

Optická charakterizace pomocí newAD2

Pro fitování pomocí *newAD2* je nutné si tento program nainstalovat na svůj Linuxový počítač dle návodu na newad.physics.muni.cz nebo je nutné si zřídit účet na serveru hercules.physics.muni.cz, kde program *newAD2* je již nainstalovaný.

V případě, že budete chtít k serveru přistupovat z operačního systému Windows je nutné nejprve instalovat VcXsrv

který je možné stáhnout z <https://sourceforge.net/projects/vcxsrv/>. Poté postupujte následovně:

1. Spustit Xlaunch.
2. Nechat zvolené Multiple Windows, dole tlačítko Next.
3. Zvolit Start a program, dole tlačítko Next.
4. Zvolit Start program on remote computer.
 - Remote program: `xterm (xfce4-terminal | XDG_CURRENT_DESKTOP=KDE konsole)`
 - Password: vaše heslo
 - Connect to computer: `hercules.physics.muni.cz`
 - Login as user: vaše login name
5. Na předposlední kartě zatrhnout Disable acces control.
6. Na poslední kartě je možnost uložení, pro opětovné připojení.

Pokud již máte nainstalován VcXsrv, nebo jiný X server pro Windows, jako například X-410 z Windows Store, můžete se na hercules připojit přímo z příkazového řádku Windows, popřípadě z terminálu PowerShell:

```
C:\Program Files\VcXsrv\plink.exe hercules@physics.muni.cz
```

Abyste nemuseli pokaždé psát celou cestu k programu `plink.exe`, stačí přidat adresář `C:\Program Files\VcXsrv` do systémové či uživatelské proměnné `%PATH%`

Pokud netušíte, kde se ve Windows nastavují systémové proměnné `PATH`, nevádí. Nainstalujte si program Putty (`plink` je jeden se souboru programů Putty), při instalaci se do systémové `PATH` nastaví adresář s instalací Putty.

Pak se z příkazového řádku přihlásíte na hercules zadáním příkazu:

```
plink hercules@physics.muni.cz
```

Z unixového X terminálu se přihlásíme na hercules jednoduše:

```
username@yourcomputer:~> ssh -CX hercules.physics.muni.cz
```

Máme-li rozdílné přihlašovací jméno tak příkazem:

```
anotherusername@yourcomputer:~> ssh -CX username@hercules.physics.muni.cz
```

Testovací experimentální data spolu se souborem `model` lze stáhnout z monocera pomocí příkazu:

```
username@hercules:~> wget physics.muni.cz/~franta/Example1.zip
```

a rozbalit příkazem:

```
username@hercules:~> unzip Example1.zip
```

V adresáři, kde jste provedli předchozí příkaz budete mít adresář `Example1` a v něm soubory `model`, `E-UVVf-Ta200-025-25-X2656.dat`, `T-MIR-Ta200-025-25-X2656.dat` a `T-FIR-Ta200-025-25-X2656.dat`.

Grafické uživatelské rozhraní se poté spouští příkazem

```
username@hercules:~> newAD2gui
```

Program je nejlépe spustit v adresáři s daty, která chceme fitovat. V případě, že program spustíte v jiném adresáři, je nutné tento adresář při prvním spuštění v úvodním dialogu zvolit.

Příklad 1: Optická charakterizace jednoduché vrstvy na oboustranně leštěném křemíku

Zde si uvedeme model a postup, kterým je možné charakterizovat data jednoduché vrstvy deponované na oboustranně leštěném křemíku. V pracovním adresáři **Example1** máme data naměřená na elipsometru UVISEL a data propustnosti naměřená na spektrofotometru Vertex 80v ve střední a vzdálené infračervené oblasti spektra.

Formát těchto experimentálních dat je následující.

Víceúhlová elipsometrie ve viditelném, blízkém infračerveném a ultrafialovém oboru (UVV) spektra na vzorku označeném Ta200-025-25-X2656:

```
# newAD2: input
#
# samples:
# Ta200-025-25-X2656
#
# variables:
# E theta0
#
# experimental functions:
# Is Ic In
#
# measurement:
# UVVf
#
# data: 1185
# E theta0 Is Ic In weight
0.6 55.000000 3.083666e-01 -5.474419e-01 6.038994e-01 3.142797e+03
0.6 60.000000 3.592986e-01 -3.506195e-01 6.730406e-01 2.562143e+04
0.6 65.000000 3.866024e-01 -8.582897e-02 7.382888e-01 1.611722e+04
...
```

Propustnost stejného vzorku naměřená ve střední infračervené (MIR) oblasti

```
# newAD2: input
#
# samples:
# Ta200-025-25-X2656
#
# variables:
# tnu
#
# experimental functions:
# T
#
# measurement:
# MIR
#
# data: 3681
# tnu T weight
399.237 0.3966 126461
401.165 0.395281 212600
```

403.093 0.395083 202366

...

Podobně vypadají i data pro propustnost ve vzdálené infračervené (FIR) oblasti. Jak tyto soubory obsahující informace o měření vyrobíme ze souborů produkovaných na jednotlivých přístrojích zde neuvádíme a předpokládáme, že vám budou dodány v tomto formátu vyučujícím.

Pro fitování dále budete potřebovat i soubor definující model vrstvy umožňující zpracovat experimentální data a vygenerovat optické konstanty ve formě tabulky. Soubor obsahující zmíněný model vypadá následovně:

newAD2: model OTF

structural parameters:

ds = 0.38 : d_s : [0.1,1] mm
df = 100 : d_f : [10,1000] nm
do = 2 : d_o : [0,10] nm
sigmaf = 0 : σ_f : [0,20] nm

media:

a = Vacuum
f = Universal:ex=3:he:ph=13
o = Universal:SiO2
s = Universal:Si26

boundary systems:

Mf = BD(a,f,sigmaf)*TH(f,df)*BF(f,s)
Mb = BF(a,o)*TH(o,do)*BF(o,s)

sample measurements:

EUVVf = Slab(R,Mf,Mb,s,ds,UVISEL)
EUVVf = Wedge(df)
TMIR = Slab(T,Mf,Mb,s,ds,Vertex80vMIR)
TFIR = Slab(T,Mf,Mb,s,ds,Vertex80vFIR)

functions:

Is,Ic,In-UVVf = IsIcIn(EUVVf)
T-MIR = T(TMIR)
T-FIR = T(TFIR)
n,k-f = OC(f)

modeled functions:

n,k-f(E=0.005~50:4001:exp)

Formát souboru model:

- V prvním řádku je informace o tom, že program pro modelování má spustit `slaveAD2-OTF`, kde OTF je zkratka Optics of Thin Films. Tento řádek neměňte.
- V sekci `structural parameters` je seznam strukturních parametrů, které budou použity v následujících sekci a které se automaticky negenerují. V našem příkladu jsou to identifikátory `ds` tloušťka substrátu, `df` tloušťka filmu, `do` tloušťka nativní oxidové vrstvy. Parametr `sigmaf` je parametr drsnosti vrstvy. Za rovnítkem jsou uvedeny počáteční hodnoty parametrů. Za první dvojtečkou je definice tzv. pěkných parametrů. Za druhou dvojtečkou je uveden interval platných hodnot a nepovinná jednotka parametru. V intervalu hodnot lze použít i kulaté závorky, které potom značí, že parametr musí být větší nebo menší než uvedená hodnota. Jako hodnotu lze použít i `(-inf` nebo `inf)` značící, že parametr není zdola nebo shora omezen.

- V sekci **media** jsou uvedeny disperzní modely použité v našem případě pro vnější prostředí **a** (ambient), film **f**, nativní oxidovou vrstvu **o** a substrát **s**. Identifikátory jsou libovolné, ale unikátní v modelu a lze použít i víceznakový identifikátor. Na pravé straně od rovnítka je název modelu, v našem případě je to triviální model **Vacuum**, který nevygeneruje žádné disperzní parametry a vrací vždy jednotkový dielektrický tenzor. Další disperzní model v našem případě je model **Universal**, který vygeneruje minimálně tři fitovací parametry a může obsahovat atributy oddělené dvojtečkami. Je-li zvolen atribut v našem případě **SiO2** nebo **Si26**, modifikuje se disperzní model včetně počátečních hodnot parametrů tak, aby popisoval dielektrickou odezvu SiO_2 a nebo fosforem mírně dopovaného křemíku (interně označovaného **Si26**), který byl použit při depozici vrstvy. V případě filmu jsme použily atributy **ex=3:he:ph=13**, které nám vygenerují modifikaci Univerzálního disperzního modelu umožňující modelovat zvolenou vrstvu. Konkrétní význam parametrů si nastudujte na newad.physics.muni.cz.
- V sekci **boundary systems** jsou uvedeny definice horního a dolního povrchu vzorku za pomoci 4×4 Yeh formalismu (4×4 komplexní matice). Jednotlivé matice mají význam: hladké rozhraní **BF**, homogenní vrstva **TH** a drsná vrstva modelovaná pomocí Drudeho aproximace **BD**. Identifikátory **Mf** a **Mb** jsou libovolné, ale unikátní v programu a značí přední rozhraní (front) a zadní rozhraní (back). Modely negenerují žádné parametry.
- V sekci **sample measurements** jsou uvedeny modely vzorků odpovídající jednotlivým měřením v rámci Stokesova–Muellerova formalismu (4×4 reálné matice). Identifikátory nemusí být unikátní a pro výpočet se použije poslední definice. Tímto způsobem jsme zavedli do měření na elipsometru fakt, že tloušťka vrstvy vykazovala neuniformitu (byla různá podél stopy měření) s distribucí hodnot typu klínu (**Wedge**). Modely generují jednak parametry pro korekci experimentálních hodnot vyplývající z faktu, že přístroje neměří přesně parametry Stokesova vektoru, ale vlivem systematických chyb a nedokonalostí přístrojů něco trochu jiného. Proto jsou v definicích uvedeny názvy přístrojů **UVISEL** a **Vertex80v** v modifikacích **MIR** a **FIR**. Funke **Wedge** generuje parametry odpovídající distribuci neuniformity parametrů δ (odchylka střední hodnoty) a σ (střední kvadratická odchylka – rms).
- V sekci **functions** jsou uvedeny vektorové funkce, které odpovídají naměřeným funkčním závislostem, které hodláme fitovat nebo funkcím, které chceme, aby se nám počítali (simulovali). Ve skutečnosti experimentální hodnoty nejsou Muellerovy matice, ale pouze jejich nějaké části. Například propustnost odpovídá prvku M_{00} Muellerovy matice. Poznamenejme například, že propustnost v **MIR** oblasti by se mohla definovat jako $T\text{-MIR} = M_{00}(\text{TMIR})$ (funkce **T** použitá v příkladu je synonymum **M00** a nebo **R**). Identifikátory na levé straně mají přesnou syntaxi, pakliže jsou použity pro výpočet experimentálních hodnot a musí být v tomto formátu v sekci uvedeny. V případě, že máme experimentální hodnoty v programu zavedeny a v modelu nejsou uvedeny odpovídající identifikátory, pokus o zavedení modelu skončí chybou.
- V sekci **modeled functions** jsou uvedené funkce, které se v průběhu fitování budou počítat navíc k experimentálním datům. V závorce uvedeme interval pro jaké proměnné se výpočet bude provádět a v jakém rozsahu. V příkladu se počítají optické konstanty pro energii fotonu **E** od hodnoty 5 meV do hodnoty 50 eV v 4001 bodech s exponenciální distribucí bodů.
- V modelu mohou být napsány komentáře uvedené vykřičníkem. Tedy znaky za vykřičníkem se budou při čtení modelu ignorovat až do konce řádku. Dále nové řádky mezi jednotlivými definicemi jsou povinné. Nepište prázdné řádky mezi hlavičku sekce a definice, vadí to návazným programům pro export z výstupních souborů.

Při fitování se držte následujícího postupu:

1. Pokud jste nespustili poprvé program v adresáři **Example1** vyberte ho v prvním dialogu.
2. Pomocí tlačítka **Samples** zvolte vzorek **Ta200-025-25-X2656** a vyberte měření na elipsometru, tj. *Quantity Is, Ic, In-UUVf*. Tím zavedete elipsometrická data do programu.
3. Pomocí tlačítka **Run Grapher** spusťte grafický prohlížeč a zobrazte si elipsometrická data.
4. Pomocí tlačítek **Model** a **Load from File** zaveďte model do programu. Model se zobrazí v okně pokud se úspěšně zavedl.

5. Pomocí tlačítka *Parameters* si zobrazte fitovací parametry modelu.
6. Pomocí tlačítka *Calculate* si spočítejte teoretická data odpovídající současným parametrům.
7. Změňte parametr E_g v sekci *Media—Universal—f* na takovou hodnotu, aby když spočítáte teoretické hodnoty byly teoretické křivky takové, že pro energie větší než cca 5 eV nevykazují interference.
8. Změňte parametr d_f v sekci *Structural* tak aby seděli interference. To můžete udělat pomocí tlačítka *Minimum*, kde lze hledat hodnotu jednoho parametru ve zvoleném intervalu.
9. Vyhledávání lze předčasně ukončit tlačítkem *Finish*. Jinak se hledá až do maximálního kroku uvedeného v položce *Steps*.
10. Pokud interference sedí a sedí i absorpční hrana, lze přejít k fitování. Zaškrtněte parametry d_f a N_{vc} jako volné (*Free*) a zmáčkněte tlačítko *Fit*.
11. Fitovací proceduru lze předčasně ukončit opět tlačítkem *Finish*.