

Polarizace světla a optické veličiny

Světelné svazky v přístrojích mezi zdroji světla, detektory, měřeními vzorky a různými elementy skutečných optických přístrojů se nejlépe popíší pomocí formalizmu Stokesových vektorů a Muellerových matic. V rámci tohoto formalizmu je na jedné straně popsána intenzita a polarizační stav světla a na druhé straně se ztrácí informace o absolutní fázi světla. Proto tento formalismus je vhodný pro nekoherentní sčítání jednotlivých svazků světla dopadající do detektoru, tak i pro vyjádření neuniformit měřených systémů, tj. že podél svazku světla se mění vlastnosti systému.

Intenzitu a polarizaci světla lze kompletně popsat Stokesovým vektorem

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I \\ I_{\parallel} - I_{\perp} \\ I_+ - I_- \\ I_{\odot} - I_{\ominus} \end{pmatrix},$$

kde $I = I_{\parallel} + I_{\perp} = I_+ + I_- = I_{\odot} + I_{\ominus}$ je celková intenzita světla a I_{\parallel} , I_{\perp} , I_+ , I_- , I_{\odot} , I_{\ominus} jsou intenzity světla, které by prošlo polarizátory propouštějícími různě polarizované světlo: I_{\parallel} – paralelně k vybranému směru, tj. pod úhlem 0° , I_{\perp} – kolmo pod úhlem 90° , I_+ – šikmo pod úhlem 45° , I_- – šikmo pod úhlem -45° , I_{\odot} – kruhově pravotočivě, I_{\ominus} – kruhově levotočivě. Ze Stokesova vektoru můžeme vyjádřit různé další veličiny popisující polarizaci světla, například stupeň polarizace

$$P = \frac{1}{S_0} \sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}.$$

Změnu intenzity a polarizace při odrazu od libovolného lineárního optického systému, resp. průchodu světla takovým systémem, pak lze popsat maticí svazující Stokesův vektor vstupujícího (dopadajícího) světla \mathbf{S}_{in} a vystupujícího (odraženého) světla \mathbf{S}_{out} :

$$\mathbf{S}_{\text{out}} = \mathbf{M} \mathbf{S}_{\text{in}}.$$

Této matici \mathbf{M} se říká Muellerova matice. Běžné optické veličiny měřené optickými přístroji, jako je odrazivost, propustnost či elipsometrické parametry, lze vyjádřit pomocí prvků této matice.

I když má Muellerova matice obecně 16 prvků, nezávislých je jich často pouze několik málo. Pro jednoduché systémy nevykazující komplexní kombinaci anizotropie nebo depolariaci světla je řada prvků Muellerovy matice nulových nebo svázaných s jinými prvky. Konkrétně odraz monochromatického světla od systému ideálních izotropních tenkých vrstev nevykazující optickou aktivitu na polonekonečné podložce lze popsat pouhými třemi veličinami. Reálná podložka samozřejmě není polonekonečná, ale lze ji za polonekonečnou považovat, když nemusíme uvažovat světlo odražené do detektoru z její zadní strany. To nastane například když dostatečně absorbuje světlo nebo je její zadní strana velmi drsná, tak že rozptýlené světlo dopadající do detektoru lze zanedbat.

Uvedený systém nedepolarizuje světlo a odraz polarizovaného světla lze uvažovat samostatně pro světlo polarizované v rovině dopadu a kolmo k rovině dopadu, tedy tzv. p-polarizaci (\parallel německy *parallel*) a s-polarizaci (\perp německy *senkrecht*) světla, viz obrázek 1. Plně polarizované světlo můžeme vždy rozložit na p a s složku, které se v tomto případě nemíchají: p-polarizované světlo se odrazí i zlomí opět jako p-polarizované a s-polarizované zase jako s-polarizované. Vztahy mezi komplexními amplitudami elektrické intenzity dopadající, odražené a prošlé vlny jsou vyjádřeny koeficienty odrazu (\hat{r}_p , \hat{r}_s) a průchodu (\hat{t}_p , \hat{t}_s) pro jednotlivé polarizace:

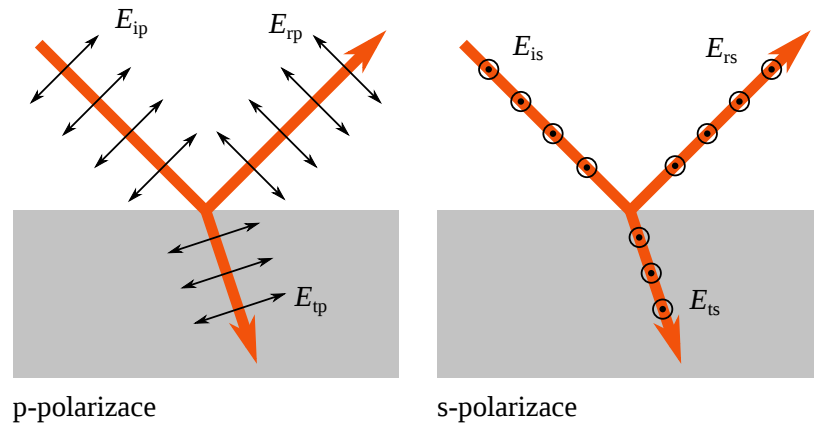
$$\hat{E}_{rp} = \hat{r}_p \hat{E}_{ip}, \quad \hat{E}_{rs} = \hat{r}_s \hat{E}_{is}, \quad \hat{E}_{tp} = \hat{t}_p \hat{E}_{ip}, \quad \hat{E}_{ts} = \hat{t}_s \hat{E}_{is}.$$

Muellerova matice popisující odraz světla od vzorku má pak tvar

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} |\hat{r}_p|^2 + |\hat{r}_s|^2 & |\hat{r}_p|^2 - |\hat{r}_s|^2 & 0 & 0 \\ |\hat{r}_p|^2 - |\hat{r}_s|^2 & |\hat{r}_p|^2 + |\hat{r}_s|^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\Re(\hat{r}_p \hat{r}_s^*) & 2\Im(\hat{r}_p \hat{r}_s^*) \\ 0 & 0 & -2\Im(\hat{r}_p \hat{r}_s^*) & 2\Re(\hat{r}_p \hat{r}_s^*) \end{pmatrix}.$$

Odrazivost vzorku, která je definována jako poměr intenzity odraženého světla I_r ku intenzitě světla dopadajícího na vzorek I_0 (implicitně uvažujeme nepolarizované světlo), je rovna prvku M_{00} matice:

$$R = \frac{I_r}{I_0} = M_{00} = \frac{1}{2} (|\hat{r}_p|^2 + |\hat{r}_s|^2).$$



Obrázek 1: Označení amplitud elektrické intenzity pro p a s polarizaci světla. Šipky vyznačují roviny, ve kterých kmitá vektor elektrické intenzity.

To odpovídá i intuitivnímu výsledku, že odrazivost pro nepolarizované světlo je rovna průměru $(R_p + R_s)/2$, tj. odrazivostí pro p a s polarizované světlo ($R_p = |\hat{r}_p|^2$, $R_s = |\hat{r}_s|^2$).

Odrazivost popisuje změnu intenzity světla při odrazu, zbývající dvě nezávislé veličiny popisují změnu polarizačního stavu světla. Existuje řada způsobů, jak takové dvě veličiny zavést. Běžně se používá elipsometrický poměr $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho} = \hat{r}_p / \hat{r}_s ,$$

což je komplexní číslo a odpovídá tedy dvěma reálným veličinám. Jako reálné veličiny popisující změnu polarizačního stavu se často používají tzv. azimut Ψ a fázová změna Δ definované vztahem

$$\tan \Psi \exp(i\Delta) = \hat{r}_p / \hat{r}_s .$$

Azimut souvisí s velikostí $\hat{\rho}$ a vyjadřuje změnu poměru intenzit p a s polarizace. Fázová změna souvisí s fází $\hat{\rho}$ a vyjadřuje vzájemný posun fází p a s polarizace.

Nevýhodou těchto a podobných veličin je, že jsou periodické, nespojitě, případně mohou nabývat nekonečných hodnot a obecně blízké změny polarizačního stavu neodpovídají blízkým hodnotám $\hat{\rho}$, Ψ a Δ , což není vhodné pro vyhodnocení experimentálních dat. Praktičtější je popis přímo pomocí prvků normalizované Muellerovy matice (tj. Muellerovy matice, ze které jsme vytkli odrazivost R)

$$\mathbf{M} = R \begin{pmatrix} 1 & -I_n & 0 & 0 \\ -I_n & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_c & I_s \\ 0 & 0 & -I_s & I_c \end{pmatrix} ,$$

které leží v intervalu $[-1, 1]$ a blízké změny polarizačního stavu odpovídají blízkým hodnotám I_s , I_c a I_n . Jelikož je změna polarizačního stavu popsána dvěma čísly, pouze dva z těchto prvků jsou nezávislé. Konkrétně jsou svázány vztahem

$$I_s^2 + I_c^2 + I_n^2 = 1 .$$

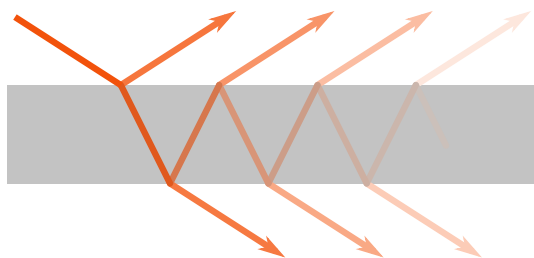
Tento popis má ještě další výhodu, Muellerova matice má stejný tvar, i když započítáme odraz na zadní straně podložky a další běžné depolarizující efekty. Potom ovšem platí

$$I_s^2 + I_c^2 + I_n^2 \leq 1 ,$$

tudíž I_s , I_c a I_n představují tři nezávislé prvky matice. V elipsometrické literatuře se často označují písmeny $S \equiv I_s$, $C \equiv I_c$ a $N \equiv I_n$ (především autoři používající přístroje od firmy Woollam), nebo $I_S \equiv I_s$, $I_{CI} \equiv I_c$ a $I_{CIII} \equiv I_n$ (především autoři používající přístroje od firmy Horiba, Jobin Yvon).

Propustnost vzorku je definována jako poměr intenzity prošlého světla I_t ku intenzitě světla dopadajícího na vzorek I_0 :

$$T = I_t / I_0 .$$



Obrázek 2: Schéma sčítání příspěvků koeficientu odrazivosti, resp. odrazivosti.

Propustnosti nemá smysl uvažovat pro polonekonečnou podložku a je zapotřebí započítat odrazy světla uvnitř podložky. Vztah mezi koeficienty odrazivosti a propustnosti a propustností systému je proto složitější než v případě odrazivosti na polonekonečné podložce.

V případě podložky propouštějící světlo musíme k výpočtu odrazivosti (resp. propustnosti) celého systému navíc sečíst i všechny odrazy uvnitř podložky. Schéma sčítání lze opět znázornit obrázkem 2, ale v tomto případě sčítáme nekoherentně, tedy už intenzity světla, nikoli amplitudy elektrické intenzity. Označíme-li po řadě R_1 odrazivost systému na horním rozhraní podložky shora, R'_1 odrazivost systému na horním rozhraní zespodu, R_2 odrazivost systému na dolním rozhraní shora, T_1 propustnost systému na horním rozhraní shora, T'_1 propustnost systému na horním rozhraní zespodu, T_2 propustnost systému na dolním rozhraní a U propustnost podložky jako takové, můžeme pro odrazivost a propustnost celého vzorku psát

$$R = R_1 + \frac{T_1 T'_1 R_2 U^2}{1 - R'_1 R_2 U^2}, \quad T = \frac{T_1 T_2 U}{1 - R'_1 R_2 U^2}.$$

Při výpočtu kompletní Muellerovy matice namísto jen odrazivosti či propustnosti bychom sčítali podle stejného schématu, ale namísto odrazivostí a propustností bychom pracovali s odpovídajícími Muellerovými maticemi:

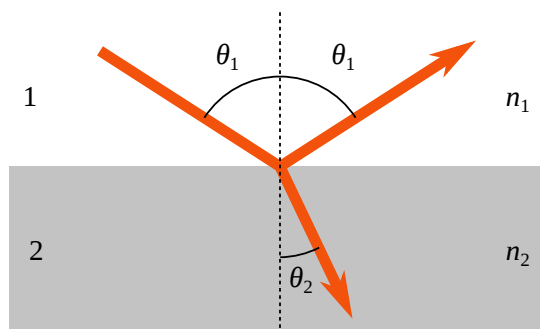
$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 + \mathbf{T}'_1 (\mathbf{1} - U^2 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}'_1)^{-1} \mathbf{R}_2 \mathbf{T}_1 U^2, \quad \mathbf{T} = U \mathbf{T}_2 (\mathbf{1} - U^2 \mathbf{R}'_1 \mathbf{R}_2)^{-1} \mathbf{T}_1.$$

Poznamenejme, že s maticí útlumu světla v podložce \mathbf{U} jsme pracovali jako se skalárem, protože platí:

$$\mathbf{U} = U \mathbf{1}, \quad U = \exp\left(-\frac{4\pi\kappa d}{\lambda}\right),$$

kde κ je extinkční koeficient prostředí podložky, d tloušťka podložky a λ vlnová délka ve vakuu. Muellerovy matice propustnosti rozhraní mají stejnou formu jako pro odraz, pouze Fresnelovy koeficienty pro odraz se nahradí koeficienty charakterizujícími průchod koherentním vrstevnatým systémem.

Tenká vrstva na podložce



Obrázek 3: Označení úhlu dopadu, odrazu, lomu a indexů lomu pro odraz a lom na jednom rozhraní.

Pro optickou charakterizaci vzorků je třeba využít vztahy mezi optickými veličinami a vlastnostmi materiálů, tloušťkami vrstev a dalšími parametry. Začneme popisem odrazu a lomu světla na jednom rozhraní mezi dvěma

různými izotropními prostředími s indexy lomu \hat{n}_1 a \hat{n}_2 (viz obrázek 3). Úhel dopadu světla ze strany prostředí 1 označme $\hat{\theta}_1$. Úhel odrazu je roven úhlu dopadu. Úhel lomu do prostředí 2 je dán Snellovým zákonem

$$\hat{n}_1 \sin \hat{\theta}_1 = \hat{n}_2 \sin \hat{\theta}_2 .$$

Tento zákon je zjevně tranzitivní. Jsou-li prostředí absorbuující, jsou indexy lomu i úhly komplexní veličiny, Snellův zákon i následující vztahy lze nicméně formálně zapsat zcela stejně.

Z podmínek na rozhraní pro Maxwellovy rovnice získáme Fresnelovy koeficienty odrazu, které jsou pro p a s polarizaci rovny

$$\hat{r}_p = \frac{\hat{E}_{rp}}{\hat{E}_{ip}} = \frac{\hat{n}_2 \cos \hat{\theta}_1 - \hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_2}{\hat{n}_2 \cos \hat{\theta}_1 + \hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_2} , \quad \hat{r}_s = \frac{\hat{E}_{rs}}{\hat{E}_{is}} = \frac{\hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1 - \hat{n}_2 \cos \hat{\theta}_2}{\hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1 + \hat{n}_2 \cos \hat{\theta}_2} .$$

Pro kolmý dopad světla se vztahy zjednoduší na

$$\hat{r}_p = -\hat{r}_s = \frac{\hat{n}_2 - \hat{n}_1}{\hat{n}_2 + \hat{n}_1} .$$

Fresnelovy koeficienty průchodu jsou

$$\hat{t}_p = \frac{\hat{E}_{tp}}{\hat{E}_{ip}} = \frac{2\hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1}{\hat{n}_2 \cos \hat{\theta}_1 + \hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_2} , \quad \hat{t}_s = \frac{\hat{E}_{ts}}{\hat{E}_{ip}} = \frac{2\hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1}{\hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1 + \hat{n}_2 \cos \hat{\theta}_2} .$$

Tedy pro kolmý dopad:

$$\hat{t}_p = \hat{t}_s = \frac{\hat{n}_1}{\hat{n}_2 + \hat{n}_1} .$$

Je nutné dodat, že ideální rozhraní mezi dvěma prostředími v přírodě prakticky neexistuje a především v elipsometrii je nutné rozhraní charakterizovat složitějšími modely beroucí v úvahu adsorbované vrstvy nebo jemnou drsnost. Nejjednodušším takovým modelem může být model tenké vrstvy.

Koeficienty odrazu pro jednu tenkou vrstvu na podložce můžeme dostat koherentním sečtením příspěvků od jednotlivých odrazů ve vrstvě (viz obrázek 2). Označíme-li \hat{r}_{q1} a \hat{r}_{q2} Fresnelovy koeficienty pro horní a dolní rozhraní vrstvy ($q = p, s$), je koeficient pro celou vrstvu roven

$$\hat{r}_q = \frac{\hat{r}_{q1} + \hat{r}_{q2} \exp(2i\hat{X})}{1 + \hat{r}_{q1}\hat{r}_{q2} \exp(2i\hat{X})} ,$$

kde \hat{X} je komplexní fázový člen

$$\hat{X} = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{n} d \cos \hat{\theta} .$$

Symbole λ , \hat{n} , d a $\hat{\theta}$ označují po řadě vlnovou délku světla, index lomu vrstvy, tloušťku vrstvy a úhel lomu ve vrstvě. Koeficient \hat{r}_q můžeme považovat za efektivní Fresnelův koeficient pro celou vrstvu, kterou si tak lze představit opět pouze jako jednoduché rozhraní. Začneme-li postupně od podložky, je tímto způsobem možné rekurzivně vypočítat koeficienty odrazivosti i pro systém více vrstev.

Vidíme, že tloušťka vrstvy vystupuje ve výsledných vztazích v argumentech komplexních exponenciál. V případě neabsorbující vrstvy, kdy je \hat{n} reálné, to znamená v argumentech goniometrických funkcí. Ve spektrech odrazivosti, propustnosti a dalších optických veličin, tedy v jejich závislostech na vlnové délce λ , budeme proto pozorovat interferenční minima a maxima. Jelikož je \hat{X} úměrné $\hat{n}d/\lambda$, bude hustota minim a maxim růst s tloušťkou vrstvy a jejím indexem lomu.

V případě složitějších systémů vrstev je vhodné použít 4×4 maticový formalismus (Yeh/Berreman formalismus). V rámci tohoto formalismu jsou matice komplexní a svazují čtyři rovinné vlny (dvě různé polarizace a dva různé směry od a k rozhraní/systému) z obou stran rozhraní/systému. V tomto formalismu se pracuje s amplitudami vln, a proto je vhodný ke koherentnímu sčítání polí, tedy vhodný pro popis tenkých vrstevnatých systémů, kde dochází k interferencím. Potom například matice systému hladké homogenní dvojevrstvy je vyjádřena následovně:

$$\mathbf{M} = \mathbf{B}(\hat{n}_a, \hat{n}_{f1}) \mathbf{T}(\hat{n}_{f1}, d_{f1}) \mathbf{B}(\hat{n}_{f1}, \hat{n}_{f2}) \mathbf{T}(\hat{n}_{f2}, d_{f2}) \mathbf{B}(\hat{n}_{f2}, \hat{n}_s) ,$$

kde závorce jsou zdůrazněny parametry komplexního indexu lomu a tlouštěk, na kterých jsou jednotlivé matice závislé, kde indexy a , f_1 , f_2 , a s označují, vnější prostředí, první a druhou vrstvu a substrát. Konkrétní formy matic zde nejsou uvedeny a lze je najít v literatuře. Je nutné zdůraznit, že v rámci tohoto 4×4 maticového formalismu lze do systému relativně snadno zahrnout anizotropie nebo defekty vrstev jako jsou drsnost nehomogenita, atd.

Vyhodnocení dat, disperzní modely

Pro některé jednoduché systémy lze optické konstanty určit přímým výpočtem z měřených veličin. V přiblížení dvoufázového systému (okolí-polonekonečný vzorek) můžeme komplexní index lomu určit přímo z elipsometrického poměru $\hat{\rho}$ jako

$$\hat{n}_1 = n_0 \sin \theta_0 \sqrt{1 + \tan^2 \theta_0 \left(\frac{1 - \hat{\rho}}{1 + \hat{\rho}} \right)^2}.$$

V praxi je však situace většinou složitější a je nutné použít vhodný model optické odezvy systému a nafitovat pomocí něj experimentální data. V rámci tohoto modelu je nutné použít vhodné disperzní modely popisující dielektrické odezvy všech prostředí formující studovaný systém, dále je nutný strukturální model popisující systém a modely popisující neideálnosti měřících systémů. Měření optické veličiny fitujeme za pomoci metody nejmenších čtverců. Pro sumu čtverců S platí

$$S(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i, \mathbf{p}))^2 w_i,$$

kde y_i a $f(x_i, \mathbf{p})$ jsou měřené a teoretické hodnoty v daném bodě i , w_i je inverzní hodnota čtverce odhadované chyby měřené veličiny a N je počet získaných experimentálních hodnot pro dané měření. Během fitování hledáme takový vektor parametrů \mathbf{p} , který minimalizuje celkovou sumu čtverců S . Vektor parametrů \mathbf{p} obsahuje tloušťku a parametry disperzního modelu. Klíčová je volba počátečních parametrů, protože běžné minimalizační metody (např. Levenberg–Marquardtův algoritmus) nezkoumají celý prostor parametrů, ale hledají pouze lokální minimum $S(\beta)$ (které se od globálního může lišit).

Jednoduchý disperzní model je Cauchyho vztah

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4},$$

kde A , B , C jsou fitovací parametry. Jedná se o empirický vztah a platí pouze pro materiály v oblasti, kde tyto materiály jsou průhledné, tj. pro energie meší než je šířka zakázaného pásu (band gap) a zároveň dostatečně daleko od fononové absorpce. V praxi to je většinou viditelná a blízká infračervená oblast. Můžeme do něj nicméně zahrnout slabou absorpci, extinkční koeficient κ pak má tvar

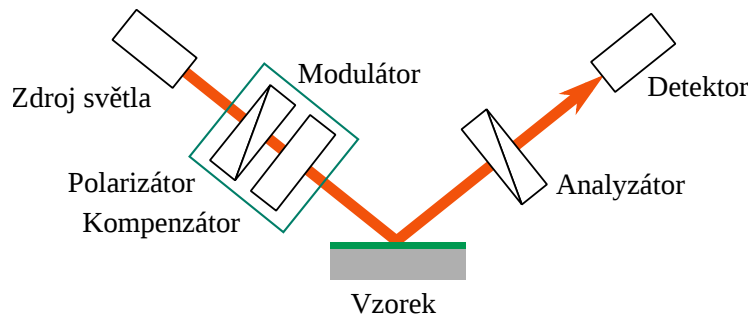
$$\kappa = ae^{-\lambda b}.$$

Je-li účelem optické charakterizace něco více, než určení indexu lomu v transparentní oblasti a tloušťky vrstvy je nutné optickou charakterizaci provést v širším spektrálním oboru, kde materiály vykazují jak absorpci způsobenou excitacemi elektronů, tj. absorpci ve viditelném a ultrafialovém oboru, tak i absorpci způsobenou vibracemi atomové mřížky, tj. fononovou absorpci v infračervené oblasti. Pro tento účel je potom nutné použít disperzní model vhodně popisující zmíněné absorpční procesy. V našem programu *newAD2* je možné použít disperzní model nazývaný Universal Dispersion Model (UDM), umožňující standardním způsobem popsat optické vlastnosti téměř jakéhokoliv materiálu.

Popis modelu UDM a jeho použití v programu je na webovských stránkách newad.physics.muni.cz.

Spectroskopická elipsometrie

Elipsometrie je optická technika, v níž se měří změna polarizačního stavu světla při odrazu od vzorku, případně při průchodu vzorkem. Příslušný optický přístroj se nazývá elipsometr. Přesněji jde o skupinu příbuzných



Obrázek 4: Schéma elipsometru v PCSA (polariser–compensator–sample–analyser) uspořádání. V optické cestě musí být samozřejmě i monochromátor, který zde bereme jako součást detektoru, takže není zakreslen zvlášť.

technik, lišících se konstrukcí a uspořádáním přístroje a množinou měřitelných veličin, která se pohybuje od Δ a Ψ po kompletních 15 prvků normalizované Muellerovy matice.

Všechny typy elipsometrů mají určité společné optické prvky. Konkrétně polarizátory, kterým se tradičně říká polarizátor, resp. analyzátor, jsou-li v optické cestě před vzorkem, resp. za vzorkem. Většina typů také obsahuje kompenzátor (prvek posouvající vzájemnou fázi polarizací ve dvou kolmých směrech), případně kompenzátory. Analýzou závislosti intenzity světla na natočení těchto prvků, případně jiné změně jejich parametrů, pak lze zjistit, jak měřený vzorek mění polarizační stav světla. Zde podrobněji popíšeme fázově modulovaný elipsometr v uspořádání PCSA (viz obrázek 4), což je typ elipsometru UVISEL od firmy Horiba, Jobin Yvon, který se využívá i v praxi. Nutno dodat, že konkrétní model má ve skutečnosti přehozený zdroj světla s detektorem, ale jelikož software užívá terminologii obrácenou, budeme se jí i my držet, protože výsledek je na pořadí elementů invariantní.

Ve fázově modulovaném elipsometru je harmonicky modulován kompenzační úhel kompenzátoru δ s frekvencí $\omega = 50 \text{ kHz}$ a určitou amplitudou a (která je dána kalibrací přístroje):

$$\delta(t) = a \sin \omega t .$$

Optický prvek sestávající z pevně spojeného polarizátoru s kompenzátozem se nazývá fotoelastický modulátor (PEM), respektive jen modulátor. V Modulátoru je kompenzátor tvořen isotropním krystalem, jenž za pomoci piezoelektrického jevu se stává anizotropní. Intenzita světla dopadajícího do detektoru I se pak s časem mění periodicky, ovšem ne harmonicky, protože na kompenzačním úhlu δ závisí následovně:

$$I(t) = I_B(1 + I_C \cos \delta + I_S \sin \delta) ,$$

kde I_B , I_S a I_C jsou konstanty. To znamená

$$I(t) = I_b \left[1 + I_C \cos(a \cos(\omega t)) + I_S \sin(a \cos(\omega t)) \right] .$$

Její časovou závislost proto můžeme rozepsat do Fourierovy řady pomocí Besselových funkcí, konkrétně

$$I(t) = W_0 + W_1 \sin(\omega t) + W_2 \cos(2\omega t) + \dots ,$$

kde W_0 je konstantní koeficient, W_1 koeficient první harmonické frekvence, W_2 koeficient druhé harmonické frekvence atd. Z těchto koeficientů lze vypočítat veličiny I_C a I_S , které již přímo souvisejí s prvky normalizované Muellerovy matice vzorku pomocí vztahů

$$I_C = \frac{W_2}{2J_2(a)W_0 - J_0(a)W_2} , \quad I_S = \frac{J_1(a)W_1}{2J_1(a)J_2(a)W_0 - J_1(a)W_2} ,$$

kde $J_n(x)$ označuje Besselovu funkci prvního druhu a n -tého řádu. Tento přepočít provádí řídicí software elipsometru, takže při zpracování dat budeme I_C a I_S brát jako měřené veličiny.

Vztahy mezi I_C , I_S a prvky Muellerovy matice závisejí na natočení analyzátoru a modulátoru vůči rovině dopadu. Při měření se využívají dvě různé konfigurace. V tzv. druhé elipsometrické konfiguraci (označované římskou II) je úhel natočení modulátoru $M = 0$ nebo $\pi/2$ a platí

$$I_S = \pm I_s , \quad I_{CII} = \pm I_C .$$

V tzv. třetí elipsometrické konfiguraci (označované římskou III) je úhel natočení modulátoru $M = \pm\pi/4$ a platí

$$I_S = \pm I_s, \quad I_{\text{CIII}} = \pm I_n.$$

V obou konfiguracích je úhel natočení analyzátoru $A = \pm\pi/4$ a úhel pootočení kompenzátoru vůči polarizátoru $\pi/4$. Při měření se používá středování přes zóny, což znamená měření ve čtyřech různých ekvivalentních konfiguracích II a čtyřech různých ekvivalentních konfiguracích III. Měřené veličiny v jednotlivých ekvivalentních konfiguracích se liší právě znaménky podle konkrétních voleb natočení optických prvků. Ze získaných 16 veličin I_S , I_C se pak vypočtou tři nezávislé I_s , I_c a I_n tak, aby se kompenzovaly určité systematické chyby měření. Experimentální hodnoty nespĺňují obecně přesně vztah $I_s^2 + I_c^2 + I_n^2 = 1$, ať už kvůli chybám měření nebo skutečné depolarizaci. Elipsometrický poměr $\hat{\rho}$, který se používá pro přímý výpočet indexu lomu v polonekonečném modelu, bychom z nich proto mohli počítat řadou neekvivalentních způsobů. Vhodný je následující vztah:

$$\hat{\rho} = \frac{I_c + iI_s}{P - I_n},$$

kde

$$P = \sqrt{I_s^2 + I_c^2 + I_n^2}.$$

Souvislost s klasickými elipsometrickými úhly je potom následující:

$$I_s = P \sin 2\Psi \sin \Delta, \quad (1)$$

$$I_c = P \sin 2\Psi \cos \Delta, \quad (2)$$

$$I_n = P \cos 2\Psi. \quad (3)$$

Odrazivost

V rámci praktika je odrazivost měřena na spektrofotometru Perkin Elmer Lambda 1050. Jedná se o spektrofotometr s dvoukanalovým uspořádáním (viz obrázek 5), tj. v přístroji jsou dvě optické dráhy a signál je měřen na každé zvlášť. Světelný svazek je za detektorem rozdělen pomocí rotujícího zrcadla na vzorkový kanál a referenční kanál, oba kanály mají nicméně společný detektor. Měření se provádí dvě, na vzorkovém kanálu se postupně měří zkoumaný vzorek a tzv. normál (vzorek se známou odrazivostí, typicky destička z monokrystalu křemíku pro UV–VIS a zlato pro NIR). Měříme tedy relativní odrazivost vzorku oproti normálu. Na referenčním kanálu je po celou dobu referenční vzorek s libovolnou odrazivostí (vhodné je aby odrazivost referenčního vzorku byla řádově podobná odrazivosti měřeného vzorku a normálu). Pro intenzity na vzorkovém kanálu I_v , I_n a referenčním kanálu I_{r1} , I_{r2} platí

$$I_v = R_v Z_1 D_1 G_v, \quad I_{r1} = R_r Z_1 D_1 G_r,$$

$$I_n = R_n Z_2 D_2 G_n, \quad I_{r2} = R_r Z_2 D_2 G_r,$$

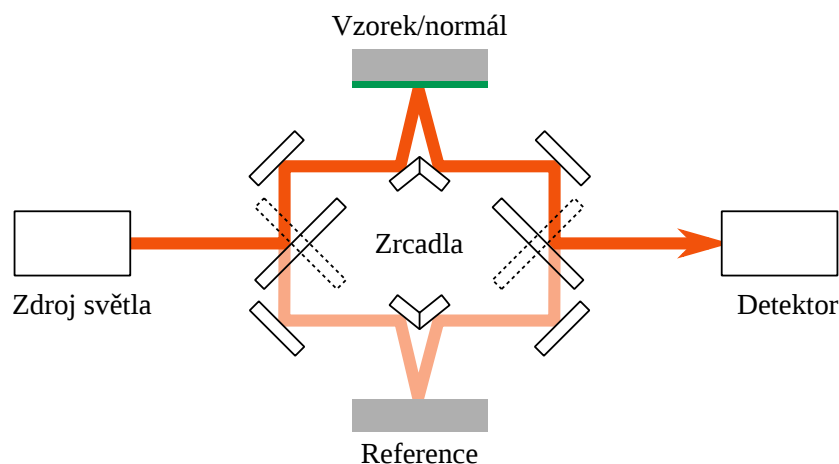
kde R_v , R_n a R_r jsou odrazivosti vzorku, normálu a reference, $Z_{1,2}$ je aktuální intenzita zdroje v čase měření, $D_{1,2}$ citlivost detektoru v čase měření a G_v , G_n , G_r jsou geometrické faktory pro jednotlivé kanály, které zahrnují například různé polohy (naklonění) vzorků a různé technické provedení obou kanálů. Předpokládáme, že během jednoho měření přepínáme mezi kanály dostatečně rychle, abychom mohli zanedbat fluktuace zdroje a detektoru (tj. D a Z jsou na obou kanálech stejné, liší se jen mezi měřeními).

Kombinací rovnic získáme

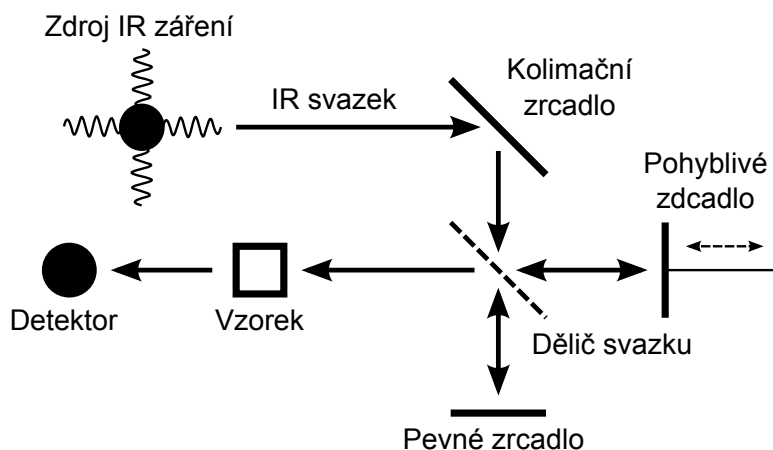
$$\frac{R_v}{R_n} = \frac{\frac{I_v}{I_{r1}} G_n}{\frac{I_n}{I_{r2}} G_v} = R_{\text{rel}}.$$

Ve vztahu tedy nevystupují fluktuace zdroje ani detektoru a poměr G_v/G_n je blízký jedné, jedná se o stejný kanál, pouze odlišné vzorky. Odrazivost vzorku pak tedy vyjádříme jako

$$R_v = R_{\text{rel}} R_n.$$



Obrázek 5: Schéma měření odrazivosti pod téměř kolmým úhlem dopadu pomocí dvoukanálového spektrofotometru. V optické cestě musí samozřejmě být i monochromátor, který není zakreslen. V případě spektrofotometru Lambda 1050 je monochromátor mezi zdrojem a vzorkem.



Obrázek 6: Schéma Michelsonova interferometru pro FTIR měření

Propustnost

Měření propustnosti pomocí dvoukanálového spektrofotometru se v principu neliší od měření odrazivosti, pouze místo normálu a referenčního vzorku je použit volný kanál, tedy 100% propustnost. Měření propustnosti tedy nevyžaduje znalost propustnosti normálu.

FTIR

FTIR je zkratka z Fourier Transform InfraRed (spectroscopy) a je to metoda měření spektrofotometrie v infračervené oblasti. Pomocí FTIR spektrofotometru lze zkonstruovat elipsometr měřící v infračervené oblasti (viz. Woollam, IR-VASE).

FTIR spektrofotometr neobsahuje monochromátor, ale místo toho využívá Michelsonův interferometr (obrázek 6) a výstupem měření je interferogram (závislost intenzity detekovaného záření na poloze zrcadla v interferometru). Spektrální závislost intenzity získáme pomocí Fourierovy transformace.

Infračervenou oblastí označujeme oblast vlnových délek 800 nm až 1000 μm , respektive vlnočtů 12500 cm^{-1} až 10 cm^{-1} (pro popis infračervené oblasti se nejčastěji používají právě vlnočty $\nu = 1/\lambda$ vyjádřené v reci-

prokých centimetrech (cm^{-1}). Infračervenou oblast dělíme na vzdálenou ($10\text{--}250\text{ cm}^{-1}$), střední ($250\text{--}5000\text{ cm}^{-1}$) a blízkou ($5000\text{--}12500\text{ cm}^{-1}$). Uvedené hranice jsou nicméně jen konvenční.

Pro měření infračervených spekter tenkých vrstev bude využit spektrofotometr Bruker Vertex 80v. Je to FTIR vakuový spektrometr založený na aktivním uspořádání interferometru, díky kterému je dosaženo velice kvalitního spektrálního rozlišení. Přesný scanner a kvalitní optika zajišťují vysokou citlivost a stabilitu měření. Držák měřeného substrátu je umístěn v komoře, která je při měření vyčerpána na tlak 2,51 hPa, čímž je eliminován vliv atmosferické vlhkosti.