
Praktikumsversuch Ellipsometrie

Ellipsometrie

Die Ellipsometrie ist ein weit verbreitetes Verfahren zur Vermessung von Schichtdicken, von der Materialzusammensetzung, den Brechzahlen und in Verbindung mit Simulationssoftware auch von Strukturinformationen. Das Verfahren ist schnell, preisgünstig und sehr präzise. Es wird deshalb in der Industrie zur Prozesskontrolle und -steuerung eingesetzt. Bei der Ellipsometrie werden die Polarisationsänderungen, die das Licht beim Auftreffen auf eine Material-Grenzfläche erfährt, gemessen.

Polarisation

Die Polarisation gehört zu den sieben Eigenschaften des Lichtwellenfeldes: Intensität, Wellenlänge, Phase, Winkelspektrum (Ausbreitungsrichtungen), zeitliche Kohärenz, räumliche Kohärenz und Polarisation. Sie ist eine Richtungsinformation der elektromagnetischen Feldstärke, die stets senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Lichts steht. Dementsprechend gibt es zwei Freiheitsgrade der Polarisationsrichtung, die man durch Komponenten eines zweidimensionalen Vektors kennzeichnen kann, dem sogenannten Jones-Vektor. Da die Wellengleichung der Lichtausbreitung linear ist, lassen sich verschiedene Polarisationszustände überlagern. Dies muss allerdings phasenrichtig geschehen, so dass es nützlich ist, wenn der Jones-Vektor auch Phaseninformation enthält: seine Komponenten sind deshalb komplexe Zahlen und die Anzahl der Freiheitsgrade steigt auf vier.

Polarisationszustände

Der einfachste Polarisationszustand einer ebenen Welle ist die lineare Polarisation. Dort besitzt das elektromagnetische Feld überall die gleiche Richtung. Wenn man zwei lineare Polarisierungen ohne Phasenunterschied überlagert (Abbildung: rote und grüne Kurve) erhält man wiederum eine lineare Polarisation (blaue Kurve). Die resultierende Richtung bekommt man dabei durch Vektoraddition. Besteht bei der Überlagerung ein Phasenunterschied ist die Situation komplizierter: Abhängig von den relativen Intensitäten und Phasen der Strahlung entsteht ein Lichtwellenfeld, das eine schraubenförmige Variation der Polarisationsrichtung besitzt: zirkular oder elliptisch polarisiertes Licht.

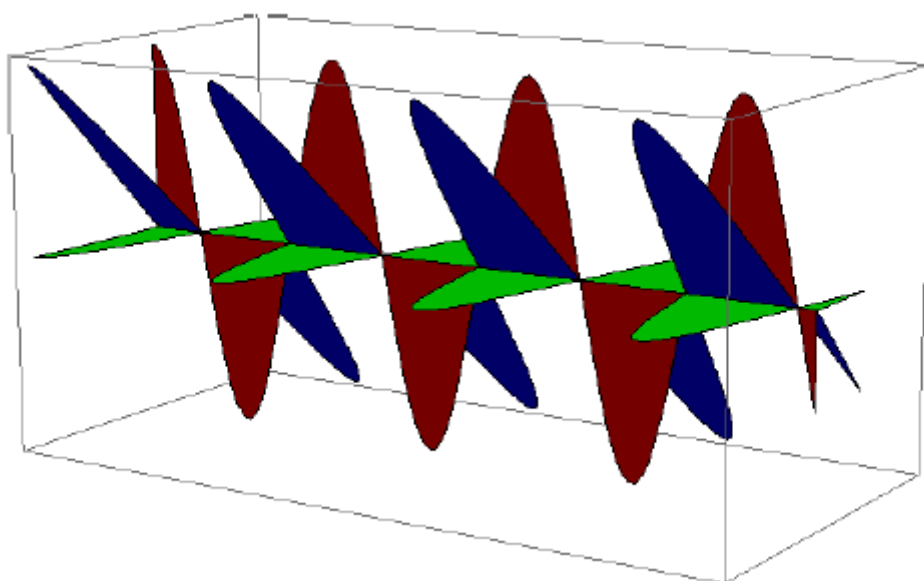


Abbildung: lineare Polarisation

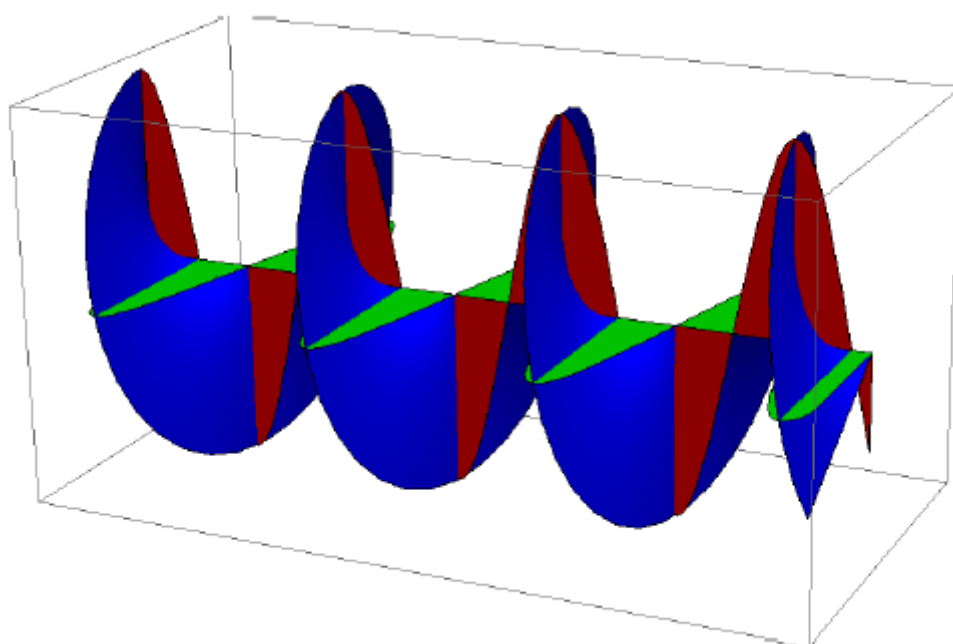
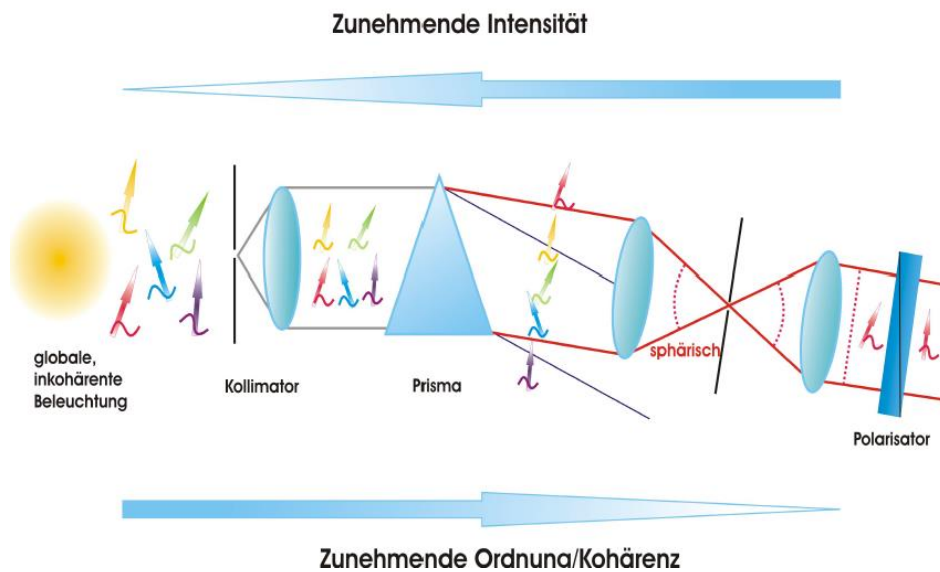


Abbildung: zirkulare Polarisation

Kohärenz

Licht aus natürlichen und aus vielen künstlichen Quellen lässt sich nicht einfach beschreiben. Wir benötigen schon für einfache Quellen eine ganze Anzahl von Parametern zur Charakterisierung wie die Ausbreitungsrichtung, Frequenz und Polarisationsrichtung. Bei den meisten Lichtquellen ändern sich diese Parameter sowohl zeitlich als auch räumlich in komplizierter und unvorhersagbar chaotischer Weise. Die Eigenschaft, die den Ordnungsgrad des Wellenfeldes angibt ist die *Kohärenz* wobei die charakteristische Länge, auf der das Feld die hochgeordnete Form einer ebenen Welle besitzt, die *Kohärenzlänge* genannt wird. In der Praxis besitzt Sonnenlicht oder z.B. Licht einer weißen Leuchtdiode Kohärenzlängen von einigen μm . Licht mit einer kleinen, aber endlichen Kohärenzlänge nennt man partiell kohärentes Licht.

Wie kann man nun geordnetes Licht aus einem ungeordneten Wellenfeld erzeugen? Dies geschieht durch die Anwendung verschiedener Filter. In der Abbildung gelangt ungeordnetes, weißes Licht zuerst auf einen Kollimator. Dieser wirkt als k-Filter, das bedeutet, dass alle Wellenzüge sich in nur noch eine Richtung ausbreiten. Durch ein Prisma und die daran anschließende Optik mit Lochblende wird dann aus dem weißen Spektrum eine Wellenlänge herausgegriffen. Das Licht liegt danach im geordneten Zustand „ebene Welle“ vor hat aber noch den Freiheitsgrad der Polarisation.



Lichtwellenfeld einer partiell kohärenten Quelle

Jones-Kalkül

Es sich gezeigt, dass sich für die Beschreibung von polarisierten ebenen Wellen komplexe Zahlen besonders geeignet sind. Wir beginnen mit der reellen Darstellung einer linear polarisierten ebenen Welle:

$$U(z, t) = A \cos \left[2\pi \left(\nu t - \frac{z}{\lambda} \right) + \delta \right]$$

A - Amplitude
 ν - Frequenz
 λ - Wellenlänge
 δ - Anfangsphase

Wir definieren, dass dieser Ausdruck der Realteil einer geeigneten komplexen Darstellung der Welle ist. Trigonometrische Funktionen können leicht durch die komplexe Exponentialfunktion beschrieben werden, so dass der folgende Ansatz nahe liegend erscheint:

$$U^{(r)}(z, t) = A \cos [2\pi (\nu t - z/\lambda) + \delta] = \operatorname{Re}[U(z, t)]$$

$\Downarrow$

$$U_{x,y}(z, t) = A_{x,y} e^{i2\pi (\nu t - z/\lambda) + i\delta_{x,y}}$$

Dies gilt für eine in x und y-Richtung polarisierte Welle, dargestellt in dieser Schreibweise durch den Index x,y. Es lassen sich nun in dieser Form die Polarisationsinformation, für die wir uns eigentlich interessieren, von der zeitlichen und räumlichen Variation abseparieren:

$$U_{x,y}(z, t) = \underbrace{A_{x,y} e^{i\delta_{x,y}}}_{\text{Polarisation}} \cdot \underbrace{e^{i2\pi (\nu t - z/\lambda)}}_{\text{Zeitabhängigkeit}}$$

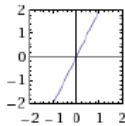
Wir sehen, dass die Polarisationsinformation in einem komplexen Vorfaktor des Wellenausdrucks steckt. Dabei ist die Anfangsphase dieser Welle das Argument der komplexen Zahl und die Amplitude der Betrag. Fasst man nun auch die Polarisation in x- und y-Komponente zu einem Vektor zusammen gelangt man zur Polarisationsinformation in Form eines komplexen Vektors, dem Jones Vektor:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} A_x e^{i\delta_x} \\ A_y e^{i\delta_y} \end{pmatrix}$$

Gemäß den vorherigen Überlegungen ergeben sich für die Darstellung von linear, zirkular und elliptisch polarisiertem Licht jeweils durch die Addition von Jones-Vektoren ebener, linear polarisierten Wellen. Ein Beispiel:

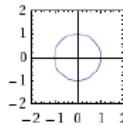
linear

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$



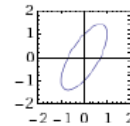
zirkular

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$



elliptisch

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 + i \end{pmatrix}$$



Verändert jetzt ein optisches Bauteil oder ein Material den Polarisationszustand der Strahlung muss man vom Jones-Vektor des einfallenden Strahls zum Jones-Vektor des austretenden Strahls übergehen. Dies bewerkstelligt im allgemeinen Fall eine (komplexe) 2x2 Matrix, die Jones Matrix. Man kann jedem Bauteil oder Material eindeutig eine solche Matrix zuordnen, wenn es linear, homogen und nicht depolarisierend ist.

Die Polarisationsänderung bei der Reflexion an einer Grenzfläche zwischen isotropen Materialien oder an einem entsprechenden Schichtsystem wird durch eine diagonale Jones-Matrix beschrieben. Aus historischen Gründen betrachtet die Ellipsometrie jedoch nicht diese Jones-Matrix, sondern die ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ , die sich aus dem komplexen Verhältnis der Diagonalelemente zusammensetzen:

$$\tan[\Psi] e^{i\Delta} = \frac{J_{xx}}{J_{yy}}$$

Müller-Kalkül

Für teilkohärentes Licht ist der Jones-Kalkül nicht geeignet. Als Kohärenzmaß dienen Zeitmittelintegrale, die im Kern aus dem Produkt zweier Feldstärkekomponenten bestehen. Es gibt vier Möglichkeiten solche Integrale zu bilden, die man in Form einer Kohärenzmatrix zusammenfassen kann.

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} \\ J_{yx} & J_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle E_x[t] E_x^*[t] \rangle & \langle E_x[t] E_y^*[t] \rangle \\ \langle E_y[t] E_x^*[t] \rangle & \langle E_y[t] E_y^*[t] \rangle \end{pmatrix}$$

Für ein geordnetes Wellenfeld ergeben solche Korrelationsintegrale einen Wert ungleich Null, da eine gewisse Wahrscheinlichkeit besteht, dass eine Vorzeichenkombination (++)/(-+/-) innerhalb des Integrals häufiger vorkommt als die andere, so dass sich nicht alle Beiträge zu null addieren können. Sind z.B. die Komponenten E_x und E_y zufällig und nicht miteinander korreliert, kommen alle Kombinationen gleich häufig vor und das Integral ist gleich Null. Bei Berücksichtigung der Kohärenz muss der Polarisationszustand der ebenen Welle also statt mit zwei mit vier Parametern beschrieben werden. Allerdings hat sich eingebürgert nicht die Einträge der Kohärenzmatrix zu nehmen sondern spezielle Linearkombinationen.

$$\begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{xx} + J_{yy} \\ J_{xx} - J_{yy} \\ J_{xy} + J_{yx} \\ -J_{yx} + J_{xy} \end{pmatrix}$$

Den so erzeugten vierdimensionalen Vektor nennt man dann Stokes-Vektor. Ein optisches Bauteil oder Material, das den Polarisationszustand ändert muss in diesem Formalismus mit einer 4x4-Matrix beschrieben werden, die Müller Matrix. Man kann in diesen Komponenten durchaus anschauliche Größen erkennen, so ist der Eintrag s_0 die Gesamtintensität des Signals und s_1 gibt den „Überschuss“ an x-Polarisation an. Die wichtigste Eigenschaft des Stokes-Vektors ist allerdings, dass auch depolarisierende Vorgänge beschrieben werden, d.h. wenn durch das Bauteil Polarisationsinformation vernichtet wird und der Ausgangsstrahl also weniger Ordnung beinhaltet als der Eingangsstrahl. Dies geschieht z.B. bei Anwesenheit von Oberflächenrauheit oder bei der chaotischen Mehrfachreflexion in Lichtleitern.

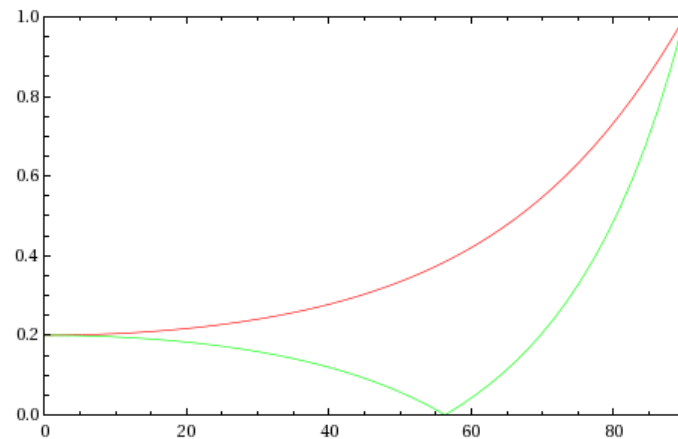
Grenzflächen

Ausgehend von den Stetigkeitsbedingungen der Lichtausbreitung in Materie, die besagen, dass bei einer Materialgrenzfläche von zwei Feldkomponenten mindestens eine stetig sein muss, ergeben sich bei der Reflexion und Transmission an Grenzflächen ganz spezielle Einschränkungen. Diese werden von den Fresnelschen Formeln beschrieben und geben die Reflexion und Transmission von polarisiertem Licht in Abhängigkeit der Einfallrichtung und dem Brechungsindex-Sprung der Grenzfläche an. Es zeigt sich, dass sich zwei Polarisationsrichtungen unterscheiden lassen, die ein ganz unterschiedliches Verhalten bei der Reflexion zeigen. Bezeichnet man diejenige Ebene, die einfallender und reflektierter Strahl aufspannen als „Einfallsebene“ so sind die Vektoren senkrecht (s-Polarisation) auf diese Ebene und parallel (p-pol) zur Ebene solche ausgezeichneten Richtungen. Die Fresnelgleichungen lauten für die s- und p-Polarisation:

$$\begin{aligned} T_s &= \frac{2 n_1 \cos[\theta]}{n_1 \cos[\theta] + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin[\theta]^2}} & R_s &= -1 + \frac{2 n_1 \cos[\theta]}{n_1 \cos[\theta] + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin[\theta]^2}} \\ T_p &= \frac{2 n_1 \cos[\theta]}{n_2 \cos[\theta] + n_1 \sqrt{1 - \frac{n_1^2 \sin[\theta]^2}{n_2^2}}} & R_p &= -1 + \frac{2 n_2 \cos[\theta]}{n_2 \cos[\theta] + n_1 \sqrt{1 - \frac{n_1^2 \sin[\theta]^2}{n_2^2}}} \end{aligned}$$

Dabei bezeichnen n_1 und n_2 die Brechzahlen des Mediums oberhalb und unterhalb der Grenzfläche, θ den Einfallswinkel und T den Transmissions- und R den Reflektionskoeffizient. An Stelle des Einfallswinkels kann man die Formeln auch durch die Projektion des Wellenvektors k auf die Grenzfläche beschreiben.

Als Beispiel betrachten wir die Reflexion beim Übergang von Luft ($n=1$) auf Glas ($n=1.5$). Dort ist auf der x-Achse der Einfallswinkel aufgetragen und auf der y-Achse die reflektierte Amplitude. S-Polarisation ist rot, die p-Polarisation grün.



Reflexion an der Grenzfläche Luft->Glas

Man sieht, dass bei einem bestimmten Einfallswinkel (hier ca. 55°) die Reflexion der p-Polarisation ein Minimum besitzt (hier: Null). Dieser Winkel existiert bei vielen Materialien und wird Brewster-Winkel genannt. Bei diesem Winkel haben wir eine sehr hohe Sensitivität, weil schon durch kleine Konfigurationsänderungen eine große Wirkung auf die Polarisation erreicht werden kann.

Dünne Schichten

Dünne Schichten oder Schichtsysteme bestehen aus einer Anzahl von Materialien mit den dazwischen liegenden Grenzflächen. Wir können also die Fresnelschen Formeln anwenden und müssen nur zusätzlich die Propagation in den Schichten und die rückreflektierten Wellen der anderen Grenzflächen berücksichtigen. Für die Propagation der Strahlung innerhalb einer Schicht der Schichtdicke a_1 erhalten wir den Ausdruck:

$$e^{-i a_1 \sqrt{k^2 - k_x^2}}$$

wobei k_x die Projektion des Wellenvektors auf die Grenzfläche ist. Die Fresnelschen Formeln lauten dann

$$(E_{11} - E_{12}) \sqrt{1 - \frac{k_x^2}{k_1^2}} n_1 = (-E_{21} + E_{22}) \sqrt{1 - \frac{k_x^2 n_1^2}{k_1^2 n_2^2}} n_2$$

$$E_{11} + E_{12} = E_{21} + E_{22}$$

Dabei bedeuten E_{11} und E_{12} die Wellen „hin“ zur Grenzfläche und „von der Grenzfläche weg“, jeweils auf der linken Seite der Grenzfläche und genau so E_{21} und E_{22} für die rechte Seite der Grenzfläche. Man kann das kleine Gleichungssystem jetzt in Matrix-Form schreiben, auflösen und erhält die Transfer Matrizen für s- und p-Polarisation:

$$M_s := \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} n_2}{\sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1} \right) & \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} n_2}{2 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1} \\ \frac{\sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1 - \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} n_2}{2 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1} & \frac{\sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1 + \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} n_2}{2 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1} \end{pmatrix}$$

$$M_p := \begin{pmatrix} \frac{n_1 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} + n_2}{2 n_1 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}}} & -\frac{n_1 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} - n_2}{2 n_1 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}}} \\ \frac{-n_1 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} + \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_2}{2 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1} & \frac{n_1 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_2^2}} + \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_2}{2 \sqrt{1 - \frac{kx^2}{k^2 n_1^2}} n_1} \end{pmatrix}$$

Jetzt muss man noch die Propagation der Wellen in den einzelnen Schichten berücksichtigen und erhält die folgende Propagationsmatrix P:

$$P := \begin{pmatrix} e^{-i d_1 \sqrt{-kx^2 + k_1^2 n_2^2}} & 0 \\ 0 & e^{i d_1 \sqrt{-kx^2 + k_1^2 n_2^2}} \end{pmatrix}$$

Nun kann man von „hinten“ her beginnen und das Licht durch das System schicken. Dabei muss an jeder Grenzfläche eine Transfermatrix und bei jeder Schicht eine Propagationsmatrix hinzugefügt werden. Man erhält z.B. für eine Einzelschicht auf einem Substrat das folgende Gleichungssystem:

$$M_{s1} \cdot P_1 \cdot M_{s2} \cdot \begin{pmatrix} T_s \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ R_s \end{pmatrix}$$

Dieses kann man jetzt nach dem Transmissions- oder Reflexionskoeffizienten auflösen. Die entstehenden Gleichungen sind auch bei einer Einzelschicht *sehr* kompliziert.

Ellipsometer

Im einfachsten Fall besteht ein Ellipsometer aus einer monochromen, näherungsweise kollimierten Lichtquelle, bei der der Polarisationszustand durch einen Polarisator (P) und einem Retarder (C) verändert werden kann. In der klassischen Ellipsometeranordnung wird ein schräger Einfall gewählt, da sich dort in

der der Nähe des Brewster-Winkels die Reflektivität für beide Polarisationen stark unterscheidet.

Nach der Reflexion an der Probe befindet sich ein weiterer Polarisator im Strahlengang, der als Analysator benutzt wird. Nun werden bei einem fest vorgegebenen Winkel von C, P und A solange variiert, bis die am Detektor gemessene Intensität Null wird. Diesen Ellipsometer-Typ nennt man deshalb Null-Ellipsometer. Als Messergebnis erhält man die Winkel P und A, aus denen man direkt die ellipsometrischen Winkel berechnen kann. Kommerzielle, moderne Ellipsometer wie das Praktikum verwendete, sind ein wenig komplizierter aufgebaut. Dabei kommen rotierende polarisierende Elemente zum Einsatz, die das Mess-Signal harmonisch modulieren. Bei einer anschließenden Fourier-Analyse können dann über eine Transformationsformel die ellipsometrischen Winkel berechnet werden. Bei beiden Typen kann natürlich der Einfallswinkel verändert werden, was zusätzliche Informationen liefern kann. Ein weiterer Ellipsometer-Typ ist das spektrale Ellipsometer. Dabei kann zusätzlich zum Einfallswinkel auch die Wellenlänge der verwendeten Strahlung variiert werden.

Das inverse Problem der Ellipsometrie

Das Messergebnis der Ellipsometrie besteht aus der Vermessung der Polarisationsellipse nach einer Reflexion mit der Probe. In den meisten Anwendungsfällen ist das nicht die Messgröße für die man sich primär interessiert. Interessante Größen sind z.B. die Brechzahl der Materialien oder die Schichtdicken auf den Substraten. Diese Daten lassen sich nicht *direkt* aus den Messdaten ablesen. Man muss vielmehr ein Modell der Probe erstellen, man gibt also eine Anzahl von Schichten oder einige Materialien vor, andere Größen sind dagegen unbekannt und werden mit Variablen belegt. Dann nimmt man das Modell und simuliert für einen gewissen Wertebereich der Parameter den Messprozess. Die dabei entstehenden simulierten „Messergebnisse“ werden mit den gemessenen Daten verglichen. Der Satz an Parametern, der die gemessenen Werte am besten wiedergibt wird als Lösung des inversen Problems angenommen.

Messaufgaben

Im Reinraum steht ein kommerzielles spektroskopisches Ellipsometer verbunden mit einer Software, die in der Lage ist das oben erwähnte inverse Problem zu lösen. Im Probenschrank befinden sich eine Anzahl von Messobjekten. Wir versuchen so viel Information wie möglich über diese Proben zu bekommen:

- Brechzahl des Substrats ?
- Befindet sich eine Schicht auf dem Substrat?
- Dicke der Schicht ?
- Um welches Material kann es sich handeln?