Optische Schichtdickenbestimmung mit Ellipsometrie

(Theoretische Grundlagen)

Matthias Eul
Stefan Klein

Überblick

1. Licht als Welle

- Licht kann als eine transversale elektromagnetische Welle beschrieben werden
- E-Feldvektor und B-Feldvektor stehen dabei senkrecht aufeinander
- Natürliches Licht (Sonne, Glühbirne) hat keinen Polarisationszustand
- Elektromagnetische Wellen werden durch 3 Größen charakterisiert: Kreisfrequenz, Wellenzahl und Phase

Allgemeine Wellengleichung:

$$\boxed{\vec{E}(\vec{z},t) = E_0 \cos(\omega t - k\vec{z} + \delta)}$$

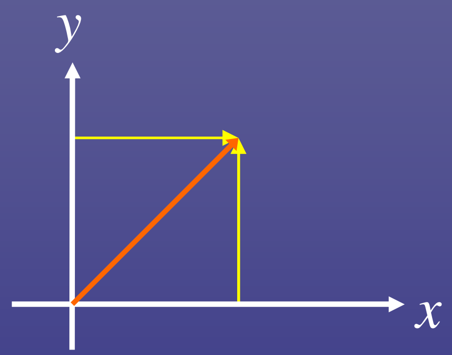
Mit:

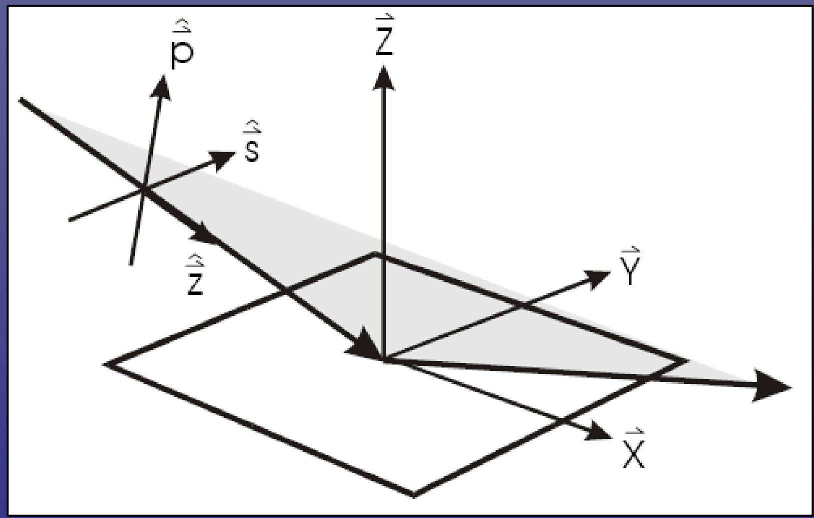
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\omega = 2\pi f$$

1. Licht als Welle

Jeder E-Feldvektor kann als Linearkombination aus zwei Einheitsvektoren, die aufeinander senkrecht stehen, dargestellt werden.





Bei einem Reflexionsexperiment bezieht man sich zur Beschreibung der EM-Welle auf ein Koordinatensystem, welches durch die Einheitsvektoren $\vec{z}$, $\vec{s}$ und $\vec{p}$ aufgespannt wird und die durch die Einfallsebene und Ausbreitungsrichtung des Lichts festgelegt sind.

1. Licht als Welle

In diesem Koordinatensystem, lässt sich jeder E-Feldvektor folgendermaßen darstellen:

$$\vec{E}(\vec{z},t) = E_{0p}\cos(\omega t - k\,\vec{z} + \delta_p)\,\hat{\vec{p}} + E_{0s}\cos(\omega t - k\,\vec{z} + \delta_s)\,\hat{\vec{s}}$$

Diese Wellengleichung lässt sich auch in der Vektorschreibweise formulieren. Da nur die Phasendifferenz und die Amplituden den Polarisationszustand bestimmen (unter der Voraussetzung $\omega_1 = \omega_2\ ;\ k_1 = k_2$), kann man den resultierenden E-Feldvektor nun folgendermaßen beschreiben:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_{0p}e^{i\delta_p} \\ E_{0s}e^{i\delta_s} \end{pmatrix}$$

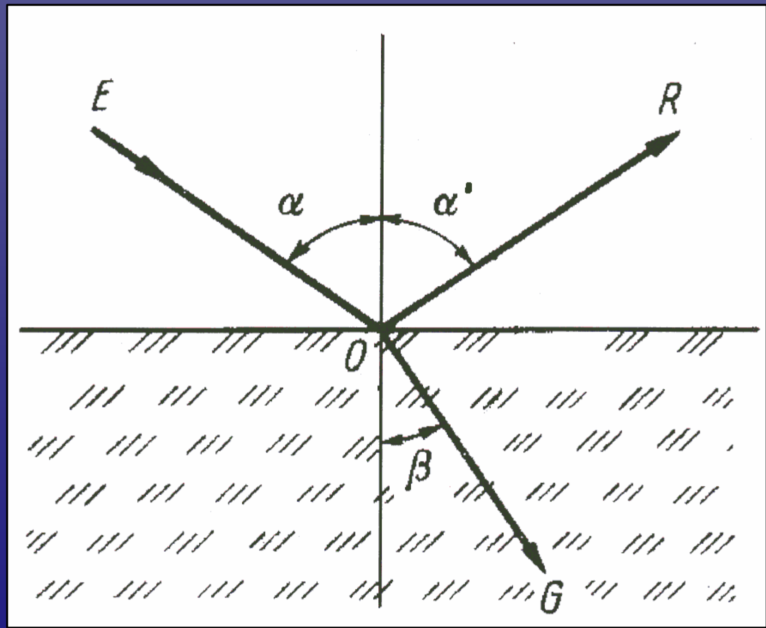
2. Polarisationszustände

Phasendifferenz	Polarisation Wenn $E_{0p} = E_{0s}$	Polarisation Wenn $E_{0p} \neq E_{0s}$
$\delta_p - \delta_s = 0°$	linear	linear
$0° \leq \delta_p - \delta_s \leq 90°$	elliptisch	elliptisch
$\delta_p - \delta_s = 90°$	zirkular	elliptisch
$90° \leq \delta_p - \delta_s \leq 180°$	elliptisch	elliptisch

3. Reflexion und Brechung

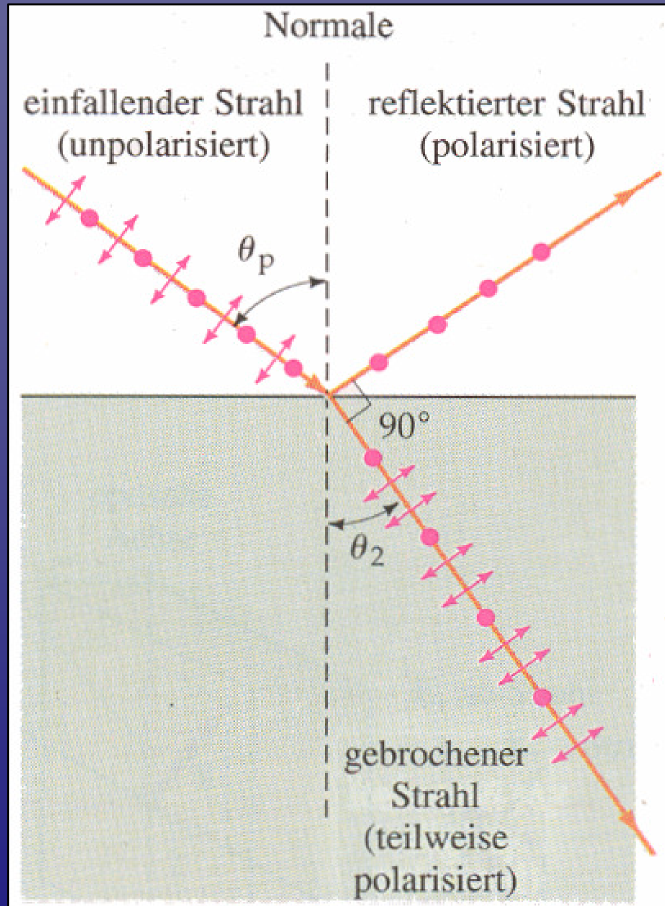
- Trifft ein Lichtstrahl auf eine Grenzfläche, so wird ein Teil reflektiert und ein Teil gebrochen
- Für den reflektierten Strahl gilt : $\alpha = \alpha'$
- Der Winkel des gebrochenen Strahls lässt sich nach dem Brechungsgesetz von Snellius berechnen:

$$n_1 \cdot \sin\alpha = n_2 \cdot \sin\beta$$



3. Reflexion und Brechung

- In welchem Maße Licht reflektiert wird hängt vom Einfallswinkel und vom Polarisationszustand ab
- Bei einem bestimmten Einfallswinkel ist der reflektierte Strahl senkrecht zur Einfallsebene linear polarisiert. Dieser heißt Polarisations- oder Brewster-Winkel
- Trifft parallel zur Einfallsebene polarisiertes Licht im Brewster-Winkel auf eine Grenzfläche, so wird kein Licht reflektiert



3. Reflexion und Brechung

- Über den Brewster-Winkel kann der Brechungsindex einer unbekannten Substanz bestimmt werden:

$$n_1 \cdot \sin\phi_1 = n_2 \sin(90° - \phi_1)$$

$$\Rightarrow n_1 \cdot \sin\phi_1 = n_2 \cos\phi_1$$

$$\Rightarrow \tan\phi_1 = \frac{n_2}{n_1}$$

Definition des Brechungsindex:

$$n_{Medium} = \frac{c_{Vakuum}}{c_{Medium}}$$

3. Reflexion und Brechung

Mikroskopische Betrachtung:

Durch die Wechselwirkung des gebrochenen Lichtstrahls (eine elektromagnetische Welle) mit den Elektronen des Mediums, werde diese in Schwingung versetzt (Hertz‘scher Dipol).

Von jedem Dipol geht eine Elementarwelle aus. Die Überlagerung aller Elementarwellen ergibt nach dem Huygens-Prinzip eine neue Wellenfront.

Huygens-Prinzip:

Jeder Punkt einer bestehenden Wellenfront ist Ausgangspunkt einer neuen Elementarwelle, die sich mit derselben Geschwindigkeit und Frequenz ausbreitet wie die ursprüngliche Wellenfront. Die Einhüllende aller Elementarwellen ergibt die Wellenfront zu einem späteren Zeitpunkt.

4. Matrizenformalismus für polarisiertes Licht

Darstellung des E-Feldvektors als sog. *Jones-Vektor :*

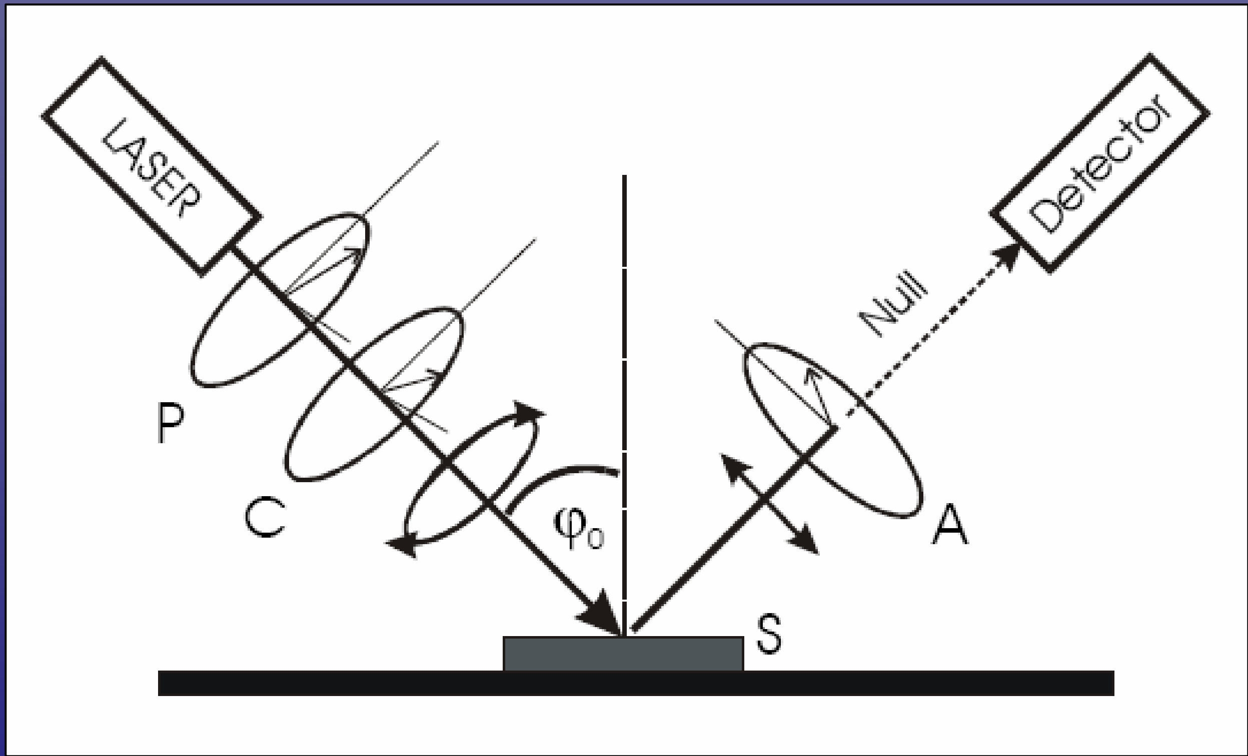
$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_{0p} e^{i\delta_p} \\ E_{0s} e^{i\delta_s} \end{pmatrix}$$

Wenn gilt: $E_{0p} = E_{0s}$ $\delta_p = \delta_s$

Kann man $\vec{E}$ schreiben als: $\vec{E} = E_{0s} e^{i\delta_s} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

Der resultierende Vektor beschreibt linear polarisiertes Licht, welcher auf der 1. Winkelhalbierende des *s,p-* Koordinatensystems liegt.

5. Schematischer Aufbau eines Ellipsometers



P: Polarisator, C: Compensator, S: Substrat, A: Analysator

6. Jones-Matrizen

Optische Komponente	Jones-Matrix
Polarisator P	$T_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
Kompensator C	$T_C = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$
Probe S	$T_S = \begin{pmatrix} R_P & 0 \\ 0 & R_S \end{pmatrix}$
Analysator A	$T_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Beschreibung des transmittierten Vektors durch Wirkung der Jones-Matrix eines optischen Elements auf den einfallenden Vektor:

$$\boxed{\vec{E}^{aus} = T_{Jones} \vec{E}^{ein}}$$

7. Ellipsometrische Grundgleichung

Durch Reflexion des Lichtstrahls an einer Probe ändert sich dessen Polarisationszustand. Die Änderung des Polarisationszustands wird durch die ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ beschrieben:

$$\tan\Psi = \frac{\left|E_{0p}^{R}\right| / \left|E_{0p}^{E}\right|}{\left|E_{0s}^{R}\right| / \left|E_{0s}^{E}\right|} \qquad \Delta = (\delta_p^R - \delta_s^R) - (\delta_p^E - \delta_s^E)$$

Weiterhin werden die komplexen Reflexionskoeffizienten R_p und R_s eingeführt:

$$R_p = \frac{\left|E_{0p}^{R}\right|}{\left|E_{0p}^{E}\right|} e^{i(\delta_p^R - \delta_p^E)} \qquad R_s = \frac{\left|E_{0s}^{R}\right|}{\left|E_{0s}^{E}\right|} e^{i(\delta_s^R - \delta_s^E)}$$

Daraus folgt die ellipsometrische Grundgleichung:

$$\boxed{\tan\Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s}}$$

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

Bevor man die Jones-Matrizen auf den E-Feldvektor wirken lassen kann, muss dieser in das entsprechende Eigenkoordinatensystem der optischen Komponente übertragen werden. Dafür verwendet man in diesem Fall folgende Drehmatrix:

$$D(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

Nun kann der austretende E-Feldvektor folgendermaßen beschrieben werden:

$$\vec{E}^{aus} = D(-A)T_A D(A)T_S D(-C)T_C D(C)D(-P)T_P D(P)\vec{E}^{ein}$$

Zu beachten ist, dass die Matrizen <u>nicht kommutativ</u> sind und in der Reihenfolge angewendet werden müssen, wie der Lichtstrahl die optischen Komponenten durchläuft.

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

$$\vec{E}^{aus} = D(-A)T_A D(A) T_S D(-C) T_C D(C) D(-P) T_P D(P) \vec{E}^{ein}$$

Bei der Null-Ellipsometrie kann der Term $D(-A)$ vernachlässigt werden. Daraus folgt:

$$\vec{E}^{aus} = T_A(\Omega_1 + \Omega_2)(E_p^{ein} \cos P + E_s^{ein} \sin P)$$

Mit:

$$\Omega_1 = R_p \cos A(\cos C \cos(C-P) - i \sin C \sin(C-P))$$

$$\Omega_2 = R_s \cos A(\sin C \cos(C-P) + i \cos C \sin(C-P))$$

Der austretende E-Feldvektor verschwindet, wenn gilt:

$$\Omega_1 + \Omega_2 = 0$$

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

Aus $\Omega_1 + \Omega_2 = 0$ folgt:

$$\frac{R_p}{R_s} = -\tan A \frac{\tan C + i \tan(C-P)}{1 - i \tan C \tan(C-P)}$$

Somit hängt der austretende E-Feldvektor nur noch von 3 Winkeln (A, C, P) ab. Nun wird $C = \pm 45°$ gewählt und mit der ellipsometrischen Grundgleichung ergibt sich:

$$\tan \Psi e^{i\Delta} = \tan A e^{i(2P+\pi/2)} \qquad \mathit{für} \quad C = -45°$$

$$\tan \Psi e^{i\Delta} = -\tan A e^{i(\pi/2-2P)} \qquad \mathit{für} \quad C = +45°$$

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

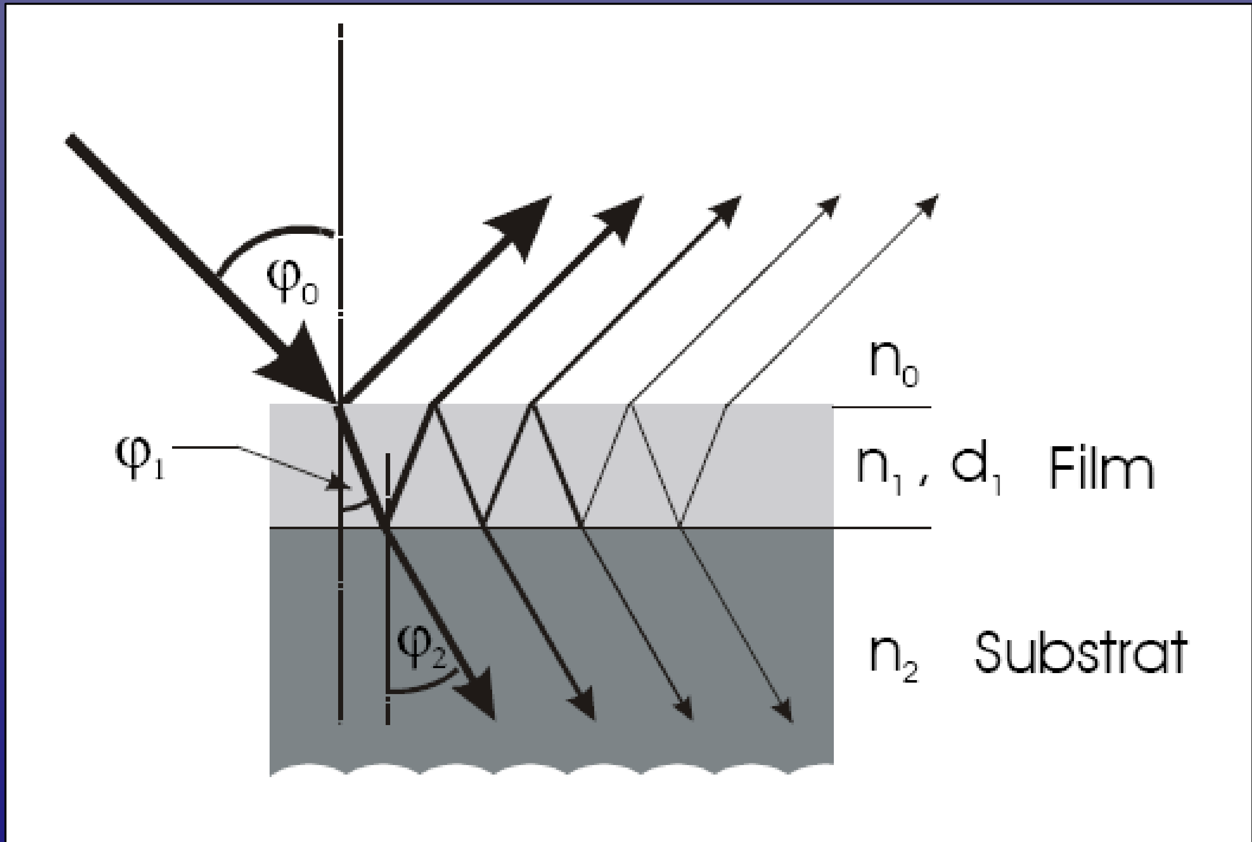
Somit ergeben sich folgende Beziehungen zwischen den gemessenen Winkeln *P*, *C*, und *A,* die zur Auslöschung des reflektierten Lichts führen, und den ellipsometrischen Winkeln:

$$\Psi = |A| \qquad \Delta = 2P \pm 90° \qquad \mathit{für} \quad C = -45°$$

$$\Psi = |A| \qquad \Delta = -2P \pm 90° \qquad \mathit{für} \quad C = +45°$$

Ψ und Δ hängen nun vom Brechungsindex des Substrats und des Films sowie von der Schichtdicke ab.

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie



8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

Für folgende Rechnungen wird angenommen, die Probe sei:

- Eine planparallele, ideal glatte Schicht
- Auf einem halbunendlichen Substrat

An den Grenzflächen gelten die Fresnelschen Gleichungen, die von der Polarisation des Lichts abhängen:

$$r_{01p} = \frac{n_1 \cos\phi_0 - n_0 \cos\phi_1}{n_1 \cos\phi_0 + n_0 \cos\phi_1} \qquad r_{01s} = \frac{n_0 \cos\phi_0 - n_1 \cos\phi_1}{n_0 \cos\phi_0 + n_1 \cos\phi_1}$$

$$r_{12p} = \frac{n_2 \cos\phi_1 - n_1 \cos\phi_2}{n_2 \cos\phi_1 + n_1 \cos\phi_2} \qquad r_{12s} = \frac{n_1 \cos\phi_1 - n_2 \cos\phi_2}{n_1 \cos\phi_1 + n_2 \cos\phi_2}$$

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

Das gesamte reflektierte Licht ist eine kohärente Überlagerung der reflektierten Teilstrahlen an den Grenzschichten Luft/Film und Film/Substrat. Die komplexen Reflexionskoeffizienten lassen durch eine geometrische Reihenentwicklung beschreiben:

$$R_p = \frac{r_{01p} + r_{12p} e^{-i2\beta}}{1 + r_{01p} r_{12p} e^{-i2\beta}} \qquad R_s = \frac{r_{01s} + r_{12s} e^{-i2\beta}}{1 + r_{01s} r_{12s} e^{-i2\beta}}$$

Nun ist β die Phasenverschiebung zwischen zwei benachbarten, reflektierten Teilstrahlen. Sie verknüpft nun auch die komplexen Reflexionskoeffizienten mit der Schichtdicke und den Brechungsindizes:

$$\beta = 2\pi \frac{d_1}{\lambda} \sqrt{n_1^2 - n_0^2 \sin^2 \phi_0}$$

8. Mathematische Behandlung der Null-Ellipsometrie

Nun folgt mit der ellipsometrischen Grundgleichung:

$$\tan\Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s} = \frac{(r_{01p} + r_{12p}e^{-i2\beta})\cdot(1 + r_{01s}r_{12s}e^{-i2\beta})}{(1 + r_{01p}r_{12p}e^{-i2\beta})\cdot(r_{01s} + r_{12s}e^{-i2\beta})} = \rho$$

Nun können Schichtdicke und Brechungsindex aus den gemessenen ellipsometrischen Winkeln bestimmt werden. Es ist zu beachten, dass es mehrere Kombinationen von *n* und *d* gibt, die mit Ψ und Δ korrespondieren.

9. Literatur

- http://www.uni-potsdam.de/u/physik/fprakti/ANLEIF9.pdf
- http://www.uni-bayreuth.de/departments/pcii/
  praktikum/hauptpraktikum/pdf/hp_ellipsometrie.pdf
- E. Hecht, *Optik*, 3. Auflage 2001, Oldenbourg Wissenschafts-verlag GmbH, München
- Paul A. Tipler, *Physik*, 1. Auflage 1995, Spektrum Akademischer Verlag GmbH, Heidelberg