

UNIVERSITÄT OSNABRÜCK

Fachbereich Physik

BACHELORARBEIT

Vorgelegt im Rahmen der Bachelorprüfung für den Zwei-Fächer-Bachelor-Studiengang im Teilstudiengang Physik

Einsatzmöglichkeiten von Experimenten mit Laserellipsometrie für physikalische Praktika

| Autor: | Sebastian Künne | Matrikelnummer: 942017 |
|-----------------|--|------------------------|
| Erstgutachter: | Prof. Dr. rer. nat. Joachim Wollschläger | |
| Zweitgutachter: | Prof. Dr. rer. nat. Mirco Imlau | |

Osnabrück, den 20. Juni 2014.

Inhaltsverzeichnis

| 1 | Einle | eitung | 1 |
|---|-------|-----------------------------------|----|
| 2 | Theo | retische Grundlagen | 3 |
| | 2.1 | Polarisation von Licht | 3 |
| | 2.2 | Der (komplexe) Brechungsindex | 5 |
| | 2.3 | Reflexion von Licht | 6 |
| | | 2.3.1 Substratmodell | 6 |
| | | 2.3.2 Einschichtmodell | 8 |
| | 2.4 | Grundgleichung der Ellipsometrie | 10 |
| 3 | Expe | rimentelles | 13 |
| | 3.1 | Geräteausstattung | 13 |
| | 3.2 | Modifikationen und Problematik | 14 |
| | 3.3 | Messmethoden | 14 |
| | | 3.3.1 Rotierender Analysator | 14 |
| | | 3.3.2 Minimumsuche | 16 |
| | 3.4 | Trajektorien | 17 |
| 4 | Schic | chtsysteme | 21 |
| | 4.1 | Silizium | 21 |
| | 4.2 | Siliziumdioxid | 21 |
| | 4.3 | Silber | 22 |
| 5 | Expe | rimentelle Befunde | 25 |
| | 5.1 | Bestimmung des Brechungsindexes | 25 |
| | 5.2 | Bestimmung der Schichtdicken | 28 |
| | | 5.2.1 Dicke Siliziumdioxidschicht | 30 |
| | | 5.2.2 Dünne Siliziumdioxidschicht | 31 |
| | | 5.2.3 Dicke Silberschicht | 33 |
| | | 5.2.4 Dünne Silberschicht | 34 |
| 6 | Zusa | mmenfassung | 37 |
| A | Man | ual | 39 |
| B | Prak | tikumsanleitung | 45 |
| С | Abbi | ldungsverzeichnis | 63 |
| D | Liter | atur | 65 |

1 Einleitung

Dünne Schichten sind seit Jahren aus der Industrie und Forschung nicht mehr wegzudenken. Anwendung finden sie unter anderem in Mechanik, Optik, Elektrotechnik, Chemie und Biologie. Bei dünnen Schichten handelt es sich um Schichten kondensierter Materie, deren Dicken im Nanometerbereich liegen. Neben vielen Methoden diese Schichten herzustellen, existieren auch einige Methoden, diese Schichten zu vermessen. Eine dieser Methoden stellt die Ellipsometrie dar.

Die Basis der Ellipsometrie bilden der Polarisationszustand einer Lichtwelle und die Phasendifferenz. Paul Drude gelingt Ende des 19. Jahrhunderts zum ersten Mal mithilfe der Phasendifferenz zweier senkrecht zueinander polarisierter Lichtwellen die Vermessung der Dicke einer sehr dünnen Schicht. Neben der Schichtdicke kann ebenso der (komplexe) Brechungsindex einer Probe bestimmt werden. Seit Paul Drudes erster Messung profitiert die Ellipsometrie vom Fortschritt der Technik. Mit Lasern und Polarisatoren lassen sich Wellenlänge und Polarisation sehr fein einstellen und mit neuer Computertechnik werden Messdaten schneller und detaillierter ausgewertet. Da mithilfe eines Lasers die Proben vermessen werden, gilt die Ellipsometrie als sogenannte zerstörungsfreie Messmethode.

Ziel dieser Arbeit ist die Einsatzmöglichkeiten des Einwellenlängenellipsometers des Typs EL X-02C für physikalische Praktika zu testen. Dafür werden Siliziumdioxid- und Silberschichten verschiedener Dicken auf Siliziumsubstrate aufgedampft und deren Brechungsindizes sowie Schichtdicken bestimmt.

In dem der Einleitung folgenden Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen zur Polarisation und Reflexion eingeführt, die sich weitgehend nach [1, 3, 11] richten. Mit dieser Basis wird am Ende des zweiten Kapitels die Grundgleichung der Ellipsometrie hergeleitet [2, 5, 11]. Im daran anschließenden dritten Kapitel werden die Grundlagen des Experiments nach [1, 2, 4] erläutert und die Funktionsweise des Ellipsometers dargestellt. Kapitel 4 beinhaltet eine Beschreibung der untersuchten Proben, dessen Schichtsysteme mittels eines Computerprogramms modelliert werden. Das fünfte Kapitel enthält eine Auswertung und Diskussion der Messergebnisse, bevor die Arbeit mit einer Zusammenfassung in Kapitel 6 abschließt.

Im Anhang ist unter A ein Manual zur Bedienung des EL X-02C zu finden. Dies soll den Praktikanten im Umgang mit dem Ellipsometer und bei der Durchführung der Versuche helfen. Unter B befindet sich eine Praktikumsanleitung mit möglichen Aufgabenstellungen für die Praktikanten.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Polarisation von Licht

Die Methode der Ellipsometrie basiert auf der Änderung des Polarisationszustandes einer Lichtwelle bei deren Reflexion an Grenzflächen und in Medien. Als Grundlage der theoretischen Beschreibung einer elektromagnetischen Welle dienen die Maxwell-Gleichungen. So kann die Lichtwelle durch ihr elektrisches Feld

$$\vec{E} = \vec{E_0} * e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$
(2.1)

beschrieben werden. Hierbei ist $\vec{E_0}$ die Amplitude, $\omega = 2\pi v$ die Kreisfrequenz, \vec{k} der Wellenvektor mit $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ und \vec{r} der Ort des elektrischen Feldes. Gleichung 2.1 genügt zur Beschreibung des Lichtes, da das magnetische Feld \vec{B} immer senkrecht auf dem elektrischen Feld steht. Zudem stehen \vec{E} - und \vec{B} -Feld senkrecht zur Ausbreitungsrichtung, die durch den Wellenvektor \vec{k} gegeben ist. Um die Richtung der Polarisation zu beschreiben, wird eine Basis relativ zur Einfallsebene gewählt. Für eine Ausbreitung in z-Richtung gilt für das \vec{E} -Feld:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_{x0} * \cos(\omega t - kz) \\ E_{y0} * \cos(\omega t - kz + \delta) \end{pmatrix}$$
(2.2)

wobei δ die Phasendifferenz zwischen den Komponenten angibt.

Durch Elimination der Zeit t in Gleichung 2.2 können Aussagen über die Orientierung des \vec{E} -Feldes an einem bestimmten Ort zu allen Zeitpunkten gemacht werden. Für E_{x0} , $E_{y0} \neq 0$ gilt

$$\frac{E_x^2}{E_{x0}^2} + \frac{E_y^2}{E_{y0}^2} - 2 * \frac{E_x}{E_{x0}} \frac{E_y}{E_{y0}} * \cos(\delta) = \sin^2(\delta),$$
(2.3)

wodurch im Allgemeinen eine Ellipse beschrieben wird.



Abbildung 2.1: Gedrehte Polarisationsellipse mit Azimutwinkel Θ und Elliptizität *e*. Der elektrische Feldvektor ist mit \vec{E} angegeben. Die Halbachsen der Ellipse sind mit *a* und *b* bezeichnet und nicht gleichzusetzen mit den Amplituden E_{x0} und E_{y0} [4,15]. Der Polarisationszustand von Licht ist von dem Quotienten E_{y0}/E_{x0} und der Phasendifferenz δ abhängig, welche aus der Ellipsenform abgeleitet werden können:

$$tan(\psi) = \frac{E_{y0}}{E_{x0}}.$$
 (2.4)

Hiermit lassen sich für die Wertepaare (Θ, e) und (δ, ψ) folgende Gleichungen herleiten:

$$tan(2\Theta) = \frac{2tan(\psi)}{1 - tan^2(\psi)} * \cos(\delta)$$
(2.5)

$$\sin(2e) = \frac{2\tan(\psi)}{1 + \tan^2(\psi)} * \sin(\delta)$$
(2.6)

Das Wertepaar (θ , e) beschreibt den Polarisationszustand und kann von dem Ellipsometer ausgelesen werden. Dadurch ist es möglich eine Phasendifferenz δ und ein Maß des Amplitudenverhältnisses ψ herleiten. Die Elliptizität e lässt sich über

$$tan(e) = \frac{b}{a} \tag{2.7}$$

bestimmen und ist als geometrische Beschreibung der Ellipse zu verstehen.

Die Einfallsebene ergibt sich aus der Ausbreitungsrichtung des einfallenden und reflektierten Lichtes, sowie der Normalen der reflektierenden Grenzschicht.



Abbildung 2.2: Einfallende Lichtwelle und Lot auf der Probenoberfläche geben die Einfallsebene vor. Der Einfallswinkel wird mit φ bezeichnet. Die Indizes p und s stehen für die parallel, bzw. senkrecht zur Einfallsebene polarisierten Komponenten der Welle. Die einfallende Welle wird mit i, die reflektierte Welle mit r gekennzeichnet.

Das elektrische Feld \vec{E} der einfallenden Welle kann in eine Komponente \vec{E}_s senkrecht zur Einfallsebene und eine Komponente \vec{E}_p parallel zur Einfallsebene zerlegt werden. Dadurch kann jeder Polarisationszustand der Welle mit der Phasendifferenz

$$\delta = \delta_p - \delta_s \tag{2.8}$$

zwischen den beiden Komponenten, sowie das Amplitudenverhältnis $\frac{E_{0p}}{E_{0s}}$ dargestellt werden. \vec{E} lässt sich durch den komplexen Jones-Vektor ausdrücken:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} |E_{0p}|e^{i\delta_p} \\ |E_{0s}|e^{i\delta_s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{0p} \\ E_{0s} \end{pmatrix}$$
(2.9)

Phasendifferenz und Amplitudenverhältnis sind ausschlaggebend für den Polarisationszustand der Welle. Zusammenfassend ist der Polarisationszustand des Lichts:

- linear, falls $\delta_p \delta_s = 0^\circ \vee \delta_p \delta_s = \pi$
- zirkular, falls $\delta_p \delta_s = \pi/2 \wedge |E_{0p}| = |E_{0s}|$
- elliptisch, falls $\delta_p \delta_s \neq 0^\circ \land |E_{0p}| \neq |E_{0s}|$.

2.2 Der (komplexe) Brechungsindex

Wenn eine elektromagnetische Welle, wie bspw. Licht, auf Materie trifft, verändert sich ihre Phasengeschwindigkeit v_{ph} von der Vakuumlichtgeschwindigkeit c_0 zu

$$v_{ph} = \frac{c_0}{n} = c. (2.10)$$

Die Abhängigkeit des Brechungsindexes n von der Wellenlänge λ wird als Dispersion bezeichnet. Neben der Phasengeschwindigkeit ändert sich die Wellenlänge zu

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n},\tag{2.11}$$

wobei die Frequenz ν des Lichtes konstant bleibt. Aus dem Modell des klassischen Oszillators folgt, dass der Brechungsindex komplexwertig ist und als $n = n_r - i\kappa$ angesetzt werden kann. Der Imaginärteil κ wird als Extinktionskoeffizient bezeichnet und ist wie der Realteil n_r abhängig von der Wellenlänge λ des Lichtes. Für das \vec{E} -Feld einer Welle ergibt sich nach Durchlaufen eines Mediums mit komplexem Brechungsindex und der Dicke¹ Δz :

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0 * \exp\left(i\omega\left(t - \frac{z}{c_0}\right)\right) * \underbrace{\exp\left(-i\omega(n_r - 1)\frac{\Delta z}{c_0}\right)}_{Phasenverz\"ogerung} * \underbrace{\exp\left(-\omega\kappa\frac{\Delta z}{c_0}\right)}_{Absorption}.$$
(2.12)

Der Extinktionskoeffizient κ verursacht einen zusätzlichen Faktor, der eine Verringerung der Amplitude bewirkt. Bei durchsichtigen Medien wie Luft oder Glas ist $\kappa \approx 0$ und demnach $n_r \approx n$.

¹ Für die Herleitung sei auf [4] verwiesen.

Mithilfe der Intensität

$$I = \epsilon_0 c_0 |\vec{E}|^2 \tag{2.13}$$

und Gleichung 2.12 ergibt sich das Absorptionsgesetz

$$I = I_0 * e^{-\alpha \Delta z}.$$
 (2.14)

Dabei wird α als Absorptionskoeffizient bezeichnet, welcher von dem Extinktionskoeffizienten abhängig ist:

$$\alpha = \frac{4\pi\kappa}{\lambda_0} = 2k_0\kappa \tag{2.15}$$

Somit ist κ direkt mit der Absorption verknüpft.

2.3 **Reflexion von Licht**

Die Beschreibung von Lichtbrechung und -reflexion, sowie die Polarisation und die Änderung der Polarisation sind in der Ellipsometrie unverzichtbar. Daher wird in diesem Abschnitt auf die mathematische Beschreibung der Reflexion von Licht eingegangen.

2.3.1 Substratmodell

Im Substratmodell wird von zwei halbunendlichen², homogenen und isotropen Medien ausgegangen. Zudem ist es üblich, diese Medien als nichtmagnetisch anzunehmen. Im Modell wird ein Medium als Umgebung (hier: Luft) und eines als Substrat bezeichnet (Vgl. Abbildung 2.3).

Trifft eine Lichtwelle aus einem Medium mit dem Brechungsindex $n_1 = n_{r1}$ (mit $\kappa_1 = 0$, z.B. Luft) auf ein zweites Medium mit dem Brechungsindex $n_2 = n_{r2} - i\kappa_2$, wird die elektromagnetische Welle an der Grenzfläche der zwei Medien aufgespalten in eine gebrochene und eine reflektierte Welle. Beide Wellen pflanzen sich weiterhin in der Einfallsebene fort, ihre Geschwindigkeiten unterscheiden sich jedoch. Für die reflektierte Welle gilt nun

$$c_1 = \frac{c_0}{n_{r1}} = \frac{c_0}{n_1}.$$
(2.16)

Sie hat folglich dieselbe Geschwindigkeit, wie die einfallende Welle. Die gebrochene Welle weist hingegen eine Geschwindigkeit von

$$c_2 = \frac{c_0}{n_{r2}} \tag{2.17}$$

auf. Zusätzlich unterscheiden sich die Winkel zum Lot der Grenzfläche (Abbildung 2.3). Für die re-

² Von halbunendlich wird in diesem Zusammenhang gesprochen, wenn das Medium stark genug absorbiert, oder die untere Fläche stark genug angeraut ist, sodass diese nicht nennenswert reflektiert.

flektierte Welle gilt $\varphi_1 = {\varphi'}_1$ (Einfallswinkel = Reflexionswinkel). Für die Berechnung des Brechungswinkels φ_2 wird das Brechungsgesetz nach Snellius benötigt:



$$\frac{\sin(\varphi_1)}{\sin(\varphi_2)} = \frac{c_1}{c_2} = \frac{n_{r_2}}{n_1}.$$
(2.18)

Abbildung 2.3: Lichtbrechung an einer Grenzschicht zwischen zwei Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes n_1 und n_2 . Die Lichtwelle fällt unter einen Winkel φ_1 auf die Oberfläche und wird zum einen Teil unter dem Winkel φ'_1 reflektiert und zum anderen Teil unter dem Winkel φ_2 transmittiert.

Das Brechungsgesetz gilt nur für optisch isotrope Dielektrika sowie in guter Näherung für schwach absorbierende Medien, bei denen $\kappa_2 \ll n_{r2}$ gilt. Bei stark absorbierenden Medien kann der Brechungswinkel über

$$tan(\varphi_2) = \frac{n_1 * sin(\varphi_1)}{Re\left\{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 * sin^2(\varphi_1)}\right\}}$$
(2.19)

berechnet werden [2]. Für den Fall, dass $n_2 = n_{r2}$ ist, ergibt sich aus Gleichung 2.19 das bekannte Snellius'sche Brechungsgesetz. Die Änderung der Amplituden, der Phasendifferenz und somit des Polarisationszustandes der Welle bei der Reflexion, wird durch den sogenannten Reflexionskoeffizienten erklärt. Dieser stellt einen Zusammenhang zwischen den Amplituden $E_{0p,s} * e^{i\delta_{p,s}}$ einer einfallenden Welle $\vec{E^i}$ und einer reflektierten Welle $\vec{E^r}$ her. Der Reflexionskoeffizient *R* wird in eine parallele und eine senkrechte Komponente zur Einfallsebene unterschieden:

$$R_{p} = \frac{E_{0p}^{r}}{E_{0p}^{i}} * e^{i(\delta_{p}^{r} - \delta_{p}^{i})}$$
(2.20)

$$R_s = \frac{E_{0s}^r}{E_{0s}^i} * e^{i(\delta_s^r - \delta_s^i)}$$
(2.21)

Die Exponentialterme ergeben sich für linear polarisiertes Licht zu Eins. Die Reflexionskoeffizienten R_p und R_s des \vec{E} -Feldes sind im Allgemeinen ungleich. Daraus kann abgeleitet werden, dass sich Amplitudenverhältnis und Phasendifferenz nach der Reflexion verändert haben. Folglich ändert sich der Polarisationszustand des Lichtes durch die Reflexion. Ein Mehrschichtmodell wird in dieser Arbeit nicht erläutert, da die im Rahmen dieser Arbeit vermessenen Proben bereits mit dem Einschichtmodell erklärt werden können. Eine weitere Schicht wurde nicht aufgedampft.

Aus geometrischen Überlegungen zu der zur Grenzfläche tangentialen und senkrechten Komponente des \vec{E} - und \vec{B} -Feldes, lassen sich die sogenannten Fresnel-Koeffizienten ableiten:

$$r_{12}^{p} = \frac{n_{2}\cos(\varphi_{1}) - n_{1}\cos(\varphi_{2})}{n_{2}\cos(\varphi_{1}) + n_{1}\cos(\varphi_{2})}$$
(2.22)

$$r_{12}^{s} = \frac{n_1 \cos(\varphi_1) - n_2 \cos(\varphi_2)}{n_1 \cos(\varphi_1) + n_2 \cos(\varphi_2)}$$
(2.23)

Wie in Kapitel 2.3 bereits erwähnt, kann für schwach absorbierende Medien das Snellius'sche Brechungsgesetz angewendet werden. Dadurch ergibt sich $\cos(\varphi_2)$ zu:

$$cos(\varphi_2) = \sqrt{1 - \frac{n_1^2}{n_2^2} sin^2(\varphi_1)}.$$
 (2.24)

Aus den Gleichungen 2.22 und 2.23 lässt sich entnehmen, dass r_{12}^p und r_{12}^s von den Brechungsindizes und dem Einfallswinkel abhängig sind.

Trifft das Licht unter dem Brewsterwinkel φ_B auf die Probe, so verschwindet die p-Komponente des reflektierten Lichtes. Der reflektierte Lichtstrahl ist dann s-polarisiert. Über die Beziehung

$$\tan(\varphi_B) = n_2 \tag{2.25}$$

kann der Brechungsindex n_2 bei Isolatoren oder in Näherung für schwach absorbierende Materialien berechnet werden. Weitere Beschreibungen sind in den Abschnitten 3.4 und 5.1 gegeben.

2.3.2 Einschichtmodell

Der für diese Arbeit wichtigere Fall ist, dass das Substrat mit einer dünnen oder ultradünnen Schicht überzogen ist. Sowohl Substrat als auch aufgetragene Schicht sind als nichtmagnetisch, homogen und isotrop vorauszusetzen. Zudem wird die Parallelität der Grenzflächen angenommen, wie Abbildung 2.5 zeigt. Die auf die Probe treffende elektromagnetische Welle wird an den Grenzflächen von Medium 1 und Medium 2 bzw. von Medium 2 und Medium 3 mehrfach reflektiert und transmittiert. Insgesamt entsteht eine reflektierte Welle, die aus der Überlagerung aller Teilwellen besteht.



Abbildung 2.4: Im Einschichtmodell trifft das Licht aus Medium 1 mit einem Brechungsindex n_1 unter einem Winkel φ_1 auf eine Schicht mit einer Dicke d_2 und einem Brechungsindex n_2 . Wie im Substratmodell wird der Strahl teilweise unter dem Winkel φ'_1 reflektiert und teilweise unter einem Winkel φ_2 transmittiert. Der transmittierte Strahlt trifft auf die Grenzfläche 2 zwischen Medium 2 mit dem Brechungsindex n_2 und Medium 3 mit dem Brechungsindex n_3 . Hier wird dieser wie an Grenzschicht 1 aufgespalten. Der Vorgang wiederholt sich, sodass der von der Probenoberfläche reflektierte Strahl aus einer Überlagerung vieler Teilstrahlen besteht [4,15].

Wird über alle Teilwellen, jeweils einzeln für p- und s-Komponente der elektromagnetischen Welle, aufsummiert, ergibt sich eine geometrische Reihe, die ausgewertet zu den Reflexionskoeffizienten führt:

$$R_{p,s} = \frac{r_{12}^{p,s} + r_{23}^{p,s} * e^{-i2\beta_2}}{1 + r_{12}^{p,s} * r_{23}^{p,s} * e^{-i2\beta_2}}$$
(2.26)

mit

$$\beta_2 = 2\pi * \frac{d_2}{\lambda} * n_2 * \cos(\varphi_2) = 2\pi * \frac{d_2}{\lambda} * \sqrt{n_2^2 - n_1^2 * \sin^2(\varphi_1)}$$
(2.27)

und n_1, n_2 reellwertig. Bei $r_{ij}^{p,s}$ handelt es sich um die Fresnel-Koeffizienten für die Reflexion der Welle an der Grenzfläche zwischen den Schichten *i* und *j*. Zu beachten ist, dass die zweite Relation der Gleichung 2.27 nach dem Brechungsgesetz von Snellius nur für schwach absorbierende Medien gilt. Falls die Voraussetzung nicht erfüllt ist, wird der Formalismus entsprechend Gleichung 2.19 komplizierter.

2.4 Grundgleichung der Ellipsometrie

Mit dem Verhältnis der in Kapitel 2.3 bereits genannten Reflexionskoeffizienten kann ein Zusammenhang zwischen n_r , κ und der Schichtdicke d der Schichten des Materialsystems mit dem Polarisationszustand nach der Reflexion hergestellt werden. Dieses Verhältnis wird im Allgemeinen mit ρ bezeichnet. Mit den in Gleichung 2.20 und 2.21 angegebenen Beziehungen ergibt sich ρ zu:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \frac{E_{0p}^r e^{i\delta_p^r} / E_{0p}^i e^{i\delta_p^i}}{E_{0s}^r e^{i\delta_s^r} / E_{0s}^i e^{i\delta_s^i}}$$
(2.28)

Hieraus erhält man die Phasendifferenz

$$\delta^{i,r} = \delta^{i,r}_p - \delta^{i,r}_s \tag{2.29}$$

zwischen der *p*- und *s*-Komponente der jeweiligen Welle vor und nach der Reflexion. Die ellipsometrischen Grundgrößen bilden Δ und ψ , welche wie folgt definiert werden:

$$\Delta \coloneqq \delta^r - \delta^i \tag{2.30}$$

$$\psi \coloneqq \arctan\left(\frac{E_{0p}^{r}/E_{0s}^{r}}{E_{0p}^{i}/E_{0s}^{i}}\right)$$
(2.31)

 Δ stellt demnach die durch die Reflexion verursachte Phasendifferenz zwischen einfallender und reflektierter Welle dar. Mit ψ kann ein Maß für die ebenfalls durch Reflexion verursachte Veränderung der Amplituden angegeben werden. Mithilfe der Definitionen und Gleichung 2.28 kann die Grundgleichung der Ellipsometrie formuliert werden:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \tan(\psi) * e^{i\Delta}.$$
(2.32)

Das Verhältnis ρ der Reflexionskoeffizienten ist demnach von den Materialeigenschaften

- Brechungsindex n_i ,
- Extinktionskoeffizient κ_i und
- Schichtdicke *d_i*

der Probe abhängig³. Die Größen Δ und ψ , aus denen auch ρ berechnet werden kann, können aus den Polarisationszuständen der einfallenden und reflektierten Welle bestimmt werden. Wird eine Polarisationsänderung zwischen einfallender und reflektierter Welle gemessen und sind zudem genügend Parameter der vermessenen Probe bekannt, so können die ausstehenden Parameter berechnet werden. Wie in Kapitel 3.1 genauer beschrieben, wird das Licht bereits vor dem Auftreffen auf die Probe polarisiert. Es wird die Polarisation der im Allgemeinen elliptisch polarisierten reflektierten Lichtwelle über die Elliptizität *e* und den Azimutwinkel Θ gemessen. Mit diesen Werten können mittels Gleichungen 2.5 und 2.6 die Phasendifferenz δ^r und $\tan(\psi^r) = E_{0p}^r/E_{0s}^r$ bestimmt werden, wobei gilt:

$$tan(\psi) = \frac{tan(\psi^r)}{tan(\psi^i)}$$
(2.33)

³ Der Index i bezeichnet hier die jeweilige Anzahl der Komponenten der Probe.

Angewendet auf das Substratmodell ergibt sich ρ als das Verhältnis der Fresnel-Koeffizienten. Im Allgemeinen können Angaben zum Einfallswinkel φ_1 und zum Brechungsindex der Umgebung (oftmals Luft) gemacht werden, sodass die Gleichung mithilfe des Snellius'schen Brechungsgesetzes umgestellt werden kann zu:

$$n_2 = n_1 \sin(\varphi_1) * \sqrt{1 + \left(\frac{1-\rho}{1+\rho}\right)^2 * \tan^2(\varphi_1)}.$$
(2.34)

Dies ist jedoch der einzigen Fall, in dem die Grundgleichung der Ellipsometrie analytisch gelöst werden kann. Bereits bei dem Einschichtmodell wird ρ durch Exponentialterme deutlich komplizierter, sodass eine Berechnung der interessierenden Größen nur numerisch erfolgen kann.

3 Experimentelles

Im Folgenden werden die technischen Grundlagen des Ellipsometers behandelt.



Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des Ellipsometers des Typs EL X-02C.

Der schematische Aufbau ist in Abbildung 3.1 dargestellt und kann folgendermaßen beschrieben werden: Bei der Lichtquelle handelt es sich um einen He-Ne-Laser, der monochromatisches Licht der Wellenlänge $\lambda = 632,8$ nm aussendet. Danach passiert das Licht einen Polarisator und gegebenenfalls einen Kompensator, mit denen der Polarisationszustand definiert wird. Bei dem Kompensator handelt es sich um ein $\lambda/4$ – Plättchen. Nach der Reflexion an der Probe durchläuft das Licht einen Polarisator und trifft anschließend auf den Detektor, der die Intensität des Lichtes für die jeweilige Analysatorstellung misst. Im nachfolgenden Abschnitt werden die einzelnen Komponenten des EL X-02C genauer erläutert.

3.1 Geräteausstattung

Das EL X-02C verfügt über einen He-Ne-Laser als Lichtquelle, der stark monochromatisches Licht aussendet. Durch die gebündelten Strahlen des Laserlichtes wird eine Leistung von 3 mW auf eine kleine Fläche (< 1 mm²) der Probe fokussiert. Der Polarisationszustand des Laserlichtes ist nicht zwingend bekannt und hängt von dem Laser und dem Aufbau des Ellipsometers ab. Im Strahlverlauf wird als nächstes Bauteil der Glan-Thompson-Polarisator passiert, der den Polarisationszustand der Lichtwelle definiert. Nach dem Durchlaufen des Bauteils ist das Licht linear polarisiert. Der in Abbildung 3.1 aufgeführte Kompensator ist in dem Modell des für diese Arbeit verwendeten Ellipsometers nicht eingebaut. Der Grund liegt in der Temperaturempfindlichkeit eines solchen Bauteils und den damit verbundenen Messfehlern [4]. Der Laserstrahl wird an der Probe reflektiert und gelangt erneut in einen Glan-Thompson-Polarisator (in Abbildung 3.1 Analysator genannt). Dieser kann durch einen internen Motor auf 0,001° genau rotiert werden⁴. Das an dieser Stelle transmittierte Licht wird verstärkt und am Ende von einer Vier-Quadranten-Diode detektiert.

3.2 Modifikation und Problematik

Das Ellipsometer des Typs EL-X02 C der Firma *Dre GmbH* befindet sich nicht mehr in dem ausgelieferten Zustand. Es wurde eine Probenausrichthilfe am Gerät installiert, sodass die Justage einer Probe auf dem Probentisch erleichtert wird. Es handelt sich um einen auf den Probentisch zielenden Laser, der über eine Eisenstange mit der Bodenplatte des Ellipsometers verbunden ist. Der ausgehende Laserstrahl wird von der auf dem Probentisch befindlichen Probe auf ein Zielkreuz zurückreflektiert, wodurch der Tisch plan ausgerichtet werden kann. Als Weiteres wurde während dieser Arbeit bei dem Probentisch ein zusätzlicher Schiebetisch eingebaut, um eine Verschiebung in y-Richtung durchführen zu können. Somit ist eine Ausrichtung der Probe in allen Ebenen möglich.

Außerdem wurde der Laserarm des Ellipsometers modifiziert. Durch die Justage des Lasers mittels der vier Justageschrauben am linken Ende des Laserarms, fiel eine Schwäche des Gehäuses auf, sobald die Schrauben fest angezogen wurden. Ein Auseinanderdrücken des zweiteiligen Gehäuses wird durch zwei Schellen verhindert, die um den Laserarm gelegt werden können. Eine Testmessung in der 90°-Grundstellung ergab, dass der eingebaute Laser im Gehäuse um ca. 47° statt vorgesehenen 45° gedrehtes Licht aussendet.

Ein weiteres Problem bei der Justage bilden die Halterungsbolzen des Laser- und Detektorarms. Diese dienen dazu, die Arme des Ellipsometers in einem eingestellten Winkel zu halten. Die Bolzen liegen in den vorgesehenen Bohrungen im hinteren Gehäuse nur auf einer schmalen Fläche auf. Durch die einwirkenden Kräfte der Arme auf diese Bolzen, haben sich diese leicht verbogen. Es zeigt sich, dass die Betätigung der Bolzen eine Dejustage des Laser- bzw. des Detektorarms zur Folge hat, die mittels der verschiedenen Einstellungsmöglichkeiten des Probentisches kompensiert werden muss. Dadurch trifft der Laser eventuell nicht mehr auf den zuvor vermessenen Punkt der Probe, wodurch eine Vermessung mit mehreren Messpunkten fehleranfälliger wird.

3.3 Messmethoden

In der Ellipsometrie existiert eine Vielzahl an verschiedenen Messmethoden. In dieser Arbeit wird auf die von dem Ellipsometer verwendbaren Methoden eingegangen – der rotierende Analysator und die Minimumsuche.

3.3.1 Rotierender Analysator

Bei der Messmethode des rotierenden Analysators bleibt der Polarisator in einem festen Winkel zur Einfallsebene fixiert. Optional kann auch der Kompensator fixiert bleiben, dieser ist allerdings nicht standardmäßig in dem verwendeten EL X-02C eingebaut. Nach Reflexion an der Probe ist das Licht im Allgemeinen elliptisch polarisiert. Der Analysator rotiert in äquidistanten Winkeln und vermisst so das reflektierte elliptisch polarisierte Licht. Dabei wird unter jedem Winkel eine bestimmte linear po-

⁴ Diese Angabe stammt vom Hersteller.

larisierte Komponente der Ellipse vom Analysator durchgelassen. Die Komponenten unterscheiden sich in ihren Amplituden, wodurch die Intensitäten für jeden Winkel des Analysators variieren.



Abbildung 3.2: Messmethode Rotierender Analysator, schematischer Aufbau.

Innerhalb des Programms werden die gemessenen Werte (Intensitäten) mittels einer Fourier-Analyse modelliert. Aus den Fourier-Koeffizienten ergeben sich $\cos(\Delta)$ und $\tan(\psi)$ woraus sich Δ und ψ berechnen lassen [2]. Im Bereich von $\Delta \approx 0^{\circ}$ und $\Delta \approx 180^{\circ}$ führt dies allerdings zu größeren Ungenauigkeiten. Ein Kompensator ändert die Phasendifferenz der einfallenden Lichtwelle und damit auch den Wert von Δ . Dadurch kann verhindert werden, dass dieser Wert in dem benannten problematischen Bereich liegt [5]. Eine weitere Schwierigkeit bei diesem Messverfahren bilden kleine Elliptizitäten.



Abbildung 3.3: Durch eine Messung der Intensitäten in äquidistanten Winkeln γ wird die Polarisationsellipse aufgeweitet [4].

In diesem Fall folgt einer Messung in äquidistanten Winkeln γ eine Aufweitung der Ellipse durch die Fourier-Analyse. Dies bewirkt größere Fehler für Δ und ψ . Entsprechend werden große Elliptizitäten sehr gut in dieser Messmethode vermessen. Aus der Fehleranfälligkeit für Δ und ψ aus besagten Gründen folgt ein relativ großer Fehler für die Schichtdicke *d*, weshalb bei sehr dünnen Schichten das Verfahren der Minimumsuche bevorzugt werden sollte.

3.3.2 Minimumsuche

Neben der im vorherigen Abschnitt erläuterten Messmethode ist die Minimumsuche eine zweite, oft angewendete Messmethode des EL X-02C. Der Aufbau ähnelt dem des in 3.3.1 genannten Rotierenden-Analysator-Modus ohne Kompensator.

Der Polarisator wird auf einen festen Winkel zur Einfallsebene fixiert, sodass das einfallende Licht mit einem Azimutwinkel Θ^i linear polarisiert ist. Θ^i ist durch eine Elliptizität $e^i = 0^\circ$ und den Winkel des Polarisators festgelegt. Nachdem das Licht an der Probenoberfläche reflektiert wird, ist es im Allgemeinen elliptisch polarisiert.



Abbildung 3.4: Messverfahren Minimumsuche. Die \vec{E} -Feld-Komponente mit minimaler Intensität zeigt zum Punkt A oder A'. Analog zeigt die \vec{E} -Feld-Komponente maximaler Intensität zum Punkt B oder B'. Aus diesen Daten kann die Elliptizität *e* und der Azimutwinkel Θ bestimmt werden.

Bei der Polarisationsellipse werden mittels Analysator und Detektor die Elliptizität e^r und Azimutwinkel Θ^r der reflektierten Lichtwelle vermessen [4]. Durch die Rotation des Analysators wird das Intensitätsminimum so abgeschätzt, dass sich die beim Analysator durchgelassene \vec{E} -Feld-Komponente in der Nähe des Punktes A befindet. Erst dann wird das Intensitätsminimum $I_{min}(\Theta^r)$ genau gemessen. Analog wird das senkrecht zu $I_{min}(\Theta^r)$ befindliche Intensitätsmaximum $I_{max}(\Theta^r)$ vermessen (vgl. Abbildung. 3.4). Aus der Messung von $I_{max}(\Theta^r)$ ergibt sich aus dem Winkel des Analysators der Azimutwinkel Θ^r . Aus den Proportionalitäten $I_{min,max} \propto E_{min,max}^2$ und dem Verhältnis von I_{min} und I_{max} folgt die Elliptizität e^r :

$$\frac{I_{min}}{I_{max}} = \frac{E_{min}^2}{E_{max}^2} \Rightarrow \tan(e^r) = \sqrt{\frac{I_{min}}{I_{max}}}$$
(3.1)

Mit $\Theta^{i,r}$ und $e^{i,r}$ können mittels der Gleichungen 2.5 und 2.6 die Größen $\delta^{i,r}$ und $\psi^{i,r}$ berechnet werden. Mit diesen Werten können mithilfe der Grundgleichung der Ellipsometrie Δ und ψ bestimmt werden. Die Polarisationsänderung und die Eigenschaften der untersuchten Probe sind miteinander verknüpft. Das Messverfahren der Minimumsuche ist besonders für kleine Elliptizitäten e^r gut geeignet, wohingegen es bei großen Elliptizitäten größere Messfehler verursacht.

3.4 Trajektorien

Ein Messergebnis bei der Ellipsometrie besteht im Allgemeinen aus (Δ, ψ) -Tupeln, mit denen bei zunehmender Schichtdicke Graphen erstellt werden können, aus denen sich physikalische Sachverhalte ableiten lassen. Wird das Reflexionsvermögen einer Probe gegen den Einfallswinkel aufgetragen, lassen sich folgende Aussagen für ψ machen.



Abbildung 3.5: Reflexionsvermögens eines transparenten (links) und eines leitenden Materials (rechts) in Abhängigkeit vom Einfallswinkel [4].

Für das Reflexionsvermögen $\Re_{p,s} = (r^{p,s})^2$ gilt $\Re_p < \Re_s$ für alle Winkel und dadurch auch $|r^p| < |r^p|$. Daraus ergibt sich für ψ :

$$\frac{|r^p|}{|r^s|} = \tan(\psi) < 1 \implies \psi < 45^{\circ}$$
(3.2)

Auch über Δ können Aussagen getroffen werden. Die von der Reflexion verursachte Phasendifferenz von 0° oder 180° bei Isolatoren ist abhängig davon, ob der Einfallswinkel φ_1 kleiner oder größer als der Brewsterwinkel φ_B ist. Bei einer Näherung zu φ_B wird das Reflexionsvermögen minimal, für Isolatoren gilt dann $R_p = 0$. Für einen Einfallswinkel $\varphi_1 < \varphi_B$ erfährt die s-polarisierte Welle eine Phasendifferenz von 180°, die p-polarisierte Welle keine Phasendifferenz. Bei $\varphi_1 > \varphi_B$ erfährt auch die p-polarisierte Welle einen Phasensprung von 180° wodurch per Definition $\Delta = 0°$ gilt [1]. Der Übergang von $\Delta = 180°$ zu $\Delta = 0°$ ist bei stark absorbierenden Materialien ($\kappa > 0$) kontinuierlich.



Abbildung 3.6: Von der Reflexion verursachte Phasendifferenz für Isolatoren und Leiter [4].

Im Substratmodell liegen somit Δ und ψ in den folgenden Intervallen:

- $0^\circ \le \Delta \le 180^\circ$
- $0^\circ \le \psi \le 45^\circ$

Werden im Einschichtmodell die (Δ, ψ) -Tupel bei wachsender Schichtdicke beobachtet, lassen sich aus den Werten charakteristische Materialeigenschaften erschließen. Dieser Merkmale unterschieden sich bei Isolatoren und leitenden Schichten. Weiter ist es möglich, die Schichtdicke so groß zu wählen, dass die Grenzschicht zum Substrat keine nennenswerte Strahlung reflektiert. In diesem Fall wird die aufgedampfte Schicht wie ein Substrat behandelt. Eine solche Probe wird in Abschnitt 5.2.1 untersucht.



Abbildung 3.7: Trajektorie einer wachsenden Siliziumdioxidschicht auf Siliziumsubstrat bei einem Einfallswinkel von 70° und $\lambda = 632,8$ nm. Jede Markierung entspricht ein Schichtwachstum von 10 nm [4,15].

Als Beispiel sei an dieser Stelle ein Siliziumdioxidfilm auf einem Siliziumsubstrat angegeben. Das Verhalten der (Δ, ψ) -Werte bei einem Schichtzuwachs ist Abbildung 3.7 zu entnehmen. In dieser Abbildung ist zu erkennen, dass die (Δ, ψ) -Werte bei hoher Schichtdicke zum Startpunkt, dem Siliziumsubstrat, laufen. Dies bestätigt nochmals das Verhalten einer dicken Schicht als Substrat. Die Periodendicke d_p wird in Anlehnung zu Gleichung 2.25 mit der zusätzlichen Bedingung $2\beta_2 = 2\pi$ erhalten durch:

$$d_p = \frac{\lambda}{2\sqrt{n_2^2 - n_1^2 * \sin^2(\varphi_1)}}.$$
(3.3)

Bei Siliziumdioxid auf Siliziumsubstrat ergibt sich daraus mit den Werten $n_2 = 1,46$; $n_1 = 1$; $\lambda = 632,8$ nm; $\varphi_1 = 70^\circ$ eine Periodendicke von $d_p = 283,2$ nm. Nachdem der (Δ, ψ) -Graph den Startpunkt erreicht hat, ist er deckungsgleich zum vorherigen Kurvenverlauf. Die Periodendicke ist somit abhängig von der Wellenlänge und dem Einfallswinkel. Um die Problematik des deckungsgleichen Kurvenverlaufs bei höheren Schichtdicken zu verhindern, werden Messungen unter mehreren Einfallswinkeln oder Wellenlängen⁵ vorgenommen. Andernfalls könnte keine bestimmte Schichtdicke berechnet werden, da die errechnete Schichtdicke plus einer unbestimmten Anzahl an Periodendicken ebenfalls eine Lösung ist.

Nachfolgend wird der Zusammenhang der (Δ, ψ) -Tupel mit dem Brechungsindex n bei wachsender Schichtdicke betrachtet. Wie Abbildung 3.8 zu entnehmen ist, liegen die (Δ, ψ) -Graphen bei sehr dünnen Schichtdicken extrem eng aneinander und bei dickeren Schichten weiter auseinander. Folglich resultiert aus einem fehlerhaften Δ - oder ψ -Wert ein großer Fehler für den Brechungsindex n. Gerade ein fehlerhafter ψ -Wert kann den Fehler des Brechungsindex stark beeinflussen. Dies liegt daran, dass sich das Amplitudenverhältnis für (sehr) dünne Schichten fast gar nicht verändert, wodurch sich auch der ψ -Wert kaum verändert. Trotzdem gilt die Ellipsometrie auch für sehr dünne Schichten als sehr genaue Messmethode. Diese Genauigkeit wird durch die Phasendifferenz Δ erreicht. Bei einem aufgedampften dünnen Film mit Brechungsindex $n_2 = 2$ auf einem Siliziumsubstrat mit dem Brechungsindex $n_3 = 3,86 - 0,02i$ unter einem Einfallswinkel von $\varphi_1 = 70^\circ$ und einer Wellenlänge von $\lambda =$ 632,8 nm entspricht eine Änderung von Δ um 0,25° nach [5] eine Änderung der berechneten Schichtdicke von 0,1 nm. Für eine bestmögliche Bestimmung der Schichtdicke wird daher der Brechungsindex gegebenenfalls nach Gleichung 4.1 modelliert und auf einen geeigneten Wert fixiert. Soll jedoch der Brechungsindex bestimmt werden, sollte eine Schichtdicke gewählt werden, bei der die (Δ, ψ) -Werte einer halben Periodendicke entsprechen.



Abbildung 3.8: Trajektorien zu wachsenden Sichtdicken mit verschiedenen Brechungsindizes auf Siliziumsubstrat. Der Einfallswinkel beträgt 70° und die Wellenlänge 632,8 nm. Links: Vergrößerter Ausschnitt des linken unteren Quadranten. Rechts: Vollständige Trajektorien. Jeder Schichtwachstum von 10 nm ist markiert [4,15].

Ist das aufgedampfte Material ein (Halb)Leiter, wird wegen $\kappa \neq 0$ ein Teil der einfallenden Lichtwelle absorbiert. Daraus resultiert eine Änderung im Amplitudenverhältnis. Somit können sehr dünne Schichten von Metallen nur mit Einschränkungen vermessen werden. Die Problematik liegt in der Abhängigkeit zwischen den optischen Konstanten und den Ablagerungsbedingungen des Materials

⁵ Bei dem EL X-02C handelt es sich um ein Einwellenlängenellipsometer. Es kann daher nur der Einfallswinkel variiert werden.

und seiner Schichtdicke [5]. Die Anpassung der Schichtdicke, sowie des Brechungsindex führt wegen des Exponenten

$$\beta_2 = \frac{2\pi * d_2 n_2}{\lambda} * \cos(\varphi_2) \tag{3.4}$$

der Exponentialfunktion in den Reflexionskoeffizienten zu Korrelationen, da der Ausdruck in Gleichung 3.4 von $n_2 * d_2$ abhängig ist. Dadurch werden bei jeder Schichtdicke optische Konstanten erhalten, wodurch diese Daten gut zu den gemessenen Daten passen [5]. Zusammenfassend ist zu sagen, dass eine Vermessung einer Metallschicht nur durchgeführt werden sollte, wenn die zu berechnenden Größen bekannt sind.

Analog zu Abbildung 3.7 sei nachfolgend das Schichtwachstum eines (Halb)Leiters auf einem Siliziumsubstrat gezeigt. Als Beispiel diene dazu Tantal mit einem komplexen Brechungsindex von n = 1,72 - 2,09i.



Abbildung 3.9: Trajektorie einer wachsenden Tantalschicht auf Siliziumsubtrat. Der Einfallswinkel beträgt 70° und die Wellenlänge 632,8 nm. Jede Markierung entspricht 10 nm Wachstum [4].

Anders wie bei Abbildung 3.7 zu erkennen war, tritt hier keine Periodendicke auf. Auf Grund der Absorptionseigenschaft wird bereits vorher ein Punkt erreicht, der dem des Tantalsubstrates entspricht. Es lässt sich erkennen, dass die (Δ, ψ) -Punkte bei höheren Schichtdicken eng zusammenrücken. Auch hier resultieren aus kleinen Fehlern von Δ oder ψ möglicherweise große Fehler für die Schichtdicke *d*. Zusätzlich ist die Intensität der reflektierten Welle sehr gering, sodass sie eventuell nicht gemessen werden kann.

4 Schichtsysteme

Die während dieser Arbeit untersuchten Proben bestanden stets aus einem Siliziumsubstrat, auf das entweder Siliziumdioxid oder Silber unterschiedlicher Dicke aufgedampft wurde. Die durch die Messungen festgestellten Unterschiede der Proben, sowie die nachgewiesenen Eigenschaften, sollen im Nachfolgenden genauer erläutert werden.

4.1 Silizium

Silizium bildet bei allen vermessenen Proben das Substrat. Es handelt sich bei diesem Material um einen Halbleiter mit der Ordnungszahl 14 und einer Bandlücke von $\Delta E = 1,1$ eV bei einer Temperatur von 300 K [4,12]. Silizium kommt sowohl in poly- und monokristalliner als auch in amorpher Form vor, wobei diese Formen als nichtmagnetisch und optisch isotrop angenommen werden. Aus der Datenbank des EL X-02C sind folgende Brechungsindizes zu entnehmen:

| Datei | Brechungsindex | | Material |
|----------|-----------------------|----------------------------|------------------------------|
| | Realteil | Imaginärteil | |
| Si-1.mat | $n_r = 3,87 \pm 0,04$ | $\kappa=0,016\pm0,004$ | kristallines Silizium (c-Si) |
| Si-5.mat | $n_r = 4,20 \pm 0,05$ | $\kappa=0,\!422\pm0,\!005$ | amorphes Silizium (a-Si) |

Tabelle 4.1: Brechungsindizes für Silizium aus der Datenbank des EL X-02C.

Bei den durchgeführten Messungen mit dem EL X-02C wird von kristallinem Silizium als Substrat ausgegangen, weshalb der Wert aus der Datei *Si-1.mat* als Referenzwert für die Brechungsindexbestimmung gilt.

4.2 Siliziumdioxid

Siliziumdioxid ist ein Isolator mit einer Bandlücke von $\Delta E \approx 9$ eV bei 300 K. Bei einer Wellenlänge von $\lambda = 632,8$ nm ergibt sich sin Extinktionskoeffizient zu $\kappa = 0$. Beim Aufbau von Siliziumdioxid kann in zwei verschiedene Strukturen, die durch die Anordnung der SiO₄-Tetraeder entstehen, unterschieden werden. Die Sauerstoffatome dienen als Brücken zwischen den einzelnen Tetraedern. Ist der Bindungswinkel zwischen den Si-O-Si immer gleich, entsteht kristallines Siliziumdioxid, auch c-SiO₂ genannt. Sind die Bindungswinkel zufällig verteilt, so sind die einzelnen Tetraeder zueinander verkippt. Es entsteht amorphes Siliziumdioxid, oder a-SiO₂.



Abbildung 4.1: Aufbau von amorphen (links) und kristallinen Siliziumdioxid (rechts) [4].

Weil a-SiO₂ als optisch isotrop angenommen wird, können entsprechende Reflexionskoeffizienten verwendet werden. Anders ist es jedoch bei c-SiO₂. Dieses ist optisch anisotrop. Die in der Datenbank zu findenden Brechungsindizes für a-SiO₂ und c-SiO₂ sind Tabelle 4.2 zu entnehmen.

| Datei | Brechungsindex | Bemerkung |
|------------|-----------------------|---|
| sio2.mat | $n = 1,46 \pm 0,01$ | a-SiO ₂ (Quarzglas) |
| SiO2-1.mat | $n = 1,46 \pm 0,01$ | a-SiO ₂ (Quarzglas) |
| SiO2-1.mat | $n = 1,524 \pm 0,005$ | c-SiO ₂ bei \sim 300 K, ord. Polarisation |
| SiO2-1.mat | $n = 1,552 \pm 0,005$ | c-SiO ₂ bei \sim 300 K, außerord. Polarisation |

Tabelle 4.2: Brechungsindizes für Siliziumdioxid aus der Datenbank des EL X-02C.

Die Fehler sind auf \pm 1% geschätzt.

Bei sehr dünnen SiO₂-Schichten auf Siliziumsubstraten zeigt sich jedoch, dass der Brechungsindex größer wird. In diesen Fall kann der Brechungsindex für Schichtdicken 1 nm $\leq d_{SiO_2} \leq 8$ nm nach [2] folgendermaßen modelliert werden:

$$n_{SiO_2} = 2,139 - 0,088 * d_{SiO_2} \tag{4.1}$$

Bei einer nativen Oxidschicht der Dicke $d_{SiO_2}^{native} \approx 1$ nm ergibt die Modellierung in Gleichung 4.1 einen Brechungsindex von n = 2,0. Trotz einer relativ hohen Fehleranfälligkeit des Brechungsindex ergibt sich für die Schichtdicke nur ein sehr geringer Fehler. Die beim Aufdampfen entstehenden Grenzschichten zwischen Substrat und Schicht können mit dem Auswertprogramm des EL X-02C modelliert werden. Dazu sollte eine Bruggemann-Approximation⁶, mit Siliziumdioxid und Silizium als Bestandteile, benutzt werden. Auch eine eventuelle Rauheit der Probenoberfläche kann im Programm simuliert werden.

4.3 Silber

Silber ist ein Metall der Ordnungszahl 47 und besitzt mit $\sigma = 61,35 * 10^6 \frac{A}{Vm}$ die höchste elektrische Leitfähigkeit. Daraus folgt mit $\kappa = 3,99$ ein ebenfalls sehr hoher Extinktionskoeffizient. Es gilt

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = 1 + \frac{i4\pi}{\omega}\hat{\sigma}$$
(4.2)

wobei ε die komplexwertige relative Permittivität und $\hat{\sigma} = \sigma_1 + i\sigma_2$ die komplexe Leitfähigkeit darstellt. Zusammen mit der Beziehung $n = \sqrt{\varepsilon}$ und der Frequenz ν des Lichtes ergibt sich für κ :

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\varepsilon_1 + \sqrt{\left(\frac{2\sigma}{\nu}\right)^2 + \varepsilon_1} \right)}$$
(4.3)

Da die Wurzelfunktion monoton wächst, folgt aus einer hohen elektrischen Leitfähigkeit σ ein hoher

⁶ Eine von der Ellipsometer-Software bereitgestellte Möglichkeit, eine Grenzschicht mit Anteilen mehrerer Materialien zu simulieren [4].

Extinktionskoeffizient κ . Aus diesem folgt über Gleichung 2.15 ein hoher Absorptionskoeffizient α . Der Realteil n_r des Brechungsindex von Silber wird in der Datenbank angegeben und ist sehr klein.

| Datei | Brechungsindex | | |
|--------|-----------------------|--------------------------|--|
| | Realteil | Imaginärteil | |
| Ag.mat | $n_r = 0,13 \pm 0,03$ | $\kappa = 3,99 \pm 0,03$ | |

Tabelle 4.3:Brechungsindex von Silber. Entnommen aus der Datenbank des EL X-02C.

Die angegebenen Fehler sind dabei geschätzt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden verschiedene Silberschichten vermessen. Der Wert aus der Datei *Ag.mat* wird als Referenzwert genommen. Zur Berücksichtigung eventueller Grenzschichten sei auf Abschnitt 5.2 verwiesen.

5 Experimentelle Befunde

In diesem Kapitel werden die Messergebnisse beschrieben, diskutiert und graphisch veranschaulicht. Für die ab Abschnitt 5.2 auftretenden Abbildungen gilt, dass sich die Modellkurve aus der errechneten Schichtdicke und den durch Abschnitt 5.1 jeweils fixierten Brechungsindex für die verschiedenen Einfallswinkel ergibt. Bei den angegebenen Winkelbereichen wurden in 5°-Schritten jeweils 5 Messwerte aufgenommen. Eine Winkeländerung wird in der Modellkurve durch einen Farbwechsel gekennzeichnet, weshalb die Messpunkte möglichst genau auf einem Farbübergang liegen sollten.

5.1 Bestimmung des Brechungsindexes

Da die Computersoftware bei der Berechnung des Brechungsindexes einer Probe Schwierigkeiten zeigte, soll in dieser Arbeit die Brechungsindexbestimmung nicht über das Auswerteprogramm des Ellipsometers erfolgen. Im Wesentlichen werden drei Methoden getestet, die Brechungsindizes der Materialien zu bestimmen. Bei Silber und Siliziumdioxid wird eine möglichst dicke Schicht des zu untersuchenden Materials auf ein Substrat aufgedampft, damit keine Reflexionen der unteren Grenzschicht vorliegen. Um den Brechungsindex von Silizium zu bestimmen, wird ein Silizium-Wafer mit einem Native Oxide-Film benutzt. Anschließend wird das Schichtmodell in der Software angepasst.

Bei Methode 1 wird mittels der gemessenen (Δ, ψ) -Werte der Realteil von ρ über die Grundgleichung der Ellipsometrie berechnet und gegen den Einfallswinkel aufgetragen. Die Plots für Silizium, Siliziumdioxid und Glas sind in Abbildung 5.1 zu erkennen. Der Nulldurchgang der Graphen gibt den jeweiligen Brewsterwinkel des Materials an.



Abbildung 5.1: Bestimmung des Brewsterwinkels von Glas, Silizium und Siliziumdioxid.

Mit dem EL X-02C gelingt eine Vermessung der Proben in einem Winkelbereich von 35° bis 80°, bei Silber im Winkelbereich von 40° bis 80°. Bei Messversuchen unterhalb oder oberhalb dieses Bereiches kommt es zu einer Übersteuerung der Vier-Quadranten-Diode. Ein vor dem Detektor gehaltener Graufilter kann die Intensitäten nicht weit genug abschwächen. Die Graphen aus Abbildung 5.1 sind innerhalb des Messbereiches dargestellt. Die Kurve für den Realteil von Silber ist erst bei Methode 3 relevant. Durch diese Kurve kann der dort benötigte Brewsterwinkel bestimmt werden.

Über den Zusammenhang aus Gleichung 2.25 kann der Brewsterwinkel der einzelnen Materialien berechnet werden. Die Ergebnisse zeigt Tabelle 5.1.

| Material | Nulldurchgang / Brewsterwinkel | Brechungsindex |
|----------------|--------------------------------|---------------------|
| Glas | 56,50° | $1,51 \pm 0,02$ |
| Siliziumdioxid | 55,44° | $1,\!45 \pm 0,\!02$ |
| Silizium | 75,47° | $3,86 \pm 0,03$ |

Tabelle 5.1:Ergebnisse von Methode 1.

Der Fehler wird wegen der modellierten Kurve auf $\pm 0,02$ geschätzt. Für Silizium wird der Fehler etwas höher eingeschätzt, da bei diesem Verfahren der sehr kleine Extinktionskoeffizient vernachlässigt wurde.

Die berechneten Brechungsindizes stimmen innerhalb ihrer Fehlerwerte mit den Werten aus der Datenbank des EL X-02C überein. Eine Bestimmung des Extinktionskoeffizienten ist bei dieser Methode nicht möglich. Der Realteil des Brechungsindexes von Silizium ergibt sich dennoch sehr genau, da der Extinktionskoeffizient sehr klein ist.

Bei Methode 2 wird der Brechungsindex rein analytisch über die Gleichung 2.34 bestimmt. Unter jedem Winkel wird ein komplexer Brechungsindex n_2 berechnet. Die erhaltenen Werte werden anschließend aufsummiert und über die Anzahl der Messungen gemittelt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.2 dargestellt.

| Material | Schwankungen des Brechungsindexes | | | mittlerer Brechungsindex | |
|----------------|-----------------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------------|
| | Realteil | | Imaginärteil | | |
| | Tiefster | Höchster | Tiefster | Höchster | |
| | Wert | Wert | Wert | Wert | |
| Silber | 0,03 | 0,16 | 4,26 | 4,76 | $\bar{n}_{Ag} = 0,10 + 4,37i$ |
| | $(\varphi = 55^{\circ})$ | $(\varphi = 80^{\circ})$ | $(\varphi = 75^{\circ})$ | $(\varphi = 40^{\circ})$ | |
| Silizium | 3.81 | 3.89 | 0,02 | 0,05 | $\bar{n}_{Si} = 3,82 + 0,03i$ |
| | $(\varphi = 60^{\circ})$ | $(\varphi = 50^{\circ})$ | $(\varphi = 75^{\circ})$ | $(\varphi = 35^{\circ})$ | |
| Siliziumdioxid | 1,41 | 1,44 | 0 | 0 | $\bar{n}_{SiO_2} = 1,42$ |
| | $(\varphi = 60^{\circ})$ | $(\varphi = 45^{\circ})$ | | | |

Tabelle 5.2: Ergebnisse Methode 2.

Die Schwankungen für Real- und Imaginärteil sind bei Silber am stärksten. Die Fehler für die Anteile des gemittelten Brechungsindexes werden jeweils auf \pm 0,05 geschätzt, da Messung und Berechnung auf zwei Nachkommastellen als Fehlerfaktoren eingehen. Für Siliziumdioxid wurde nur der Realteil berechnet, da $\kappa = 0$ gilt.

Die dritte Methode nutzt die Eigenschaften des Brewsterwinkels aus. Im (Δ, ψ) -Graph wird $\Delta = 90^{\circ}$ fixiert und der dazugehörige Wert $\tan(\psi)$ bestimmt. Zusätzlich wird der Brewsterwinkel benötigt. Dieser kann durch einen $Re(\rho)$ - φ -Plott (Abbildung 5.1), oder einen Δ - φ -Plott (Abbildung 5.2), bei $\Delta = 90^{\circ}$, bestimmt werden.



Abbildung 5.2: Bestimmung des Brewsterwinkels von Silber für $\Delta = 90^{\circ}$.

Durch diese Voraussetzung vereinfacht sich Gleichung 2.34 zu

$$n_{2} = n_{1}\sin(\varphi_{B}) * \sqrt{1 + \left(\frac{1 - i * \tan(\psi)}{1 + i * \tan(\psi)}\right)^{2} * \tan^{2}(\varphi_{B})}.$$
(5.1)

Diese Methode wurde für Silizium und Silber getestet, die über einen sehr kleinen bzw. sehr großen Extinktionskoeffizienten verfügen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.3 gezeigt. Der Fehler wird auf ± 0.02 für Real- und Imaginärteil beider Materialien geschätzt.

| Material | Brewsterwinkel | ψ_B | Brechungsindex |
|----------|----------------|-----------------|-----------------------------|
| Silizium | 75,47° | 0,1° | 3,86 – 0,02 <i>i</i> |
| Silber | 76,63° | 44.08° | 0,14 <i>-</i> 4,01 <i>i</i> |

Tabelle 5.3: Ergebnisse Methode 3.

| Material | Methode | Brechungsindex | |
|----------------|-----------|---------------------|--------------------|
| | | Realteil | Imaginärteil |
| Silizium | Methode 1 | 3,86 ± 0,03 | |
| | Methode 2 | $3,82 \pm 0,05$ | $(0,03 \pm 0,05)i$ |
| | Methode 3 | $3,86 \pm 0,02$ | $(0,02 \pm 0,02)i$ |
| Siliziumdioxid | Methode 1 | $1,45 \pm 0,02$ | |
| | Methode 2 | $1,\!42 \pm 0,\!05$ | |
| | Methode 3 | | |
| Silber | Methode 1 | | |
| | Methode 2 | $0,\!10\pm0,\!05$ | $(4,37 \pm 0,05)i$ |
| | Methode 3 | $0,14 \pm 0,02$ | $(4,01 \pm 0,02)i$ |

In Tabelle 5.4 werden alle Ergebnisse der Methoden für Silizium, Siliziumdioxid und Silber zusammengefasst.

Tabelle 5.4: Übersicht der Ergebnisse der Methoden zur Bestimmung des Brechungsindexes.

Im Vergleich zeigt sich, dass alle Ergebnisse, mit Ausnahme des Imaginärteils von Silber bei Methode 2, innerhalb ihrer Fehler mit den Literaturwerten und den Werten der Datenbank übereinstimmen. Im Allgemeinen ist zu erkennen, dass Methode 2 am fehleranfälligsten ist und Ergebnisse mit den größten Abweichungen hervorbringt. Eine Bestimmung des Brechungsindexes für Isolatoren sollte mit Methode 1 erfolgen, da dieses Verfahren sehr genau ist und wenig mathematischen Aufwand erfordert. Zudem wird das Ergebnis graphisch gut dargestellt. Methode 1 eignet sich ebenfalls bei schwach absorbierenden Medien sehr gut. Jedoch wird dadurch nur der Realteil des Brechungsindexes bestimmt. Ein sehr genaues Verfahren liefert Methode 3. Der dafür benötigte Brewsterwinkel kann über mehrere Verfahren wie oben beschrieben bestimmt werden.

5.2 Bestimmung der Schichtdicken

Die Brechungsindizes werden nach Abschnitt 5.1 fixiert.

| Material | Brechungsindex |
|----------------|-------------------------|
| Silizium | $n_{Si} = 3,86 + 0,02i$ |
| Siliziumdioxid | $n_{SiO_2} = 1,45$ |
| Silber | $n_{Ag} = 0,14 + 4,01i$ |

Tabelle 5.5: Fixierung der Brechungsindizes.

Es werden Schichtdicken von Siliziumdioxidschichten und Silberschichten berechnet. Beide Materialsysteme liegen in verschiedenen Schichtdicken vor. Der Referenzwert der dicken Siliziumdioxidschicht wird durch das IHP in Frankfurt (Oder) gegeben und liegt bei $d_{SiO_2} = 99,37$ nm. Da die Probe vermutlich mit der gängigen Messmethode des Rotierenden Analysators vermessen wurde, wird der Fehler auf ±2 nm geschätzt. Die Schichtdicke der dünnen Siliziumdioxidschicht wird mit $d_{SiO_2} =$ 14,7 nm angegeben. Der Fehler wird auf ±3 nm geschätzt, da es sich um eine dünnere Schicht handelt. Während die dicke Siliziumdioxidschicht mit dem Rotierender-Analysator-Modus vermessen wird, werden bei der dünnen etwa 15 nm dicken Schicht beide Messmethoden angewendet und verglichen. Das genutzte Schichtmodell, dem die Berechnungen zu Grunde liegen, ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Die Grenzschicht zwischen Substrat und aufgedampfter Schicht wurde auf 1 nm geschätzt und durch die Bruggemann-Appoximation mit einem 50-50-Anteil beider Stoffe modelliert.



Abbildung 5.3: Modellierte Schichtsysteme. V.l.n.r.: Siliziumsubstrat, Glas, Siliziumdioxid, Silber.

Die Proben mit aufgedampften Silberschichten wurden im Rahmen dieser Arbeit hergestellt. Wie bei der Siliziumdioxidschicht wurden eine dicke und eine dünne Schicht aufgedampft. Für diese Proben existieren keine Referenzwerte. Die Untersuchung der Siliziumschicht und des Glases dienten dazu, den Brechungsindex der beiden Materialien zu bestimmen, da diese oftmals als Substrate dienen. Für die Bestimmung des Brechungsindexes von Siliziumdioxid und Silber wurden bei obigen Modellen sehr dicke Schichten gewählt. Die (Δ, ψ) -Graphen, aus deren Werten die Brechungsindizes für Silizium und Siliziumdioxid bestimmt wurden, sind in Abbildung 5.4 zu sehen.



Abbildung 5.4: (Δ, ψ) -Graphen zur Brechungsindexbestimmung von Silizium (link) und Siliziumdioxid (rechts).

5.2.1 Dicke Siliziumdioxidschicht

Die Probe wurde in einem Winkelbereich von 35° bis 80° vermessen. Messungen unter kleineren bzw. größeren Winkeln verursachten fehlerhafte Messwerte und werden daher nicht beachtet⁷. Ursache dafür ist die nicht ausreichende Intensität an der Vier-Quadranten-Diode bei den Winkeln. Der resultierende (Δ, ψ)-Graph ist in Abbildung 5.5 zu erkennen:



Abbildung 5.5: (Δ, ψ) -Graph einer dicken Siliziumdioxidschicht. Die dazugehörigem Werte sind $d_{SiO_2} = 98,2$ nm und $n_{SiO_2} = 1,45$.

Da es sich um eine dicke Schicht handelt, wurde sie mit der Rotierenden-Analysator-Methode vermessen. Die berechnete Schichtdicke beträgt $d_{SiO_2} = 98,2$ nm. Es werden die sehr geringen Abweichungen⁸ $a_{\Delta} = 0,26^{\circ}$ und $a_{\psi} = 0,2^{\circ}$ angegeben, sowie ein Gesamtfehler⁹ von $\xi = 0,25^{\circ}$. Die vom IHP in Frankfurt (Oder) gemessene Schichtdicke beträgt $d_{SiO_2} = 99,4$ nm wobei der Fehler auf ±2 nm ge-

⁷ In der Software des EL X-02C werden im Simulationsfenster rote Markierungen bei nicht verwendbaren Messungen angezeigt.

⁸ $a_{\Delta,\psi}$ gibt die mittleren Abweichungen zwischen experimentellen Werten $(\Delta, \psi)_{exp}$ und errechneten Werten $(\Delta, \psi)_{Mod}$ anhand des Modells an [4].

⁹ ξ stellt die Gesamtfehlerfunktion dar, die die beste Übereinstimmung zwischen $(\Delta, \psi)_{exp}$ und $(\Delta, \psi)_{Mod}$ ausgibt [4].

schätzt wird. Die Abweichung der Ergebnisse resultiert vermutlich aus leicht unterschiedlichen Brechungsindizes. Wird dieselbe Messung mit dem Brechungsindex $n_{SiO_2}^{Lit} = 1,46$ wiederholt, ergibt sich eine Schichtdicke von $d_{SiO_2} = 99,8$ nm, was nahezu den Wert vom IHP ergibt. Jedoch gibt das Programm hier leicht höhere Fehlerwerte an. Folglich wurde beim IHP vermutlich der Literaturwert für den Brechungsindex fixiert und nicht separat berechnet. Dennoch stimmt das Ergebnis für die Schichtdicke innerhalb der Fehlerwerte mit dem Referenzwert überein.

5.2.2 Dünne Siliziumdioxidschicht

Diese Probe wird aus oben genannten Gründen im Winkelbereich von 35° bis 80° vermessen. Der (Δ, ψ) -Graph ist in Abbildung 5.6 dargestellt:



Abbildung 5.6: (Δ, ψ) -Graph einer dünnen Siliziumdioxidschicht. Die dazugehörigen Werte sind $d_{SiO_2} = 14,2$ nm und $n_{SiO_2} = 1,45$.

Mit den Werten errechnet die Software eine Schichtdicke von $d_{SiO_2} = 14$ nm. Dazu wird ein Fehler von $\xi = 1,27^{\circ}$ und Abweichungen von $a_{\Delta} = 0,72^{\circ}$ und $a_{\psi} = 1,53^{\circ}$ angegeben. In der Abbildung fallen allerdings die Messwerte bei 75° und 80° auf. Bei diesen Winkeln liegt die Intensität der Diode sehr nahe am maximalen Bereich, was die Lage der Messpunkte erklären könnte. Bei der Vermessung der dicken Siliziumdioxidschicht liegen die Intensitätswerte der Diode weniger hoch. Diese werden vernachlässigt und die Schichtdicke noch einmal berechnet. Die dadurch errechnete Schichtdicke beläuft sich auf $d_{SiO_2} = 14,6$ nm. Die Abweichungen werden mit $a_{\Delta} = 0,01^{\circ}$ und $a_{\psi} = 0,20^{\circ}$ angegeben, der Fehler mit $\xi = 0,19^{\circ}$, also deutlich geringer als beim ersten Fall ($\xi = 1,27^{\circ}$). Der dazugehörige Graph ist in Abbildung 5.7 zu sehen. Ein Unterschied des Kurvenverlaufs zu dem in Abbildung 5.6 ist jedoch nicht zu erkennen.



Abbildung 5.7: (Δ, ψ) -Graph einer dünnen Siliziumdioxidschicht. Die Werte für 75° und 80° wurden vernachlässigt. Die dazugehörigen Werte sind $d_{SiO_2} = 14,6$ nm und $n_{SiO_2} = 1,45$.

Wird diese Probe mit der Methode des Rotierenden Analysators vermessen, so ergibt sich eine Schichtdicke von $d_{SiO_2} = 13,9$ nm. Die Abweichungen und Fehler belaufen sich auf $a_{\Delta} = 1,02^{\circ}$, $a_{\psi} = 1,61^{\circ}$ und $\xi = 1,56^{\circ}$. Beide Ergebnisse liegen innerhalb ihrer Fehler sehr nahe beim vom IHP vorgegebenen Wert von $d_{SiO_2} = 14,7$ nm. Auf Grund der höheren Genauigkeit ist die Messmethode der Minimumsuche jedoch zu bevorzugen.
5.2.3 Dicke Silberschicht

Bei diesem Versuchsteil wird eine Silberschicht auf ein Siliziumsubstrat aufgedampft. Das Schichtsystem der Proben ist Abbildung 5.3 zu entnehmen. Mögliche oxidierte Silberschichten werden bei diesem Versuch nicht beachtet, da die Vermessung kurz nach dem Bedampfen stattfand und dies auch in einem Praktikumsversuch entsprechend zeitnah geschieht. Wegen der geringeren Fehleranfälligkeit des Rotierenden-Analysator-Modus gegenüber der Minimumsuche, wird dieser zur Vermessung der Proben verwendet. Die Grenzschichten wurden über die Bruggemann-Approximation wie schon bei der SiO₂-Schicht modelliert. Es ergibt sich der folgende Graph:



Abbildung 5.8: (Δ, ψ) -Graph einer dicken Silberschicht. Die dazugehörigen Werte sind $d_{Ag} = 124,9$ nm und $n_{Ag} = 0,14 + 4,01i$.

Es wird eine Schichtdicke $d_{Ag} = 124,9$ nm berechnet. Die Abweichungen sind $a_{\Delta} = 0,03^{\circ}$ und $a_{\psi} = 0,17^{\circ}$ angegeben, der Fehler ist $\xi = 0,12^{\circ}$. Wegen den Streuungen der Messwerte bei kleinen Einfallswinkeln wird ein Fehler von ± 5 nm geschätzt. Die berechnete Schichtdicke kann als sehr genau angenommen werden. Die Messpunkte liegen sehr nahe an den theoretischen Stellen. Eine Problematik bei der Vermessung konnte kaum beobachtet werden. Lediglich eine gute Intensität bei der Justage zu erhalten war im kleinen Winkelbereich schwierig. In diesem fällt auch eine breitere Streuung der Messpunkte auf. Eine Referenzmessung mit einem anderen Gerät war nicht mehr möglich.

5.2.4 Dünne Silberschicht

Auch bei dieser Schicht wurde wie in Abschnitt 5.2.3 die Messmethode des Rotierenden Analysators verwendet, da Elliptizitäten um 40° auftraten. Eine Grenzschicht zwischen Substrat und aufgedampfter Schicht wurde erneut durch die Bruggemann-Approximation modelliert. Das Winkelspektrum der Messung reichte von 40° bis 80°.



Abbildung 5.9: (Δ, ψ) -Graph einer dünnen Silberschicht. Die dazugehörigen Werte sind $d_{Ag} = 39,5$ nm und $n_{Ag} = 0,14 + 4,01i$.

Es wurde eine Schichtdicke von $d_{Ag} = 39,5$ nm berechnet. Nach der Software betragen die Abweichungen $a_{\Delta} = 0,12^{\circ}$ und $a_{\psi} = 0,31^{\circ}$. Zudem wird ein Fehler von $\xi = 0,41^{\circ}$ angegeben. Die leicht erhöhten Abweichungen resultieren vermutlich aus den Streuungen der Messpunkte bei kleinen Einfallswinkeln. Der Fehler der Schichtdicke wird daher auf ± 5 nm geschätzt. Wie bereits im (Δ, ψ) -Graph der dicken Silberschicht zu erkennen, fällt auch hier eine breitere Streuung der oberen Messwerte auf.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Bestimmung der Schichtdicke bei zuvor fixiertem Brechungsindex sehr gute Ergebnisse bei den untersuchten Proben liefert. Die Problematik bei den Silberschichten zeigt sich in der breiteren Streuung der Messwerte bei kleinen Messwinkeln. Vermutlich besteht hier ein Zusammenhang mit der geringen Intensität an der Vier-Quadranten-Diode. Eine Vermessung von Siliziumdioxidschichten zeigte ebenfalls sehr gute Ergebnisse. Bei einer dünnen Schicht von ca. 15 nm führten die Messwerte bei Winkeln von 75° und 80° zu erhöhten Fehlerwerten. Werden diese ignoriert, ändert sich der (Δ, ψ) -Graph zwar nicht sichtbar, jedoch werden die Fehlerwerte und Abweichungen deutlich geringer.

6 Zusammenfassung

Bei dieser Arbeit sollte die Messgenauigkeit des Ellipsometers EL X-02C für Siliziumdioxid- und Silberschichten unterschiedlicher Schichtdicken getestet und die Tauglichkeit des Gerätes für einen Praktikumsversuch untersucht werden. Mit Silizium als Halbleiter, Siliziumdioxid als Isolator und Silber als elektrischer Leiter werden drei sehr unterschiedliche Materialien untersucht. Für die Bestimmung der Brechungsindizes wurden drei Methoden getestet. Alle ergaben sehr gute Werte, die innerhalb ihrer Fehlergrenzen mit den Literaturwerten und den Werten aus der Datenbank des EL X-02C übereinstimmten. Als schlechteste Methode zeigte sich die rein analytische Bestimmung des Brechungsindexes. Für Isolatoren eignet sich Methode 1 besonders gut. Jedoch ist diese Methode nicht für absorbierende Materialien geeignet. Soll für diese der komplexe Brechungsindex bestimmt werden, liefert Methode 3, welche auf Methode 1 zurückgreift, das beste Ergebnis. Für alle Methoden sind gemessene (Δ, ψ)-Werte nötig.

Für die anschließende Bestimmung von Schichtdicken wurde der Brechungsindex fixiert. Es wurden dicke und dünne Silber-, sowie Siliziumdioxidschichten vermessen. Bei den Silberschichten fällt eine Streuung der Messwerte bei kleinen Einfallswinkeln auf. Vermutlich stehen diese im Zusammenhang mit einer geringen Intensität auf der Vier-Quadranten-Diode bei kleinen Einfallswinkeln¹⁰. Die Streuungen erhöhen die von der Software angegebenen Abweichungen und somit die bestimmte Schichtdicke. Somit sollte hier ein höherer Fehler bei der angegeben Schichtdicke angenommen werden. Während eine Vermessung einer dicken Siliziumdioxidschicht keine Probleme darstellte, fielen bei der Vermessung einer ca. 15 nm dicken Schicht stark abweichende Messpunkte bei Einfallswinkeln von 75° und 80° auf. Diese sollten bei der Bestimmung der Schichtdicke vernachlässigt werden, um höhere Fehler zu vermeiden.

Für einen Praktikumsversuch eignen sich Siliziumdioxidschichten als Einstieg sehr gut. Die Bestimmung eines Brechungsindexes sollte zu Beginn für einen Isolator erfolgen. Eine Vermessung von Silberschichten ist ebenfalls unproblematisch. Allerdings ist die Bestimmung des Brechungsindexes aufwendiger und bei der Berechnung der Schichtdicke treten höhere Fehler auf, die vermutlich mit einer problematischen Justage der Probe zusammenhängen. Die Herausforderungen des Praktikumsversuchs könnten in dem Vergleich der verschiedenen Methoden zur Brechungsindexbestimmung liegen. In diesem Zusammenhang könnte für jeden bestimmten Brechungsindex eines Materials eine eigene Schichtdicke bestimmt. Die Ergebnisse sollten anschließend diskutiert und mit den Werten aus der Datenbank verglichen werden. Ein weiterer Vergleich mit einem von der Software bestimmten Brechungsindex wäre ebenfalls denkbar.

Es zeigen sich somit vielseitige Anwendungen des EL X-02C. Im Rahmen dieser Arbeit stellte sich das Ellipsometer als bedienungsfreundlich heraus mit der Mechanik als Schwachstelle. Dennoch liefert es sehr genaue Ergebnisse, wodurch es durchaus praktikumstauglich erscheint.

¹⁰ Der Intensitätsbalken des Programms befindet sich unterhalb des Minimumwertes.

A Ellipsometer EL X-02C – Manual

Justage

Die Justage einer Probe geschieht über den Half-Cut. Hierzu werden Laser- und Detektorarm in eine 90°-Stellung gebracht und der Probentisch **ohne** Probe ganz heruntergefahren.



Abbildung A.1: Probentisch des EL X-02C.



Abbildung A.2: EL X-02C in 90°-Stellung.

Der Laser wird eingeschaltet und der Shutter geöffnet. Im Hauptmenü der Software wird Button 1 gedrückt.



Abbildung A.3 Hauptmenü der Ellipsometer-Software. Die Buttons werden im Folgenden von links nach rechts durchnummeriert.

Im dann zu sehenden Fenster ist ein Vier-Quadranten-Feld abgebildete und im Idealfall ein grüner Kreis. Im Allgemeinen jedoch ist ein ähnliches Bild wie in Abbildung 4 (rechts) zu erkennen:



Abbildung A.4: Justage des Lasers.

Ziel ist es, den Laser mittig auf den Detektor zu justieren (Abbildung 4, links). Dazu werden vier Schrauben am hinteren Ende des Laserarms genutzt.

Ist der Laser justiert, sollte das Gerät nicht zu stark erschüttert werden. Das Fenster mit dem Vier-Quadranten-Feld wird geschlossen.

Die zu untersuchende Probe wird vorsichtig auf die Mitte des Probentisches positioniert. Dazu sollten Handschuhe und Plastikpinzetten benutzt werden, um die Oberfläche der Probe nicht zu verunreinigen. Liegt die Probe mittig auf den Probentisch, wird der Justagelaser eingeschaltet. Der von der Probe zurückreflektierte Laser muss in die Mitte des am Justagelaser befindlichen Zielkreuzes treffen. Dann ist der Probentisch waagerecht ausgerichtet. Anschließend wird der Justagelaser wieder ausgeschaltet.

Jetzt wird das Potentiometer kontrolliert. Dieses muss auf Minimum (0%) stehen. Der Drehregler für das Potentiometer befindet sich auf der Rückseite des Detektorarms. Im Hauptmenü wird anschließend Button 2 gedrückt. Es öffnet sich das folgende Fenster:

| Test Intensity | | × |
|----------------------------------|--|----------|
| Please until mete | e adjust amplification with the potentiometer r is green, then press Acc | cept |
| | | |
| 0% 10% | 83 % | 90% 100% |
| Amplifier: 1 | | |
| Actual Wavelength 632.8000 nm | Potentiometer 0.00 % | |
| Accept | | |

Abbildung A.5 Test der Intensität.

Die angezeigte Intensität muss halbiert werden. Dazu wird der Probentisch mit der Probe solange nach oben gefahren, bis die Intensität halbiert ist. Anschließend wird das Fenster geschlosen. Die Probe befindet sich nun im Half-Cut. Ab jetzt wird die Justageschraube zum Hoch- und Herunterfahren des Probentisches **nicht** mehr betätigt.

Messungen

Für eine gute Bestimmung der Schichtdicke oder des Brechungsindexes ist nötig, die Probe unter mehreren Winkeln zu vermessen. Die Durchführung wird für einen beliebigen Winkel erklärt und wiederholt sich für jeden weiteren beliebigen Winkel.

- 1. Gerät und Laser sind eingeschaltet und die Software ist gestartet.
- 2. Der Shutter ist geschlossen. Für Laser- und Detektorarm wird ein beliebiger aber gleicher Winkel eingestellt. Dazu müssen die Halterungsbolzen vorsichtig herausgezogen werden. In ihnen befindet sich eine Feder, sodass sie automatisch bei einem passenden Winkel einrasten. Die Arme sollten mit einer Hand festgehalten werden, sobald die Bolzen gelöst werden, da diese ansonsten herunterfallen.
- 3. Im Hauptmenü wird Button 1 betätigt. Die mittige Justage auf den Detektor geschieht **aus**schließlich über die drei kleinen Justageschrauben oben am Probentisch. Sind ein grüner Kreis und ein grüner Balken zu sehen, kann das Fenster über Accept geschlossen werden.
- 4. Im Hauptmenü wird Button 2 gedrückt. Das Potentiometer sollte zuvor minimal eingestellt sein. Der zu sehende Intensitätsbalken sollte sich im Bereich um 80% befinden. Ist dies nicht der Fall, kann der Drehregler des Potentiometers vorsichtig hochgeregelt werden. Anschließend wird das Fenster über Accept geschlossen.
- 5. Bei Button 3 im Hauptmenü wird lediglich den darauffolgenden Anweisungen gefolgt. Dies ist selbsterklärend und bedarf keiner weiteren Ausführung.
- 6. Mit Button 4 im Hauptmenü kann die Messmethode ausgesucht werden. Im Wesentlichen stehen der Rotierende Analysator und die Minimumsuche zur Verfügung. Beide Methoden sind in der Anleitung genauer erklärt.
- Mit Button 10 wird eine Liste geöffnet. Eventuelle alte Messwerte sollten gelöscht werden. Die Liste sollte regelmäßig (am besten nach jedem Messpunkt) gespeichert werden. (Punkt überspringen, wenn Liste aus vorheriger Messung noch geöffnet ist.)
- 8. Bei Button 7 öffnet sich ein Fenster, in dem der eingestellte Winkel eingetragen wird. Zudem kann die Anzahl an Messwiederholungen eingestellt werden. Eine Messung mit 5 Wiederholungen dauert ca. 30 Sekunden. Anschließend wird über "Measure" die Messung gestartet.

Bestimmung von Brechungsindex und Schichtdicke

Wurde die Probe unter ausreichend vielen Winkeln vermessen wird über Button 11 das Simulationsfester geöffnet. Die dort angezeigte Messkurve wird nicht in den Messpunkten liegen. Das liegt daran, dass die Software ein bestimmtes Standardmodell mit dazugehöriger Messkurve speichert, was beim Öffnen des Simulationsfensters angezeigt wird. Daher ist wichtig: Das Simulationsfenster sollte während der Berechnungen **nicht** geschlossen werden. Ansonsten müssen die Einstellungen nochmal durchgeführt werden!

Anpassung des Schichtmodells

Im Simulationsfenster ist oben rechts das Schichtmodell zu erkennen. Durch Linksklick auf das jeweilige Material, können diverse Eigenschaften oder das Material selbst geändert werden. Ein anderes Material auswählen funktioniert folgendermaßen:

- 1. Linksklicken auf das gewünschte Material.
- 2. Materials
- 3. Load Material Data. Die Datenbank des EL X-02C findet sich unter C:\Ellipsometer\Materialfile Data_400_1000\...

Um eine Grenzschicht zwischen Substrat und aufgedampfter Schicht zu simulieren wird folgendermaßen vorgegangen:

- 1. Rechtsklick auf die Linie zwischen Substrat und Schicht im Schichtmodell. Dann "insert Layer".
- 2. Linksklick auf "New Layer", dann auf "Materials".
- 3. Im darauffolgenden Fenster wird im Feld "Type of Mixture" eine passende Grenzschicht ausgesucht. Bei den hier untersuchten Proben eignet sich "Bruggeman (EMA)" am besten.
- 4. Links können nun die beteiligten Materialen ausgesucht werden, sowie deren prozentualer Anteil an der Grenzschicht. Ein entsprechender Brechungsindex der Grenzschicht wird automatisch berechnet.

Um eine manuelle Änderung des Brechungsindexes eines Materials gilt

- 1. Linksklick auf das Material.
- 2. Modify n-jk.

Die blauen Pfeile neben dem Schichtmodell zeigen an, in welcher Schicht das Programm die entsprechende Größe bestimmt.

Bestimmung der Schichtdicke

Für die Bestimmung der Schichtdicke wird im Simulationsfenster Button 4 gedrückt. Es öffnet sich das folgende Fenster.

| Calculation of optimal S | imulation Curve | | X |
|--|---|---|--|
| SiO2 Default Index n: Default Index k: Default Thickness T: | 3.87169 ☐ Modify from: 3 -0.01600 ☐ Modify from: 0 9.8000 nm ♥ Modify from: 0 | .87169 to: 3.87169 with steps of: 0.01600 to: -0.01600 with steps of: 0.0000 nm to: 50.0000 nm with steps of: | 0.01 2 0.01 C Line C Arithmetical lean |
| Measurement Points are in selected Layer: C Layer not existing C Layer not existing | Show Layer Air n = 1.000 C Layer not existing C Layer not existing | 000 k = -0.00000 | Hesolution (No. of Huns) 1 x (Res. 1) 4x (Res. 0.001) 2 x (Res. 0.1) 5x (Res. 0.0001) 3x (Res. 0.01) 5x (Res. 0.00001) weighting of Deviation Delta & Psi (Delta: 50%, Psi: 50%) Delta & Psi (Delta: 75%, Psi: 25%) Delta & Psi (Delta: 25%, Psi: 75%) Delta & Psi (Delta: 90%, Psi: 10%) Delta & Psi (Delta: 10%, Psi: 90%) |
| SiD2 Which Data? Original Data Inverted Output El. | Image: SiD2 n = 3.871 C Si 1 n = 1.500 Deviation from Curve 1 n = 1.500 Run 1: Delta-De 1 Run 2: Delta-De 0 | 169 k = -0.01600 Thickness t = variable 000 k = -0.00000 Final Action and the second action and the second action | Test Function 3 No. of Elements: 1101 Solution: 0.1000 nm N of Variables: 1 N of Steps: 1 ∰ |
| C Inverted Input E C Inv. In- and Out ut C Userdefined | Run 4: | Viation: Psi-Deviation: Menu Cate T Calculate Thickness | Show Deviation |

Abbildung A.6: Fenster zur Kalkulation von Brechungsindex und Schichtdicke.

Es werden für eine Bestimmung der Schichtdicke die Punkte 1 bis 5 abgearbeitet. Unter Punkt 6 werden die Abweichungen der errechneten Kurve, sowie ein Fehler angegeben.

Die errechnete Schichtdicke wird im Simulationsfenster nicht automatisch übernommen. Es muss im Simulationsfenster mit Button 6 die Tool Box-Simulation geöffnet werden. Unter "Ghost / Trace Curves" wird der vierte Button von links betätigt. Im sich dann öffnenden Fenster kann die berechnete Schichtdicke eingetragen werden.

Analog kann der Brechungsindex im Simulationsfenster bestimmt werden. Jedoch wird dieser nur berechnet, wenn auch die Schichtdicke berechnet wird. Daher sollte man diese vorher bestimmen und das Intervall der Schichtdicke anschließend sehr klein um den zuvor bestimmten Wert legen. Der Brechungsindex wird im Simulationsfenster direkt übernommen und muss nicht separat eingegeben werden.

Weitere Einstellungen

Im Tool-Box Fenster sind weitere diverse Einstellungen für das Simulationsfenster wie Skalierungen oder farbliche Einstellungen möglich. Auch ein bestimmter Wertebereich der Messkurve kann angegeben werden. Ein Speichern der Simulation ist ebenfalls möglich. Zudem kann die Messkurve als WMF-Datei gespeichert werden.

B Praktikumsanleitung

1 Einleitung

Dünne Schichten sind seit Jahren aus der Industrie und Forschung nicht mehr wegzudenken. Anwendung finden sie unter anderem in Mechanik, Optik, Elektrotechnik, Chemie und Biologie. Bei dünnen Schichten handelt es sich um Schichten kondensierter Materie, deren Dicken im Nanometerbereich liegen. Neben vielen Methoden diese Schichten herzustellen, existieren auch einige Methoden, diese Schichten zu vermessen. Eine dieser Methoden stellt die Ellipsometrie dar.

Die Basis der Ellipsometrie bilden der Polarisationszustand einer Lichtwelle und die Phasendifferenz. Paul Drude gelingt Ende des 19. Jahrhunderts zum ersten Mal mithilfe der Phasendifferenz zweier senkrecht zueinander polarisierter Lichtwellen die Vermessung der Dicke einer sehr dünnen Schicht. Neben der Schichtdicke kann ebenso der (komplexe) Brechungsindex einer Probe bestimmt werden. Mit Lasern und Polarisatoren lassen sich Wellenlänge und Polarisation sehr fein einstellen und mit Computertechnik werden Messdaten schneller und detaillierter ausgewertet. Da mithilfe eines Lasers die Proben vermessen werden, gilt die Ellipsometrie als sogenannte zerstörungsfreie Messmethode.

Ziel dieses Praktikumsversuchs ist es mit dem Einwellenlängenellipsometer des Typs EL X-02C Siliziumdioxid- und Silberschichten verschiedener Dicken auf Siliziumsubstraten aufzudampfen und die Brechungsindizes der Materialien sowie die Schichtdicken zu bestimmen.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Polarisation von Licht

Die Methode der Ellipsometrie basiert auf der Änderung des Polarisationszustandes einer Lichtwelle bei deren Reflexion an Grenzflächen und in Medien. Als Grundlage der theoretischen Beschreibung einer elektromagnetischen Welle dienen die Maxwell-Gleichungen. So kann die Lichtwelle durch ihr elektrisches Feld

$$\vec{E} = \vec{E_0} * e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$
(2.1)

beschrieben werden. Hierbei ist $\vec{E_0}$ die Amplitude, $\omega = 2\pi v$ die Kreisfrequenz, \vec{k} der Wellenvektor mit $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ und \vec{r} der Ort des elektrischen Feldes. Gleichung 2.1 genügt zur Beschreibung des Lichtes, da das magnetische Feld \vec{B} immer senkrecht auf dem elektrischen Feld steht. Zudem stehen \vec{E} - und \vec{B} -Feld senkrecht zur Ausbreitungsrichtung, die durch den Wellenvektor \vec{k} gegeben ist. Um die Richtung der Polarisation zu beschreiben, wird eine Basis relativ zur Einfallsebene gewählt. Für eine Ausbreitung in z-Richtung gilt für das \vec{E} -Feld:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_{x0} * \cos(\omega t - kz) \\ E_{y0} * \cos(\omega t - kz + \delta) \end{pmatrix}$$
(2.2)

wobei δ die Phasendifferenz zwischen den Komponenten angibt.

Durch Elimination der Zeit t in Gleichung 2.2 können Aussagen über die Orientierung des \vec{E} -Feldes an einem bestimmten Ort zu allen Zeitpunkten gemacht werden. Für E_{x0} , $E_{y0} \neq 0$ gilt

$$\frac{E_x^2}{E_{x0}^2} + \frac{E_y^2}{E_{y0}^2} - 2 * \frac{E_x}{E_{x0}} \frac{E_y}{E_{y0}} * \cos(\delta) = \sin^2(\delta),$$
(2.3)

wodurch im Allgemeinen eine Ellipse beschrieben wird.



Abbildung 2.1: Gedrehte Polarisationsellipse mit Azimutwinkel Θ und Elliptizität *e*. Der elektrische Feldvektor ist mit \vec{E} angegeben. Die Halbachsen der Ellipse sind mit *a* und *b* bezeichnet und nicht gleichzusetzen mit den Amplituden E_{x0} und E_{y0} [4,15].

Der Polarisationszustand von Licht ist von dem Quotienten E_{y0}/E_{x0} und der Phasendifferenz δ abhängig, welche aus der Ellipsenform abgeleitet werden können:

$$tan(\psi) = \frac{E_{y0}}{E_{x0}}.$$
 (2.4)

Hiermit lassen sich für die Wertepaare (Θ, e) und (δ, ψ) folgende Gleichungen herleiten:

$$tan(2\theta) = \frac{2tan(\psi)}{1 - tan^2(\psi)} * \cos(\delta)$$
(2.5)

$$sin(2e) = \frac{2tan(\psi)}{1 + tan^2(\psi)} * sin(\delta)$$
(2.6)

Das Wertepaar (Θ , e) beschreibt den Polarisationszustand und kann von dem Ellipsometer ausgelesen werden. Dadurch ist es möglich eine Phasendifferenz δ und ein Maß des Amplitudenverhältnisses ψ herleiten. Die Elliptizität e lässt sich über

$$\tan(e) = \frac{b}{a} \tag{2.7}$$

bestimmen und ist als geometrische Beschreibung der Ellipse zu verstehen.

Die Einfallsebene ergibt sich aus der Ausbreitungsrichtung des einfallenden und reflektierten Lichtes, sowie der Normalen der reflektierenden Grenzschicht.



Abbildung 2.2: Einfallende Lichtwelle und Lot auf der Probenoberfläche geben die Einfallsebene vor. Der Einfallswinkel wird mit φ bezeichnet. Die Indizes p und s stehen für die parallel, bzw. senkrecht zur Einfallsebene polarisierten Komponenten der Welle. Die einfallende Welle wird mit i, die reflektierte Welle mit r gekennzeichnet.

Das elektrische Feld \vec{E} der einfallenden Welle kann in eine Komponente \vec{E}_s senkrecht zur Einfallsebene und eine Komponente \vec{E}_p parallel zur Einfallsebene zerlegt werden. Dadurch kann jeder Polarisationszustand der Welle mit der Phasendifferenz

$$\delta = \delta_p - \delta_s \tag{2.8}$$

zwischen den beiden Komponenten, sowie das Amplitudenverhältnis $\frac{E_{0p}}{E_{0s}}$ dargestellt werden. \vec{E} lässt sich durch den komplexen Jones-Vektor ausdrücken:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} |E_{0p}| e^{i\delta_p} \\ |E_{0s}| e^{i\delta_s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{0p} \\ E_{0s} \end{pmatrix}$$
(2.9)

Phasendifferenz und Amplitudenverhältnis sind ausschlaggebend für den Polarisationszustand der Welle. Zusammenfassend ist der Polarisationszustand des Lichts:

- linear, falls $\delta_p \delta_s = 0^\circ \vee \delta_p \delta_s = \pi$
- zirkular, falls $\delta_p \delta_s = \pi/2 \wedge |E_{0p}| = |E_{0s}|$
- elliptisch, falls $\delta_p \delta_s \neq 0^\circ \land |E_{0p}| \neq |E_{0s}|$.

2.2 Der (komplexe) Brechungsindex

Wenn eine elektromagnetische Welle, wie bspw. Licht, auf Materie trifft, verändert sich ihre Phasengeschwindigkeit v_{ph} von der Vakuumlichtgeschwindigkeit c_0 zu

$$v_{ph} = \frac{c_0}{n} = c. (2.10)$$

Die Abhängigkeit des Brechungsindexes n von der Wellenlänge λ wird als Dispersion bezeichnet. Neben der Phasengeschwindigkeit ändert sich die Wellenlänge zu

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n},\tag{2.11}$$

wobei die Frequenz ν des Lichtes konstant bleibt. Aus dem Modell des klassischen Oszillators folgt, dass der Brechungsindex komplexwertig ist und als $n = n_r - i\kappa$ angesetzt werden kann. Der Imaginärteil κ wird als Extinktionskoeffizient bezeichnet und ist wie der Realteil n_r abhängig von der Wellenlänge λ des Lichtes. Für das \vec{E} -Feld einer Welle ergibt sich nach Durchlaufen eines Mediums mit komplexem Brechungsindex und der Dicke¹¹ Δz :

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_{0} * \exp\left(i\omega\left(t - \frac{z}{c_{0}}\right)\right) * \underbrace{\exp\left(-i\omega(n_{r} - 1)\frac{\Delta z}{c_{0}}\right)}_{Phasenverz\"{o}gerung} * \underbrace{\exp\left(-\omega\kappa\frac{\Delta z}{c_{0}}\right)}_{Absorption}.$$
(2.12)

Der Extinktionskoeffizient κ verursacht einen zusätzlichen Faktor, der eine Verringerung der Amplitude bewirkt. Bei durchsichtigen Medien wie Luft oder Glas ist $\kappa \approx 0$ und demnach $n_r \approx n$. Mithilfe der Intensität

$$I = \epsilon_0 c_0 |\vec{E}|^2 \tag{2.13}$$

und Gleichung 2.12 ergibt sich das Absorptionsgesetz

$$I = I_0 * e^{-\alpha \Delta z}.$$
 (2.14)

Dabei wird α als Absorptionskoeffizient bezeichnet, welcher von dem Extinktionskoeffizienten abhängig ist:

$$\alpha = \frac{4\pi\kappa}{\lambda_0} = 2k_0\kappa \tag{2.15}$$

Somit ist κ direkt mit der Absorption verknüpft.

2.3 Reflexion von Licht

Die Beschreibung von Lichtbrechung und -reflexion, sowie die Polarisation und die Änderung der Polarisation sind in der Ellipsometrie unverzichtbar. Daher wird in diesem Abschnitt auf die mathematische Beschreibung der Reflexion von Licht eingegangen.

¹¹ Für die Herleitung sei auf [4] verwiesen.

2.3.1 Substratmodell

Im Substratmodell wird von zwei halbunendlichen¹², homogenen und isotropen Medien ausgegangen. Zudem ist es üblich, diese Medien als nichtmagnetisch anzunehmen. Im Modell wird ein Medium als Umgebung (hier: Luft) und eines als Substrat bezeichnet (Vgl. Abbildung 2.3).

Trifft eine Lichtwelle aus einem Medium mit dem Brechungsindex $n_1 = n_{r1}$ (mit $\kappa_1 = 0$, z.B. Luft) auf ein zweites Medium mit dem Brechungsindex $n_2 = n_{r2} - i\kappa_2$, wird die elektromagnetische Welle an der Grenzfläche der zwei Medien aufgespalten in eine gebrochene und eine reflektierte Welle. Beide Wellen pflanzen sich weiterhin in der Einfallsebene fort, ihre Geschwindigkeiten unterscheiden sich jedoch. Für die reflektierte Welle gilt nun

$$c_1 = \frac{c_0}{n_{r1}} = \frac{c_0}{n_1}.$$
(2.16)

Sie hat folglich dieselbe Geschwindigkeit, wie die einfallende Welle. Die gebrochene Welle weist hingegen eine Geschwindigkeit von

$$c_2 = \frac{c_0}{n_{r2}} \tag{2.17}$$

auf. Zusätzlich unterscheiden sich die Winkel zum Lot der Grenzfläche (Abbildung 2.3). Für die reflektierte Welle gilt $\varphi_1 = \varphi'_1$ (Einfallswinkel = Reflexionswinkel). Für die Berechnung des Brechungswinkels φ_2 wird das Brechungsgesetz nach Snellius benötigt:

$$\frac{\sin(\varphi_1)}{\sin(\varphi_2)} = \frac{c_1}{c_2} = \frac{n_{r_2}}{n_1}.$$
(2.18)

¹² Von halbunendlich wird in diesem Zusammenhang gesprochen, wenn das Medium stark genug absorbiert, oder die untere Fläche stark genug angeraut ist, sodass diese nicht nennenswert reflektiert.



Abbildung 2.3: Lichtbrechung an einer Grenzschicht zwischen zwei Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes n_1 und n_2 . Die Lichtwelle fällt unter einen Winkel φ_1 auf die Oberfläche und wird zum einen Teil unter dem Winkel φ'_1 reflektiert und zum anderen Teil unter dem Winkel φ_2 transmittiert.

Das Brechungsgesetz gilt nur für optisch isotrope Dielektrika sowie in guter Näherung für schwach absorbierende Medien, bei denen $\kappa_2 \ll n_{r2}$ gilt. Bei stark absorbierenden Medien kann der Brechungswinkel über

$$tan(\varphi_2) = \frac{n_1 * sin(\varphi_1)}{Re\left\{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 * sin^2(\varphi_1)}\right\}}$$
(2.19)

berechnet werden [2]. Für den Fall, dass $n_2 = n_{r2}$ ist, ergibt sich aus Gleichung 2.19 das bekannte Snellius'sche Brechungsgesetz. Die Änderung der Amplituden, der Phasendifferenz und somit des Polarisationszustandes der Welle bei der Reflexion, wird durch den sogenannten Reflexionskoeffizienten erklärt. Dieser stellt einen Zusammenhang zwischen den Amplituden $E_{0p,s} * e^{i\delta_{p,s}}$ einer einfallenden Welle $\vec{E^{t}}$ und einer reflektierten Welle $\vec{E^{r}}$ her. Der Reflexionskoeffizient *R* wird in eine parallele und eine senkrechte Komponente zur Einfallsebene unterschieden:

$$R_{p} = \frac{E_{0p}^{r}}{E_{0p}^{i}} * e^{i(\delta_{p}^{r} - \delta_{p}^{i})}$$
(2.20)

$$R_{s} = \frac{E_{0s}^{r}}{E_{0s}^{i}} * e^{i(\delta_{s}^{r} - \delta_{s}^{i})}$$
(2.21)

Die Exponentialterme ergeben sich für linear polarisiertes Licht zu Eins. Die Reflexionskoeffizienten R_p und R_s des \vec{E} -Feldes sind im Allgemeinen ungleich. Daraus kann abgeleitet werden, dass sich Amplitudenverhältnis und Phasendifferenz nach der Reflexion verändert haben. Folglich ändert sich der Polarisationszustand des Lichtes durch die Reflexion.

Aus geometrischen Überlegungen zu der zur Grenzfläche tangentialen und senkrechten Komponente des \vec{E} - und \vec{B} -Feldes, lassen sich die sogenannten Fresnel-Koeffizienten ableiten:

$$r_{12}^{p} = \frac{n_2 \cos(\varphi_1) - n_1 \cos(\varphi_2)}{n_2 \cos(\varphi_1) + n_1 \cos(\varphi_2)}$$
(2.22)

$$r_{12}^{s} = \frac{n_1 \cos(\varphi_1) - n_2 \cos(\varphi_2)}{n_1 \cos(\varphi_1) + n_2 \cos(\varphi_2)}$$
(2.23)

Wie in Kapitel 2.3 bereits erwähnt, kann für schwach absorbierende Medien das Snellius'sche Brechungsgesetz angewendet werden. Dadurch ergibt sich $\cos(\varphi_2)$ zu:

$$cos(\varphi_2) = \sqrt{1 - \frac{n_1^2}{n_2^2} sin^2(\varphi_1)}.$$
 (2.24)

Aus den Gleichungen 2.22 und 2.23 lässt sich entnehmen, dass r_{12}^p und r_{12}^s von den Brechungsindizes und dem Einfallswinkel abhängig sind.

Trifft das Licht unter dem Brewsterwinkel φ_B auf die Probe, so verschwindet die p-Komponente des reflektierten Lichtes. Der reflektierte Lichtstrahl ist dann s-polarisiert. Über die Beziehung

$$\tan(\varphi_B) = n_2 \tag{2.25}$$

kann der Brechungsindex n_2 bei Isolatoren oder in Näherung für schwach absorbierende Materialien berechnet werden. Weitere Beschreibungen sind in den Abschnitten 3.4 und 5.1 gegeben.

2.3.2 Einschichtmodell

Der wichtigere Fall ist, dass das Substrat mit einer dünnen oder ultradünnen Schicht überzogen ist. Sowohl Substrat als auch aufgetragene Schicht sind als nichtmagnetisch, homogen und isotrop vorauszusetzen. Zudem wird die Parallelität der Grenzflächen angenommen, wie Abbildung 2.5 zeigt. Die auf die Probe treffende elektromagnetische Welle wird an den Grenzflächen von Medium 1 und Medium 2 bzw. von Medium 2 und Medium 3 mehrfach reflektiert und transmittiert. Insgesamt entsteht eine reflektierte Welle, die aus der Überlagerung aller Teilwellen besteht.



Abbildung 2.4: Im Einschichtmodell trifft das Licht aus Medium 1 mit einem Brechungsindex n_1 unter einem Winkel φ_1 auf eine Schicht mit einer Dicke d_2 und einem Brechungsindex n_2 . Wie im Substratmodell wird der Strahl teilweise unter dem Winkel φ'_1 reflektiert und teilweise unter einem Winkel φ_2 transmittiert. Der transmittierte Strahlt trifft auf die Grenzfläche 2 zwischen Medium 2 mit dem Brechungsindex n_2 und Medium 3 mit dem Brechungsindex n_3 . Hier wird dieser wie an Grenzschicht 1 aufgespalten. Der Vorgang wiederholt sich, sodass der von der Probenoberfläche reflektierte Strahl aus einer Überlagerung vieler Teilstrahlen besteht [4,15].

Wird über alle Teilwellen, jeweils einzeln für p- und s-Komponente der elektromagnetischen Welle, aufsummiert, ergibt sich eine geometrische Reihe, die ausgewertet zu den Reflexionskoeffizienten führt:

$$R_{p,s} = \frac{r_{12}^{p,s} + r_{23}^{p,s} * e^{-i2\beta_2}}{1 + r_{12}^{p,s} * r_{23}^{p,s} * e^{-i2\beta_2}}$$
(2.26)

mit

$$\beta_2 = 2\pi * \frac{d_2}{\lambda} * n_2 * \cos(\varphi_2) = 2\pi * \frac{d_2}{\lambda} * \sqrt{n_2^2 - n_1^2 * \sin^2(\varphi_1)}$$
(2.27)

und n_1, n_2 reellwertig. Bei $r_{ij}^{p,s}$ handelt es sich um die Fresnel-Koeffizienten für die Reflexion der Welle an der Grenzfläche zwischen den Schichten *i* und *j*. Zu beachten ist, dass die zweite Relation der Gleichung 2.27 nach dem Brechungsgesetz von Snellius nur für schwach absorbierende Medien gilt. Falls die Voraussetzung nicht erfüllt ist, wird der Formalismus entsprechend Gleichung 2.19 komplizierter.

2.4 Grundgleichung der Ellipsometrie

Mit dem Verhältnis der in Kapitel 2.3 bereits genannten Reflexionskoeffizienten kann ein Zusammenhang zwischen n_r , κ und der Schichtdicke d der Schichten des Materialsystems mit dem Polarisations-

zustand nach der Reflexion hergestellt werden. Dieses Verhältnis wird im Allgemeinen mit ρ bezeichnet. Mit den in Gleichung 2.20 und 2.21 angegebenen Beziehungen ergibt sich ρ zu:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \frac{E_{0p}^r e^{i\delta_p^r} / E_{0p}^i e^{i\delta_p^i}}{E_{0s}^r e^{i\delta_s^r} / E_{0s}^i e^{i\delta_s^i}}$$
(2.28)

Hieraus erhält man die Phasendifferenz

$$\delta^{i,r} = \delta^{i,r}_p - \delta^{i,r}_s \tag{2.29}$$

zwischen der *p*- und *s*-Komponente der jeweiligen Welle vor und nach der Reflexion. Die ellipsometrischen Grundgrößen bilden Δ und ψ , welche wie folgt definiert werden:

$$\Delta \coloneqq \delta^r - \delta^i \tag{2.30}$$

$$\psi \coloneqq \arctan\left(\frac{E_{0p}^r/E_{0s}^r}{E_{0p}^i/E_{0s}^i}\right) \tag{2.31}$$

 Δ stellt demnach die durch die Reflexion verursachte Phasendifferenz zwischen einfallender und reflektierter Welle dar. Mit ψ kann ein Maß für die ebenfalls durch Reflexion verursachte Veränderung der Amplituden angegeben werden. Mithilfe der Definitionen und Gleichung 2.28 kann die Grundgleichung der Ellipsometrie formuliert werden:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \tan(\psi) * e^{i\Delta}.$$
(2.32)

Das Verhältnis ρ der Reflexionskoeffizienten ist demnach von den Materialeigenschaften

- Brechungsindex n_i ,
- Extinktionskoeffizient κ_i und
- Schichtdicke d_i

der Probe abhängig¹³. Die Größen Δ und ψ , aus denen auch ρ berechnet werden kann, können aus den Polarisationszuständen der einfallenden und reflektierten Welle bestimmt werden. Wird eine Polarisationsänderung zwischen einfallender und reflektierter Welle gemessen und sind zudem genügend Parameter der vermessenen Probe bekannt, so können die ausstehenden Parameter berechnet werden. Wie in Kapitel 3.1 genauer beschrieben, wird das Licht bereits vor dem Auftreffen auf die Probe polarisiert. Es wird die Polarisation der im Allgemeinen elliptisch polarisierten reflektierten Lichtwelle über die Elliptizität *e* und den Azimutwinkel Θ gemessen. Mit diesen Werten können mittels Gleichungen 2.5 und 2.6 die Phasendifferenz δ^r und $\tan(\psi^r) = E_{0p}^r/E_{0s}^r$ bestimmt werden, wobei gilt:

$$tan(\psi) = \frac{tan(\psi^r)}{tan(\psi^i)}$$
(2.33)

Angewendet auf das Substratmodell ergibt sich ρ als das Verhältnis der Fresnel-Koeffizienten. Im Allgemeinen können Angaben zum Einfallswinkel φ_1 und zum Brechungsindex der Umgebung (oftmals Luft) gemacht werden, sodass die Gleichung mithilfe des Snellius'schen Brechungsgesetzes umgestellt werden kann zu:

¹³ Der Index i bezeichnet hier die jeweilige Anzahl der Komponenten der Probe.

$$n_2 = n_1 \sin(\varphi_1) * \sqrt{1 + \left(\frac{1-\rho}{1+\rho}\right)^2 * \tan^2(\varphi_1)}.$$
(2.34)

Dies ist jedoch der einzigen Fall, in dem die Grundgleichung der Ellipsometrie analytisch gelöst werden kann. Bereits bei dem Einschichtmodell wird ρ durch Exponentialterme deutlich komplizierter, sodass eine Berechnung der interessierenden Größen nur numerisch erfolgen kann.

3 Funktionsweise des Ellipsometers

Im Folgenden werden die technischen Grundlagen des Ellipsometers behandelt.



Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des Ellipsometers des Typs EL X-02C.

Der schematische Aufbau ist in Abbildung 3.1 dargestellt und kann folgendermaßen beschrieben werden: Bei der Lichtquelle handelt es sich um einen He-Ne-Laser, der monochromatisches Licht der Wellenlänge $\lambda = 632,8$ nm aussendet. Danach passiert das Licht einen Polarisator und gegebenenfalls einen Kompensator, mit denen der Polarisationszustand definiert wird. Bei dem Kompensator handelt es sich um ein $\lambda/4$ – Plättchen. Nach der Reflexion an der Probe durchläuft das Licht einen Polarisator und trifft anschließend auf den Detektor, der die Intensität des Lichtes für die jeweilige Analysatorstellung misst. Im nachfolgenden Abschnitt werden die einzelnen Komponenten des EL X-02C genauer erläutert.

3.1 Geräteausstattung

Das EL X-02C verfügt über einen He-Ne-Laser als Lichtquelle, der stark monochromatisches Licht aussendet. Durch die gebündelten Strahlen des Laserlichtes wird eine Leistung von 3 mW auf eine kleine Fläche (< 1 mm²) der Probe fokussiert. Der Polarisationszustand des Laserlichtes ist nicht zwingend bekannt und hängt von dem Laser und dem Aufbau des Ellipsometers ab. Im Strahlverlauf wird als nächstes Bauteil der Glan-Thompson-Polarisator passiert, der den Polarisationszustand der Lichtwelle definiert. Nach dem Durchlaufen des Bauteils ist das Licht linear polarisiert. Der in Abbildung 3.1 aufgeführte Kompensator ist in dem Modell des verwendeten Ellipsometers nicht eingebaut. Der Grund liegt in der Temperaturempfindlichkeit eines solchen Bauteils und den damit verbundenen Messfehlern [4]. Der Laserstrahl wird an der Probe reflektiert und gelangt erneut in einen Glan-Thompson-Polarisator (in Abbildung 3.1 Analysator genannt). Dieser kann durch einen internen Motor auf 0,001° genau rotiert werden¹⁴. Das an dieser Stelle transmittierte Licht wird verstärkt und am Ende von einer Vier-Quadranten-Diode detektiert.

3.2 Messmethoden

In der Ellipsometrie existiert eine Vielzahl an verschiedenen Messmethoden. Es wird auf die von dem Ellipsometer verwendbaren Methoden eingegangen – der rotierende Analysator und die Minimumsuche.

3.2.1 Rotierender Analysator

Bei der Messmethode des rotierenden Analysators bleibt der Polarisator in einem festen Winkel zur Einfallsebene fixiert. Optional kann auch der Kompensator fixiert bleiben, dieser ist allerdings nicht standardmäßig in dem verwendeten EL X-02C eingebaut. Nach Reflexion an der Probe ist das Licht im Allgemeinen elliptisch polarisiert. Der Analysator rotiert in äquidistanten Winkeln und vermisst so das reflektierte elliptisch polarisierte Licht. Dabei wird unter jedem Winkel eine bestimmte linear polarisierte Komponente der Ellipse vom Analysator durchgelassen. Die Komponenten unterscheiden sich in ihren Amplituden, wodurch die Intensitäten für jeden Winkel des Analysators variieren.

¹⁴ Diese Angabe stammt vom Hersteller.



Abbildung 3.2: Messmethode Rotierender Analysator, schematischer Aufbau.

Innerhalb des Programms werden die gemessenen Werte (Intensitäten) mittels einer Fourier-Analyse modelliert. Aus den Fourier-Koeffizienten ergeben sich $\cos(\Delta)$ und $\tan(\psi)$ woraus sich Δ und ψ berechnen lassen [2]. Im Bereich von $\Delta \approx 0^{\circ}$ und $\Delta \approx 180^{\circ}$ führt dies allerdings zu größeren Ungenauigkeiten. Ein Kompensator ändert die Phasendifferenz der einfallenden Lichtwelle und damit auch den Wert von Δ . Dadurch kann verhindert werden, dass dieser Wert in dem benannten problematischen Bereich liegt [5]. Eine weitere Schwierigkeit bei diesem Messverfahren bilden kleine Elliptizitäten.



Abbildung 3.3: Durch eine Messung der Intensitäten in äquidistanten Winkeln γ wird die Polarisationsellipse aufgeweitet [4,15].

In diesem Fall folgt einer Messung in äquidistanten Winkeln γ eine Aufweitung der Ellipse durch die Fourier-Analyse. Dies bewirkt größere Fehler für Δ und ψ . Entsprechend werden große Elliptizitäten sehr gut in dieser Messmethode vermessen. Aus der Fehleranfälligkeit für Δ und ψ aus besagten

Gründen folgt ein relativ großer Fehler für die Schichtdicke d, weshalb bei sehr dünnen Schichten das Verfahren der Minimumsuche bevorzugt werden sollte.

3.3.2 Minimumsuche

Neben der im vorherigen Abschnitt erläuterten Messmethode ist die Minimumsuche eine zweite, oft angewendete Messmethode des EL X-02C. Der Aufbau ähnelt dem des in 3.2.1 genannten Rotierenden-Analysator-Modus ohne Kompensator.

Der Polarisator wird auf einen festen Winkel zur Einfallsebene fixiert, sodass das einfallende Licht mit einem Azimutwinkel Θ^i linear polarisiert ist. Θ^i ist durch eine Elliptizität $e^i = 0^\circ$ und den Winkel des Polarisators festgelegt. Nachdem das Licht an der Probenoberfläche reflektiert wird, ist es im Allgemeinen elliptisch polarisiert.



Abbildung 3.4: Messverfahren Minimumsuche. Die \vec{E} -Feld-Komponente mit minimaler Intensität zeigt zum Punkt A oder A'. Analog zeigt die \vec{E} -Feld-Komponente maximaler Intensität zum Punkt B oder B'. Aus diesen Daten kann die Elliptizität *e* und der Azimutwinkel Θ bestimmt werden [4].

Bei der Polarisationsellipse werden mittels Analysator und Detektor die Elliptizität e^r und Azimutwinkel Θ^r der reflektierten Lichtwelle vermessen [4]. Durch die Rotation des Analysators wird das Intensitätsminimum so abgeschätzt, dass sich die beim Analysator durchgelassene \vec{E} -Feld-Komponente in der Nähe des Punktes A befindet. Erst dann wird das Intensitätsminimum $I_{min}(\Theta^r)$ genau gemessen. Analog wird das senkrecht zu $I_{min}(\Theta^r)$ befindliche Intensitätsmaximum $I_{max}(\Theta^r)$ vermessen (vgl. Abbildung. 3.4). Aus der Messung von $I_{max}(\Theta^r)$ ergibt sich aus dem Winkel des Analysators der Azimutwinkel Θ^r . Aus den Proportionalitäten $I_{min,max} \propto E_{min,max}^2$ und dem Verhältnis von I_{min} und I_{max} folgt die Elliptizität e^r :

$$\frac{I_{min}}{I_{max}} = \frac{E_{min}^2}{E_{max}^2} \Rightarrow \tan(e^r) = \sqrt{\frac{I_{min}}{I_{max}}}$$
(3.1)

Mit $\theta^{i,r}$ und $e^{i,r}$ können mittels der Gleichungen 2.5 und 2.6 die Größen $\delta^{i,r}$ und $\psi^{i,r}$ berechnet werden. Mit diesen Werten können mithilfe der Grundgleichung der Ellipsometrie Δ und ψ bestimmt

werden. Die Polarisationsänderung und die Eigenschaften der untersuchten Probe sind miteinander verknüpft. Das Messverfahren der Minimumsuche ist besonders für kleine Elliptizitäten e^r gut geeignet, wohingegen es bei großen Elliptizitäten größere Messfehler verursacht.

4 Schichtsysteme

Die durch die Messungen festgestellten Unterschiede der Proben, sowie die nachgewiesenen Eigenschaften, sollen im Nachfolgenden genauer erläutert werden.

4.1 Silizium

Silizium bildet bei allen vermessenen Proben das Substrat. Es handelt sich bei diesem Material um einen Halbleiter mit der Ordnungszahl 14 und einer Bandlücke von $\Delta E = 1,1$ eV bei einer Temperatur von 300 K [4,12]. Silizium kommt sowohl in poly- und monokristalliner als auch in amorpher Form vor, wobei diese Formen als nichtmagnetisch und optisch isotrop angenommen werden. Aus der Datenbank des EL X-02C sind folgende Brechungsindizes zu entnehmen:

| Datei | Brechungsindex | | Material |
|----------|-----------------------|----------------------------|------------------------------|
| | Realteil | Imaginärteil | |
| Si-1.mat | $n_r = 3,87 \pm 0,04$ | $\kappa=0,016\pm0,004$ | kristallines Silizium (c-Si) |
| Si-5.mat | $n_r = 4,20 \pm 0,05$ | $\kappa=0,\!422\pm0,\!005$ | amorphes Silizium (a-Si) |

Tabelle 4.1: Brechungsindizes für Silizium aus der Datenbank des EL X-02C.

Bei den durchgeführten Messungen mit dem EL X-02C wird von kristallinem Silizium als Substrat ausgegangen, weshalb der Wert aus der Datei *Si-1.mat* als Referenzwert für die Brechungsindexbestimmung gilt.

4.2 Siliziumdioxid

Siliziumdioxid ist ein Isolator mit einer Bandlücke von $\Delta E \approx 9$ eV bei 300 K. Bei einer Wellenlänge von $\lambda = 632,8$ nm ergibt sich sin Extinktionskoeffizient zu $\kappa = 0$. Beim Aufbau von Siliziumdioxid kann in zwei verschiedene Strukturen, die durch die Anordnung der SiO₄-Tetraeder entstehen, unterschieden werden. Die Sauerstoffatome dienen als Brücken zwischen den einzelnen Tetraedern. Ist der Bindungswinkel zwischen den Si-O-Si immer gleich, entsteht kristallines Siliziumdioxid, auch c-SiO₂ genannt. Sind die Bindungswinkel zufällig verteilt, so sind die einzelnen Tetraeder zueinander verkippt. Es entsteht amorphes Siliziumdioxid, oder a-SiO₂.



Abbildung 4.1: Aufbau von amorphen (links) und kristallinen Siliziumdioxid (rechts) [4].

Weil $a-SiO_2$ als optisch isotrop angenommen wird, können entsprechende Reflexionskoeffizienten verwendet werden. Anders ist es jedoch bei c-SiO₂. Dieses ist optisch anisotrop. Die in der Datenbank zu findenden Brechungsindizes für a-SiO₂ und c-SiO₂ sind Tabelle 4.2 zu entnehmen.

| Datei | Brechungsindex | Bemerkung |
|------------|-----------------------|---|
| sio2.mat | $n = 1,46 \pm 0,01$ | a-SiO ₂ (Quarzglas) |
| SiO2-1.mat | $n = 1,46 \pm 0,01$ | a-SiO ₂ (Quarzglas) |
| SiO2-1.mat | $n = 1,524 \pm 0,005$ | c-SiO ₂ bei \sim 300 K, ord. Polarisation |
| SiO2-1.mat | $n = 1,552 \pm 0,005$ | c-SiO ₂ bei \sim 300 K, außerord. Polarisation |

Tabelle 4.2: Brechungsindizes für Siliziumdioxid aus der Datenbank des EL X-02C.

Die Fehler sind auf \pm 1% geschätzt.

Bei sehr dünnen SiO₂-Schichten auf Siliziumsubstraten zeigt sich jedoch, dass der Brechungsindex größer wird. In diesen Fall kann der Brechungsindex für Schichtdicken $1 \text{ nm} \le d_{SiO_2} \le 8 \text{ nm}$ nach [2] folgendermaßen modelliert werden:

$$n_{SiO_2} = 2,139 - 0,088 * d_{SiO_2} \tag{4.1}$$

Bei einer nativen Oxidschicht der Dicke $d_{SiO_2}^{native} \approx 1$ nm ergibt die Modellierung in Gleichung 4.1 einen Brechungsindex von n = 2,0. Trotz einer relativ hohen Fehleranfälligkeit des Brechungsindex ergibt sich für die Schichtdicke nur ein sehr geringer Fehler. Die beim Aufdampfen entstehenden Grenzschichten zwischen Substrat und Schicht können mit dem Auswertprogramm des EL X-02C modelliert werden. Dazu sollte eine Bruggemann-Approximation, mit Siliziumdioxid und Silizium als Bestandteile, benutzt werden. Auch eine eventuelle Rauheit der Probenoberfläche kann im Programm simuliert werden.

4.3 Silber

Silber ist ein Metall der Ordnungszahl 47 und besitzt mit $\sigma = 61,35 * 10^6 \frac{A}{Vm}$ die höchste elektrische Leitfähigkeit. Daraus folgt mit $\kappa = 3,99$ ein ebenfalls sehr hoher Extinktionskoeffizient. Es gilt

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = 1 + \frac{i4\pi}{\omega}\hat{\sigma}$$
(4.2)

wobei ε die komplexwertige relative Permittivität und $\hat{\sigma} = \sigma_1 + i\sigma_2$ die komplexe Leitfähigkeit darstellt. Zusammen mit der Beziehung $n = \sqrt{\varepsilon}$ und der Frequenz ν des Lichtes ergibt sich für κ :

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\varepsilon_1 + \sqrt{\left(\frac{2\sigma}{\nu}\right)^2 + \varepsilon_1} \right)}$$
(4.3)

Da die Wurzelfunktion monoton wächst, folgt aus einer hohen elektrischen Leitfähigkeit σ ein hoher Extinktionskoeffizient κ . Aus diesem folgt über Gleichung 2.15 ein hoher Absorptionskoeffizient α . Der Realteil n_r des Brechungsindex von Silber wird in der Datenbank angegeben und ist sehr klein.

| Datei | Brechungsindex | | |
|--------|-------------------|--------------------------|--|
| | Realteil | Imaginärteil | |
| Ag.mat | $n_r=0,13\pm0,03$ | $\kappa = 3,99 \pm 0,03$ | |

Tabelle 4.3: Brechungsindex von Silber. Entnommen aus der Datenbank des EL X-02C.

Die angegebenen Fehler sind dabei geschätzt. Es werden verschiedene Silberschichten vermessen. Der Wert aus der Datei *Ag.mat* wird als Referenzwert genommen. Zur Berücksichtigung eventueller Grenzschichten sei auf Abschnitt 5.2 verwiesen.

5 Methoden zur Auswertung

Für die Berechnungen des Brechungsindexes sind Grundkenntnisse in Algebra und Analysis nötig. Zudem sollten Grundkenntnisse in Programmen wie Mathematica, Mathlab, GnuPlot, Graph, oder Ähnliches vorhanden sein. Allgemein kann der Brechungsindex über drei verschiedene Methoden bestimmt werden.

5.1 Methode 1

Die Probe wird unter möglichst vielen Winkeln vermessen. Die erhaltenen (Δ, ψ) -Werte können in die Grundgleichung der Ellipsometrie eingesetzt werden. Wird der Realteil von ρ gegen den Einfallswinkel graphisch aufgetragen, ergibt sich beispielsweise die folgende Kurve:



Abbildung 5.1: Bestimmung des Brewsterwinkels.

Der Nulldurchgang beschreibt den Brewsterwinkel. Über diesen lässt sich der Brechungsindex bestimmen. Diese Methode eignet sich jedoch nur zur Bestimmung reeller Brechungsindizes.

5.2 Methode 2

Bei Methode 2 wird der Brechungsindex rein analytisch über die Gleichung 2.34 bestimmt. Unter jedem Winkel wird ein komplexes n_2 berechnet. Diese werden anschließend aufsummiert und über die Anzahl der Messungen gemittelt. Die (Δ, ψ) -Werte werden aus den Messungen übernommen.

5.3 Methode 3

Die dritte Methode nutzt, wie Methode 1, die Eigenschaften des Brewsterwinkels aus. Im (Δ, ψ) -Graph wird $\Delta = 90^{\circ}$ fixiert und der dazugehörige Wert $\tan(\psi_B)$ abgelesen. Dazu sollte eine geeignete Skalierung des Simulationsfensters gewählt werden. Zusätzlich wird der Brewsterwinkel benötigt. Dieser kann auf zwei Arten bestimmt werden:

- 1. Es wird der Realteil von ρ gegen den Einfallswinkel aufgetragen (Methode 1).
- 2. Es wird ein Δ - φ -Plott erzeugt, und der Einfallswinkel bei bei $\Delta = 90^{\circ}$ bestimmt.

Durch die Bedingung $\Delta = 90^{\circ}$ vereinfacht sich Gleichung 2.34. Durch Einsetzen der Werte kann der komplexe Brechungsindex eines Materials bestimmt werden.

6 Aufgabenstellung

- 1. Machen Sie sich mit dem Gerät vertraut. Üben und beschreiben Sie (kurz) das Justieren einer Probe mit dem EL X-02C. Gehen Sie in diesem Zusammenhang auf eventuelle mechanische oder technische Mängel des Gerätes ein
- Vermessen Sie "Probe I". Es handelt sich hierbei um eine Siliziumdioxidschicht auf Siliziumsubstrat. Versuchen Sie die angegebene Schichtdicke möglichst genau zu reproduzieren. Verwenden Sie für Silizium und Siliziumdioxid die Brechungsindizes aus der Datenbank des EL X-02C.
- 3. Bestimmen Sie den Brechungsindex von Glas, Silizium und Siliziumdioxid mit einer der oben stehenden Methoden. Gleichen Sie ihr Schichtmodell geeignet an und behandeln Sie die aufgedampfte Schicht wie ein Substrat. Gehen Sie weiter darauf ein, warum die aufgedampfte Siliziumdioxidschicht möglichst über 100 nm betragen sollte. Bestimmen Sie anschließend mit ihren berechneten Brechungsindizes die Schichtdicke von Probe I erneut und vergleichen Sie ihre Ergebnisse.
- 4. Stellen Sie eine dicke Silberschicht her (mindestens 105 nm). Bestimmen Sie den Brechungsindex von Silber. Nutzen Sie dazu mindestens zwei der drei oben beschriebenen Methoden und vergleichen Sie ihre Ergebnisse. Stellen Sie anschließend eine Silberschicht mit einer Schichtdicke unter 50 nm her und bestimmen Sie die Schichtdicke, unter der Verwendung der berechneten Brechungsindizes.

C Abbildungsverzeichnis

| 2.1 | Gedrehte Polarisationsellipse | 3/46 |
|-----|---|-------|
| 2.2 | Einfallsebene der Lichtwelle | 4/47 |
| 2.3 | Lichtbrechung an Grenzfläche zweier Medien | 7/50 |
| 2.4 | Einschichtmodell | 9/52 |
| 3.1 | Schematischer Aufbau des EL X-02C | 13/54 |
| 3.2 | Rotierender Analysator | 15/56 |
| 3.3 | Aufweitung der Polarisationsellipse | 15/56 |
| 3.4 | Messmverfahren Minimumsuche | 16/57 |
| 3.5 | Reflexionsvermögen von transparentem und leitendem Material | 17 |
| 3.6 | Phasendifferenz für Isolatoren und Leiter | 18 |
| 3.7 | Schichtwachstumskurve von Siliziumdioxid auf Siliziumsubstrat | 18 |
| 3.8 | Schichtwachstumskurven für verschiedene Brechungsindizes | 19 |
| 3.9 | Schichtwachstumskurve von Tantal auf Siliziumsubstrat | 20 |
| 4.1 | Aufbau von Siliziumdioxid | 21/59 |
| 5.1 | Bestimmung des Brewsterwinkels von Glas, Silizium und Siliziumdioxid | 25/61 |
| 5.2 | Bestimmung des Brewsterwinkels von Silber für $\Delta = 90^{\circ}$ | 27 |
| 5.3 | Modellierte Schichtsysteme | 29 |
| 5.4 | Bestimmung der Brechungsindizes von Si und SiO ₂ über (Δ, ψ)-Graphen | 29 |
| 5.5 | (Δ, ψ) -Graph einer dicken Siliziumdioxidschicht | 30 |
| 5.6 | (Δ, ψ) -Graph einer dünnen Siliziumdioxidschicht (alle Messwerte) | 31 |
| 5.7 | (Δ, ψ) -Graph einer dünnen Siliziumdioxidschicht (beste Messwerte) | 32 |
| 5.8 | (Δ, ψ) -Graph einer dicken Silberschicht | 33 |
| 5.9 | (Δ, ψ) -Graph einer dünnen Silberschicht | 34 |
| A.1 | Probentisch des EL X-02C | 39 |
| A.2 | EL X-02C in 90°-Stellung | 40 |
| A.3 | Hauptmenü der Ellipsometer-Software | 40 |
| A.4 | Justage des Lasers | 40 |
| A.5 | Test der Intensität | 41 |
| A.6 | Fenster zur Kalkulation von Brechungsindex und Schichtdicke | 43 |

D Literaturverzeichnis

- [1] Wolfgang Demtröder. Experimentalphysik 2. 5. Auflage. Springer-Verlag, 2009.
- [2] Harland G. Tompkins und Eugene A. Irene, Hrsg. *Handbook of Ellipsometry*. William Andrew, 2005.
- [3] Stephen G. Lipson, Henry S. Lipson und David S. Tannhauser. *Optik.* 3. Auflage. Springer-Verlag, 1997.
- [4] Sebastian Voss. *Ellipsometrische Charakterisierung dünner Schichten auf Siliziumsubstraten*. Bachelorarbeit. Osnabrück 2012.
- [5] Harland G. Tompkins und William A. McGahan. *Spectroscopic Ellipsometry and Reflectometry - A User's Guide*. John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- [6] Roy F. Potter. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Hrsg. von Edward D. Palik. Academic Press, 1998, S. 465–469.
- [7] Thorsten Fließbach. *Elektrodynamik Lehrbuch zur theoretischen Physik II* 5. Auflage. Spektrum Akademischer Verlag, 2008.
- [8] John A. Woollam, Blaine Johs, Craig M. Herzinger, James Hilfiker, Ron Synowicki und Corey L. Bungay. Optical Metrology – Overview of Variable Angle Spectroscopic Ellipsometer (VASE), Part 1: Basic Theory and Typical Applications. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers Box 10, 1999. Aufruf am 07.06.2014. URL: http://www.lot-qd.de/files/downloads/woollam/en/el_vaseoverview1_deen.pdf.
- Katalin Biro. *Ellipsometrische Untersuchungen dünner Halbleiterschichten*. Diplomarbeit. Bonn, 2009. Aufruf am 07.06.2014.
 URL: http://tdpac.hiskp.uni-bonn.de/diplomarbeiten/Diplomarbeit-Katalin-Biro-2009.pdf.
- [10] Daniel Faltermeier. Ellipsometrie an organischen Dünnfilmen und Einkristallen zur Bestimmung der optischen und strukturellen Eigenschaften. Dissertation, Stuttgart 2007. URL: http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2007/3250/pdf/ThesisFinal.pdf.
- [11] Ralf Rochotzki. *Ellipsometrische Untersuchungen an Plasmapolymeren und plasmamodifizierten Polymeroberfächen*. Dissertation. Chemnitz, 1993.
 URL: http://www1.physik.uni-greifswald.de/download/dissertationen/dr-rochotzki.pdf
- [12] Jeremy Low u. a. "Band Gap Energy in Silicon". In: *American Journal of Undergraduate Research* 7 (2008), S. 27–32.
- [13] Marcus Eichfelder. Wechselwirkung von Licht mit Materie: Reflexion und Brechung. 2004. Aufruf am 07.06.2014.
 URL: http://www.pi1.physik.uni-stuttgart.de/teaching/HauptseminarWS0405/Eichfelder.pdf.
- [14] Olaf Kahle. Einsatzmöglichkeiten und Grenzen der temperaturvariablen Ellipsometrie zur thermophysikalischen Charakterisierung polymerer Schichten. Dissertation. Cottbus, 2002. URL: opus.kobv.de/btu/volltexte/2007/75/pdf/diss_kahle.pdf.
- [15] Dr. J.-P. Zöllner. Fachpraktikum Mikroelektronik und Sensorik Versuch: Schichtdickenbestimmung mittels Ellipsometrie. Praktikumsanleitung. TU Ilmenau, 1999. URL: https://www.tuilmenau.de/fileadmin/media/mne_nano/Lehre/Praktikum/ Ellipsometrie.pdf.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen und mich durch diese Zeit begleitet haben. Zunächst möchte ich Herrn Prof. Dr. Joachim Wollschläger danken, der trotz vieler Termine immer Zeit fand, mir bei Problemen und Fragen während der Arbeit zu helfen. Weiter bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Mirco Imlau, der sich ohne zu zögern dazu bereiterklärt hat, die Position des Zweitgutachters zu übernehmen.

Meinem Betreuer Tobias Schemme sei ebenfalls gedankt. Er hatte immer ein offenes Ohr bei technischen oder inhaltlichen Fragen. Darüber hinaus sei Julia, Katharina, Kamil und Lili gedankt für die zahlreichen lustigen Momente in den Laboren und Unterhaltungen während der Entstehung der Arbeit. Ebenso sei Julia, Lukas und meinen Geschwistern, Christian und Sandra, sowie meinem Schwager Florian für die ausgezeichnete redaktionelle Unterstützung gedankt. Natürlich sei auch jedem jetzigen und ehemaligen Mitglied der AG "Dünne Schichten und Grenzflächen" für die super Atmosphäre gedankt.

Ebenso danke ich der Feinmechanikwerkstatt für die schnellen Modifikationen am Ellipsometer. Zum Schluss möchte ich mich ganz herzlich bei der Person bedanken, mit deren Hilfe und Unterstützung ich nun genau dort bin, wo ich bin: Katrin, du bist einfach die beste! Vielen Dank für alles!
Ich versichere, dass ich die eingereichte Bachelorarbeit selbstständig und ohne unerlaubte Hilfe verfasst habe. Anderer als der von mir angegebenen Hilfsmittel und Schriften habe ich mich nicht bedient. Alle wörtlich oder sinngemäß den Schriften anderer Autoren entnommenen Stellen habe ich kenntlich gemacht.

Osnabrück, den 20. Juni 2014.

Sebastian Künne