# Messungen und numerische Simulationen der Müller Matrix an Silizium Nanowire-Strukturen

Jana Grundmann, Tim Käseberg, Bernd Bodermann

Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Bundesallee 100, 38116 Braunschweig mailto:jana.grundmann@ptb.de

Nanowire-Strukturen können zur Gewinnung von Energie aus erneuerbaren Energien genutzt werden. Die Charakterisierung der Strukturen soll dabei zerstörungsfrei stattfinden und auch inline einsetzbar sein, um den Herstellungsprozess optimieren zu können. Ellipsometrische Mess- und Simulationsergebnisse werden hier dargestellt und als potenzielle Charakterisierungsmethode diskutiert.

## 1 Einleitung

Sogenannte Nanowire-Strukturen finden in der Halbleiterindustrie immer mehr Anwendungsbereiche. So können sie zum Beispiel als Array zu einer Solarzelle angeordnet werden und so zur Energiegewinnung aus erneuerbaren Energien genutzt werden. Ihre Vorteile gegenüber herkömmlichen planaren Solarzellen sind, dass sie sehr kleine Abmessungen haben und ein hohes Oberfläche-Volumen-Verhältnis aufweisen, sodass sehr hohe Wirkungsgrade erreicht werden können [1]. Zur Optimierung des Herstellungsprozesses müssen diese Nanowire-Strukturen hinsichtlich ihrer Abmessungen charakterisiert werden. Dafür wurde Müller-Matrix-Ellipsometrie als ein Messverfahren untersucht, welches zerstörungsfreie Messungen und gute Inlinefähigkeit mit hoher Form- und Größensensitivität kombiniert. Es wurde sowohl ein integrierendes als auch ein abbildendes Gerät eingesetzt. Auf diese Weise können die Ergebnisse beider Geräte verglichen werden und der Einfluss von lokalen Fehlstellen kann mit Hilfe des abbildenden Geräts erkannt werden.

## 2 Proben und Messverfahren

Bei der Müller-Matrix-Ellipsometrie wird die Veränderung des Polarisationszustands von Licht nach der Interaktion mit der Probe analysiert, um so Rückschlüsse auf die dielektrischen Eigenschaften von dünnen Filmschichten oder auf die Schichtdicken von Filmen zu schließen. Dabei handelt es sich um eine indirekte Messmethode, es sind also numerische Simulationen nötig, um die Strukturparameter zu rekonstruieren und das inverse Problem zu lösen. Bei einem abbildenden Ellipsometer ist im Vergleich zum integrierenden Gerät zusätzlich ein Objektiv in den Analysator-Strahlengang eingebaut und der Detektor durch eine Kamera ersetzt. Auf diese Weise wird die Müller Matrix nicht mehr integral über die gesamte Beleuchtungspunktgröße, sondern für jeden Pixel der Kamera separat und damit über sehr viel kleinere Integrationsbereiche gemessen. Somit können auch Strukturen untersucht werden, die wesentlich kleiner als die Beleuchtungspunktgröße sind oder die nicht periodisch sind.

Die hier untersuchte Probe besteht aus Silizium mit Nanowiren, die in einem quadratischen Muster angeordnet sind und die folgenden Abmessungen aufweisen:

Höhe:	<i>h</i> = 90 nm
Durchmesser:	<i>w</i> =100 nm
Periode:	$\Lambda_x = \Lambda_y = 200 \text{ nm}$
Kantenwinkel:	$\theta = 8^{\circ}$
Kantenradius:	$R_{\rm top} = R_{\rm bottom} = 5  \rm nm$

Für den Optimierungsprozess werden diese Parameter als Startwerte genutzt. Das jeweilige Simulationsergebnis wird an das Messergebnis angefittet bis ein Best-Fit-Ergebnis gefunden wurde und so die realen Strukturparameter rekonstruiert wurden. Die Simulationen sind mit der finiten Elemente Methode durchgeführt worden.

## 3 Mess- und Simulationsergebnisse

Die Ergebnisse des abbildenden Ellipsometers sind im Folgenden als Mittelwert der Müller-Matrix-Bilder dargestellt, um eine bessere Vergleichbarkeit zwischen den Messergebnissen und der Simulation zu gewährleisten. Die Müller Matrix mit den Ergebnissen der Messungen und Simulation aus der ersten Optimierungs-Iteration ist in Abbildung 1 dargestellt. Die Messgeräte haben unterschiedliche Wellenlängenbereiche, in denen sie messen können. So kann mit dem nicht-abbildenden Gerät von 190 nm bis 980 nm und mit dem abbildenden Gerät von 400 nm bis 1000 nm gemessen werden. Im Wellenlängenbereich von 400 nm bis 800 nm, in dem beide Geräte messen können, passen die Ergebnisse sehr gut zueinander. Kleine Abweichungen zwischen den Messergebnissen lassen sich auf potenzielle residuale Justageabweichungen der Probe in beiden Geräten zurückführen. In den Elementen m<sub>13</sub>, m<sub>14</sub>,

m<sub>23</sub>, m<sub>24</sub>, m<sub>31</sub>, m<sub>32</sub>, m<sub>41</sub>, m<sub>42</sub> ist außerdem zu erkennen, dass es kleine Abweichungen zwischen dem simulierten Wert null und den Messergebnissen gibt. Das liegt daran, dass die Proben nicht exakt senkrecht zum einfallenden Licht einjustiert wurden, um auch aus diesen Elementen Informationen zu erhalten. Im Wellenlängenbereich zwischen 200 nm und 400 nm fällt auf, dass es deutlich größere Abweichungen zwischen den Messungen mit dem nichtabbildenden Ellipsometer und der Simulation gibt. Messungen mit einer Wellenlänge im Bereich der Pitch-Abmaße der Probe sind deutlich sensitiver auf Veränderungen der Strukturen. Auf diese Weise lassen sich Rückschlüsse auf die tatsächliche Form der Nanowire schließen. Abweichungen zwischen Messung und Simulation im m<sub>34</sub> und m<sub>43</sub> Element lassen darauf schließen, dass die Form der Nanowire nicht zylindrisch ist. Außerdem sind die Abweichungen von null in den Elementen  $m_{13}$ ,  $m_{14}$ ,  $m_{23}$ ,  $m_{24}$ ,  $m_{31}$ , m<sub>32</sub>, m<sub>41</sub>, m<sub>42</sub> deutlich größer als noch im Wellenlängenbereich über 400 nm. Das liegt daran, dass die Anordnung der Nanowire nicht quadratisch ist, wie bisher angenommen, sondern eine eher rautenförmige Anordnung aufweist. Für den Optimierungsprozess bedeutet das, dass neben den Simulationen der strukturellen Parameter der Nanowire auch die Form und die Anordnung mit optimiert werden müssen, was den Prozess sehr zeitaufwendig macht.



**Abb. 1** Müller Matrix von Messungen mit einem abbildenden und einem nicht-abbildenden Ellipsometer und Simulation an einer Nanowire-Struktur mit 200 nm Pitch.

Um die Vermutung der rautenförmigen Anordnung der Nanowire zu überprüfen, wurde eine Optimierung des Rautenwinkels durchgeführt. Die Optimierung hat einen Winkel von 87,1° ergeben. Die Müller Matrix mit den Ergebnissen dieser Simulation ist in Abbildung 2 dargestellt. Besonders in den Matrix Elementen  $m_{13}$ ,  $m_{14}$ ,  $m_{23}$ ,  $m_{24}$ ,  $m_{31}$ ,  $m_{32}$ ,  $m_{41}$ ,  $m_{42}$  ist eine deutliche Verbesserung zu erkennen.



**Abb. 2** Müller Matrix von Messung und Simulation mit einem Rautenwinkel von 87,1° an einer Nanowire-Struktur mit 200 nm Pitch.

#### 4 Diskussion und Ausblick

Die ellipsometrischen Messungen und Simulationen von Nanowire-Strukturen im Wellenlängenbereich von 400 nm bis 800 nm zeigen gute Übereinstimmungen. In den Messergebnissen ist außerdem zu sehen, dass bei Wellenlängen im Bereich des Pitchs der Nanowire die Messungen auf kleinste Gitterabweichungen sensitiv sind, was das metrologische Potenzial der Müller-Ellipsometrie zur Charakterisierung der Nanowire-Strukturen dokumentiert.

Der nächste Schritt ist nun die Vermutung der nichtzylindrischen Nanowire ebenfalls durch einen Optimierungsprozess zu überprüfen.

Acknowledgement: The 19ENG05 NanoWires project has received funding from the EMPIR programme co-financed by the Participating States and from the Europeans Union's Horizon 2020 research and innovation programme.

#### Literatur

 E. C. Garnett, M. L. Brongersma, Y. Cui, and M. D. McGehee, "Nanowire Solar Cells," Annual Review of Materials Research, pp. 269–295 (2011).