Robustes Verfahren zur Bestimmung von Porendurchmessern

Dorothee Hüser, PTB, Fachgebiet 5.10

1 Einleitung

Zur Charakterisierung des Übertragungsverhaltens bzw. der Wiedergabetreue von Topographiesignalen werden an der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB) Pseudochirpstrukturen entwickelt. Die Struktur ist aus Cosinuswellen in einer Sequenz von diskreten, konstanten Wellenlängen λ_i zusammengesetzt, deren Werte in Anlehnung an die E24 Widerstandsreihe gewählt wurden [1].

Das Objekt ist ein Segment aus einer Kreisscheibe von 80 mm Durchmesser, siehe Abb. 1. Das Material der Scheibe ist sauerstoffarmes Kupfer mit gehärteter Nickel-Phosphorschicht.

Die Strukturen sind mittels Plandrehen gefertigt, indem die Nickel-Phosphorschicht strukturiert wurde. Die dafür verwendete Diamantschneide hat einen Schneidkantenradius von ca. 6 μm.

Die aufgebrachten Strukturen sind Pseudochirpstrukturen mit zweierlei Amplituden, Dreieckstrukturen und Kreisabschnittstrukturen.

2 Messobjekt

Die Werte für die Wellenlängen λ_i sind in μm angegeben:

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
λ_i	91	82	75	68	62	56	51	47	43	39	36	33

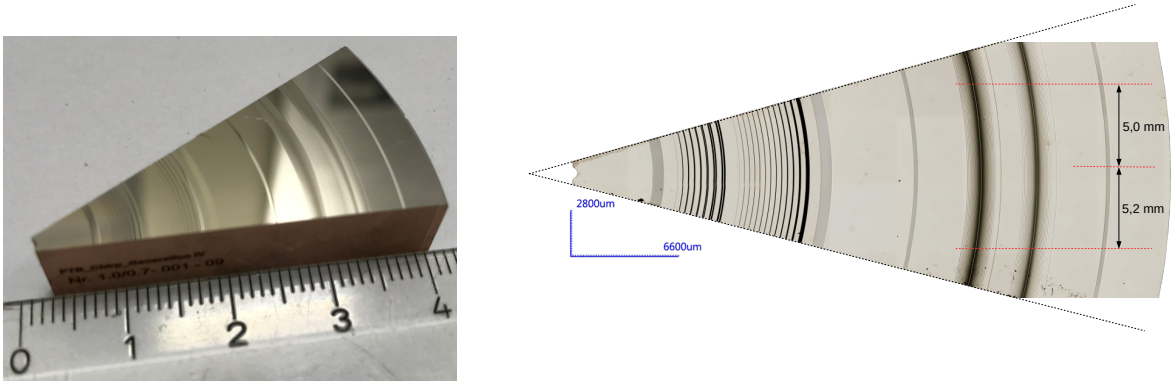

Abbildung 1: Plangedrehter Prüfkörper als Segment aus einer Kreisscheibe

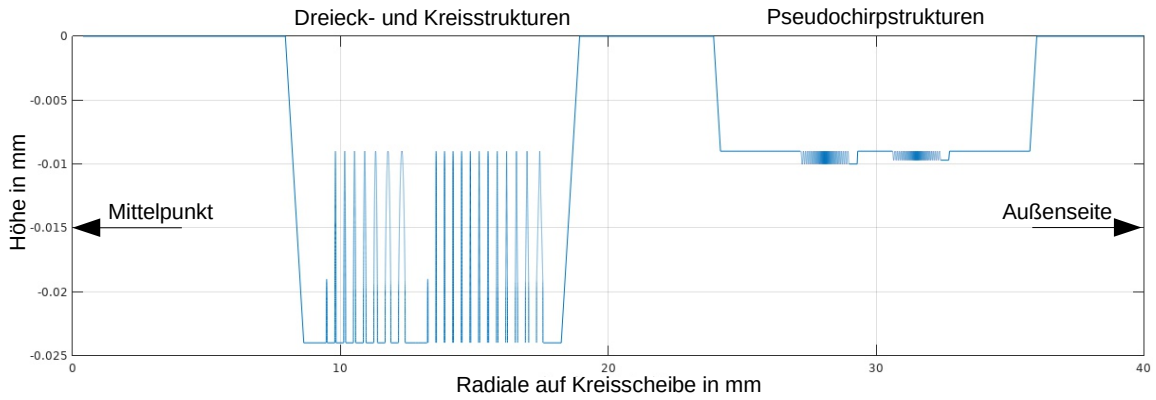

Abbildung 2: Layout des Prüfkörpers Chirp IV

i	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
λ_i	30	27	24	22	20	18	16	15	13	12	11

Die Strukturen sind nicht im eigentlichen Sinne gechirpt, sondern als einzelne Cosinuswellen, die jeweils eine konstante Wellenlänge haben, realisiert. Charakterisiert sind die Strukturen durch

- ihre Amplituden $a_1 = 0{,}35\,\mu\text{m}$ und $a_2 = 0{,}50\,\mu\text{m}$
- die Strukturhöhen h_1 und h_2;
- ihre Wellenlängen λ_i;
- die Positionen ihrer Extrema $x_{\text{E},i}$.

Nominell ergeben sich die Strukturhöhen aus den Amplituden $h_j = 2a_j$ mit $j = 1, 2$ und die Positionen der Extrema aus den Wellenlängen. Durch die Begrenztheit der Fertigungspräzision müssen diese aber unabhängig voneinander bestimmt werden.

Die Anordnung der Wellen ist so, dass die Cosinuswellen mit den kleinsten Wellenlängen getrennt durch einen Graben von $11\,\mu\text{m}$ Breite nebeneinander liegen und nach außen die Wellenlängen ansteigend sind.

Die Wellenstrukturen, die Richtung Kreisscheibenmittelpunkt liegen, sind negative Cosinuswellen

$$z(x \in [x_{\text{E},i} - \frac{1}{2}\lambda_i, x_{\text{E},i} + \frac{1}{2}\lambda_i]) \;=\; -a\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_i}\,(x - x_{\text{E},i})\right) \tag{1}$$

und ihre Extrema an den Positionen $x_{\text{E},i}$ sind Minima. In Richtung der Außenseite der Scheibe befinden

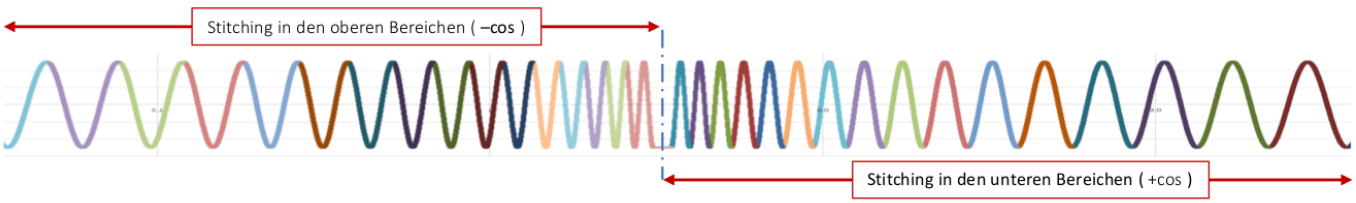

Abbildung 3: Anordnung der Cosinuswellen des Pseudochirp

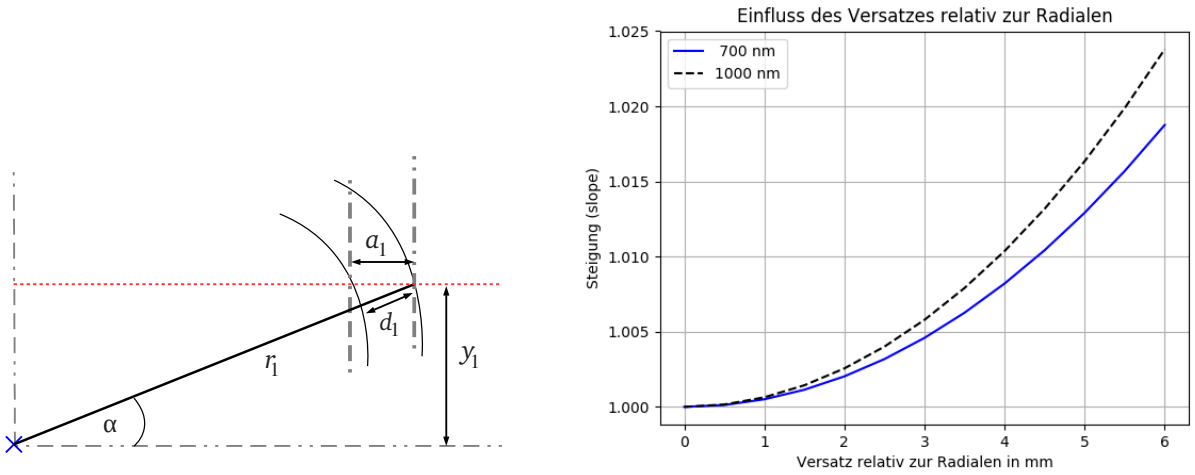

Abbildung 4: Dehnungsfaktor für die Abstände zwischen den Extrema bei zur Radialen parallel versetzten Profillinien, der die Steigung der Geraden zwischen den Abständen a als Funktion der Abstände d auf der Radialen ist.

sich die positiven Cosinuswellen

$$z(x \in [x_{\mathrm{E},i} - \frac{1}{2}\lambda_i, x_{\mathrm{E},i} + \frac{1}{2}\lambda_i]) \;=\; +a\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_i}\,(x - x_{\mathrm{E},i})\right) \tag{2}$$

und ihre Extrema an den Positionen $x_{\mathrm{E},i}$ sind Maxima. Die positiven Cosinuswellen werden entsprechend in den unteren Bereichen, den Tälern, aneinandergesetzt und die negativen in den oberen Bereichen auf den Berggipfeln, siehe Abb. 3.

Die Wellenlängen λ_i von 11 bis 91 μm gelten für die Radialschnitte bezüglich der plangedrehten Strukturen auf der Kreisscheibe. Die Lage des Radialschnitts auf dem Segment ist durch die in Abb. 1 *rechts* durch gestrichtelte Linien hervorgehoben Striche markiert. Die Markierung auf dem Prüfkörper ist durch ca. 30 μm breite Rillen realisiert. Die kurze Rille ist in erster Näherung entlang des Radialschnitts angeordnet, die beiden langen Rillen sind jeweils um etwa 5 mm parallel dazu versetzt. Die langen Rillen sind über die gesamten Strukturen durchgezogen und begrenzen den Messbereich.

Wird mit einem Versatz y_k parallel zur radialen Richtung gemessen, so werden die Abstände $d_i = x_{\mathrm{E},i} - x_{\mathrm{E},i+1}$ der Positionen der Extrema $x_{\mathrm{E},i}$ gedehnt, siehe Abb. 4.

Eine Herausforderung an die Auswertung ist die durch das Plandrehen erzeugte Krümmung der Anordnung der Strukturen, die bei parallelen Profilen zur versatzbedingten Dehnung der Wellenlängen führt. Dieser wird von Seewig, Eifler und Wiora dadurch begegnet, dass eine flächenhafte Gesamtauswertung vorgenommen wird [2]. Hier wird gemeinsam mit allen Wellenlängen und den Amplituden auch der Radius auf der plangedrehten Scheibe in die nichtlineare Optmierungsrechnung eingepasst.

Eine weitere Herausforderung stellt die Begrenztheit der Fertigungsgenauigkeit dar. Dazu gehört die Diskrepanz zwischen ursprünglich charakterisiertem Schneidkantenradius, der den Designdaten zugrunde gelegt wurde und dem tatsächlichen, der später nach weiterem Verschleiß zum Einsatz gekommen ist. Verschleiß verursacht nicht nur eine Formabweichung durch Radiendifferenz sondern auch Einzelausbrüche, die sich als kurzwellige Topographieabweichungen darstellen. Deshalb ist eine Auswertung der Strukturhöhen, die von der Anpassung einer Cosinuswellenfunktion unabhängig ist, durchzuführen.

Während der vergangen Jahre wurden in der Arbeitsgruppe 5.5 Fertigungstechnologie der PTB ver-

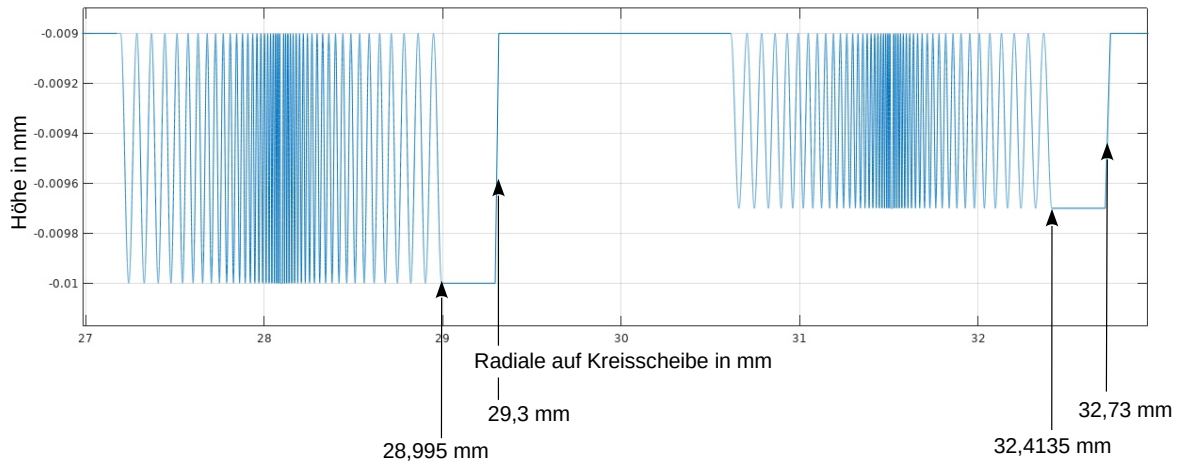

Abbildung 5: Radiale Position der Pseudochirpstrukturen entlang der Radialen auf der Kreisscheibe

schiedentlich Objekte mit unterschiedlichem Layout und Plandrehradius gefertigt. Bei dem zuletzt hergestellten Objekt wurden Pseudochirpstrukturen mit den Amplituden 1,0 μm und 0,7 μm gefertigt, die zwischen Plandrehradien von ca. 29 bis 32 mm liegen.

Der Winkel $\alpha_i(y, r_j)$ zwischen der Profillinie und der Radialen ergibt sich aus dem Versatz und dem radialen Abstand r_i der Extremalposition $x_{\mathrm{E},i}$ zum Mittelpunkt der Kreisscheibe

$$\alpha_i(y, r_j) = \arctan\left(\frac{y_k}{r_i}\right) \quad \text{mit} \quad r_i = r_j - \frac{1}{2}\lambda_1 - \frac{1}{2}\sum_{\nu=2}^{i}(\lambda_\nu + \lambda_{\nu-1}) \tag{3}$$

mit $j = 1, 2$ und mit $r_1 = 32{,}4135\,\mathrm{mm}$ für die 700 nm-Struktur und $r_2 = 28{,}9950\,\mathrm{mm}$ für die 1000 nm-Struktur am Fußpunkt der größten der +cos-Strukturen. Damit gilt für den Abstand zwischen zwei benachbarten Maxima

$$a_i = \frac{d_i}{\cos\left(\alpha_i(y_k, r_j)\right)}. \tag{4}$$

Das Diagramm in Abb. 4 rechts zeigt die Steigungen der Geraden a_i vs d_i als Funktion des Versatzes y. Diese Steigungen sind gleich dem Dehnungsfaktor, der von der Größe des Versatzes und dem Abstand der Strukturen vom Mittelpunkt der Kreisscheibe abhängt. Die blaue, durchgezogene Kurve zeigt den Steigungsverlauf für die +cos-Strukturen für $r_1 = 32{,}4135\,\mathrm{mm}$, also die mit der Strukturhöhe von 700 nm. Die schwarze, gestrichtelte Kurve zeigt den Steigungsverlauf für die +cos-Strukturen für $r_2 = 28{,}9950\,\mathrm{mm}$ wo die Strukturen mit der Höhe von 1000 nm beginnen. Abb. 5 zeigt die radialen Positionen r_1 und r_2 der Pseudochirpstrukturen entlang der Radialen auf der Kreisscheibe.

3 Messverfahren

Die Pseudochirpstrukturen wurden mit dem metrologischen Large-Range Rasterkraftmikroskop der Arbeitsgruppe 5.23 der PTB [3] in parallel zueinander angeordneten Profilschnitten in drei Bereichen gemessen, ein Bereich entlang der Radialen und zwei Bereiche mit ca. 5 mm Versatz, siehe Abb. 1 *rechts*. In jedem der drei Bereiche wurden auf jeder der beiden Strukturen, der mit 700 nm und der mit 1000 nm Höhe, jeweils 6 Profile in Abständen von 1 μm aufgenommen. Die Länge jedes Profils beträgt 2000 μm und die Abtastintervalle 0,005 μm.

Das Grundgerät des metrologischen Large-Range Rasterkraftmikroskops ist eine SIOS-Nanometermessmaschine, deren Wegmesssyteme interferometrisch messen und die derart angeordnet sind, dass sie abbéfehlerfrei messen. Sie sind über die Wellenlänge der Laser zurückgeführt. Der Krümmungsradius der Spitze der Sonde, eine Nanosensors PPP-NCLR-Sonde, ist kleiner als 10 nm, also sehr viel kleiner als die Unsicherheit der Formabweichung der Cosinusstrukturen. Die Unsicherheit des Messsystems ist sehr viel kleiner als die Unsicherheit der Methode zur Bestimmung der Geometrieparameter der Pseudochirpstrukturen. Die längenabhängige erweiterte Unsicherheit des Messsystems wird nach oben abgeschätzt mit

$$U(L) \;<\; 10\,\mathrm{nm} \;+\; 10^{-6}\,L \tag{5}$$

mit L für die Länge sowohl in vertikaler als auch lateraler Richtung, also für $L = a$ und $L = h$ in Nanometer, sowie für $L = \lambda$, $L = \sum_{i=1}^{23} \lambda_i$ und $L = x_\mathrm{E}$ in Nanometer.

4 Auswertemethode

Die Amplitude a_j, die Wellenlänge λ_i und die Lage der Extrema $x_{\mathrm{E},i}$ werden für jede der $i = 1, \ldots, 23$ diskreten Cosinuswellen einzeln, also unabhängig mittels der Methode der kleinesten Summe der Residuenquadrate bestimmt.

Für die positiven Wellen liegen die Positionen $x_{\mathrm{E},i}$ im Maximum der jeweiligen Cosinusfunktion und es wird ein positives Vorzeichen (Signum) $s = +1$ vor der Amplitude verwendet. Für die negativen Wellen liegen die Positionen $x_{\mathrm{E},i}$ im Minimum also ist entsprechend das Vorzeichen vor der Amplitude $s = -1$ negativ. Das Zielfunktional ist

$$\min_{\lambda_i, a_i, x_{\mathrm{E},i}, z_{0,i}} \left\{ \sum_{\nu \in N_j} \varepsilon_\nu^2 \right\} \quad \text{mit} \quad \varepsilon_\nu \;=\; z(x_\nu) \;-\; \left(s\, a_j \,\cos\!\left(\frac{2\pi}{\lambda_i} \left(x_\nu - x_{\mathrm{E},i} \right) \right) + z_{0,i} \right) \tag{6}$$

mit der Indexmenge N_i für die Daten, die zur i-ten Cosinuswelle gehören, also

$$N_i = \left\{ \nu \;\middle|\; x_{\mathrm{E},i} - \frac{1}{2}\lambda_i < x_\nu < x_{\mathrm{E},i} + \frac{1}{2}\lambda_i \right\}. \tag{7}$$

Zu jeder Welle i werden die Indexmengen N_i über die Nominalwerte der Wellenlängen λ_i und die Positionen r_1 und r_2 ermittelt. Es wird mit dem Ursprung der lateralen Scanachse begonnen, der manuell an die Übergangsstelle der Plateaulinie zur Cosinuswelle mit der größten Wellenlänge gelegt wird. Für jede nachfolgende Welle wird dann die Position der Vorgängerwelle verwendet. Die Qualität der Optimierung wird überprüft und ggf. noch ein bis zwei Mal iteriert mit neuer Indexmenge, die aus der gefitteten Position $x_{\mathrm{E},i}$ resultiert, und mit neuen Startwerten für die Parameter $\lambda_i, a_i, x_{\mathrm{E},i}, z_{0,i}$.

Dieser Ansatz gilt für die Profile, die auf der Radialen bzw. sehr dicht an der Radialen gemessen wurden. Für Profile, die um y parallel verschoben dazu liegen, müsste im Prinzip folgender Ansatz eingesetzt werden

$$\varepsilon \;=\; z(x) \;-\; \left(s\, a_j \,\cos\!\left(\frac{2\pi}{\lambda_i} \cos(\alpha(y, r_j, x)) \left(x - x_{\mathrm{E},i} \right) \right) + z_{0,i} \right) \tag{8}$$

wobei die Schreibweise $\alpha(y, r_j, x)$ bedeutet, dass der Winkel α Funktion der Position x in Scanrichtung, des Radius r_j und des Versatzes y ist. Wenn die Scanachse so gewählt wird, dass ihr Ursprung auf dem

Kreis mit Radius r_j liegt und die Achse von diesem Ursprung zum Kreismittelpunkt zeigt, dann gilt

$$\alpha(y, r_j, x) = \arctan\left(\frac{y}{r_j - x}\right). \tag{9}$$

Die Wellenlängen sind damit nicht konstant. Sie hängen nicht nur vom dem Versatz y der lateralen Position $r_i = r_j - \frac{1}{2}\lambda_1 - \frac{1}{2}\sum_{\nu=2}^{i}(\lambda_\nu + \lambda_{\nu-1})$, Gl. (3), der Struktur ab, sondern variieren innerhalb einer Cosinuswelle in Abhängigkeit von x als Funktion $\tilde{\lambda}_i : x \mapsto \tilde{\lambda}_i(x)$ mit

$$\tilde{\lambda}_i(x) = \frac{\lambda_i}{\cos\left(\arctan\left(\frac{y}{r_i - x}\right)\right)}. \tag{10}$$

Um die Auswertung zu vereinfachen, wurde eine große Kreisscheibe verwendet, auf der die Strukturen mehr als 26000μm vom Mittelpunkt entfernt liegen. Die äußerten Cosinusstrukturen liegen bei $r_1 = 32413{,}5\,\mu$m für den Pseudochirp mit $a_1 = 0{,}35\,\mu$m und bei $r_2 = 28995\,\mu$m für den Pseudochirp mit $a_2 = 0{,}50\,\mu$m. Die größte Wellenlänge λ_1 hat den Wert $\lambda_1 = 91\,\mu$m. Das Intervall für $r_2 - x$ ist damit $[28904\,\mu\text{m}, 28995\,\mu\text{m}]$. Für einen Versatz von $5000\,\mu$m ändert sich der Winkel α zwischen 0,171291 rad und 0,170764 rad und der Cosinus des Winkels $\cos(\alpha)$ zwischen 0,985366 und 0,985455. Der relative Unterschied liegt unterhalb von 10^{-4}, so dass auch für die Profile, die um 5 mm versetzt liegen, näherungsweise das Zielfunktional aus Gl. (6) mit konstanter Wellenlänge angesetzt wird.

Aus den Positionen der Extrema $x_{\mathrm{E},i}$ wird per Regressionsrechnung eine mittlere gemeinsame Steigung $c_1 = 1/\cos(\alpha)$ aus der Regressiongeraden

$$x_{\mathrm{E},i} - x_{\mathrm{E},i-1} = c_1 \frac{1}{2}(\lambda_i + \lambda_{i-1}) + c_0 \tag{11}$$

berechnet, wobei die Differenz der aus den Messungen bestimmten Extremalpositionen $x_{\mathrm{E},i} - x_{\mathrm{E},i-1}$ als Regressand und die Nominalwerte der Mittel der Wellenlängenpärchen $\frac{1}{2}(\lambda_i + \lambda_{i-1})$ als Regressor eingesetzt werden. Rechnerisch liefert Gl. (8) mit Gl. (9) bestimmten Werten für $x_{\mathrm{E},i} - x_{\mathrm{E},i-1}$ für einen Versatz von $y = 5000\,\mu$m, für die Position $r_2 = 28995\,\mu$m und die 23 Cosinuswellen, die sich an die Position r_2 anschließen, folgende Dehnungsfaktoren c_1

$x =$	α/rad	c_1
r_2	0,170764	1,014759
$r_2 - \sum_{i=1}^{23}\lambda_i$	0,176068	1,015703

Die Mittelung erfolgt also über einen Bereich von variierenden Werten für die Dehnungsfaktoren $c_1 = 1/\cos(\alpha) \in [1{,}014759; 1{,}015703]$, die sich größenordnungsmäßig nur um rund ein Promille unterscheiden. Für die Auswertung werden die Ursprünge r_1 und r_2 manuell in den gemessenen Profilen mit einer Unsicherheit von $< 2\,\mu$m am Übergang der Plateaulinien zur größten Cosinuswelle bestimmt. Für die Pseudochirpstrukturen mit negativem Cosinus, die weiter zum Kreismittelpunkt hin liegen, liegt die Cosinuswelle mit der größten Wellenlänge am weitesten innen. Hier wird der Ursprung auf die nach innen zeigende Seite gelegt und die Scanachse von innen nach außen gewählt, so dass sich die Berechnung auch hierbei von der größten Wellenlänge zur kleinsten vorarbeitet.

Das Ergebnis stellt die aus den Optimierungsrechnungen gewonnen Schätzwerte der Parameter dar,

- die Positionen der Extrema $x_{\mathrm{E},i}$,

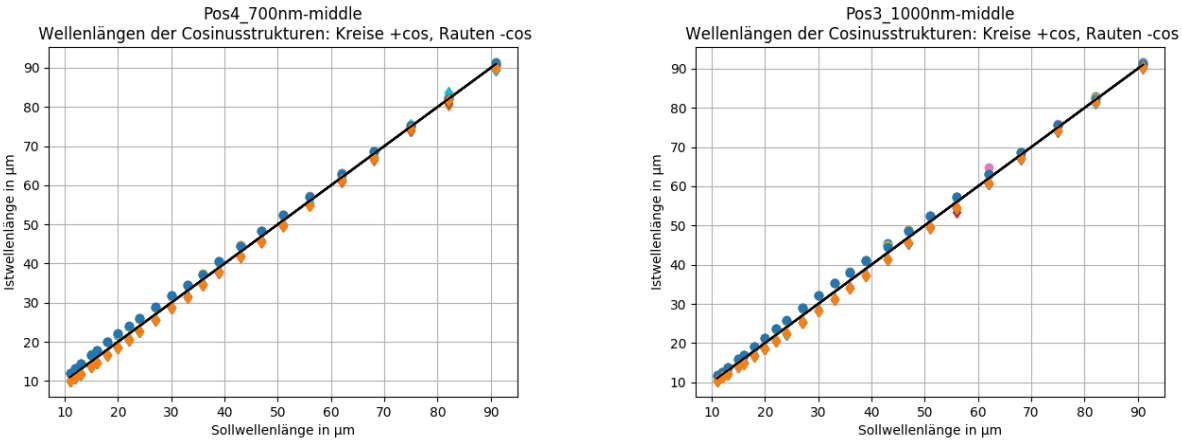

Abbildung 6: Experimentell bestimmte Wellenlängen aufgetragen über die nominalen Wellenlängen: Die Geraden repäsentieren Nominalwerte vs. Nominalwerte; die Kreise oberhalb der Geraden zeigen das Ergebnis für die negativen Cosinuswellen, die Täler; die Rauten das Ergebnis der positiven Cosinuswellen, der Berge. Das Diagramm *links* zeigt das Resultat für die Pseudochirpstruktur mit 700 nm Höhe und *rechts* das für die 1000 nm hohe Struktur.

- die Wellenlängen λ_i, die für die von der Radialen parallel versetzten Profile entsprechend um den Dehnungsfaktor c_1 größer sind,
- die Dehnungsfaktoren $c_1 = 1/\cos(\alpha)$,
- die Amplituden a_i,
- die Strukturhöhen h_i.

Während die Amplituden a_i aus der Optimierung mit dem in Gl. (6) definierten Zielfunktional berechnet werden, werden die Strukturhöhen davon unabhängig ermittelt. Die Formabweichungen erfordern, dass die Höhen direkt aus dem Abstand des höchsten Punktes der Berggipfel und des niedrigsten Punktes der Talsohle berechnet werden. Dazu werden die obersten Gipfelbereiche und die untersten Talbereiche verwendet, jeweils mit einer Breite von 3 μm eingegrenzt. Die hochfrequente Welligkeit wird mittels Polynomanpassung geglättet. Artefakte, die vermutlich durch Ausbrüche oder ungünstiges Abfließen des Spans entstanden sind, erfordern, dass ein Polynom höheren Grades, und zwar 4. Grades, verwendet wird.

Der Abstand der Gipfelspitze von den beiden benachbarten Talsohlen im Falle der positiven Cosinuswellen liefert den Wert für die Strukturhöhe h. Für den Fall der negativen Cosinuswellen ist dies der Abstand des tiefsten Punktes der Talsohle zu ihren beiden benachbarten Gipfelspitzen.

5 Experimenteller Befund zur Formabweichung der Strukturen

Die rasterkraftmikroskopischen Messungen zeigen, dass die relative Lage der Extremalpositionen der Cosinuswellen im Rahmen von zehntel Mirkometern mit den Nominalwerten übereinstimmt. Die Breite der Berge ist schmaler als nominal, was sich darin zeigt, dass die Wellenlängen der positiven Cosinuswellen zu klein sind. Die Breite der Täler ist breiter, das heißt, dass die Wellenlängen der negativen Cosinuswellen im Vergleich zu den Nominalwerten zu groß sind. Abb. 6 zeigt Diagramme, die die ex-

perimentell bestimmten Wellenlängen aufgetragen über die nominalen Wellenlängen darstellen. Für jedes der sechs Profile wurde eine unterschiedliche Farbe gewählt. Da die meisten Profile die gleichen Resultate liefern, liegen die Symbole übereinander und nur vereinzelte Ausreißer sind farblich abgesetzt zu sehen. Die vier Tabellen 1 bis 4 mit den Ergebnissen im Überblick zeigen zu jeder der Einzelwellen die durch Anpassung der Cosinusfunktion gemäß Gl. (6) ermittelten Wellenlängen (λ_{exp}), die peak-peak-Amplituden ($2a$) und die Positionen der Extrema x_{E}, sowie die Strukturhöhen h. Aufgrund der Formabweichung können nicht die peak-peak-Amplituden als Strukturhöhen verwendet werden.

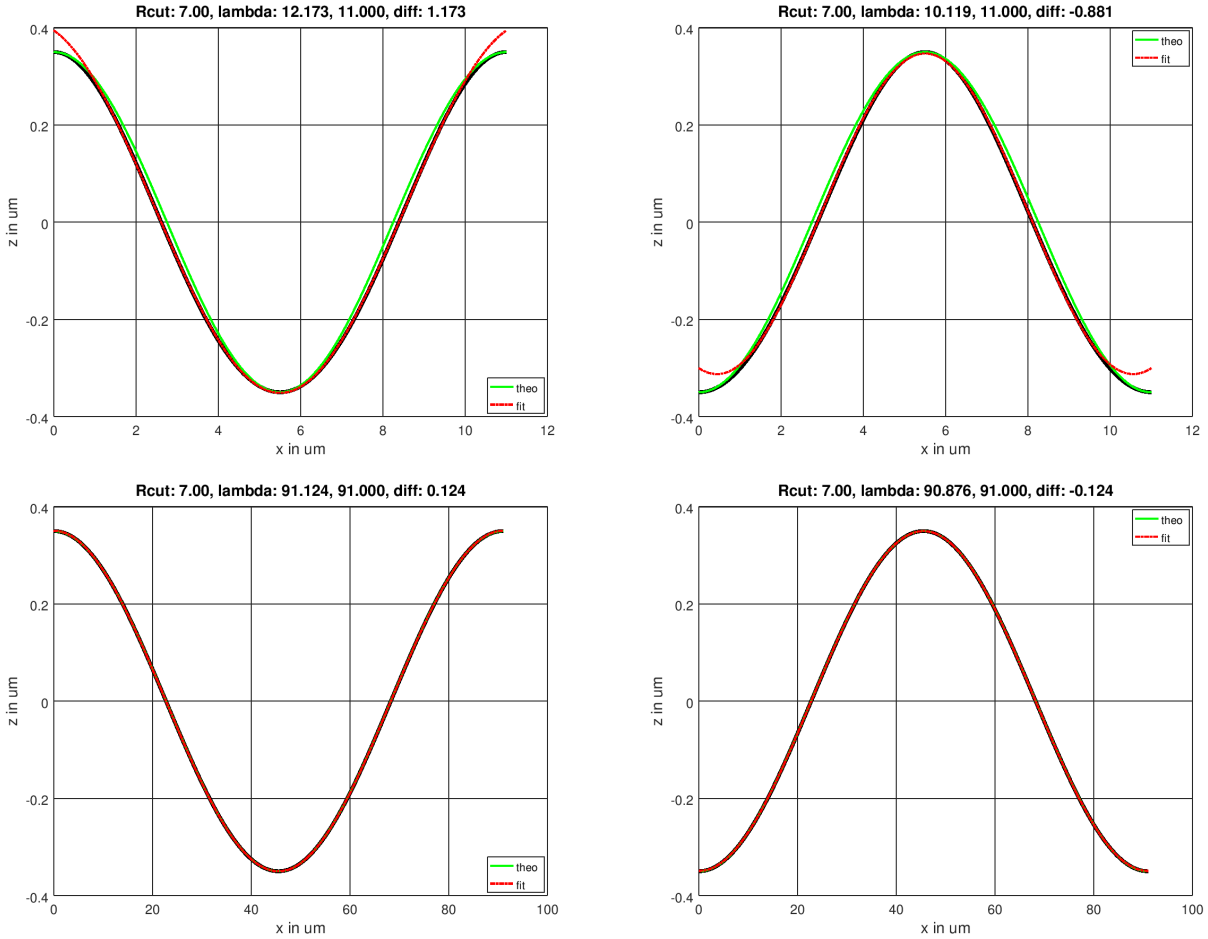

Abbildung 7: Berechnete Formabweichungen: Für eine Schneide mit 5,6 μm Schneidkantenradius wie für den Steuerdatensatz der Werkzeugmaschine dilatiert und anschließend zur Nachbildung des Schneidprozesses mit einem Schneidkantenradius von 7 μm rechnerisch erodiert.

Die Formabweichung, die sich in dem systematischen Effekt zeigt, dass die Berge schmaler und die Berge breiter sind, lässt vermuten, dass der Schneidkantenradius größer war als erwartet. Vor der Fertigung wurde der Schneidkantenradius mittles Konfokalmikroskopie ausgemessen und ein Wert von 5,6 μm bestimmt. Dieser Wert wurde der Dilatationsberechnung für den Steuerdatensatz zugrunde gelegt.

Mit der Schneide wurde die Kreisscheibe vor der Strukturierung vorbearbeitet, um eine hochgenau plane Ebene zu erhalten. Es wird vermutet, dass dabei soviel Verschleiß eingetreten ist, dass die Schneidkante bei der anschließenden Fertigung der Kontur der Cosinusstrukturen die beobachtete Formabweichung verursacht hat.

Abb. 7 zeigt berechnete Formabweichungen. Die Berechnungen für den Steuerdatensatz der Werkzeugmaschine wurden für eine Schneide mit 5,6 μm Schneidkantenradius durch die morphologische

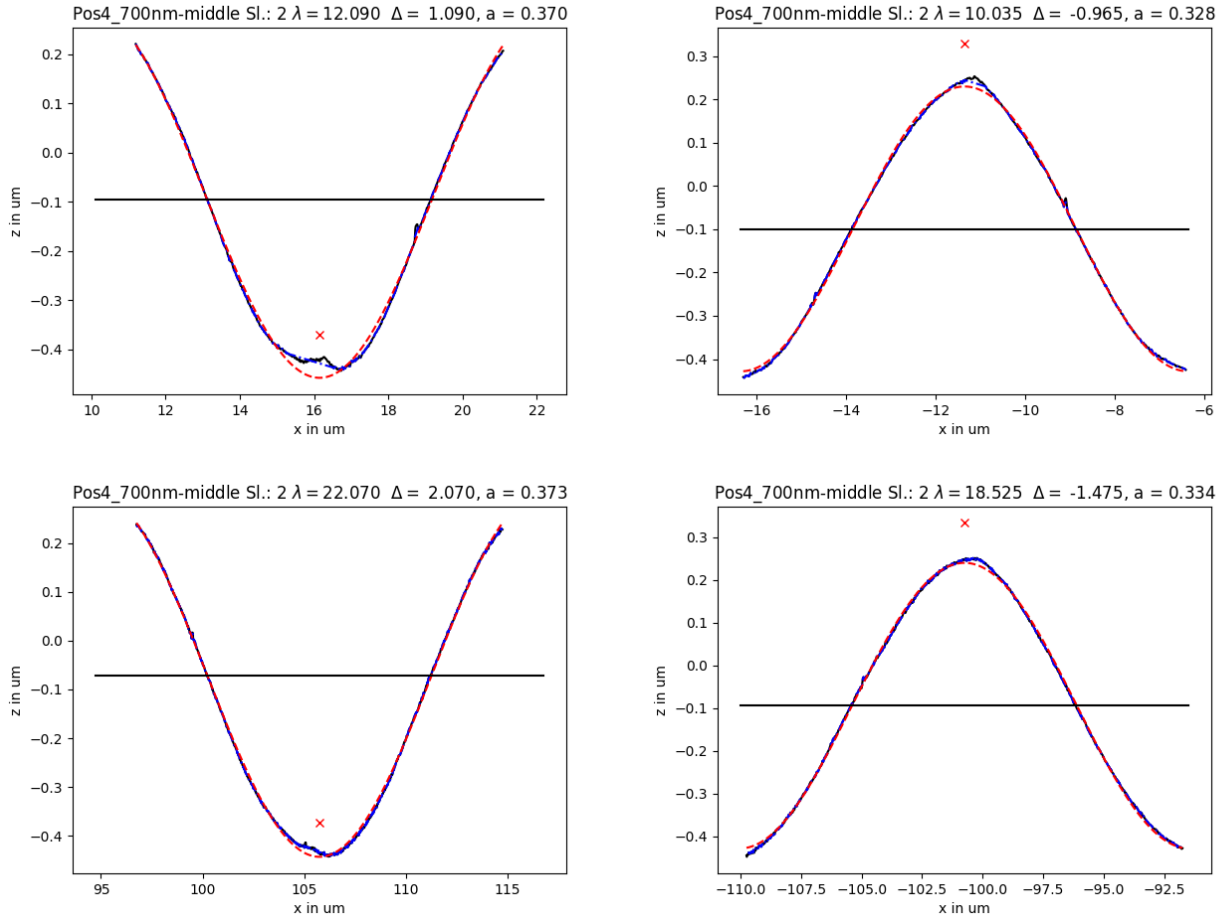

Abbildung 8: Formabweichungen und Verformungen einzelner Cosinusstrukturen mit den Wellenlängen $\lambda = 11$ und $20\,\mu$m gemessener Profile.

Rechenoperation der Dilatation durchgeführt.

Für die Abschätzung der schneidenbedingten Formabweichung werden aus dem Steuerdatensatz synthetische Datensätze zur Nachbildung des Schneidprozesses erstellt.

Die folgende Tabelle zeigt die durch Optimierungsrechnung ermittelten Wellenlängen der synthetischen Datensätze, die durch die morphologische Operation Erodieren mit einem Schneidkantenradius von $r_{\text{cut}} = 7\,\mu$m und einem Radius von $r_{\text{cut}} = 8\,\mu$m gerechnet wurden.

λ	$11\,\mu$m		$91\,\mu$m	
r_{cut}	neg.	pos.	neg.	pos.
$7\,\mu$m	$12{,}17\,\mu$m	$10{,}12\,\mu$m	$91{,}12\,\mu$m	$90{,}88\,\mu$m
$8\,\mu$m	$13{,}24\,\mu$m	$9{,}63\,\mu$m	$91{,}21\,\mu$m	$90{,}79\,\mu$m

Die Cosinuswellenparameter werden gemäß Gl. (6) ermittelt. Es ist anhand der Diagramme für Wellenlänge von $\lambda = 11\,\mu$m erkennbar, dass die Formabweichung nicht nur zu veränderten Wellenlängen führt, sondern auch dazu führt, dass die Amplituden der Cosinusanpassung von der Strukturhöhe abweichen.

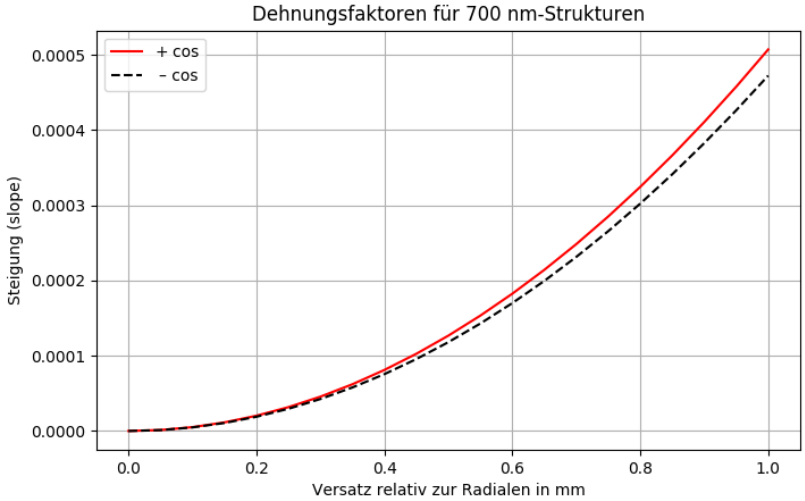

Abbildung 9: Dehnungsfaktor für Parallelverschiebung relativ zur Radialen bis zu 1 mm.

Zusätzlich zu den systematischen Formabweichungen durch den größeren Schneidenradius werden Verformungen und Defekte beobachtet insbesondere in den Tälern, siehe Abb. 8.

Die in den Tabellen 1 bis 4 aufgeführten Abweichungen der Wellenlänge $\Delta\lambda$ sind ein Beitrag zur Unsicherheit der Wellenlängen, der aus der Unsicherheit darüber, wie gut die Profile entlang der Radialen ausgerichtet werden, resultiert. Es wird hier ein Versatz von 1 mm angesetzt und somit der Dehnungsfaktor $c_1 = 1.0005$ aus Abb. 9 zugrunde gelegt und die Wellenlängenabweichung mit

$$\Delta\lambda = \lambda\left(c_1 - \frac{1}{c_1}\right) \tag{12}$$

abgeschätzt.

Für den Dehnungsfaktor c_1 wird gemäß Gl. (11) die Steigung der Regressionsgeraden zu den lateralen Positionen x_E der Extrema, der experimentell bestimmten als Funktion der nominellen, verwendet.

Die Abbn. 10 und 11 zeigen die Abweichungen der experimentell bestimmten zu den nominellen lateralen Positionen der Extrema der Profile sowie die Geraden, die sich aus den auf der Regressionsgeraden zu Gl. (11) liegenden Werten abzüglich der Nominalwerte der Positionen der Extrema ergeben. Die Dehnungsfaktoren c_1 sind jeweils mit den Bezeichnungen *slope(n)* für die negativen Cosinuswellen und *slope(p)* für die positiven Cosinuswellen in der Diagrammüberschrift aufgeführt. Bei den Profilen entlang der Radialen weichen die Steigungswerte c_1 bis zu 0,7 Promille ab. Die Werte der Steigungen der Profile mit rund 5 mm Versatz mit $c_1 = 0{,}010 \ldots 0{,}018$ passen zu den in Abb. 4 gezeigten Berechnungen.

6 Verfahren zur Unsicherheitsbestimmung

Jeder der Parameter a, h und x_E, λ wird von den Formabweichungen und von der Unsicherheit der Ausrichtung entlang der Radialen beeinflusst. Die aus dem größeren Schneidkantenradius hervorgerufene Formabweichung hat auf die Cosinuswellen mit den kleineren Wellenlängen einen stärkeren Einfluss als auf die mit größeren Wellenlängen. Die Formabweichungen, die als Artefakte insbesondere in den

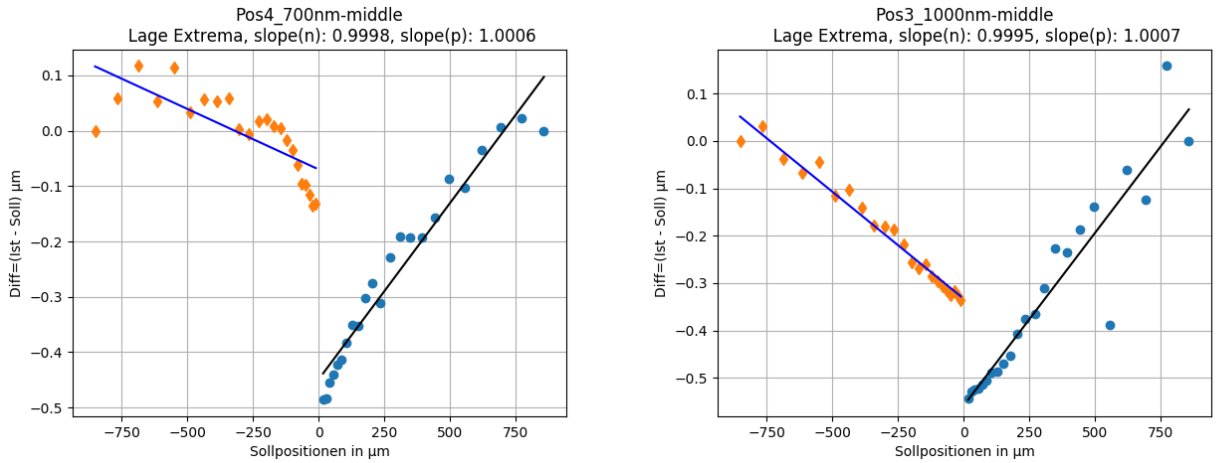

Abbildung 10: Abweichungen der experimentell bestimmten zu den nominellen lateralen Positionen der Extrema der Profile entlang der Radialen; die durchgezogenen Linien sind die auf den Regressionsgeraden liegenden Werte abzüglich der nominellen Werte, der Regressandenwerte; die mit *slope* bezeichneten Steigungswerte im Titel der Diagramme sind die Werte der Faktoren c_1. *Links:* Ergebnis der 700 nm-Strukturen, *rechts:* Ergebnis der 1000 nm-Strukturen.

Tälern beobachtet werden und von denen vermutet wird, dass sie durch Materialinhomogenitäten und ungünstiges Spanabfließen verursacht wurden, beeinträchtigen die Anpassung der Cosinusfunktion bei den Strukturen mit kleinen Wellenlängen. Sie beeinträchtigen bei allen Strukturen die Bestimmung der Strukturhöhen. Ein weiterer Effekt, der beobachtet wird, ist die Qualität der Oberfläche. Hier zeigen sich hochfrequente regelmäßige Strukturen, die sich wie Rauheit oder Rauschen darstellen. Die Effekte werden untergliedert als

Schneide: langwellige Formabweichung durch Schneidenradius,

Artefakt: kurzwellige Formabweichung durch Materialartefakte im Bereich weniger Mikrometer,

Schwingung: hochfrequente Störungen mit Wellenlängen in der Größenordnung von zehntel und hundertstel Mikrometern und Amplituden von 5 bis 15 Nanometern.

Die erweiterten Unsicherheiten U der jeweiligen Parameter beruhen zum großen Teil auf nicht-stochastischen Prozessen. Den Abweichungen des Profils von Design liegen Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen zugrunde, die nicht einfach als normalverteilt oder t-verteilt angenommen werden können. Außerdem sind die indirekten Messgrößen implizit abhängig von den direkten Messgrößen, die durch die Wertepaare $x_k, z(x_k)$ des Profils $z(x)$ mit $k = 1, \ldots, n_{\text{scan}}$ und n_{scan} für die Anzahl der gescannten Datenpunkte gegeben sind.

Wegen des nicht nicht-stochastischen Charakters der Abweichungen der direkten Messgröße *Profil*, werden für die Abweichungen deterministische Modelle aufgestellt.

Aus beiden Gründen, nicht-stochastische Abweichungsursachen und implizite indirekte Messgrößen λ, x_{E} und h, ist die Unsicherheitsfortpflanzung gemäß GUM 1995/2008 JCGM 100 nicht anwendbar. Es ist deshalb erforderlich, nach den in den neueren Ergänzungsdokumenten des GUM spezifizierten Methoden zu verfahren, *Supplement* 1 (JCGM 101:2008) und *Supplement* 2 (JCGM 102:2011).

Die erweiterten Unsicherheiten U werden somit ermittelt, indem synthetische Profile generiert werden für verschiedene Schneidkantenradien (*Schneide*), für Formabweichungen (*Artefakt*) der Gestalt eines

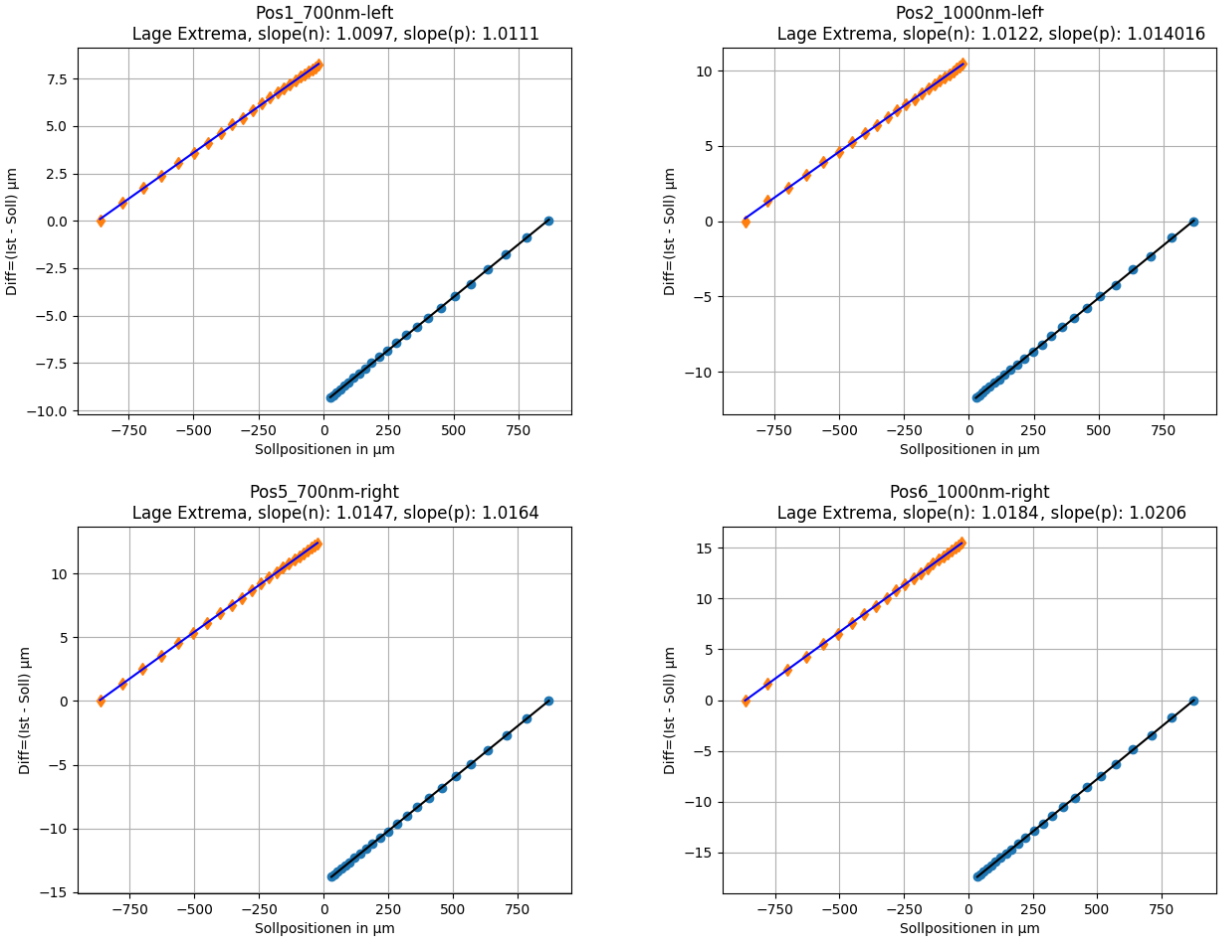

Abbildung 11: Abweichungen der experimentell bestimmten zu den nominellen lateralen Positionen der Extrema der Profile mit Versatz; die durchgezogenen Linien sind die auf den Regressionsgeraden liegenden Werte abzüglich der nominellen Werte, der Regressandenwerte; die mit *slope* bezeichneten Steigungswerte im Titel der Diagramme sind die Werte der Faktoren c_1. *Links:* Ergebnis der 700 nm-Strukturen, *rechts:* Ergebnis der 1000 nm-Strukturen, *oben* um ca. 5 mm nach oben in y-Richtung verschoben und *unten* um ca. 5,2 mm nach unten in y-Richtung verschoben.

kubischen Polynoms, dessen Position relativ zur Position des Extremums variiert wird und durch die Superposition von Sinusschwingungen simulierte Störungen (*Schwingung*).

Schneide: Verwendete Schneidkantenradien sind: 6,0; 6,5; 7,0; 7,5; 8,0 μm

Artefakt: Durch ein kubisches Polynom

$$z_{\mathrm{A}}(x) \;=\; \sum_{\nu=0}^{3} b_\nu \, x^\nu \tag{13}$$

repräsentiert, das durch vier Punkte festgelegt wird:

$x =$	$-x_{\mathrm{p}}$	$-0{,}7x_{\mathrm{p}}$	$0{,}7x_{\mathrm{p}}$	x_{p}
$z_{\mathrm{A}}(x) =$	0	$-z_{\mathrm{p}}$	z_{p}	0

Es wurden zweierlei Polynome verwendet eins mit $x_{\mathrm{p}} = 0{,}7\,\mu$m und $z_{\mathrm{p}} = 0.02\,\mu$m (Fall A) und das andere mit $x_{\mathrm{p}} = 0{,}7\,\mu$m und $z_{\mathrm{p}} = -0.017\,\mu$m (Fall B).

Das Polynom $z_{\mathrm{A}}(x)$ wird innerhalb des Intervals

$$[-x_{\mathrm{p}} + x_{\mathrm{E}} + x_{\mathrm{shift}}, x_{\mathrm{p}} + x_{\mathrm{E}} + x_{\mathrm{shift}}]$$

dem Profil superponiert, wobei x_{shift} Positionen sind, die innerhalb eines Mikrometers variiert werden.

Schwingung: Dem Profil werden hochfrequente Störungen superponiert, die repräsentiert werden durch

$$z_{\mathrm{S}}(x) \;=\; \sum_{\nu=1}^{3} a_\nu \, \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_\nu} x + \varphi_\nu\right) \tag{14}$$

mit Phasenwerten, die beliebige, gleichverteilte Zufallszahlen zwischen $-\pi$ und π sind und mit folgenden Wellenlängen und Amplituden:

$\nu =$	1	2	3
$\lambda_\nu =$	0,06 μm	0,45 μm	20,0 μm
$a_\nu =$	0,0060 μm	0,0035 μm	0,0025 μm

6.1 Unsicherheit der Strukturhöhe

Die Bestimmung der Strukturhöhen aus den 3 μm breiten Intervallen um die Extremalpositionen, deren Extrema jeweils als Extremum eines Polynoms vierten Grades berechnet werden, ist unabhängig vom Schneidkantenradius. Die Einpassung eines Polynoms vierten Grades ermöglicht durch dessen glättende Wirkung eine Unabhängigkeit von den hochfrequenten Schwingungen. Die Unsicherheit der auf diese Weise ermittelten Strukturhöhen wird von den Artefakten (*Artefakt*) im Bereich der Gipfel und Mulden verursacht. Die Größe des Schneidkantenradius spielt für die Strukturhöhen, die auf diese Weise ermittelt werden, keine Rolle.

Die Abbn. 14 und 13 zeigen die Abweichung Δh der Strukturhöhe von der Nominalhöhe als Funktion der Wellenlänge (Breite) der Cosinuswellenstrukturen. Dabei sind die mit Rautensymbolen dargestellten Ergebnisse aus Polynomen für Fall A mit $x_{\mathrm{p}} = 0{,}7\,\mu$m und $z_{\mathrm{p}} = 0.02\,\mu$m gewonnen worden und die mit Kreissymbolen aus den Polynomen für Fall B mit $x_{\mathrm{p}} = 0{,}7\,\mu$m und $z_{\mathrm{p}} = -0.017\,\mu$m. Die graphisch dargestellten Werte gelten für Positionen der Polynome mit $x_{\mathrm{shift}} = -0{,}9\,\mu$m (rote Symbole) und

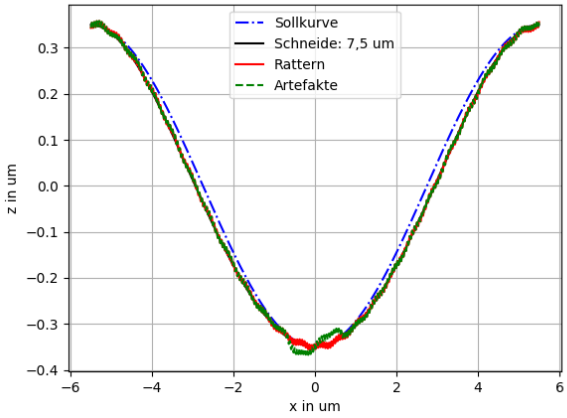

Abbildung 12: Synthetisch generierte – cos-Welle mit Artefakt in der Mulde realisiert als kubisches Polynom (*Artefakt*). Die durch Schwingungen überlagerten hochfrequenten Störungen, die eventuell verursacht durch Rattern beim Fertigungsprozess entstehen, sind in der Legende des Diagramms mit *Rattern* bezeichnet, im Text dieses Protokolls mit *Schwingung*.

$x_{\text{shift}} = 0{,}9\,\mu\text{m}$ (schwarze Symbole).

Die durch blaue Linien verbundenen Daten zeigen die Wurzel der Summe von Abweichungsquadraten

$$s_h(\lambda) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{p\in\{\text{A,B}\};x_{\text{shift}}\in X} \Delta h(\lambda, p, x_{\text{shift}})^2} \tag{15}$$

wobei $\Delta h(\lambda, p, x_{\text{shift}})$ bedeutet: Abweichung der Höhen Δh als Funktion der Strukturwellenlängen λ, als Funktion der Art des Polynoms p mit $p \in \{\text{A}, \text{B}\}$, symbolische Schreibweise für die beiden Polynome Fall A und Fall B, und als Funktion von x_{shift} aus der Menge $X = \{-1{,}0\,(0{,}1)\,0{,}9\}$ in μm. Dabei ist n die Anzahl der Δh für die unterschiedlichen Kombinationen aus den beiden p und den 20 verschiedenen Werten für x_{shift}, also $n = 40$. Die daraus resultierende Unsicherheit der Strukturhöhe h wird daraus mit $0{,}006\,\mu$m abgeschätzt. Die aus den Messungen ermittelten Höhen weichen für einzelne Cosinusstrukturen jedoch deutlich stärker ab. Die durch die Begrenztheit der Fertigung entstandenen Störungen (*Artefakt* mit Amplituden im Bereich von bis zu $0{,}02\,\mu$m und *Schwingung* mit Gesamtamplituden von bis zu $0{,}013\,\mu$m) sowie weitere Fertigungsabweichungen führen dazu, dass Höhen bis zu $0{,}04\,\mu$m von der Nominalhöhe abweichen. Deshalb wird die Unsicherheit von h abgeschätzt mit

$$U = 0{,}04\,\mu\text{m}. \tag{16}$$

6.2 Unsicherheit der Wellenlängen der Strukturen

An jede einzelne Cosinuswelle wird durch Optimierungsrechnung gemäß Zielfunktional Gl. (6) eine Cosinusfunktion eingepasst, deren Parameter die Strukturwellenlänge λ, die Position des Extremums der Cosinuswelle x_{E} und die Amplitude a sind. Die Strukturwellenlänge λ wird direkt von der Breite der Struktur beeinflusst. Wird durch einen zu großen Schneidkantenradius mehr vom Material herausgeschnitten als bei der Berechnung der Steuerdaten einkalkuliert war, so werden die Berge schmaler und die Täler breiter. Schmale Berge bedeuten für die + cos-Strukturen, dass die Strukturen schmaler sind und folglich die Wellenlänge kleiner wird als per Zeichnung vorgegeben. Breite Täler bedeuten für die – cos-Strukturen, dass die Strukturen breiter sind und folglich die Wellenlänge größer wird als per

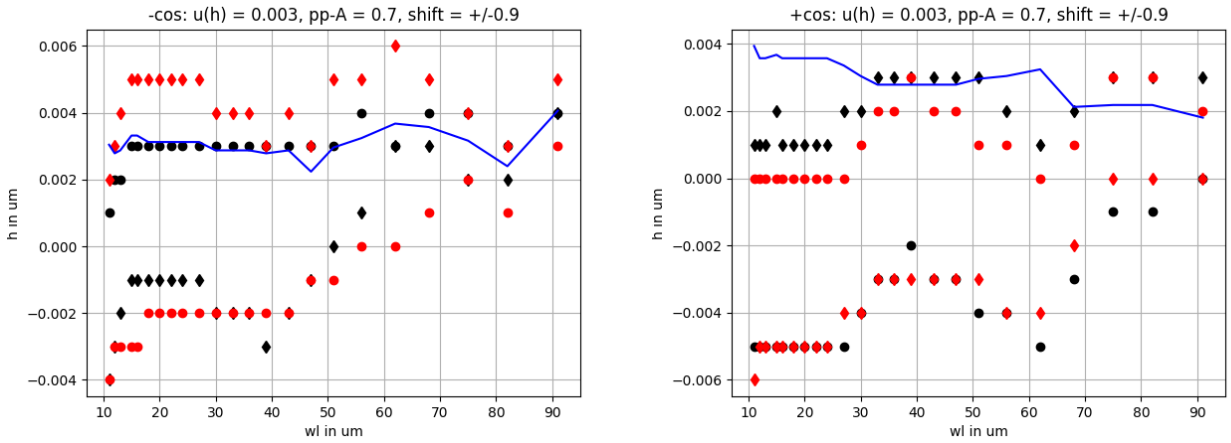

Abbildung 13: Abweichung von der Nominalhöhe als Funktion der Wellenlänge der Cosinuswellenstrukturen mit peak-peak-Amplitude sowie nominaler Höhe 0,7 μm: Rautensymbolen für Polynom Fall A mit x_p = 0,7 μm und z_p = 0.02 μm; Kreissymbole für Polynomen Fall B mit x_p = 0,7 μm und z_p = −0.017 μm; rote Symbole für Position des Polynoms x_shift = −0,9 μm; schwarze Symbole für x_shift = 0,9 μm; *links:* − cos-Strukturen; *rechts:* + cos-Strukturen.

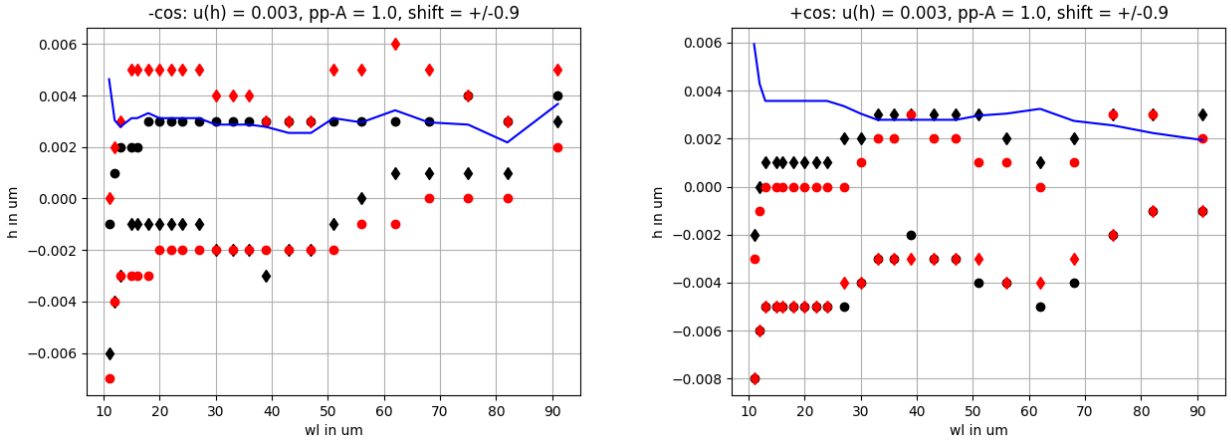

Abbildung 14: Abweichung von der Nominalhöhe als Funktion der Wellenlänge der Cosinuswellenstrukturen mit peak-peak-Amplitude sowie nominaler Höhe 1,0 μm: Rautensymbolen für Polynom Fall A mit x_p = 0,7 μm und z_p = 0.02 μm; Kreissymbole für Polynomen Fall B mit x_p = 0,7 μm und z_p = −0.017 μm; rote Symbole für Position des Polynoms x_shift = −0,9 μm; schwarze Symbole für x_shift = 0,9 μm; *links:* − cos-Strukturen; *rechts:* + cos-Strukturen.

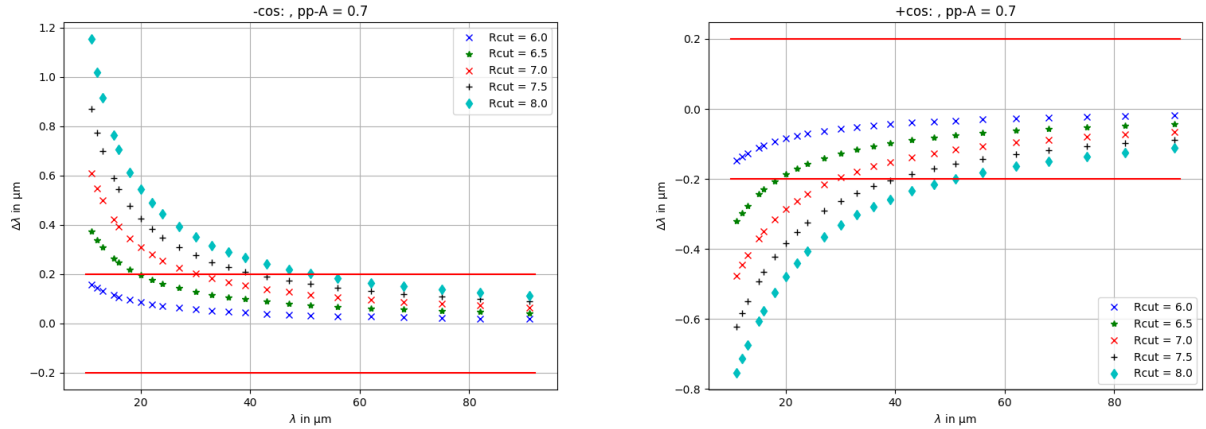

Abbildung 15: Abweichungen der Strukturwellenlängen von der Nominalwellenlänge als Funktion der Wellenlänge der Cosinuswellenstrukturen mit peak-peak-Amplitude sowie nominaler Höhe 0,7 μm für unterschiedliche Schneidkantenradien R_{cut}; *links:* − cos-Strukturen; *rechts:* + cos-Strukturen.

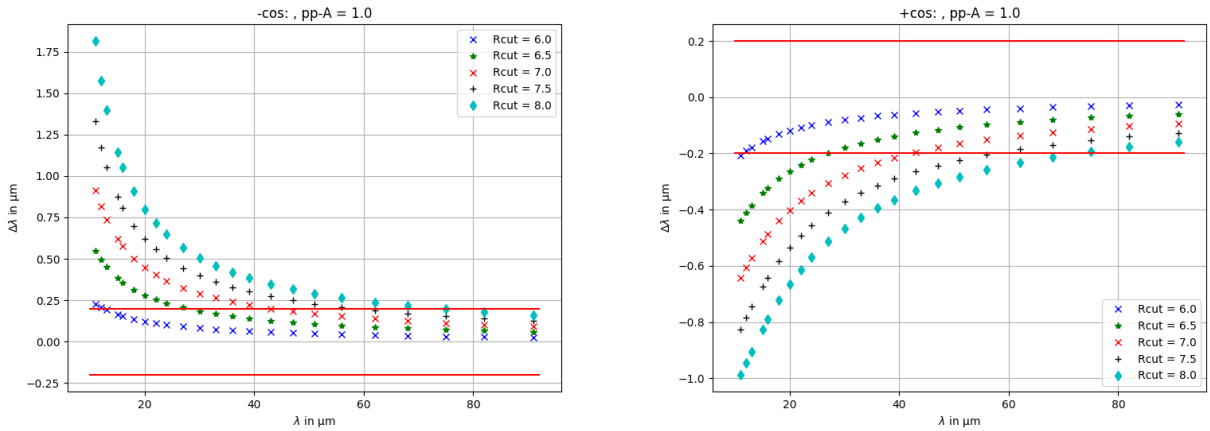

Abbildung 16: Abweichungen der Strukturwellenlängen von der Nominalwellenlänge als Funktion der Wellenlänge der Cosinuswellenstrukturen mit peak-peak-Amplitude sowie nominaler Höhe 1,0 μm für unterschiedliche Schneidkantenradien R_{cut}; *links:* − cos-Strukturen; *rechts:* + cos-Strukturen.

Zeichnung vorgegeben. Abbn. 7 und 8 zeigen diesen Effekt. Zur Untersuchung des Unsicherheitseinflusses dieses Effektes wurden synthetische Profile mit folgenden Schneidkantenradien R_{cut} generiert.

$$R_{\text{cut}}: \quad 6{,}0 \quad 6{,}5 \quad 7{,}0 \quad 7{,}5 \quad 8{,}0\,\mu\text{m}$$

Abbn. 15 und 16 zeigen die berechneten Abweichungen der Strukturwellenlängen. Die Berechnungen beruhen auf morphologischen Operationen, die auf die Cosinuswellenprofile angewendet wurden, zunächst die Dilatation für einen Schneidkantenradius von 5,6 μm mit nachfolgender Erosion mit den oben aufgelisteten Schneidkantenradien R_{cut}.

Werden den aus den morphologischen Operationen erhaltenen Profilen die Störungen *Artefakt* und *Schwingung* superponiert, wird die Optimierungsberechnung der Einpassung der Cosinusfunktion wesentlich unsicherer. Abb. 17 zeigt für dieselben Störungen zweierlei Ergebnisse zu zweierlei Sätzen von

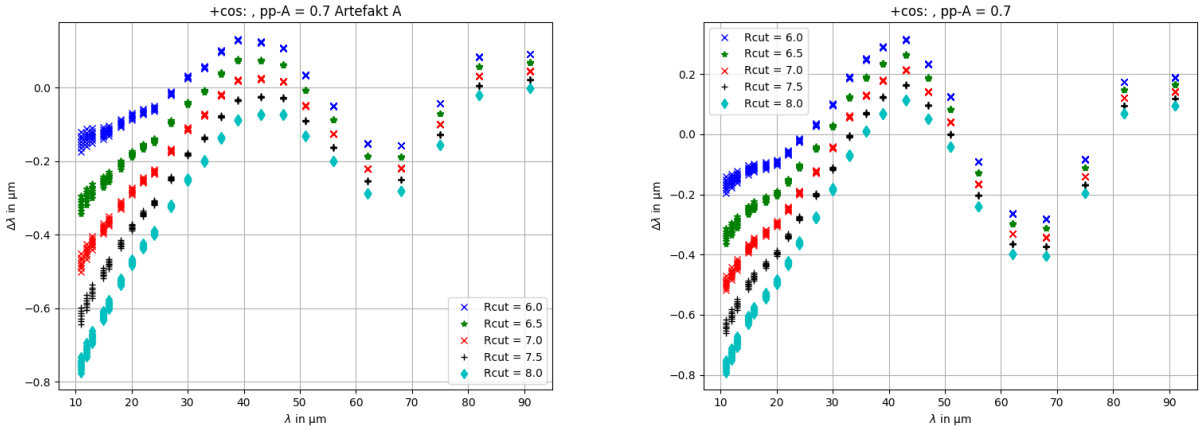

Abbildung 17: Abweichungen der Wellenlängen +cos-Strukturen von der Nominalwellenlänge als Funktion der Wellenlänge der Cosinuswellenstrukturen mit peak-peak-Amplitude sowie nominaler Höhe 0,7 μm für unterschiedliche Schneidkantenradien R_{cut} und mit superponiert Störungen *Artefakt* und *Schwingung* für unterschiedliche Startwerte zur Einpassung der Cosinusfunktion.

Startwerten für die Einpassung etwas unterschiedliche Resultate. Es zeigt sich eine Unsicherheit von bis zu 0,4 μm.

Ein Vergleich der Differenzen zwischen aus den gemessenen Profilen bestimmten Wellenlängen der Strukturen und den entsprechenden Nominalwellenlängen mit der Differenz zwischen den aus den simulierten Profilen bestimmten Wellenlängen der Strukturen und den entsprechenden Nominalwellenlängen zeigt, dass die Wellenlängenermittlung Abweichungen um 1 μm aufweisen kann.

Die resultierende Unsicherheit der Strukturwellenlängen λ wird daraus abgeschätzt mit

$$U = 1\,\mu\text{m}. \tag{17}$$

6.3 Unsicherheit der Positionen der Strukturen

Als Position der +cos-Strukturen wird die jeweilige Lage des Maximums der Cosinuswelle und als Position der −cos-Strukturen die jeweilige Lage des Minimums der Cosinuswelle bestimmt, die ebenfalls einer der Parameter der Cosinusfunktion ist, die durch Optmierungsrechnung eingepasst wird. Der nominale Abstand zwischen zwei benachbarten Extrema, zwischen der i-ten Cosinuswelle und der benachbarten Welle $i+1$ ist die Summe der beiden halben nominalen Wellenlängen:

$$x_{\text{E},i+1} - x_{\text{E},i} = \frac{1}{2}\left(\lambda_{i+1} + \lambda_i\right) \tag{18}$$

Für die Auswertung wird mit der größten Struktur, der Cosinuswelle mit $\lambda_1 = 91\,\mu$m begonnen. Diese Position wird als Anfangsposition auf Null gesetzt, sowohl für die gemessene als auch für die nominale, so dass $x_{\text{E},1} - x_{\text{E,nom},1} = 0$. Die letzte Welle ist damit die Struktur mit der nominalen Wellenlänge $\lambda_{23} = 11\,\mu$m. Die nominalen Positionen werden aus den nominalen Wellenlängen wie folgt berechnet

$$x_{\text{E,nom,i}} = \left(\sum_{k=1}^{i} \lambda_k\right) - \frac{1}{2}\left(\lambda_1 + \lambda_i\right). \tag{19}$$

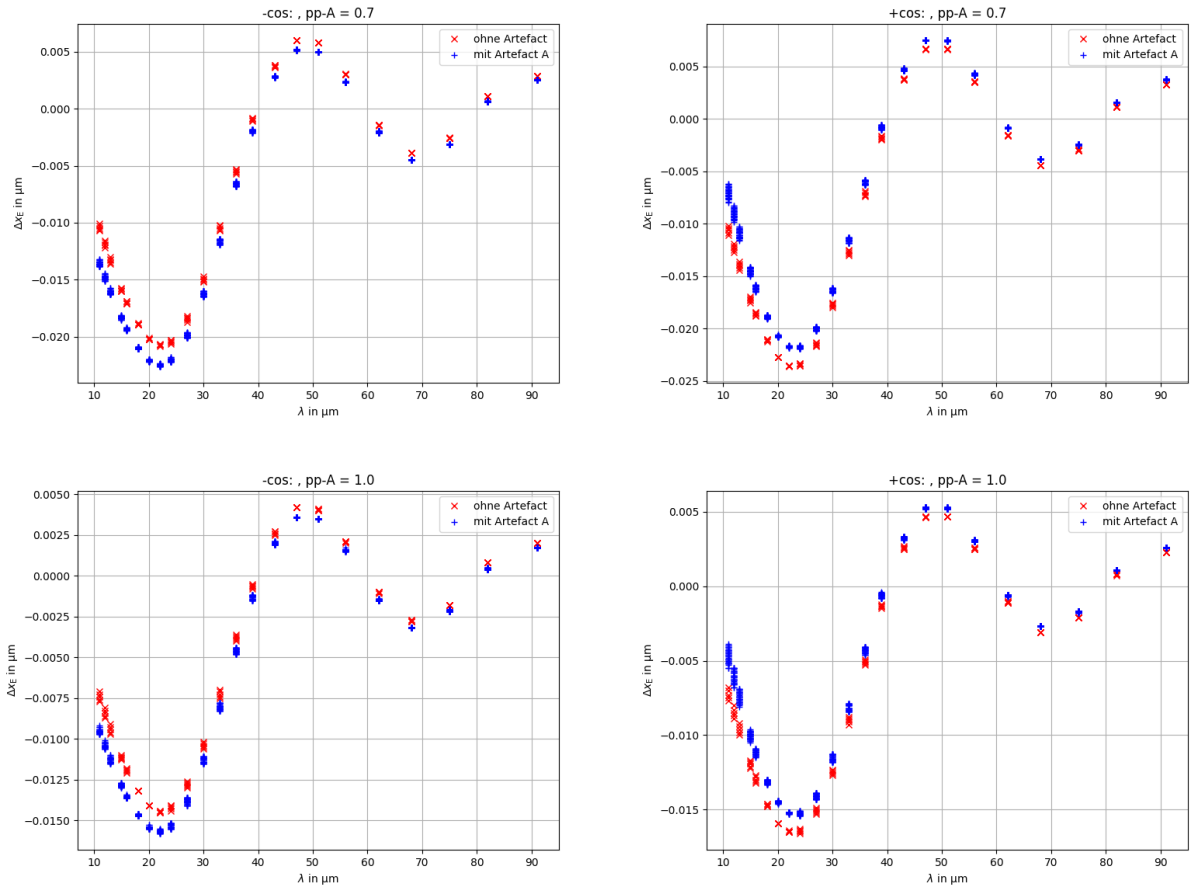

Abbildung 18: Abweichungen der Strukturpositionen als Funktion der Wellenlänge der Cosinuswellenstrukturen mit peak-peak-Amplitude sowie nominalen Höhen 0,7 μm (*oben*) und 1,0 μm (*unten*) für unterschiedliche Schneidkantenradien mit und ohne *Artefakte*; *links:* $-$cos-Strukturen; *rechts:* $+$cos-Strukturen.

Die Differenzen $x_{\mathrm{E,i}} - x_{\mathrm{E,nom,i}}$ sind in der siebten Spalte der Tabellen 1 bis 4 aufgelistet. Der Betrag dieser Differenzen ist $\leq 0{,}5\,\mu$m.

Abb. 18 zeigt die aus simulierten Profilen berechneten Abweichungen der Positionen der Extrema der Strukturen. Die Unsicherheit, die bedingt ist durch eine zu große Schneidkante und durch Schwingungen und Artefakte wird hiermit auf $< 0{,}02\,\mu$m geschätzt. Das experimentelle Ergebnis deutet auf weitere Fertigungsabweichungen als die, die simuliert wurden, hin. Die Unsicherheit für die Positionen x_{E} wird deshalb mit folgendem Wert angegeben

$$U \;=\; 0{,}5\,\mu\mathrm{m}. \tag{20}$$

Literatur

[1] R. Krüger-Sehm, P. Bakucz, L. Jung, and H. Wilhelms. Chirp calibration standards for surface measuring instruments. *tm - Technisches Messen*, 74(11):572–576, 2009. doi:10.1524/teme.2007.74.11.572.

[2] J. Seewig, M. Eifler, and G. Wiora. Unambiguous evaluation of a chirp measurement standard. *Surf. Topogr.: Metrol. Prop.*, 2(4):045003, 2014. doi:2051-672X-2-4-045003.

[3] G. Dai, H. Wolff, F. Pohlenz, and H-U. Danzebrink. A metrological large range atomic force microscope with improved performance. *Rev. Sci. Instrum.*, 80(4):043702(10pp), 2009. doi:10.1063/1.3109901.