőzfázisú rétegleválasztással készült $\text{Sr}_x\text{Bi}_y\text{Ta}_2\text{O}_9$ (SBT) rétegek törésmutatója leírható az Adachi-féle parametrizálással [143]. A modell használatával meghatároztam különböző Bi/Sr arányú rétegek törésmutatóját, és RBS valamint XRD mérések eredményeivel való összehasonlításból korrelációt mutattam ki a törésmutató és a Bi/Sr arány valamint a törésmutató és a szemcseméret között. (T18)

Megmutattam, hogy impulzusüzemű inverz lézeres leválasztással előállított CN_x rétegek dielektromos függvénye leírható a Tauc-Lorentz parametrizálással. A felületi nanoérdességet is leíró többretegű modellt alkalmazva meghatároztam a réteg optikai tulajdonságait és az optikai tulajdonságokból leszármaztatható paramétereit (sűrűség, felületi érdesség, rétegvastagság, törésmutató, tiltott sáv szélessége) a forrástávolság függvényében. Jó egyezést találtam a referencia mérésenként végrehajtott atomerő mikroszkópiai, profilometriai és röntgen fotoelektron spektroszkópiai mérések eredményeivel. (T19)

A tézispontokban feltárt módszerek alkalmazhatóságát a mikroelektronikai technológiában félvezető eszközök gyártására használt anyagok, szerkezetek és eljárások minősítésének példáin demonstráltam. A tézispontokban az alábbi kapcsolódó közleményeimre hivatkozok:

T1: **P. Petrik**, O. Polgár, M. Fried, T. Lohner, N.Q. Khánh, J. Gyulai. Ellipsometric characterization of damage profiles using an advanced model. *J. Appl. Phys.* 93 (2003) 1987.

T2: **P. Petrik**, O. Polgár, T. Lohner, M. Fried, N.Q. Khánh, J. Gyulai, E. R. Shaaban. Ellipsometric characterization of shallow damage profiles created by Xe-implantation into silicon. *IEEE Proceedings* ISBN:0-7803-7155-0, 601.

T3: **P. Petrik**. Ellipsometric models for vertically inhomogeneous composite structures. *physica status solidi A* 205 (2008) 732.

T4: **P. Petrik**, F. Cayrel, M. Fried, O. Polgár, T. Lohner, L. Vincent, D. Alquier, J. Gyulai. Depth distribution of disorder and cavities in high dose helium implanted silicon characterized by spectroscopic ellipsometry. *Thin Solid Films* 455 (2004) 344.

T5: **P. Petrik**, F. Cayrel, M. Fried, T. Lohner, O. Polgár, J. Gyulai, D. Alquier. Optical models for cavity profiles in high-dose helium-implanted and annealed silicon measured by ellipsometry. *J. Appl. Phys* 97 (2005) 123514.

T6: **P. Petrik**, M. Fried, T. Lohner, N. Q. Khánh, P. Basa, O. Polgar, C. Major, J. Gyulai, F. Cayrel, D. Alquier. Dielectric function of disorder in high-fluence helium implanted silicon. *Nucl. Instr. and Meth. B* 253 (2006) 192.

T7: E. Vazsonyi, E. Szilagy, **P. Petrik**, Z. E. Horvath, T. Lohner, M. Fried, G. Jalsovszky. Porous silicon formation by stain etching. *Thin Solid Films* 388 (2001) 295.

T8: **P. Petrik**, E. Vázsonyi, M. Fried, J. Volk, G. T. Andrews, A. L. Tóth, C. S. Daróczi, I. Bársony, J. Gyulai. Optical models for the ellipsometric characterisation of porous silicon structures. *physica status solidi C* 2 (2005) 3319.

T9: **P. Petrik**, M. Fried, E. Vazsonyi, T. Lohner, E. Horvath, O. Polgar, P. Basa, I. Barsony, and J. Gyulai. Ellipsometric characterization of nanocrystals in porous silicon. *Appl. Surf. Sci.* 253 (2006) 200.

T10: **P. Petrik**, M. Fried, E. Vazsonyi, P. Basa, T. Lohner, P. Kozma, Z. Makkai. Nanocrystal characterization by ellipsometry in porous silicon using model dielectric function. *J. Appl. Phys.* 105 (2009) 024908.

T11: **P. Petrik**, T. Lohner, M. Fried, J. Gyulai, U. Boell, R. Berger, W. Lehnert. Ellipsometric study of the polysilicon/thin oxide/single-crystalline silicon structure and its change upon annealing. *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 2374.

T12: **P. Petrik**, E. Szilágyi, T. Lohner, G. Battistig, M. Fried, G. Dobrik, L. P.

Biró. Optical models for ultrathin oxides on Si- and C-terminated faces of thermally oxidized SiC. J. Appl. Phys. 106 (2009) 123506.

T13: **P. Petrik**, E. R. Shaaban, T. Lohner, G. Battistig, M. Fried, J. Garcia Lopez, Y. Morilla, O. Polgár, J. Gyulai. Ion implantation-caused damage in SiC measured by spectroscopic ellipsometry. Thin Solid Films 455 (2004) 239.

T14: **P. Petrik**, Z. Zolnai, O. Polgár, M. Fried, Z. Betyak, E. Agocs, T. Lohner, C. Werner, M. Röppischer, C. Cobet. Characterization of damage structure in ion implanted SiC using high photon energy synchrotron ellipsometry. Thin Solid Films 519 (2011) 2791.

T15: **P. Petrik**, N. Q. Khánh, Jian Li, Jie Chen, R.W. Collins, M. Fried, G.Z. Radnoczi, T. Lohner, J. Gyulai. Ion implantation induced disorder in single-crystal and sputter-deposited polycrystalline CdTe characterized by ellipsometry and backscattering spectrometry. physica status solidi C 5 (2008) 1358.

T16: **P. Petrik**, M. Fried, Z. Zolnai, N.Q. Khánh, Jian Li, R.W. Collins, T. Lohner. Dielectric function and defect structure of CdTe implanted by 350-keV Bi ions. Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1123 (2009) P0501.

T17: **P. Petrik**, N. Q. Khánh, Z. E. Horváth, Z. Zolnai, I. Barsony, T. Lohner, M. Fried, J. Gyulai. Characterisation of $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ films using spectroscopic ellipsometry, rutherford backscattering spectrometry and X-ray diffraction. J. Non-Cryst. Solids 303 (2002) 179.

T18: **P. Petrik**, N.Q. Khánh, Z. E. Horváth, Z. Zolnai, I. Bársony, T. Lohner, M. Fried, J. Gyulai, C. Schmidt, C. Schneider, H. Ryssel. Non-destructive characterization of strontium bismuth tantalate films. Mat. Sci. in Semic. Processing 5 (2003) 141.

T19: **P. Petrik**, T. Lohner, L. Égerházi, Zs. Geretovszky. Optical models for the ellipsometric characterization of carbon nitride layers prepared by inverse pulsed laser deposition. Appl. Surf. Sci. 253 (2006) 173.

8.2. Hasznosulás

Az értekezésben összefoglalt munka legfontosabb eredményének azt tartom, hogy a kifejlesztett modellek segítségével bővítettem az ellipszometria alkalmazási körét. Az ellipszometria olyan indirekt módszer, amelynek hasznossága messzemenően azon múlik, hogy a mért spektrumokat hogyan sikerül kiértékelni. Az általam vizsgált vékonyrétegek alkalmazási köre a legszélesebb értelemben vett integrált áramköri alkalmazásoktól a szenzorikán keresztül a napelemtechnológiáig széles spektrumot ölel fel.

Fontos kiemelni az oktatásban jelentkező hasznosulást. Az "Előzmények" fejezetben említett hallgatói sikerek mellett a tézisekhez kapcsolódó témákból számos kiváló színvonalú diplomamunka és PhD értekezés született. Laborunk munkatársai rendszeresen tartanak egyetemi előadásokat és laborgyakorlatokat, nyári iskolát és szakmai

gyakorlatokat vezetnek egyetemistáknak, sőt, újabban középiskolásoknak is. Ezzel mi is hozzájárulunk a tudományterület, és szélesebb értelemben a fizika és a természettudományok népszerűsítéséhez a fiatalság körében. Nagy hangsúlyt helyezünk a magyar nyelvű publikációkra is, pl. a Fizikai Szemlében vagy a Természettudományi Közönyben.

Laborunk fejlesztései és kutatási eredményei a magyar és nemzetközi partnerekkel végzett együttműködésekben is hasznosulnak. Az ebben az értekezésben bemutatott vizsgálatok számos esetben ipari indíttatásúak voltak (pl. eltemetett ultravékony oxid, magas dielektromos állandójú oxidok, getterező hélium implantáció). Olyan nemzetközileg is meghatározó félvezetőipari és mérés technikai cégekkel dolgoztunk együtt, mint az Intel, Infineon¹, ST Microelectronics², AIXTRON³, Fraunhofer Intézet⁴, SOPRA⁵, SEMILAB ZRt.⁶, Osram⁷, First Solar⁸. A korábban említett akkreditációs tevékenység mellett magyar példaként kiemelendők a SOPRA, majd az azt felvásárló magyar SEMILAB Zrt.-vel folytatott közös projektek és együttműködések, illetve azon egykori munkatársaink, akik laborunkban tanulták az ellipszometriát, majd tudásukat a SEMILAB ZRt. munkatársaként hasznosíthatták. A SEMILAB mára nem csak számos félvezetőipari mérőberendezés nemzetközileg kiemelkedő gyártója, hanem az egyik legjelentősebb ellipszométer gyártó is.

¹Az együttműködés idején az egyik vezető európai mikroelektronikai vállalat volt.

²Napjainkig az egyik legmeghatározóbb európai mikroelektronikai vállalat. Többek között az Apple cégnek is egyik beszállítója.

³A világ élvonalába tartozó fémorganikus gőzfázisú leválasztó kemence gyártó.

⁴Németország legnagyobb alkalmazott kutatási intézethálózata.

⁵Sokáig a világ négy meghatározó ellipszométer gyártója közé tartozott. Ez máig érvényes rá, de a felvásárlás után már SEMILAB néven.

⁶Világviszonylatban is meghatározó félvezetőipari mérés technikai berendezéseket gyártó magyar vállalat. Kisebbségi töltéshordozó élettartam mérő és térképező berendezéseivel vált híressé.

⁷Fényforrásokat gyártó vállalat.

⁸A világ legértékesebb napelem gyártó cége.

Jelölések és rövidítések

Az alábbiakban a gyakrabban előforduló mennyiségek és rövidítések jelentését foglalom össze a teljesség igénye nélkül. A dolgozatban törekedtem rá, hogy az első előforduláskor definiáljam a jelöléseket és rövidítéseket, a terjedelem miatt azonban célszerű külön is összefoglalni, hogy kevesebbet kelljen a szövegben keresgélni. Emellett helyenként az újabb előforduláskor is megadom a jelentéseket, ezzel engedve a következetességből, növelve a redundanciát, de reményeim szerint az olvashatóságot is.

- ALD - atomic layer deposition, atomi rétegleválasztás
- BPSG - borophosphosilicate glas, bórfoszforüveg
- c-Si - egykristályos Si
- CVD - chemical vapor deposition, kémiai gőzfázisú leválasztás
- EMA - effective medium approximation, effektív közeg közelítés
- ϵ - dielektromos függvény: a polarizálhatósággal kapcsolatban álló hullámhossz-függő anyagjellemző, a komplex törésmutató négyzete; sok esetben a hullámhosszfüggő törésmutató szinonímájaként használok; a dielektromos függvény képzetes része közvetlen kapcsolatban áll a csatolt állapotssűrűséggel
- i-a-Si - ionimplantációval amorfizált Si
- LPCVD - low pressure chemical vapor deposition, alacsony nyomású kémiai gőzfázisú leválasztás
- IPLD - inverse pulsed laser deposition (inverz impulzus üzemi lézeres leválasztás)
- MDF - model dielectric function, parametrikus dielektromos függvény modell (S. Adachi [56])
- MOCVD - metal organic chemical vapor deposition, fémorganikus kémiai gőzfázisú leválasztás
- MSE - mean squared error - a mért és illesztett értékek négyzetes középhibája; az illesztés jóságának SOPRA által használt értékét σ -val jelölöm a dolgozatban; MSE és σ csak a normálásra és súlyozásra használt módszerekben különbözik

- $\bar{N} = n + i \cdot k$ - komplex törésmutató, amelynek valós része (n) a fény anyagban való terjedési sebességére jellemző mennyiség; megadja, hogy hányszorosa a vákuumbeli terjedési sebesség az adott n törésmutatójú anyagban mérhető terjedési sebességnek; a törésmutató képzetes része (extinkciós együttható, k) a fényelnyelést leíró mennyiség
- nc-Si - nanokristályos Si
- Pszeudó törésmutató és dielektromos függvény: tömbi ekvivalens értékek; tömbi anyagként ilyen optikai paraméterek mellett adná a minta a kapott választ
- OPD - optical penetration depth, optikai behatolási mélység
- PECVD - plasma enhanced chemical vapor deposition, plazmával segített kémiai gőzfázisú leválasztás
- RBS - Rutherford Backscattering Spectrometry, Rutherford visszaszórásos spektrometria
- RMS - root mean square, négyzetes középérték
- RTP - rapid thermal processing, gyors hőkezelési eljárás
- σ - a mért és illesztett spektrumok pontjai közötti eltérések normált négyzetösszege, az illesztés jósága (csökkenő számérték javuló illesztést jelent); az MSE SOPRA által használt implementációja
- SRIM - Stopping and Range of Ions in Matter (<http://www.srim.org>): ionimplantációs szimulációs program az ion és roncsoltsági profilok meghatározására
- SZTE - Szegedi Tudományegyetem
- TEM - transmission electron microscopy, transzmissziós elektronmikroszkópia
- TL - Tauc-Lorentz dielektromos függvény modell [157]
- XPS - X-ray photoelectron spectroscopy, röntgen fotoelektron spektroszkópia
- XRD - X-ray diffraction, röntgendiffrakció

Köszönetnyilvánítás

Általában méltatlanul kevés szó esik a középiskolai tanárokról, ezért itt az időrendiséget is alapul véve elsőként középiskolai matematika és fizika tanáromnak, Müller Jánosnak szeretnék köszönetet mondani, mert nélküle nagy valószínűséggel nem ezen a pályán kötöttem volna ki. Egyetemi tanulmányaim végéhez közeledve Kormány Teréz és Gyulai József terelt a Lohner Tivadar és Fried Miklós fémjelezte kutatói műhelybe, ahol ők folyamatosan és fáradhatatlanul mentoraim és tanítómestereim voltak. Gyulai József akadémikus, az Anyagtudományi Kutatóintézet igazgatója, majd utóda Bársony István akadémikus, valamint számos Fraunhofer IISB⁹ Intézetbeli tartózkodásom kapcsán Heiner Ryssel professzor intézetigazgatóként is sokat egyengették utamat és mindig készséggel segítettek. Az egykori Anyagtudományi majd később Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet számos kollégájának, diákoknak, nemzetközi együttműködő partnereknek tartozom nagy nagy köszönettel az együttműködésért, a rengeteg önzetlen segítségért, és elsősorban a kivételesen jó munkahelyi légkörért, ami az egyik legnagyobb ajándék és kiváltság, ami az embert érheti.

Megkockáztatva annak a veszélyét, hogy valaki kimarad a terjedelmes névsorból, teszek egy kísérletet mindazok nevének felsorolására,¹⁰ akiknek az értekezésbe beavogatott témákkal kapcsolatos¹¹ megtisztelő együttműködését, segítségét és támogatását szerencsém volt élvezni: Agócs Emil, Ádám Antalné, Daniel Alquier, Bársony István, Basa Péter, Battistig Gábor, Rudolf Berger, Betyák Zoltán, Biró László Péter, Ulrike Boell, Frederic Cayrel, Jie Chen, Cristoph Cobet, Robert W. Collins, Csalózkyné Bolgár Andrea, Daróczy Csaba Sándor, Dobrik Gergely, Égerházi László, Erős Magdolna, Fodor Bálint, Fried Miklós, Geretovszky Zsolt, Gyulai József, Horváth Zsolt Endre, Nguyen Quoc Khánh, Kozma Péter, Wolfgang Lehnert, Jian Li, Lohner Tivadar, Major Csaba, Makkai Zsolt, Pécz Béla, Polgár Olivér, Radnóczy György Zoltán, Heiner Ryssel, Christian Schmidt, Rainer Schönweiß, Claus Schneider, Essam Ramadan Shaaban, Szilágyi Edit, Tóth Attila Lajos, Vázsonyi Éva, Volk János, Cristoph Werner, Zolnai Zsolt.

Végezetül de tulajdonképpen elsősorban nagy köszönettel tartozom családomnak, mindenekelőtt feleségemnek Évának a sok türelemért és támogatásért.

A dolgozatban szereplő munkákat részben a következő pályázati források támogatták: OTKA posztdoktori és Bolyai ösztöndíjak, DAAD-MÖB 1999-2000, OTKA T030441, OTKA D34594, OTKA T033072, EU FP5 FECLAM, EU IST-2000-29352 FECLAMplus, DAAD-MÖB 2003-2004, OTKA T043704, OTKA T047011, DAAD-MÖB 2006-2007, OTKA K61725, OTKA K68688, EU FP6 I3 ANNA, ICMET07, DAAD-MÖB 2008-2009, PVMET08, DAAD-MÖB 2010-2011, OTKA K81842, EU

⁹Fraunhofer Institut für Integrierte Systeme - Bauelementetechnologie

¹⁰ABC sorrendben

¹¹A felsorolás ezért sajnos nem tartalmazhatja a dolgozatból kihagyott témákban résztvevő együttműködő partnerek és kollégák legalább ilyen népes listáját.

FP7 STREP P3SENS.

Irodalomjegyzék

- [1] P. Drude, Oberflächenschichten, Ann. Phys. Chem. 36 (1889) 532.
- [2] P. S. Hauge, F. H. Dill, Design and operation of ETA, an automated ellipsometer, IBM Journal of Research and Development 17 (1973) 472.
- [3] D. E. Aspnes, Extended spectroscopy with high-resolution scanning ellipsometry, Phys. Rev. B 12 (1975) 4008.
- [4] P. Petrik, Personal notes on ellipsometry and science from the perspective of a small country, Nanocharm News Letter - <http://nanocharm.org> 3 (2009) 12.
- [5] P. Petrik, Ellipszometria (nanoszerkezetek optikai vizsgálata), Természettudományi Közlöny 142(5) (2011) 231.
- [6] P. Kozma, N. Nagy, S. Kurunczi, P. Petrik, A. Hámori, A. Muskotál, F. Vonderviszt, M. Fried, I. Bársony, Ellipsometric characterization of flagellin films for biosensor applications, phys. stat. sol. (c) 5 (2008) 1427.
- [7] S. Kurunczi, A. Nemeth, T. Hulber, P. Kozma, P. Petrik, H. Jankovics, A. Sebestyen, F. Vonderviszt, M. Fried, I. Barsony, In situ ellipsometric study of surface immobilization of flagellar filaments, Appl. Surf. Sci. 257 (2010) 319.
- [8] A. Nemeth, P. Kozma, T. Hulber, S. Kurunczi, R. Horvath, P. Petrik, A. Muskotál, F. Vonderviszt, C. Hős, M. Fried, J. Gyulai, I. Barsony, In situ spectroscopic ellipsometry study of protein immobilization on different substrates using liquid cells, Sensor Letters 8 (2010) 1.
- [9] P. Kozma, D. Kozma, A. Nemeth, H. Jankovics, S. Kurunczi, R. Horvath, F. Vonderviszt, M. Fried, P. Petrik, In-depth characterization and computational 3D reconstruction of flagellar filament protein layer structure based on in situ spectroscopic ellipsometry measurements, Appl. Surf. Sci. 257 (2011) 7160.
- [10] D. E. Aspnes, Fourier transform detection system for rotating-analyzer ellipsometers, Optics Communications 8 (1973) 222.
- [11] D. E. Aspnes, Effects of component optical activity in data reduction and calibration of rotating-analyzer ellipsometers, J. Opt. Soc. Am. 64 (1974) 812.
- [12] D. E. Aspnes, Optimizing precision of rotating-analyzer ellipsometers, J. Opt. Soc. Am. 64 (1974) 639.
- [13] J. B. Theeten, D. E. Aspnes, The determination of interface layers by spectroscopic ellipsometry, Thin Solid Films 60 (1979) 183.

- [14] D. E. Aspnes, J. B. Theeten, F. Hottier, Investigation of effective-medium models of microscopic surface roughness by spectroscopic ellipsometry, *Phys. Rev. B* 20 (1979) 3292.
- [15] M. Fried, On-line monitoring of solar cell module production by ellipsometry technique, *Thin Solid Films* 571 (2014) 345.
- [16] D. E. Aspnes, Spectroscopic ellipsometry - Past, present, and future, *Thin Solid Films* 571 (2014) 334.
- [17] NanoCharm project website, <http://www.nanocharm.org>.
- [18] T. Lohner, G. Mezey, E. Kótai, F. Pászti, L. Királyhidi, G. Vályi, J. Gyulai, Ellipsometric and channelling studies on ion-implanted silicon, *Nucl. Instr. and Meth.* 182-183 (1981) 591.
- [19] T. Lohner, G. Mezey, E. Kótai, A. Manuaba, F. Pászti, A. Dévényi, J. Gyulai, An investigation of ion-bombarded silicon by ellipsometry and channeling effect, *Nucl. Instr. and Meth.* 199 (1982) 405.
- [20] T. Lohner, G. Mezey, E. Kótai, F. Pászti, A. Manuaba, J. Gyulai, An investigation of ion-bombarded silicon by ellipsometry and channeling effect, *Nucl. Instr. and Meth.* 209 (1983) 615.
- [21] K. Vedam, P. J. McMarr, J. Narayan, Nondestructive depth profiling by spectroscopic ellipsometry, *Appl. Phys. Lett.* 47 (1985) 339.
- [22] J. Vanhellemont, P. Roussel, Characterization by spectroscopic ellipsometry of buried layer structures in silicon formed by ion beam synthesis, *Mat. Sci. Eng. B12* (1992) 165.
- [23] M. Fried, T. Lohner, W. A. M. Aarnink, L. J. Hanekamp, A. van Silfhout, Nondestructive determination of damage depth profiles in ion-implanted semiconductors by spectroscopic ellipsometry using different optical Models, *J. Appl. Phys.* 71 (1992) 2835.
- [24] M. Fried, T. Lohner, E. Jároli, N. Q. Khanh, C. Hajdu, J. Gyulai, Nondestructive determination of damage depth profiles in ion-implanted semiconductors by multiple-angle-of-incidence single-wavelength ellipsometry using different optical models, *J. Appl. Phys.* 72 (1992) 2197.
- [25] W. Fukarek, W. Möller, N. Hatzopoulos, D. G. Armour, J. A. van den Berg, Ellipsometric investigation of damage distribution in low energy boron implantation of silicon, *Nucl. Instr. and Meth.* 127-128 (1997) 879.
- [26] W. Fukarek, J. R. Kaschny, Cavities in helium implanted and annealed silicon characterized by spectroscopic ellipsometry, *J. Appl. Phys.* 86 (1999) 4160.
- [27] P. Petrik, O. Polgár, M. Fried, T. Lohner, N. Khánh, J. Gyulai, Ellipsometric characterization of damage profiles using an advanced model, *J. Appl. Phys.* 93 (2003) 1987.

- [28] P. Petrik, O. Polgár, T. Lohner, M. Fried, N. Khánh, J. Gyulai, E. R. Shaa-ban, Ellipsometric characterization of shallow damage profiles created by Xe-implantation into silicon, IEEE Proceedings ISBN:0-7803-7155-0 (2003) 601.
- [29] P. Petrik, Characterization of nanocrystals using spectroscopic ellipsometry, in: S. Neralla (Ed.), Nanocrystals - Synthesis, Characterization and Applications, InTech, 2012, dOI: 10.5772/48732, ISBN: 978-953-51-0714-9, <http://www.intechopen.com/books/nanocrystals-synthesis-characterization-and-applications/characterization-of-nanocrystals-using-spectroscopic-ellipsometry>.
- [30] P. Petrik, Parameterization of the dielectric function of semiconductor nanocrystals, Physica B 453 (2014) 2.
- [31] D. E. Aspnes, J. B. Theeten, Optical properties of the interface between Si and its thermally grown oxide, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1046.
- [32] E. Strein, D. Allred, Eliminating carbon contamination on oxidized Si surfaces using a VUV excimer lamp, Thin Solid Films 517 (2008) 1011.
- [33] R. W. Collins, B. Y. Yang, In situ ellipsometry of thin-film deposition: Implications for amorphous and microcrystalline si growth, J. Vac. Sci. Technol. B7 (1989) 1155.
- [34] E. Hourdakis, A. G. Nassiopoulou, A. Parisini, M. A. Reading, J. A. van den Berg, L. Sygellou, S. Ladas, P. Petrik, A. Nutsch, M. Wolf, G. Roeder, Electrical and structural properties of ultrathin SiON films on Si prepared by plasma nitridation, J. Vac. Sci. Technol. B 29 (2011) 022201.
- [35] L. Korosi, S. Papp, S. Beke, B. Pecz, R. Horvath, P. Petrik, E. Agocs, I. Dekany, Highly transparent ITO thin films on photosensitive glass: sol-gel synthesis, structure, morphology and optical properties, Appl. Phys. A 107 (2012) 385.
- [36] P. Petrik, B. Pollakowski, S. Zakel, T. Gumprecht, B. Beckhoff, M. Lemberger, Z. Labadi, Z. Baji, M. Jank, A. Nutsch, Characterization of ZnO structures by optical and X-ray methods, Appl. Surf. Sci. 281 (2013) 123.
- [37] P. Petrik, T. Gumprecht, A. Nutsch, G. Roeder, M. Lemberger, G. Juhasz, O. Polgar, C. Major, P. Kozma, M. Janosov, B. Fodor, E. Agocs, M. Fried, Comparative measurements on atomic layer deposited Al₂O₃ thin films using ex situ table top and mapping ellipsometry, as well as X-ray and VUV reflectometry, Thin Solid Films 541 (2013) 131.
- [38] D. E. Aspnes, S. Kelso, C. Olson, D. Lynch, Direct determination of sizes of excitations from optical measurements on ion-implanted GaAs, Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 1863.
- [39] G. F. Feng, R. Zallen, Optical properties of ion-implanted GaAs: The observation of finite-size effects in GaAs microcrystals, Physical Review B 40 (1989) 1064.
- [40] Z. C. Feng, F. Yan, W. Y. Chang, J. H. Zhao, J. Lin, Optical characterization of ion-implanted 4H-SiC, Mat. Sci. Forum 389 (2002) 647.

- [41] P. Petrik, M. Fried, Ellipsometry of semiconductor nanocrystals, in: M. Losurdo, K. Hingerl (Eds.), Ellipsometry at the nanoscale, Springer, Berlin, Heidelberg, 2013.
- [42] D. E. Aspnes, S. M. Kelso, R. A. Logan, R. Bhat, Optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, J. Appl. Phys. 60 (1986) 754.
- [43] J. A. Zapien, R. W. Collins, Characterization of cubic boron nitride growth using UV-extended real-time spectroscopic ellipsometry: Effect of plasma additions and dynamic substrate bias steps, J. Vac. Sci. Technol. A 20 (2002) 1395.
- [44] E. A. Irene, SiO_2 films, in: E. G. Irene, H. G. Tomkins (Eds.), Handbook of ellipsometry, William Andrew, Norwich, NY, 2005.
- [45] P. Petrik, Z. Zolnai, O. Polgár, M. Fried, Z. Betyak, E. Agocs, T. Lohner, C. Werner, M. Röppischer, C. Cobet, Characterization of damage structure in ion implanted SiC using high photon energy synchrotron ellipsometry, Thin Solid Films 519 (2011) 2791.
- [46] P. Petrik, N. Q. Khanh, Z. E. Horvath, Z. Zolnai, I. Barsony, T. Lohner, M. Fried, J. Gyulai, Characterisation of $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ films using spectroscopic ellipsometry, Rutherford backscattering spectrometry and X-ray diffraction, J. Non-cryst. Solids 303 (2002) 179.
- [47] P. Petrik, T. Lohner, L. Égerházi, Z. Geretovszky, Optical models for the ellipsometric characterization of carbon nitride layers prepared by inverse pulsed laser deposition, Appl. Surf. Sci. 253 (2006) 173.
- [48] R. M. A. Azzam, N. M. Bashara, Ellipsometry and Polarized Light, Elsevier, 1987.
- [49] M. Fried, T. Lohner, J. Gyulai, Ellipsometric analysis, in: C. Cristofides, G. Ghi-
baudo (Eds.), Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals, Academic Press, New York, 1997.
- [50] M. Fried, T. Lohner, P. Petrik, Ellipsometric characterization of thin films, in: H. S. Nalwa (Ed.), Handbook of Surfaces and Interfaces of materials: "Solid Thin Films and Layers", Academic Press, San Diego, 2001.
- [51] H. G. Tompkins, E. A. Irene, Handbook of Ellipsometry, William Andrew Publishing, 2005.
- [52] H. Fujiwara, Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications, Wiley, New York, 2007.
- [53] M. Losurdo, K. Hingerl, Ellipsometry at the Nanoscale, Springer-Verlag, Heidelberg, 2012.
- [54] R. W. Collins, I. An, J. Lee, J. A. Zapien, Multichannel ellipsometry, in: E. G. Irene, H. G. Tomkins (Eds.), Handbook of ellipsometry, William Andrew, Norwich, NY, 2005.
- [55] J. Maxwell-Garnett, Phil. Trans. R. Soc. Lond. 203 (1904) 385.

- [56] S. Adachi, Model dielectric constants of Si and Ge, *Phys. Rev. B* 38 (1988) 12966.
- [57] K. Tsunoda, S. Adachi, M. Takahashi, Spectroscopic ellipsometry study of ion-implanted Si(100) wafers, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 2936.
- [58] G. E. Jellison, Jr., M. F. Chisholm, S. M. Gorbalkin, Optical functions of chemical vapor deposited thin-film silicon determined by spectroscopic ellipsometry, *Appl. Phys. Lett.* 62 (1993) 348.
- [59] G. E. Jellison, Jr., F. A. Modine, Erratum: Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region [*Appl. Phys. Lett.* 69, 371 (1996)], *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 2137.
- [60] J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu, Optical properties and electronic structure of amorphous germanium, *physica status solidi* 15 (1966) 627.
- [61] J. W. Mayer, L. Eriksson, J. A. Davies, Ion implantation in semiconductors, Academic Press, New York, 1970.
- [62] G. Dearnaley, J. H. Freeman, R. S. Nelson, J. Stephen, Ion implantation, North Holland, Amsterdam, 1973.
- [63] E. Szilágyi, P. Petrik, T. Lohner, A. A. Koós, M. Fried, G. Battistig, Oxidation of SiC investigated by ellipsometry and Rutherford backscattering spectrometry, *J. Appl. Phys.* 104 (2008) 014903.
- [64] P. Petrik, E. Szilágyi, T. Lohner, G. Battistig, M. Fried, G. Dobrik, L. P. Biró, Optical models for ultrathin oxides on Si- and C-terminated faces of thermally oxidized SiC, *J. Appl. Phys.* 106 (2009) 123506.
- [65] W.-K. Chu, J. W. Mayer, M.-A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press, 1978.
- [66] J. Gyulai, G. Mezey, Felületek és vékonyrétegek vizsgálata MeV energiájú ionokkal, in: T. Siklós (Ed.), *A szilárdtestkutatás újabb eredményei*, Vol. 14, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1985.
- [67] E. Kótai, Computer methods for analysis and simulation of rbs and erda spectra, *Nucl. Instr. and Meth. B* 85 (1994) 588.
- [68] B. Fodor, F. Cayrel, E. Agocs, D. Alquier, M. Fried, P. Petrik, Characterization of in-depth cavity distribution after thermal annealing of helium-implanted silicon and gallium nitride, *Thin Solid Films* 571 (2014) 567.
- [69] P. Petrik, E. Agocs, J. Volk, I. Lukacs, B. Fodor, P. Kozma, T. Lohner, S. Oh, Y. Wakayama, T. Nagata, M. Fried, Resolving lateral and vertical structures by ellipsometry using wavelength range scan, *Thin Solid Films* 571 (2014) 579.
- [70] T. Lohner, W. Skorupa, M. Fried, K. Vedam, N. Nguyen, R. Groetzschel, H. Bartsch, J. Gyulai, Comparative study of the effect of annealing of nitrogen-implanted silicon-on-insulator structures by spectroscopic ellipsometry, cross-sectional transmission electron microscopy and rutherford backscattering spectroscopy, *Mat. Sci. Eng. B* 12 (1992) 177.

- [71] J. Vanhellemont, P. Roussel, H. E. Maes, Spectroscopic ellipsometry for depth profiling of ion implanted materials, *Nucl. Instr. Meth.* 55 (1991) 183.
- [72] P. Petrik, Ellipsometric models for vertically inhomogeneous composite structures, *Physica Status Solidi A* 205 (2008) 732.
- [73] P. Petrik, F. Cayrel, M. Fried, O. Polgár, T. Lohner, L. Vincent, D. Alquier, J. Gyulai, Depth distribution of disorder and cavities in high dose helium implanted silicon characterized by spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Films* 455 (2004) 344.
- [74] M. Fried, T. Lohner, W. A. M. Aarnink, L. J. Hanekamp, A. van Silfhout, Determination of complex dielectric functions of ion-implanted and implanted-annealed silicon by spectroscopic ellipsometry, *J. Appl. Phys.* 71 (1992) 5260.
- [75] P. Petrik, M. Fried, T. Lohner, N. Q. Khánh, P. Basa, O. Polgar, C. Major, J. Gyulai, F. Cayrel, D. Alquier, Dielectric function of disorder in high-fluence helium-implanted silicon, *Nucl. Instr. and Meth. B* 253 (2006) 192.
- [76] P. Petrik, M. Fried, E. Vazsonyi, P. Basa, T. Lohner, P. Kozma, Z. Makkai, Nanocrystal characterization by ellipsometry in porous silicon using model dielectric function, *J. Appl. Phys.* 105 (2009) 024908.
- [77] T. Lohner, M. Fried, N. Q. Khánh, P. Petrik, H. Wormeester, M. A. El-Sherbiny, Comparative study of ion implantation caused anomalous surface damage in silicon studied by spectroscopic ellipsometry and Rutherford backscattering spectrometry, *Nucl. Instr. and Methods B* 147 (1999) 90.
- [78] S. Adachi, H. Mori, M. Takahashi, Model-dielectric-function analysis of ion-implanted Si(100) wafers, *J. Appl. Phys.* 93 (2003) 115.
- [79] P. Petrik, M. Fried, T. Lohner, R. Berger, L. P. Biró, C. Schneider, J. Gyulai, H. Ryssel, Comparative study of polysilicon-on-oxide using spectroscopic ellipsometry, atomic force microscopy, and transmission electron microscopy, *Thin Solid Films* 313-314 (1998) 259.
- [80] P. Petrik, T. Lohner, M. Fried, N. Q. Khánh, O. Polgár, J. Gyulai, Comparative study of ion implantation caused damage depth profiles in polycrystalline and single crystalline silicon studied by spectroscopic ellipsometry and rutherford backscattering spectrometry, *Nucl. Inst. Meth. B* 147 (1999) 84.
- [81] P. Petrik, W. Lehnert, C. Schneider, M. Fried, T. Lohner, J. Gyulai, H. Ryssel, In situ spectroscopic ellipsometry for the characterization of polysilicon formation inside a vertical furnace, *Thin Solid Films* 364 (2000) 150.
- [82] P. Petrik, T. Lohner, M. Fried, L. P. Biró, N. Q. Khánh, J. Gyulai, W. Lehnert, C. Schneider, H. Ryssel, Ellipsometric study of polycrystalline silicon films prepared by low pressure chemical vapor deposition, *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 1734.
- [83] P. Petrik, T. Lohner, M. Fried, J. Gyulai, U. Boell, R. Berger, W. Lehnert, Ellipsometric study of the polysilicon/thin oxide/single-crystalline silicon structure and its change upon annealing, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 2374.

- [84] E. Vazsonyi, E. Szilagyi, P. Petrik, Z. E. Horvath, T. Lohner, M. Fried, G. Jallovszky, Porous silicon formation by stain etching, *Thin Solid Films* 388 (2001) 295.
- [85] P. Petrik, E. Vázsonyi, M. Fried, J. Volk, G. T. Andrews, A. L. Tóth, C. S. Daróczi, I. Bársony, J. Gyulai, Optical models for the ellipsometric characterisation of porous silicon structures, *phys. stat. sol. c* 2 (2005) 3319.
- [86] E. Agocs, P. Petrik, M. Fried, A. G. Nassiopoulou, Optical characterization using ellipsometry of Si nanocrystal thin layers embedded in silicon oxide, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 1321 (2011) DOI: 10.1557/opl.2011.949.
- [87] E. Agocs, A. G. Nassiopoulou, S. Milita, P. Petrik, Model dielectric function analysis of the critical point features of silicon nanocrystal films in a broad parameter range, *Thin Solid Films* 541 (2013) 83.
- [88] P. Petrik, E. Agocs, High Sensitivity Optical Characterization of Thin Films with Embedded Si Nanocrystals, *ECS Transactions* 53 (2013) 43.
- [89] M. Fried, T. Lohner, O. Polgar, P. Petrik, E. Vazsonyi, I. Barsony, J. P. Piel, J. L. Stehle, Characterization of different porous silicon structures by spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Films* 276 (1996) 223.
- [90] M. Fried, H. Wormeester, E. Zoethout, T. Lohner, O. Polgár, I. Bársony, In situ spectroscopic ellipsometric investigation of vacuum annealed and oxidized porous silicon layers, *Thin Solid Films* 313-314 (1998) 459.
- [91] P. Petrik, M. Fried, E. Vazsonyi, T. Lohner, E. Horvath, O. Polgar, P. Basa, I. Barsony, J. Gyulai, Ellipsometric characterization of nanocrystals in porous silicon, *Appl. Surf. Sci.* 253 (2006) 200.
- [92] P. Petrik, S. Milita, G. Pucker, A. G. Nassiopoulou, J. A. van den Berg, M. R. M. Fried, T. Lohner, M. Theodoropoulou, S. G. M. Barozzi, M. Ghulinyan, A. Lui, L. V. A. Picciotto, Preparation and characterization of nanocrystals using ellipsometry and X-ray diffraction, *ECS Transactions* 25 (2009) 373.
- [93] R. W. Collins, I. An, H. V. Nguyen, Y. Lu, Real time spectroscopic ellipsometry for characterization of nucleation, growth, and optical functions of thin films, *Thin Solid Films* 233 (1993) 244.
- [94] B. Johs, J. S. Hale, Dielectric function representation by B-splines, *phys. stat. Sol.* 205 (2008) 715.
- [95] J. A. van den Berg, M. A. Reading, A. Parisini, M. Kolbe, B. Beckhoff, S. Ladas, M. Fried, P. Petrik, P. Bailey, T. Noakes, T. Conard, S. D. Gendt, High resolution depth profile analysis of ultra thin high-k Hf based films using MEIS compared with XTEM, XRF, SE and XPS, *ECS Transactions* 25 (2009) 349.
- [96] D. E. Aspnes, The accurate determination of optical properties by ellipsometry, in: E. D. Palik (Ed.), *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, New York, 1985.
- [97] Y. Song, S. Dhar, L. C. Feldman, Modified Deal Grove model for the thermal oxidation of silicon carbide, *J. Appl. Phys.* 95 (2004) 4953.

- [98] I. C. Vickridge, J.-J. Ganem, G. Battistig, E. Szilágyi, Oxygen isotopic tracing study of the dry thermal oxidation of 6H SiC, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 161-163 (2000) 462.
- [99] I. C. Vickridge, D. Tromson, I. Trimaille, J.-J. Ganem, E. Szilágyi, G. Battistig, Oxygen isotopic exchange occurring during dry thermal oxidation of 6H SiC, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 190 (2002) 574.
- [100] D. A. G. Bruggeman, Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen, *Ann. Phys. (Lepzig)* 24 (1935) 636.
- [101] C. M. Herzinger, B. Johs, W. A. McGahan, J. A. Woollam, W. Paulson, Ellipsometric determination of optical constants for silicon and thermally grown silicon dioxide via a multi-sample, multi-wavelength, multi-angle investigation, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 3323.
- [102] D. E. Aspnes, J. B. Theeten, Spectroscopic analysis of the interface between Si and its thermally grown oxide, *J. Electrochem. Soc.* 127 (1980) 1359.
- [103] F. J. Grunthaner, P. J. Grunthaner, R. P. Vasquez, B. F. Lewis, J. Maserjian, High-resolution X-ray photoelectron spectroscopy as a probe of local atomic structure: Application to amorphous SiO₂ and the Si-SiO₂ interface, *Physical Review Letters* 43 (1979) 1683.
- [104] V. A. Yakovlev, E. A. Irene, An interface enhanced spectroscopic ellipsometry technique: Application to Si-SiO₂, *J. Electrochem. Soc.* 139 (1992) 1450.
- [105] A. Szekeres, A. Paneva, S. Alexandrova, Study of thin SiO and its interface formed by thermal oxidation of RF hydrogen plasma-cleaned silicon, *Vacuum* 61 (2001) 263.
- [106] E. A. Ray, J. Rozen, S. Dhar, L. C. Feldman, J. R. Williams, Pressure dependence of SiO₂ growth kinetics and electrical properties on SiC, *J. Appl. Phys.* 105 (2008) 023522.
- [107] P. R. Lefebvre, C. Zhao, E. A. Irene, An in situ and ex situ ellipsometry comparison of the interfaces of Si and GaAs resulting from thermal and plasma oxidation, *Thin Solid Films* 313-314 (1998) 454.
- [108] P. Petrik, L. P. Biró, M. Fried, T. Lohner, R. Berger, C. Schneider, J. Gyulai, H. Ryssel, Surface roughness measurement on polysilicon produced by low pressure chemical vapor deposition using spectroscopic ellipsometry and atomic force microscopy, *Thin Solid Films* 315 (1998) 186.
- [109] M. Fried, T. Lohner, E. Jároli, G. V. G. Mezey, J. Gyulai, M. Somogyi, H. Kerkow, Investigation of ion-implanted semiconductors by ellipsometry and backscattering spectrometry, *Thin Solid Films* 116 (1984) 191.
- [110] M. Fried, T. Lohner, J. M. M. de Nijs, A. van Silfhout, L. J. Hanekamp, Z. Laczik, N. Q. Khánh, J. Gyulai, Non-destructive characterization of nitrogen-implanted silicon-on-insulator structures by spectroscopic ellipsometry, *J. Appl. Phys.* 66 (1989) 5052.

- [111] M. Fried, T. Lohner, E. Jároli, C. Hajdu, J. Gyulai, Non-destructive determination of damage depth profiles in ion-implanted semiconductors by multiple-angle-of-incidence single-wavelength ellipsometry, *Nucl. Instr. Meth. B* 55 (1991) 257.
- [112] T. Lohner, M. Fried, J. Gyulai, K. Vedam, N. V. Nguyen, L. J. Hanekamp, A. van Silfhout, Ion-implantation-caused special damage profiles determined by spectroscopic ellipsometry in crystalline and in relaxed (annealed) amorphous silicon, *Thin Solid Films* 233 (1993) 117.
- [113] P. Petrik, E. R. Shaaban, T. Lohner, G. Battistig, M. Fried, J. G. Lopez, Y. Morilla, O. Polgár, J. Gyulai, Ion implantation-caused damage in SiC measured by spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Films* 455-456 (2004) 239.
- [114] P. Petrik, F. Cayrel, M. Fried, T. Lohner, O. Polgár, J. Gyulai, D. Alquier, Optical models for cavity profiles in high-dose helium-implanted and annealed silicon measured by ellipsometry, *J. Appl. Phys.* 97 (2005) 123514.
- [115] S. Zollner, J. G. Chen, E. Duda, Dielectric functions of bulk 4H and 6H SiC and spectroscopic ellipsometry studies of thin SiC films on Si, *J. Appl. Phys.* 85 (1999) 8353.
- [116] E. R. Shaaban, T. Lohner, P. Petrik, N. Q. Khánh, M. Fried, O. Polgár, J. Gyulai, Determination of the complex dielectric function of ion implanted amorphous SiC by spectroscopic ellipsometry, *phys. stat. sol. (a)* 195 (2003) 277.
- [117] Z. C. Feng, F. Yan, W. Y. Chang, J. H. Zhao, J. Lin, Optical characterization of ion-implanted 4H-SiC, *Materials Science Forum* 389-393 (2002) 647.
- [118] P. Musumeci, L. Calcagno, M. G. Grimaldi, G. Foti, Determination of the complex dielectric function of ion implanted amorphous SiC by spectroscopic ellipsometry, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 468.
- [119] C. Cobet, K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Edwards, N. Esser, W. Richter, Optical properties of SiC investigated by spectroscopic ellipsometry from 3.5 to 10 eV, *Thin Solid Films* 364 (2000) 111.
- [120] Stopping and Range of Ions in Matter - ionimplantációs szimulációs program az ion és roncsoltsági profilok meghatározására, <http://www.srim.org>.
- [121] P. Petrik, N. Q. Khánh, J. Li, J. Chen, R. Collins, M. Fried, G. Radnoczi, T. Lohner, J. Gyulai, Ion implantation induced disorder in single-crystal and sputter-deposited polycrystalline CdTe characterized by ellipsometry and backscattering spectrometry, *Phys. Stat. Sol. (c)* 5 (2008) 1358.
- [122] P. Petrik, M. Fried, Z. Zolnai, N. Khánh, J. Li, R. Collins, T. Lohner, Dielectric function and defect structure of CdTe implanted by 350-keV Bi ions, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 1123 (2009) P05-01.
- [123] J. Koh, Y. Lee, H. Fujiwara, C. R. Wronski, R. W. Collins, Optimization of hydrogenated amorphous silicon p-i-n solar cells with two-step i layers guided by real time spectroscopic ellipsometry, *Appl. Phys. Lett.* 73 (1998) 1526.

- [124] J. Li, J. Chen, N. J. Podraza, R. W. Collins, Real time spectroscopic ellipsometry of sputtered CdTe: effect of growth temperature on structural and optical properties, IEEE Proceedings of the 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion 1 (2006) 392, ISBN 1-4244-0017-1.
- [125] A. Gupta, A. D. Compaan, All-sputtered 14% CdS/CdTe thin-film solar cell with ZnO:Al transparent conductive oxide, Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 684.
- [126] J. Lee, P. I. Rovira, I. An, R. W. Collins, Rotating-compensator multichannel ellipsometry: Applications for real time Stokes vector spectroscopy of thin film growth, Rev. Sci. Instrum. 69 (1998) 1800.
- [127] R. W. Collins, A. S. Ferlauto, G. M. Ferreira, C. Chen, J. Koh, R. J. Koval, Y. Lee, J. M. Pearce, C. R. Wronski, Evolution of microstructure and phase in amorphous, protocrystalline, and microcrystalline silicon studied by real time spectroscopic ellipsometry, Solar Energy Mater. Solar Cells 78 (2003) 143.
- [128] R. W. Collins, I. An, J. Lee, J. A. Zapien, Multichannel ellipsometry, in: E. G. Irene, H. G. Tomkins (Eds.), Handbook of ellipsometry, William Andrew, Norwich, NY, 2005.
- [129] J. Stark, G. Wendt, Über das Eindringen von Kanalstrahlen in feste Körper, Phys. Rev. B 12 (1975) 3368.
- [130] G. Bahir, R. Kalish, Structure of ion-implanted and annealed $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, J. Appl. Phys. 54 (1983) 3129.
- [131] M. Fried, P. Petrik, T. Lohner, N. Q. Khánh, O. Polgár, J. Gyulai, Dose-dependence of ion implantation-caused damage in silicon measured by ellipsometry and backscattering spectrometry, Thin Solid Films 455-456 (2004) 404.
- [132] M. Cardona, Modulation spectroscopy, in: F. Seitz, D. Turnbull (Eds.), Solid State Physics, Academic, New York, 1969.
- [133] P. Lautenschlager, M. Garriga, L. Vina, M. Cardona, Temperature dependence of the dielectric function and interband critical points in silicon, Phys. Rev. B 36 (1987) 4821.
- [134] D. E. Kotecki, J. D. Baniecki, H. Shen, H. Shen, R. Laibowit, K. Saenger, J. Lian, T. Shaw, S. Athavale, C. C. Jr., P. Duncombe, M. Gutsche, G. Kunkel, Y.-J. Park, Y.-Y. Wang, R. Wise, (Ba,Sr)TiO₃ dielectrics for future stacked-capacitor DRAM, IBM J. Res. Develop. 43 (1999) 367.
- [135] S. M. Bilodeau, R. Carl, P. V. Busakirk, J. Ward, MOCVD BaSrTiO₃ for ≥ 1 -Gbit DRAMs, Solid State Technol. 40 (1997) 235.
- [136] H. Funakubo, Y. Takeshima, D. Nagano, K. Shinozaki, N. Mizutani, Crystal structure and dielectric property of epitaxially grown (Ba,Sr)TiO₃ thin film prepared by molecular chemical vapor deposition, J. Mater. Res. 13 (1998) 3512.
- [137] P. Pasierb, S. Komornicki, M. Radecka, Structural and optical properties of $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{TiO}_3$ thin films prepared by rf sputtering, Thin Solid Films 324 (1998) 134.

- [138] F. Wang, A. Uusimäki, S. Leppävuori, S. F. Karmanenko, A. I. Dedyk, V. I. Sakharov, I. T. Serenkov, Ba_{0.7}Sr_{0.3}IO₃ ferroelectric film prepared with the sol-gel process and its dielectric performance in planar capacitor structure, J. Mater. Res. 13 (1998) 1243.
- [139] C. Li, D. Cui, Y. Zhou, H. Lu, Z. Chen, D. Zhang, F. Wu, Asymmetric rocking curve study of the crystal structure orientations for BaTiO₃ thin films grown by pulsed laser deposition, Appl. Surf. Sci. 136 (1998) 173.
- [140] F. Tcheliabou, H. S. Ryu, C. K. Hong, W. S. Park, S. Baik, On the microstructure and optical properties of Ba_{0.5}Sr_{0.5}TiO₃ films, Thin Solid Films 305 (1997) 30.
- [141] R. Thielsch, K. Kaemmer, B. Holzapfel, L. Schulz, Structure-related optical properties of laser-deposited Ba_xSr_{1-x}TiO₃ thin films grown on MgO (001) substrates, Thin Solid Films 301 (1997) 203.
- [142] Powder Diffraction File, Sets 1-42 (1992).
- [143] S. Adachi, Model dielectric constants of GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb, Phys. Rev. B 35 (1987) 7454.
- [144] K. Watanabe, A. J. Hartmann, R. N. Lamb, R. P. Craig, S. M. Thurgate, J. F. Scott, Valence band and bandgap states of ferroelectric SrBi₂Ta₂O₉ thin films, Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) 309.
- [145] J. H. Bahng, M. Lee, H. L. Park, I. W. Kim, J. H. Jeong, K. J. Kim, Spectroscopic ellipsometry study of SrBi₂Ta₂O₉ ferroelectric thin films, Appl. Phys. Lett. 79 (2001) 1664.
- [146] T. Malkow, Critical observations in the research of carbon nitride, Mat. Sci. Eng. A 302 (2001) 311.
- [147] S. Muhl, J. M. Mendez, A review of the preparation of carbon nitride films, Diamond and Related Materials 8 (1999) 1809.
- [148] T. Szörényi, B. Hopp, Z. Geretovszky, A novel PLD configuration for deposition of thin films of improved quality: A case study of carbon nitride, Appl. Phys. A 79 (2004) 1207.
- [149] T. Szörényi, Z. Geretovszky, Thin film growth by inverse pulsed laser deposition, Thin Solid Films 484 (2005) 165.
- [150] R. W. Collins, J. M. Caveese, Surface roughness evolution on glow discharge a-Si:H, J. Appl. Phys. 61 (1987) 1662.
- [151] R. W. Collins, J. S. Burnham, S. Kim, J. Koh, Y. Lu, C. R. Wronski, Insights into deposition process for amorphous semiconductor materials and devices from real time spectroscopic ellipsometry, J. Non-Cryst. Solids 198 (1996) 981.
- [152] S. Logothetidis, Optical and electronic properties of amorphous carbon materials, Diamond Relat. Mater. 12 (2003) 141.

- [153] M. Gioti, S. Logothetidis, Dielectric function, electronic properties and optical constants of amorphous carbon and carbon nitride films, *Diamond. Relat. Mater.* 12 (2003) 957.
- [154] L. Égerházi, Z. Geretovszky, T. Szörényi, Thickness distribution of carbon nitride films grown by inverse-pulsed laser deposition, *Appl. Surf. Sci.* 247 (2005) 182.
- [155] J. Budai, Z. Tóth, A. Juhász, G. Szakács, E. Szilágyi, M. Veres, M. Koós, Reactive pulsed laser deposition of hydrogenated carbon thin films: The effect of hydrogen pressure, *J. Appl. Phys.* 100 (2006) 043501.
- [156] M. Bereznai, J. Budai, I. Hanyec, J. Kopniczky, M. Veres, M. Koós, Z. Toth, Ellipsometric study of nanostructured carbon films deposited by pulsed laser deposition, *Thin Solid Films* 519 (2011) 2989.
- [157] G. E. Jellison, Jr., F. A. Modine, Parameterization of the optical function of amorphous materials in the interband region, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 371.