

UNIVERSITÄT OSNABRÜCK

Fachbereich Physik

BACHELORARBEIT

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

Ellipsometrische Charakterisierung dünner Schichten auf Siliziumsubstraten

Autor: Sebastian Voß

Matrikelnummer: 940084

Erstgutachter: Prof. Dr. rer. nat. Joachim Wollschläger

Zweitgutachter: Prof. Dr. rer. nat. Mirco Imlau

Osnabrück, den 5. September 2012.

Ich versichere, dass ich die eingereichte Bachelor-Arbeit 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 5. September 2012.
Sebastian Voß

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	1
2.	Elektromagnetische Wellen und Materie 2.1. Die Polarisation von Licht 2.2. Der Brechungsindex 2.3. Die Reflexion von Licht 2.3.1. Substratmodell 2.3.2. Einschichtmodell 2.3.3. Mehrschichtmodell 2.3.4. Heterogene Systeme 2.4. Die Grundgleichung der Ellipsometrie	3 6 7 8 9 11 11 12
3.	Funktionsweise von Ellipsometern	15
	3.1. Geräteausstattung 3.2. Messmethoden 3.2.1. Rotierender Analysator 3.2.2. Minimumsuche 3.3. Datenanalyse 3.4. Fehleranalyse 3.5. Trajektorien der ellipsometrischen Grundgrößen	16 16 18 19 22 23
4.	Materialsystem	29
	4.1. Silizium	29 29 31
5.	Experimentelle Befunde	33
	5.1. Thermisch oxidiertes Siliziumdioxid	33 34 36 40 46
6.	Ausblick und Zusammenfassung	51
Α.	Exkurse A 1 Spezialfälle der Ellipsengleichung	53

In halts verzeichn is

	A.2. Herleitung des elektrischen Feldes nach Durchlaufen eines Mediums	54
	A.3. Gebräuchliche Effektivmediumtheorien	55
	A.4. Der Glan-Thompson-Polarisator	55
	A.5. Nullellipsometrie	56
В.	Abbildungsverzeichnis	59
C.	Literatur	61

1. Einleitung

Dünne Schichten gewinnen seit einigen Jahren eine immer größere Bedeutung für Industrie und Forschung in Form von mikroelektronischen Bauteilen, selbstreinigenden oder schmutzabweisenden Oberflächen, biologischen Membranen und vielen weiteren Beispielen. Mit der Bedeutung von dünnen Schichten steigt auch die Bedeutung von Methoden, die diese möglichst genau vermessen können. Eine dieser Methoden ist die Ellipsometrie, die im Rahmen dieser Arbeit für die Forschung und Didaktik an der Universität Osnabrück erprobt wurde.

Die Ursprünge der Ellipsometrie gehen zurück auf Paul Drude, der im späten 19. Jahrhundert als Erster die Phasendifferenz zwischen zwei senkrecht zueinander polarisierten Lichtwellen zur Messung der Schichtdicke von sehr dünnen Schichten nutzte [15]. Neben der Messung der Schichtdicke kann mit der Ellipsometrie auch der komplexe Brechungsindex des Materials bestimmt werden. Die Nutzung von polarisiertem Licht zur Vermessung dünner Schichten profitierte in den folgenden Jahrzehnten von vielen weiteren Errungenschaften der Technik: Mit Lasern ließ sich sowohl die Wellenlänge als auch der Polarisationszustand des Lichtes sehr genau definieren, durch die Weiterentwicklung von Polarisatoren ließ sich letzterer immer besser vermessen und durch das Fortschreiten der Computertechnik verbesserten sich schließlich die Möglichkeiten zur Auswertung der Messdaten. Durch diese Entwicklungen wurde die Ellipsometrie zu einer sehr genauen, schnellen und zerstörungsfreien Messmethode und errang dadurch einen festen Platz in Industrie und Forschung.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Erprobung des Submonolayer-Ellipsometers vom Typ EL X-02C der Firma DRE GMBH anhand von verschiedenen Filmen (dünne und ultradünne isolierende Schichten sowie dünne leitende Schichten) auf Siliziumsubstraten. Zum Verständnis dieser Experimente werden zunächst in Kapitel 2 die theoretischen Grundlagen zur Polarisation und Reflexion von Licht eingeführt, die sich weitgehend nach [3, 14] richten. Mit deren Hilfe wird dann die ellipsometrische Grundgleichung nach [14–16] hergeleitet. Daraufhin werden in Kapitel 3 die experimentellen Grundlagen nach [3, 11, 12, 15] erläutert, worauf sich die genaue Beschreibung der untersuchten Proben in Kapitel 4 anschließt. Die Arbeit schließt mit der Auswertung und Diskussion der Messergebnisse in Kapitel 5 sowie einer Zusammenfassung der erreichten Ergebnisse in Kapitel 6.

Elektromagnetische Wellen und Materie

2.1. Die Polarisation von Licht

Licht ist eine transversale elektromagnetische Welle, die nach den Maxwellgleichungen durch ihr elektrisches Feld

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

beschrieben wird, wobei \vec{E}_0 die Amplitude, $\omega = 2\pi\nu$ die Kreisfrequenz, \vec{k} den Wellenvektor mit $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$ und \vec{r} den Ort des elektrischen Feldes bezeichnet. Das magnetische Feld \vec{B} steht immer senkrecht zum elektrischen Feld, sodass Gleichung 2.1 zur Beschreibung des Lichtes genügt. Sowohl \vec{E} - als auch \vec{B} -Feld stehen außerdem senkrecht zur Ausbreitungsrichtung, die durch den Wellenvektor \vec{k} festgelegt ist.

Definiert man das Koordinatensystem so, dass die Welle sich in z-Richtung ausbreitet, dann gilt mit $\vec{k} = (0, 0, k)$ für das \vec{E} -Feld:

$$\vec{E} = \vec{E_x} + \vec{E_y} \tag{2.2}$$

mit

$$E_x(z,t) = |Re\{\vec{E}_x\}| = E_{x0} \cdot \cos(\omega t - kz),$$

$$E_y(z,t) = |Re\{\vec{E}_y\}| = E_{y0} \cdot \cos(\omega t - kz + \delta).$$
(2.3)

Dabei beschreibt δ die Phasendifferenz zwischen den beiden Komponenten, die man aus Gleichung 2.1 erhält, wenn man berücksichtigt, dass die Amplitude $\vec{E_0}$ eine komplexe Größe ist.

Der Polarisationszustand einer elektromagnetischen Welle ist durch die zeitabhängige Orientierung des \vec{E} -Feldes an einem bestimmten Ort definiert.² Eliminiert man

 $^{^1}$ Im Vakuum schwingen \vec{E} - und \vec{B} -Feld in Phase, allerdings ändert sich dies für Wellen in Materie mit komplexem Brechungsindex. In dem Fall lässt sich jedoch die Phasenverschiebung aus dem Brechungsindex errechnen. Für die Überlegungen in dieser Arbeit genügt es aber ohnehin, das \vec{E} -Feld zu betrachten.

²Durch die implizite Voraussetzung einer festen Phasenbeziehung δ in Gl. 2.3 wurde ein Polarisationszustand bereits ausgeschlossen: Es kann auch sein, dass δ für alle Teilwellen statistisch verteilt ist. In dem Fall spricht man von unpolarisiertem Licht.

in den Gleichungen 2.3 die Zeit t, so erhält man die folgende Gleichung, die die Information über die Orientierung des \vec{E} -Feldes an einem bestimmten Ort und zu allen Zeitpunkten enthält (für $E_{x0}, E_{y0} \neq 0$):

$$\frac{E_x^2}{E_{x0}^2} + \frac{E_y^2}{E_{y0}^2} - 2\frac{E_x E_y}{E_{x0} E_{y0}} \cos \delta = \sin^2 \delta.$$
 (2.4)

Im allgemeinen Fall beschreibt diese Gleichung eine Ellipse, deren Hauptachsen gegenüber den Koordinatenachsen um den Azimutwinkel Θ gedreht sind. Die Form der Ellipse - und damit auch die Polarisation des Lichtes - ist dabei festgelegt durch die Amplituden E_{x0} , E_{y0} und die Phasendifferenz δ ; geometrisch beschrieben wird sie durch die Elliptizität e mit tan e = b/a, wobei b bzw. a die kurze bzw. die lange Hauptachse bezeichnen, und den bereits erwähnten Azimutwinkel Θ .

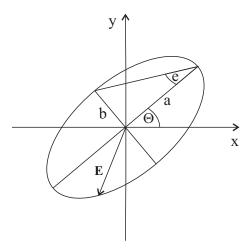


Abbildung 2.1.: Im Allgemeinen erhält man aus Gl. 2.4 eine gedrehte Polarisationsellipse mit Elliptizität e und Azimutwinkel Θ . Die Halbachsen sind mit a bzw. b beschrieben und nicht mit den Amplituden E_{x0} , E_{y0} zu verwechseln, für die sich im Allgemeinen keine graphische Anschauung finden lässt. Der Vektor des elektrischen Feldes ist mit \mathbf{E} bezeichnet.

Da der Polarisationszustand des Lichtes bei Reflexion an den Grenzflächen einer Probe geändert wird, ist also die Beschreibung und Vermessung des elliptischen Polarisationszustandes wesentlich für die Ellipsometrie, die dadurch auch ihren Namen erhielt. Der Polarisationszustand ist festgelegt durch das Amplitudenverhältnis E_{y0}/E_{x0} sowie die Phasendifferenz δ , daher wird im folgenden dargelegt, wie man diese Größen aus der Form der Polarisationsellipse erhält.

³Eigentlich bräuchte man zusätzlich einen Skalierungsfaktor, der die Länge der Hauptachsen beschreibt, allerdings werden in der Ellipsometrie nur die Verhältnisse der Amplituden entlang dieser Achsen betrachtet.

Mit der Definition $\tan \psi = E_{y0}/E_{x0}$ (siehe auch Abschnitt A.1) lassen sich folgende Zusammenhänge zwischen (Θ, e) und (δ, ψ) herleiten:

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

und

$$\sin 2e = \frac{2\tan\psi}{1+\tan^2\psi}\sin\delta. \tag{2.6}$$

Aus der Vermessung des Polarisationszustandes (also (Θ, e)) durch das Ellipsometer lässt sich demnach die Phasendifferenz δ und ein Maß für das Amplitudenverhältnis, ψ , herleiten. Der Winkel ψ hat dabei im Allgemeinen keine geometrische Bedeutung, sondern wird in Anlehnung an die ellipsometrische Grundgleichung (vgl. Abschnitt 2.4) so definiert.

In der Ellipsometrie wird das Koordinatensystem nun durch die Einfallsebene und ihre Normale festgelegt. Die Einfallsebene ist dabei die durch das Lot zur reflektierenden Fläche und den Wellenvektor \vec{k} der einfallenden Welle definierte Ebene (vgl. Abb. 2.2).

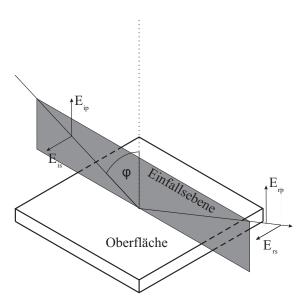


Abbildung 2.2.: Die Einfallsebene ist durch die einfallende Welle und das Lot zur Oberfläche der Probe festgelegt. Die Bezeichnungen p und s stehen für die parallel bzw. senkrecht zur Einfallsebene polarisierte Komponente der einfallenden (i) bzw. reflektierten (r) Welle; φ bezeichnet den Einfallswinkel.

Das elektrische Feld \vec{E} der einfallenden Welle kann immer zerlegt werden in eine Komponente $\vec{E_p}$ parallel zur Einfallsebene und eine Komponente $\vec{E_s}$ senkrecht zur Einfallsebene. Durch diese Aufteilung kann weiterhin jeder Polarisationszustand

durch die Phasendifferenz $\delta = \delta_p - \delta_s$ zwischen den beiden Komponenten und das Amplitudenverhältnis $\frac{E_{0p}}{E_{0s}}$ dargestellt werden. Dies gilt auch für die reflektierte und transmittierte Welle.

2.2. Der Brechungsindex

Trifft eine elektromagnetische Welle auf Materie, so verändert sich ihre Phasengeschwindigkeit v_{ph} von der Vakuumlichtgeschwindigkeit c_0 zu:

$$v_{ph} = \frac{c_0}{n} = c. \tag{2.7}$$

Die Größe n wird als Brechungsindex bezeichnet und ist abhängig von der Wellenlänge λ (Dispersion). Gleichzeitig verändert sich die Wellenlänge um den gleichen Faktor zu $\lambda = \lambda_0/n$, wohingegen die Frequenz der Welle unverändert bleibt.

Aus dem Modell des klassischen Oszillators kann hergeleitet werden, dass der Brechungsindex eigentlich eine komplexe Größe ist und daher als $n=n_r-i\kappa$ angesetzt werden muss. Der Imaginärteil κ des Brechungsindex wird als Extinktionskoeffizient bezeichnet und ist ebenso wie der Realteil n_r abhängig von der Wellenlänge des Lichtes. Mit dem komplexen Brechungsindex ergibt sich für das elektrische Feld nach Durchlaufen eines Mediums der Dicke Δz (zur Herleitung siehe auch Abschnitt A.2):

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E_0} \cdot \exp(i\omega(t - \frac{z}{c_0})) \cdot \underbrace{\exp(-i\omega(n_r - 1)\frac{\Delta z}{c_0})}_{\text{Phasenverz\"ogerung}} \cdot \underbrace{\exp(-\omega\kappa\frac{\Delta z}{c_0})}_{\text{Absorption}}.$$
 (2.8)

Man erhält also durch den Extinktionskoeffizienten einen zusätzlichen Faktor, der die Verringerung der Amplitude beschreibt. Für durchsichtige Medien (z.B. Luft) ist κ im Bereich des sichtbaren Lichtes sehr klein (deshalb sind sie durchsichtig, vgl. Gl. 2.9), daher wird dort oft $n \approx n_r$ gesetzt.

Aus Gl. 2.8 erhält man für die Intensität $I=c_0\epsilon_0|\vec{E}|^2$ das LAMBERT-BEERsche Absorptionsgesetz:

$$I = I_0 \cdot e^{-\alpha \Delta z}$$
 mit $\alpha = \frac{4\pi \kappa}{\lambda_0} = 2k_0 \kappa.$ (2.9)

Der Faktor α , der die Stärke der Abnahme beschreibt, wird als Absorptionskoeffizient bezeichnet. Der Extinktionskoeffizient ist demnach direkt mit der Absorption verknüpft.

Als Eindringtiefe wird diejenige Dicke $d_e = \Delta z_e$ definiert, bei der die Intensität um den Faktor $\frac{1}{e}$ (ca. 37%) gesunken ist. Aus $\alpha \cdot d_e = 1$ erhält man:

$$d_e = \frac{\lambda_0}{4\pi\kappa} \tag{2.10}$$

Man beachte, dass anfangs ein senkrechter Einfall der Welle aus dem Vakuum in das Medium vorausgesetzt wurde. Es lassen sich jedoch alle Formeln auf die Situation zweier Medien mit $n_1, n_2 \neq 1$ übertragen, wenn man berücksichtigt, dass die Geschwindigkeit der einfallenden Welle nicht die Vakuumlichtgeschwindigkeit, sondern c_0/n_1 ist. Bei einem schrägen Einfall muss außerdem der Einfallswinkel φ_1 berücksichtigt werden. Trifft eine Welle aus einem Isolator mit Brechungsindex n_1 auf einen Leiter mit Brechungsindex $n_2 = n_{r2} - i\kappa_2$ wird bspw. Gl. 2.9 nach [15] zu:

$$I = I_0 \cdot e^{\alpha z}$$
 mit $\alpha = \frac{4\pi}{\lambda_1} \cdot Im \left\{ \sqrt{n_2^2 - (n_1 \sin \varphi_1)^2} \right\}.$ (2.11)

Für $\varphi_1 = 0$ ergibt sich wieder der Absorptionskoeffizient aus 2.9. Das negative Vorzeichen des Exponenten ergibt sich wie vorher durch den Ansatz $n = n_r - i\kappa$. Die gezeigten Formeln können auch mithilfe der MAXWELL-Gleichungen hergeleitet werden. Insbesondere erhält man für die Phasengeschwindigkeit in Materie:

$$v_{ph} = \frac{c_0}{\sqrt{\epsilon \mu}} \tag{2.12}$$

Darin ist ϵ die relative Permittivität und μ die relative Permeabilität. Der Vergleich mit Gl. 2.7 ergibt $n=\sqrt{\epsilon\mu}$, was sich für nichtmagnetische Materialien ($\mu=1$) zu $n=\sqrt{\epsilon}$ vereinfacht. Beide Größen sind komplex, abhängig von der Wellenlänge und können gleichwertig zur Beschreibung von optischen Vorgängen genutzt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wird meistens der Brechungsindex genutzt, da dieser zu den Größen gehört, die in der Ellipsometrie bestimmt werden.

2.3. Die Reflexion von Licht

Für die Ellipsometrie ist die Beschreibung und Berechnung der Reflexion von Licht, insbesondere die Veränderung des Polarisationszustandes bei der Reflexion, entscheidend. Daher soll in diesem Abschnitt geschildert werden, wie die Reflexion von Licht mathematisch beschrieben werden kann.

An der Grenzfläche zweier Medien mit den Brechungsindizes $n_1 = n_{r1}$ (also $\kappa_1 = 0$) bzw. $n_2 = n_{r2} - i\kappa_2$ wird eine elektromagnetische Welle in eine gebrochene und eine reflektierte Welle aufgespalten. Beide Wellen pflanzen sich weiterhin in der Einfallsebene fort, allerdings mit den unterschiedlichen Geschwindigkeiten $c_1 = c_0/n_1$ für die reflektierte Welle (genauso wie die einfallende Welle) bzw. $c_2 = c_0/n_{r2}$ für die gebrochene Welle. Außerdem unterscheiden sich die Winkel zum Lot der Grenzfläche (vgl. Abb. 2.3): Für die reflektierte Welle gilt $\varphi_1 = \varphi_1$, während zur Berechnung von φ_2 das SNELLIUSsche Brechungsgesetz benötigt wird:

$$\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} = \frac{c_1}{c_2} = \frac{n_{r2}}{n_1}.\tag{2.13}$$

Das Gesetz gilt allerdings nur für optisch isotrope Dielektrika und in (guter) Näherung auch für schwach absorbierende Medien mit $\kappa_2 \ll n_{r2}$ [6]. Für stärker

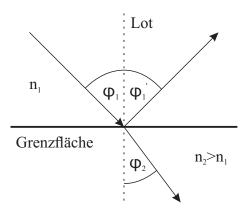


Abbildung 2.3.: Die Lichtbrechung an der Grenzfläche zweier Medien. n_1 und n_2 bezeichnen die Brechungsindizes der Medien, φ_1 den Einfallswinkel, φ_1 den Reflexionswinkel und φ_2 den Brechungswinkel.

absorbierende Medien wird in [15] angegeben, dass sich der Brechungswinkel dann folgendermaßen berechnet:

$$\tan \varphi_2 = \frac{n_1 \sin \varphi_1}{Re\left\{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \varphi_1}\right\}}.$$
 (2.14)

Für $n_2=n_{r2}$ ergibt sich daraus wieder das SNELLIUSsche Brechungsgesetz. Die Frage, wie sich die Amplituden, die Phasendifferenz und somit der Polarisationszustand bei der Reflexion ändern, wird durch die sogenannten Reflexionskoeffizienten beantwortet. Diese stellen den Zusammenhang zwischen den komplexen Amplituden $E_{0p,s} \cdot e^{i\delta_p,s}$ von einfallender Welle \vec{E}^i (von engl. incident) und reflektierter Welle \vec{E}^r her. Dabei wird jeweils zwischen den zwei Komponenten \vec{E}_p parallel und \vec{E}_s senkrecht zur Einfallsebene unterschieden:

$$R_{p} = \frac{E_{0p}^{r}}{E_{0p}^{i}} \cdot e^{i(\delta_{p}^{r} - \delta_{p}^{i})} \quad \text{bzw.} \quad R_{s} = \frac{E_{0s}^{r}}{E_{0s}^{i}} \cdot e^{i(\delta_{s}^{r} - \delta_{s}^{i})}.$$
 (2.15)

Die Gestalt der Reflexionskoeffizienten hängt vom Schichtsystem des Materials ab und wird in den folgenden Abschnitten genauer erläutert.

2.3.1. Substratmodell

Im Substratmodell (Abb. 2.4) geht man von zwei halbunendlichen, homogenen und isotropen Medien aus, die hier außerdem nichtmagnetisch sein sollen⁴ und von denen das eine als Substrat (2) und das andere als Umgebung (1) bezeichnet wird. Die Voraussetzung "halbunendlich" kann dann als erfüllt angesehen werden, wenn das Medium entweder stark genug absorbiert oder die untere Fläche stark genug

⁴Die Einschränkung auf nichtmagnetische Medien ist nicht zwingend notwendig, aber in der Ellipsometrie üblich.

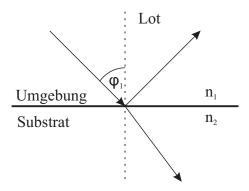


Abbildung 2.4.: Das Substratmodell mit Brechungsindex n_1 für die Umgebung und n_2 für das Substrat. Das Licht fällt unter dem Winkel φ_1 auf die Oberfläche und wird zum Teil reflektiert und zum Teil transmittiert.

angeraut ist, dass sie nicht mehr nennenswert reflektiert. Aus Überlegungen zur Stetigkeit der zur Grenzfläche tangentialen bzw. normalen Komponente von \vec{E} -bzw. \vec{B} -Feld erhält man schließlich die Fresnel-Koeffizienten:

$$r_{12p} = \frac{n_2 \cos \varphi_1 - n_1 \cos \varphi_2}{n_2 \cos \varphi_1 + n_1 \cos \varphi_2}$$
 (2.16)

und

$$r_{12s} = \frac{n_1 \cos \varphi_1 - n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1 + n_2 \cos \varphi_2}.$$
 (2.17)

Für schwach absorbierende Medien kann man nach dem SNELLIUSschen Brechungsgesetz den unbekannten Ausdruck $\cos \varphi_2$ umschreiben:

$$\cos \varphi_2 = \sqrt{1 - \frac{n_1^2}{n_2^2} \sin^2 \varphi_1}.$$
 (2.18)

Für stärker absorbierende Medien ergibt sich ein nach Gleichung 2.14 entsprechend komplizierterer Ausdruck. In beiden Fällen sind dadurch r_{12p} und r_{12s} nur von den Brechungsindizes und vom Einfallswinkel abhängig.

Da die Reflexionskoeffizienten für p- bzw. s-Komponente des \vec{E} -Feldes im Allgemeinen unterschiedlich sind, lässt sich erkennen, dass das Amplitudenverhältnis und die Phasendifferenz nach der Reflexion anders sind als vor der Reflexion, sodass sich der Polarisationszustand geändert hat.

2.3.2. Einschichtmodell

Wichtiger für die Ellipsometrie ist der Fall, dass das Substrat mit einer (dünnen) Schicht bedeckt ist. Beide Bestandteile werden als homogen, nichtmagnetisch und

isotrop vorausgesetzt. Außerdem wird hier angenommen, dass die Grenzflächen parallel zueinander liegen. Die einfallende Welle wird dann an den Grenzflächen von Umgebung (1) und Schicht (2) bzw. von Schicht und Substrat (3) mehrfach reflektiert und transmittiert, sodass die insgesamt reflektierte Welle aus der Überlagerung aller dieser Teilwellen besteht. Die Summation über alle Teilwellen, jeweils

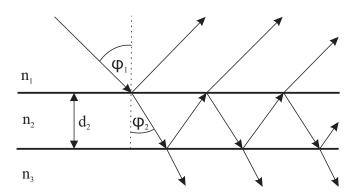


Abbildung 2.5.: Das Einschichtmodell. Das Licht trifft in der Umgebung mit Brechungsindex n_1 unter einem Winkel φ_1 auf die Schicht der Dicke d_2 mit Brechungsindex n_2 und wird dabei teilweise reflektiert und teilweise unter einem Brechungswinkel φ_2 transmittiert. Der transmittierte Strahl wird an der Grenzfläche von Schicht und Substrat mit Brechungsindex n_3 wiederum in einen reflektierten und einen transmittierten Strahl aufgespalten. Diese Prozedur wiederholt sich in der Schicht, sodass der insgesamt von der Probe reflektierte Strahl aus der Überlagerung aller reflektierten Teilstrahlen besteht.

einzeln für p- und s-Komponente der Welle, führt mathematisch zu einer geometrischen Reihe, die ausgewertet werden kann und folgende Reflexionskoeffizienten ergibt:

$$R_{p,s} = \frac{r_{12p,s} + r_{23p,s}e^{-i2\beta_2}}{1 + r_{12p,s}r_{23p,s}e^{-i2\beta_2}}$$
(2.19)

mit

$$\beta_2 = 2\pi \frac{d_2}{\lambda} n_2 \cos \varphi_2 = 2\pi \frac{d_2}{\lambda} \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \varphi_1}.$$
 (2.20)

Die $r_{ijp,s}$ bezeichnen dabei die Fresnel-Koeffizienten für die Reflexion an der Grenzfläche zwischen den Schichten i und j. Die zweite Relation für β_2 gilt wieder nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz nur für schwach absorbierende Medien und wird sonst nach Gl. 2.14 entsprechend komplizierter. Die Wahl der Indizes verursacht, dass es kein β_1 und d_1 gibt.

2.3.3. Mehrschichtmodell

Erhöht man die Anzahl der Schichten bei gleichen Voraussetzungen wie in Abschnitt 2.3.2, so treten weitere Reflexionen und Transmissionen auf, die durch ähnliche Überlegungen wie im Einschichtmodell berücksichtigt werden können. Zur Herleitung beginnt man mit der obersten Schicht und fasst alle darunter liegenden Schichten mit dem Substrat zusammen. Der unteren, zusammengefassten Schicht ordnet man den effektiven Reflexionskoeffizienten $R_{p,s}^*$ zu, sodass man wieder das Einschichtmodell verwenden kann. Dann wendet man das gleiche Verfahren auf die jeweils darunter liegende Schicht an. Für ein System mit zwei Schichten (2), (3) auf dem Substrat (4) ergibt sich beispielsweise:

$$R_{p,s} = \frac{r_{12p,s} + R_{p,s}^* e^{-i2\beta_2}}{1 + r_{12p,s} R_{p,s}^* e^{-i2\beta_2}} \quad \text{mit} \quad R_{p,s}^* = \frac{r_{23p,s} + r_{34p,s} e^{-i2\beta_3}}{1 + r_{23p,s} r_{34p,s} e^{-i2\beta_3}}$$
(2.21)

Dabei ergibt sich β_2 entsprechend Gl. 2.20 und β_3 als

$$\beta_3 = 2\pi \frac{d_3}{\lambda} n_3 \cos \varphi_3 = 2\pi \frac{d_3}{\lambda} \sqrt{n_3^2 - n_1^2 \sin^2 \varphi_1}, \qquad (2.22)$$

wobei die zweite Relation wiederum nur nach dem Brechungsgesetz von Snellius gilt.

Alternativ kann die Reflexion auch durch einen Matrixformalismus modelliert werden, der in [14, 15] genauer beschrieben wird. Zusätzlich mit dem Jones- und Müller-Matrixformalismus für die optischen Bauelemente des Ellipsometers lässt sich die Transformation des Polarisationszustandes des Lichtes zu jedem Zeitpunkt durch die Multiplikation der entsprechenden Matrizen errechnen.

2.3.4. Heterogene Systeme

Häufig sind die bisher getroffenen Annahmen von Isotropie, Homogenität und Parallelität der Grenzflächen nicht (auch nicht näherungsweise) erfüllt. Dies wird vor allem durch die Rauheit der Grenzfläche, verschiedene Defekte oder die Interdiffusion der Schicht(en) mit anderen Materialien, wie z.B. dem Substrat, verursacht. Die Anisotropie von Materialien kann durch entsprechende Matrizen, aber auch durch entsprechend kompliziertere Reflexionskoeffizienten berücksichtigt werden [15]. Abbildung 2.6 zeigt beispielhaft und schematisch ein heterogenes Mehrschichtmodell mit einer rauen Schicht (2) an der Oberfläche und einer inhomogenen Schicht (3) darunter.

Um auch dies modellieren zu können, wurden verschiedene Effektivmediumtheorien entwickelt, die die Größe $\epsilon=n^2$ der heterogenen Schicht aus den ϵ_i der Komponenten errechnen. In der Regel wird dabei eine elektrostatische Näherung angewandt, für deren Gültigkeit die separaten Bereiche klein sein müssen gegenüber der Wellenlänge, aber groß genug, dass ihnen eine sinnvolle dielektrische Funktion ϵ zugeordnet werden kann. Unter dieser Voraussetzung kann die folgende Gleichung

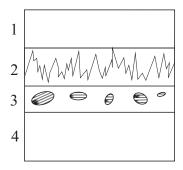


Abbildung 2.6.: Schematisches Modell von einer rauen Schicht (2) an der Oberfläche bzw. Umgebung (1) und einer aus zwei Materialien bestehenden Schicht (3) über dem Substrat (4).

hergeleitet werden, die der Ausgangspunkt der drei gebräuchlichsten Effektivmediumtheorien ist [15]:

$$\frac{\epsilon - \epsilon_h}{\epsilon + \gamma \epsilon_h} = \sum_{i=1}^n f_i \frac{\epsilon_i - \epsilon_h}{\epsilon_i + \gamma \epsilon_h}.$$
 (2.23)

Die Parameter f_i sind die Volumenanteile der i-ten Komponente, γ ist ein Maß für den Einfluss der geometrischen Form der Partikel auf das lokale elektrische Feld, ϵ_h ist die dielektrische Funktion des einbettenden Mediums und ϵ ist die resultierende dielektrische Funktion für das effektive Medium.

Die einzige in dieser Arbeit benutzte Effektivmediumtheorie ist die BRUGGEMANN-Approximation: Diese Theorie geht von $\gamma=2$ für kugelförmige Partikel und vergleichbaren Füllfaktoren aus, um z.B. Oberflächenrauigkeiten durch Fehlstellen und Material mit Anteilen von je ca. 50 % zu approximieren. Dazu wird die selbstkonsistente Wahl $\epsilon=\epsilon_h$ getroffen, was in einem Beispiel mit zwei Materialien folgende Gleichung ergibt:

$$0 = f_1 \frac{\epsilon_1 - \epsilon}{\epsilon_1 + 2\epsilon} + f_2 \frac{\epsilon_2 - \epsilon}{\epsilon_2 + 2\epsilon}.$$
 (2.24)

Zwei weitere gebräuchliche Effektivmediumtheorien finden sich in Abschnitt A.3.

2.4. Die Grundgleichung der Ellipsometrie

Den Zusammenhang zwischen den optischen Konstanten⁵ n_r, κ und der Schichtdicke d der einzelnen Schichten im Materialsystem mit dem Polarisationszustand des Lichtes nach der Reflexion stellt das Verhältnis der Reflexionskoeffzienten her, das mit ρ bezeichnet wird. In Abschnitt 2.3 wurde der Zusammenhang zu den verschiedenen komplexen Brechungsindizes des Materialsystems hergestellt. Die Beziehung

⁵Wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, hängen beide Größen von der Wellenlänge ab und sind daher *keine* Konstanten. Die Wortgebung richtet sich lediglich nach der allgemeinen Verwendung in Fachbüchern.

zum Polarisationszustand erhält man mithilfe von Gl. 2.15 folgendermaßen:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \frac{\frac{E_{0p}^r e^{i\delta_p^r}}{E_{0p}^i e^{i\delta_s^i}}}{\frac{E_{0s}^r e^{i\delta_s^i}}{E_{0s}^i e^{i\delta_s^i}}} = \frac{E_{0p}^r}{E_{0s}^r} e^{i\delta^r} \cdot \frac{1}{\frac{E_{0p}^i}{E_{0s}^i} e^{i\delta^i}}.$$
 (2.25)

Durch die Umsortierung im letzten Schritt erhält man jeweils die Phasendifferenz $\delta^{i,r} = \delta^{i,r}_p - \delta^{i,r}_s$ zwischen p- und s-Komponente vor und nach der Reflexion.

An dieser Stelle werden die zwei ellipsometrischen Grundgrößen Δ und Ψ definiert. Es ist $\Delta := \delta^r - \delta^i$, also ist Δ die von der Reflexion verursachte Phasendifferenz zwischen einfallender und reflektierter Welle. Außerdem wird festgelegt:

$$\Psi := \arctan\left(\frac{\frac{E_{0p}^r}{E_{0s}^r}}{\frac{E_{0p}^i}{E_{0s}^i}}\right). \tag{2.26}$$

Damit wird Ψ zu einem Maß für die Veränderung der Amplituden bei der Reflexion. Die Definition ist nicht besonders anschaulich, daher wird im Abschnitt A.5 zur Nullellipsometrie, dem ältesten Verfahren, kurz darauf eingegangen, wieso es dort Sinn macht $|\rho|$ als tan Ψ anzusetzen. Die Betrachtung von Ψ hat sich jedoch auch für modernere Verfahren durchgesetzt.

Insgesamt erhält man mit diesen Definitionen aus Gleichung 2.25 die *ellipsometrische Grundgleichung*:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \tan \Psi \cdot e^{i\Delta}. \tag{2.27}$$

Auf der einen Seite ist ρ also abhängig von den Materialeigenschaften (n_i, κ_i, d_i) der i Komponenten; auf der anderen Seite erhält man Δ , Ψ und damit ρ auch aus dem Polarisationszustand der einfallenden und reflektierten Welle. Wird also die Polarisation des Lichtes vermessen und sind genügend Parameter des Materials bekannt, so lassen sich die restlichen Parameter berechnen. Üblicherweise lässt man das Licht mit einem vorgegebenen Polarisationszustand auf die Probe einfallen und misst die Polarisation des im Allgemeinen elliptisch polarisierten, reflektierten Lichtes über die Elliptizität e und den Azimutwinkel Θ . Aus diesen Größen erhält man nach den Gleichungen 2.5 und 2.6 die Phasendifferenz δ^r und $\tan \psi^r = E_{0p}^r/E_{0s}^r$, welches sich nach Definition 2.26 in Ψ wiederfindet:

$$\tan \Psi = \frac{\tan \psi^r}{\tan \psi^i}.$$
 (2.28)

Zum besseren Verständnis seien das Substratmodell und das Einschichtmodell genauer ausgeführt. Im Substratmodell ergibt sich für ρ das Verhältnis der Fresnel-Koeffizienten. Üblicherweise sind Einfallswinkel und der Brechungsindex der Umgebung (Luft) bekannt, sodass die Gleichung unter Verwendung des Brechungsgesetzes von Snellius für schwach absorbierende Medien zum Brechungsindex der

Probe (2) aufgelöst wird:

$$n_2 = n_1 \sin \varphi_1 \sqrt{1 + \left(\frac{1-\rho}{1+\rho}\right)^2 \tan^2 \varphi_1}.$$
 (2.29)

Dies ist jedoch der einzige Fall, in dem eine analytische Lösung der ellipsometrischen Grundgleichung möglich ist. Schon im Einschichtmodell wird ρ durch die Exponentialfunktion in den zugehörigen Reflexionskoeffizienten zu einer transzendenten Funktion, die sich im Allgemeinen nicht mehr nach den interessierenden Größen auflösen lässt. Die Berechnung erfolgt dann meistens über numerische Iteration, die in Abschnitt 3.3 genauer beschrieben wird.

3. Funktionsweise von Ellipsometern

Dieses Kapitel behandelt die technischen Grundlagen, also wie der Polarisationszustand vermessen wird und wie man daraus die ellipsometrischen Grundgrößen Δ und Ψ bekommt. Es gibt inzwischen sehr viele verschiedene Methoden und Aufbauten, daher beschränkt sich dieses Kapitel auf die Bereiche, die zum Verständnis der Theorie oder für das verwendete Ellipsometer wichtig sind. So wird nicht auf die weit verbreitete spektroskopische Ellipsometrie eingegangen, da ein Einwellenlängenellipsometer vom Typ EL X-02C der Firma DRE GMBH verwendet wurde.

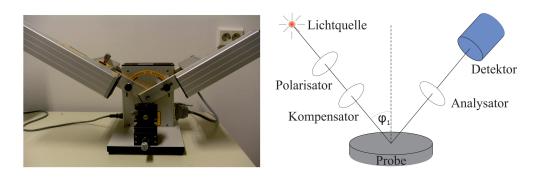


Abbildung 3.1.: Das EL X-02C und der schematische Aufbau eines Ellipsometers. φ_1 bezeichnet den Einfallswinkel des Lichtes.

Der schematische Aufbau eines Ellipsometers (Abb. 3.1) lässt sich folgendermaßen beschreiben: Zunächst benötigt man eine Lichtquelle, die für das Einwellenlängenellipsometer möglichst monochromatisches Licht aussenden sollte. Daher werden dort meistens He-Ne-Laser, üblicherweise bei einer Wellenlänge von 632,8 nm, verwendet [16]. Danach passiert das Licht einen Polarisator und optional einen Kompensator, mit denen der Polarisationszustand des einfallenden Lichtes definiert wird. Nach der folgenden Reflexion an der Probe passiert das Licht den Analysator, der eigentlich auch ein Polarisator ist, aber aufgrund seiner Funktion, der Analyse der Polarisation des reflektierten Lichtes, den Namen Analysator erhielt [16]. Zuletzt wird mit einem Detektor die Intensität des Lichtes für die aktuelle Analysatorstellung gemessen.

Eine genauere Erläuterung der Funktionsweise der einzelnen Komponenten, die im EL X-02C Anwendung finden, wird, insbesondere im Hinblick auf den Strahlverlauf, im folgenden Abschnitt 3.1 genauer erklärt.

3.1. Geräteausstattung

Als Lichtquelle dient der bereits erwähnte He-Ne-Laser, der stark monochromatisches Licht aussendet. Die ohnehin sehr schmale Bandbreite des ausgestrahlten Lichtes wird in der Ellipsometrie vernachlässigt und die Wellenlänge (für diesen Laser) auf 632,8 nm festgesetzt. Eine weitere Eigenschaft des Laserlichtes ist die starke Bündelung der Strahlen, wodurch die Leistung des Lasers von 2 mW auf eine sehr kleine Fläche der Probe fokussiert werden kann. Dies verbessert das Verhältnis von Signal- zu Hintergrundstrahlung [16]. Je nach Laser kann das ausgestrahlte Licht bereits polarisiert sein, allerdings ist dieser Polarisationszustand, falls vorhanden, nicht unbedingt bekannt. In jedem Fall wird als nächstes Bauteil im Strahlverlauf ein Glan-Thompson-Polarisator verwendet, um den Polarisationszustand des einfallenden Lichtes zu definieren. Eine genaue Beschreibung für den Strahlverlauf im Glan-Thompson-Polarisator findet sich in Abschnitt A.4. Nach dem Durchlaufen des Polarisators ist das Licht linear polarisiert.

Im schematischen Modell eines Ellipsometers wurde als nächstes Bauteil im Strahlverlauf ein Kompensator beschrieben. Dieser ist im EL X-02C jedoch nicht standardmäßig vorhanden, da Kompensatoren ohne Superentspiegelung sehr temperaturempfindlich sind und dadurch den Messfehler vergrößern [12]. Dazu kommt, dass der Kompensator für die verwendete Messmethode (Minimumsuche, vgl. Abschnitt 3.2.2) nicht benötigt wird. Falls man jedoch trotzdem einen Kompensator braucht (z.B. im Rotierender-Analysator-Modus, vgl. Abschnitt 3.2.1), kann dieser nachgerüstet werden.

Nach der Reflexion an der Probe folgt wiederum ein Glan-Thompson-Polarisator, der durch einen fehlerkorrigierten Schrittmotor bis auf 0,001° genau rotiert werden kann. Das dort transmittierte Licht wird zur Intensitätsmessung verstärkt und von einer Quadrantendiode detektiert.

3.2. Messmethoden

Wie schon erwähnt, ist die Vielfalt der Messmethoden in der Ellipsometrie enorm und kann nicht in ihrer Gesamtheit behandelt werden. Beispielhaft werden hier die zwei Messmethoden vorgestellt, die mit dem EL X-02C durchgeführt werden können, nämlich die Minimumsuche und der Rotierende Analysator. Eine ältere Methode, die sich zum besseren Verständnis der ellipsometrischen Grundgleichung eignet, ist in Abschnitt A.5 beschrieben.

3.2.1. Rotierender Analysator

Bei der Messmethode des rotierenden Analysators (Abb. 3.2) bleibt der Polarisator (optional auch der Kompensator, der im EL X-02C allerdings nicht standardmäßig vorhanden ist) auf einen festen Winkel zur Einfallsebene fixiert. Das von der Probe reflektierte Licht ist im Allgemeinen elliptisch polarisiert und wird vom Analysator

dadurch vermessen, dass dieser in äquidistanten Winkeln rotiert. Bei jedem Winkel wird eine bestimmte, linear polarisierte Komponente der Ellipse vom Analysator hindurch gelassen. Die Amplituden dieser Komponenten unterscheiden sich und daher variiert auch die Intensität für jeden Winkel des Analysators.

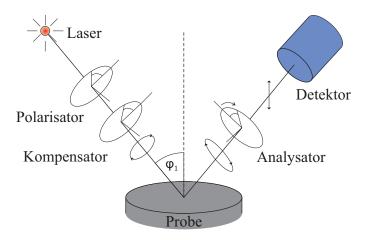


Abbildung 3.2.: Schematische Darstellung des Aufbaus für den rotierenden Analysator.

Die gemessenen Werte $I(\alpha)$ werden durch eine Fourier-Analyse modelliert, aus deren Koeffizienten sich wiederum Δ und Ψ errechnen lassen [15]. Genau genommen, erhält man aus den Fourier-Koeffizienten $\cos \Delta$ und $\tan \Psi$, was im Fall von Δ im Bereich von $\Delta \approx 0^{\circ}$ und $\Delta \approx 180^{\circ}$ zu einer größeren Ungenauigkeit führt.

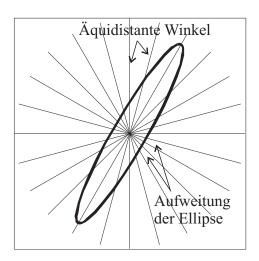


Abbildung 3.3.: Aufweitung der Polarisationsellipse durch Intensitätsmessung in äquidistanten Winkeln, verändert aus [12]

Dieses Problem kann allerdings durch die Nutzung des Kompensators gelöst werden, indem dieser die Phasendifferenz der einfallenden Welle und damit den Wert von Δ verändert, sodass er nicht mehr im kritischen Bereich liegt [16]. Außerdem

kann nicht ohne Weiteres unterschieden werden, ob Δ im Intervall [0°, 180°] oder im Intervall [180°, 360°] (alternativ [-180°, 0°]) liegt. Ein weiteres Problem sind kleine Elliptizitäten (vgl. Abb. 3.3). Durch die Messung in äquidistanten Winkeln wird die Ellipse bei der Fourier-Analyse im Fall von kleinen Elliptizitäten aufgeweitet, wodurch sich größere Fehler der Werte für Δ und Ψ ergeben. Andersherum werden große Elliptizitäten (z.B. bei zirkular polarisiertem Licht) sehr gut vermessen, weshalb dieses Verfahren dann der Minimumsuche zu bevorzugen ist. Weitere Vorteile sind Schnelligkeit und Kostengründe [12].

Insgesamt lässt sich für den Rotierenden-Analysator-Modus festhalten, dass er zwar relativ große Fehler für Δ und Ψ und damit für die Schichtdicke beinhaltet (der Fehler beläuft sich je nach Konfiguration auf ca. 15 nm [11]), weshalb er für die Vermessung sehr dünner Schichten schlecht geeignet ist, aber aufgrund seiner Schnelligkeit und der geringen Kosten hat er doch eine breite Anwendung gefunden [12].

3.2.2. Minimumsuche

Die Messmethode der Minimumsuche ist die hauptsächlich verwendete Methode mit dem EL X-02C. Der Versuchsaufbau ähnelt dem des Rotierenden-Analysator-Modus ohne Kompensator: Der Polarisator wird wiederum auf einen festen Winkel zur Einfallsebene fixiert, sodass das einfallende Licht linear polarisiert ist mit einem Azimutwinkel Θ^i , der durch den Winkel des Polarisators festgelegt ist und einer Elliptizität $e^i = 0^\circ$. Nach der Reflexion an der Probe ist das Licht im Allgemeinen (abhängig von den Materialeigenschaften der Probe) elliptisch polarisiert.

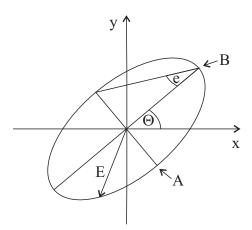


Abbildung 3.4.: Das Meßverfahren zur Suche des Intensitätsminimums. Die Komponente des \vec{E} -Feldes, die die minimale Intensität liefert, zeigt im Vektormodell zum Punkt A (oder zum am Ursprung gespiegelten Punkt). Analog findet sich die maximale Intensität für die Komponente, die zum Punkt B zeigt (oder zum am Ursprung gespiegelten Punkt). Daraus bekommt man Elliptizität e und Azimutwinkel Θ .

Mithilfe von Analysator und Detektor werden nun die Elliptizität e^r und der Azi-

mutwinkel Θ^r der Polarisationsellipse des reflektierten Lichtes vermessen [11]. Dazu wird das Intensitätsminimum (vgl. Abb. 3.4) durch Rotation des Analysators innerhalb von ein paar Millisekunden grob abgeschätzt, sodass sich die vom Analysator durchgelassene Komponente von \vec{E} in der Nähe von Punkt A befindet. Danach wird das Intensitätsminimum $I_{min}(\Theta^r)$ mit dem Schrittmotor am Analysator auf $\pm 0,001^\circ$ genau vermessen. Im nächsten Schritt findet sich orthogonal zum Intensitätsminimum das Intensitätsmaximum $I_{max}(\Theta^r)$, das ebenfalls vermessen wird. Aus dem Winkel des Analysators bei der Messung des Intensitätsmaximums erhält man also direkt den Azimutwinkel Θ^r und das bis auf $\pm 0,001^\circ$ genau. An die Elliptizität gelangt man durch das Verhältnis der beiden Intensitäten. Es ist $I_{min} \propto E_{min}^2$ und $I_{max} \propto E_{max}^2$, wobei sich die Größen jeweils um denselben umgebungsabhängigen Faktor f unterscheiden. Damit gilt:

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

Aus den Azimutwinkeln $\Theta^{i,r}$ und den Elliptizitäten $e^{i,r}$ bekommt man nach den Gleichungen 2.5 und 2.6 die Größen $\delta^{i,r}$ und $\psi^{i,r}$ und aus diesen wiederum nach der Grundgleichung der Ellipsometrie die Grundgrößen Δ und Ψ . Diese Formeln mögen die Zusammenhänge zwischen der Änderung der Polarisation des Lichtes und den Materialeigenschaften verdeutlichen. Eigentlich wird für das EL X-02C jedoch folgende Formel benutzt [11], die sich mit Matrixformalismen herleiten lässt, die in ihrer Komplexität im Rahmen dieser Arbeit nicht erläutert werden konnten:

$$\chi^{i} = \tan \Psi \cdot e^{-i\Delta} \cdot \chi^{r} \quad \text{mit} \quad \chi^{i,r} = \frac{\tan \Theta^{i,r} + i \tan e^{i,r}}{1 - i \tan \Theta^{i,r} \tan e^{i,r}}.$$
 (3.2)

Dieses Verfahren ist besonders geeignet für kleine Elliptizitäten e^r , wohingegen es bei größeren Elliptizitäten einen relativ großen Messfehler verursacht [12]. Daher kann in diesem Fall der Modus des rotierenden Analysators verwendet werden. In allen anderen Fällen ist jedoch die Minimumsuche zu bevorzugen, da sie dann sehr genau funktioniert und damit zur Vermessung von sehr dünnen Schichten geeignet ist. Durch den nicht benötigten Kompensator vermeidet man einen zusätzlichen Fehler und außerdem ist das Verfahren nur wenig langsamer als das des rotierenden Analysators.

3.3. Datenanalyse

Die Messung bei einer bestimmten Wellenlänge und einem bestimmten Einfallswinkel liefert die zwei reellen Größen Δ und Ψ , aus denen prinzipiell zwei Parameter der Probe bestimmt werden können. Es kann jedoch sein, dass man mehr als zwei

¹Durch das Potentiometer werden außerdem beide Intensitäten für die Messung mit einem unterschiedlichen Faktor verstärkt, aber da dieser dem Ellipsometer, das die Verstärkung automatisch durchführt, bekannt ist, kann er vorher herausgerechnet werden [11].

Parameter bestimmen will. Außerdem ist es vorteilhaft mehrere Messwerte zu nutzen, indem man diese bei der Auswertung mittelt. Um die Anzahl der Messpunkte zu erhöhen, wird die Probe in der Einwellenlängenellipsometrie unter verschiedenen Winkeln φ_i gemessen, die jeweils einen (Δ_i, Ψ_i) -Wert liefern. Diese gehören zu den gleichen Materialparametern (n_r, κ, d) , da unter allen Winkeln die gleiche Stelle auf der Probe vermessen wird.² Zur Analyse der Daten müssen die Materialparameter der evtl. vorhandenen anderen Schichten des Materialsystems (und des Substrates) bekannt sein, da mit der Einwellenlängenellipsometrie nur eine Schicht vermessen werden kann [16].

Hat man die ellipsometrischen Größen gemessen, so kann man daraus nicht direkt die Materialeigenschaften berechnen. Man muss zusätzliche Annahmen machen, die sich in drei Schritten vollziehen [15]:

- 1. Die Wahl eines Modells: Zur Analyse sollte bereits in etwa klar sein, wie die Probe, die man vermessen hat, aufgebaut ist, denn für die Ellipsometrie braucht man ein Schichtmodell (Substrat-, Einschicht-, Mehrschichtmodell), dessen Materialeigenschaften zumindest teilweise bekannt sein müssen. Bei der Wahl des Schichtmodells sollten ggf. auch Grenzschichten und Rauheiten berücksichtigt werden, um die Probeneigenschaften möglichst gut wiederzugeben.
- 2. Die Parametrisierung des Modells: In diesem Schritt wird jeder Schicht aus dem Modell, abgesehen von derjenigen, die man vermessen will, ein komplexer Brechungsindex und eine Schichtdicke zugewiesen. Da mit dem Einwellenlängenellipsometer nur eine Schicht vermessen werden kann, muss z.B. im Einschichtmodell mindestens der komplexe Brechungsindex des Substrates bekannt sein. Weitere Angaben wie der Brechungsindex der aufliegenden Schicht können die Berechnung der verbleibenden Größen, in diesem Beispiel nur noch die Schichtdicke der aufliegenden Schicht, verbessern, sofern sie genau bekannt sind. Jeder Fehler im Modell und seiner Parametrisierung verursacht auch einen Fehler in der berechneten Größe.
- 3. Die Berechnung der verbleibenden Größen: Die Grundgleichung der Ellipsometrie kann nur in seltenen Fällen analytisch aufgelöst werden. Daher benutzt man ein iteratives Verfahren, das nachfolgend genauer beschrieben wird. Eine ungefähre Vorstellung sieht folgendermaßen aus: Setzt man für die verbleibenden Größen, die ermittelt werden sollen, Werte ein, so lassen sich aus dem vollständig parametrisierten Modell die zugehörigen Werte für Δ und Ψ berechnen. Dabei tritt eine Abweichung zwischen den so berechneten Daten und den experimentell ermittelten Daten auf, die minimiert werden soll. Unter Zuhilfenahme einer Fehlerfunktion werden die verbleibenden Größen des Modells so lange angepasst, bis die Abweichung zwischen den berechneten Werten $(\Delta, \Psi)_{mod}$ und den experimentellen

²In der spektroskopischen Ellipsometrie erhöht man die Anzahl der Messpunkte, indem man bei verschiedenen Wellenlängen misst. Dadurch erhält man noch mehr Messpunkte als in der Einwellenlängenellipsometrie.

Werten $(\Delta, \Psi)_{exp}$ minimal geworden ist. Dabei sollten diese Abweichungen auch mit ausgegeben werden, damit man ein Maß für die Qualität des Fits hat. Erhält man qualitativ völlig unpassende Werte, muss die Prozedur wiederholt und das angenommene Modell überdacht werden.

Als Fehlerfunktion wird folgende Funktion verwendet [12]:

$$\zeta = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} \sqrt{(\Psi_i^{exp} - \Psi_i^{mod}(\vec{p}, \vec{v}))^2 + (\Delta_i^{exp} - \Delta_i^{mod}(\vec{p}, \vec{v}))^2}$$
(3.3)

Darin ist N die Anzahl der gemessenen (Δ, Ψ) -Paare, also die Anzahl der Einfallswinkel, unter denen gemessen wurde, mal der Anzahl der (Δ, Ψ) -Werte, die für jeden Winkel gemessen wurden, sodass es insgesamt 2N experimentell ermittelte Werte gibt. Es sei M die Anzahl der gesuchten Parameter, also in der Einwellenlängenellipsometrie maximal M=3, da nur eine Schicht mit den Variablen (n_r, κ, d) vermessen werden kann, dann ist \vec{p} der M-dimensionale Vektor, der die gesuchten Parameter enthält und \vec{v} derjenige konstante Vektor, der die bekannten Parameter des Materialsystems enthält. Wenn man also den Parameter p_i im Intervall J_i , $i=1,\ldots,M$, variieren lässt (z.B. die Schichtdicke im Intervall von 0 nm bis 50 nm), ist ζ eine Funktion:

$$\zeta: J_1 \times \cdots \times J_M \to \mathbb{R}.$$
 (3.4)

Diese kann mit Methoden der mehrdimensionalen Analysis auf ihr globales Minimum untersucht werden. Als Algorithmus, der dieses globale Minimum an der Stelle \vec{p}_{min} liefert, wird üblicherweise das Marquardt-Levenberg-Verfahren (oder darauf basierende Verfahren) benutzt. Der Vektor \vec{p}_{min} enthält also in der Einwellenlängenellipsometrie am Ende diejenigen gesuchten Größen (n_r, κ, d) (oder weniger, falls z.B. nur die Schichtdicke bestimmt werden sollte), die die beste Übereinstimmung zwischen experimentell ermittelten Werten und aus dem Modell errechneten Werten (Δ, Ψ) liefern. Neben diesen Größen und dem minimalen Fehler ζ_{min} erfolgt auch die Ausgabe der mittleren Abweichung der modellierten (Δ, Ψ) -Werte, die als Maß für die Qualität der angepassten Größen dienen können. Die mittlere Abweichung $a_{\Delta,\Psi}$ derjenigen Werte $(\Delta_{i,min}^{mod}, \Psi_{i,min}^{mod})$, die die insgesamt geringste Abweichung zu den experimentellen Werten und damit den Vektor \vec{p}_{min} geliefert haben, ist gegeben durch die folgenden Formeln [12]:

$$a_{\Delta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} |\Delta_i^{exp} - \Delta_{i,min}^{mod}| \tag{3.5}$$

und

$$a_{\Psi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} |\Psi_i^{exp} - \Psi_{i,min}^{mod}|.$$
 (3.6)

3.4. Fehleranalyse

Im folgenden soll eine Analyse der auftretenden Fehler vorgenommen werden, die letztendlich auch zu einem Fehler für die errechnete Schichtdicke führen. Dabei wird die langwierige, komplizierte Fehlerrechnung nicht durchgeführt; stattdessen beschränkt sich dieser Abschnitt auf die Fehlerangaben des Herstellers, die im Experimentalteil für die Minimumsuche überprüft und diskutiert werden.

Die experimentell ermittelten Werte für Δ und Ψ errechnen sich nach Gleichung 3.2 aus der Elliptizität und der Orientierung des einfallenden bzw. reflektierten Lichtes. Wie bereits erwähnt, wird bei der Minimumsuche das Intensitätsminimum auf $\pm 0,001^{\circ}$ genau vermessen und dieser Fehler kann für die Orientierung des reflektierten Lichtes übernommen werden. Die Einstellung des Polarisators erfolgt mit der gleichen Genauigkeit, sodass der Fehler von $\pm 0,001^{\circ}$ auch für die Orientierung des einfallenden Lichtes übernommen werden kann. Die Elliptizität der einfallenden Welle ergibt sich durch den Glan-Thompson-Polarisator zu 0° mit einer Genauigkeit von ebenfalls $\pm 0,001^{\circ}$, die der reflektierten Welle bekommt man aus den Intensitäten I_{min} und I_{max} , welche durch die Quadrantendiode gemessen werden. Die resultierende Genauigkeit für die Elliptizität der reflektierten Welle variiert aufgrund der Messmethode (vgl. Abschnitt 3.2.2) von $\pm 0,001^{\circ}$ für kleine Elliptizitäten bis $\pm 0,05^{\circ}$ bei einer Elliptizität von 30° [11].

Für die aus dem Modell ermittelten Werte für Δ und Ψ treten ebenfalls Fehler auf, die sich aus dem Fehler für den Einfallswinkel und den Fehlern für die Größen aus dem verwendeten Modell ergeben. Der Fehler für den Einfallswinkel beläuft sich bei optimaler Probenpositionierung auf $\pm 0,01^{\circ}$. Bezüglich des Modells sollte zunächst vor allem die Struktur des Schichtsystems möglichst korrekt sein und ggf. Inhomogenitäten oder Rauheiten berücksichtigen. Die Fehlerangaben für die verwendeten Brechungsindizes, die aus der Datenbank des Programms zum EL X-02C entnommen wurden³, werden im Kapitel 4 genannt. Die Schichtdicke von evtl. vorhandenen weiteren Schichten muss bereits vor der Messung bestimmt worden sein. Der Fehler ergibt sich dann aus der verwendeten Messmethode.

Im Rahmen der Versuche, die dieser Arbeit zugrunde liegen, wurden meist alle Brechungsindizes als bekannt vorausgesetzt und nur die Schichtdicke bestimmt. Nach Herstellerangaben beträgt die Genauigkeit der Schichtdicke dann im Beispiel einer Siliziumdioxid- oder einer Siliziumnitridschicht auf Silizium, vorausgesetzt das Modell ist geeignet, bis zu $\pm 0,002$ nm für eine dünne Schicht (0 nm bis 10 nm) bzw. $\pm 0,1$ nm für eine 60 nm dicke Schicht [11]. In Kapitel 5 werden diese Fehlerangaben überprüft und diskutiert.

Die Fehleranalyse für den Modus des rotierenden Analysators, der ebenfalls verfügbar ist, wird in [11] genauer ausgeführt. In dem gleichen Beispiel liegen die Herstellerangaben für den Fehler der Schichtdicke von dünnen Schichten (wiederum 0 nm bis 10 nm) in einem Bereich von mehr als 10 nm; bei größeren Schichtdicken (z.B.

³Die Daten sind wiederum dem *Handbook of optical Constants of Solids* von E. D. Palik entnommen.

60 nm) verringert sich der Fehler auf etwas mehr als 2 nm. Die ungenaue Angabe resultiert aus den unterschiedlichen Geräteausstattungen, die für den Modus des rotierenden Analysators möglich sind.

3.5. Trajektorien der ellipsometrischen Grundgrößen

Als Ergebnis einer Messung erhält man einen bzw. mehrere (Δ, Ψ) -Punkte, die einer Interpretation bedürfen. Dieser Abschnitt soll dazu dienen, die erhaltenen Messgrößen einordnen zu können, wozu die (Δ, Ψ) -Punkte bei wachsender Schichtdicke betrachtet werden. Das Ergebnis sind Kurven, aus denen sich einige wichtige Beobachtungen entnehmen lassen.

Zunächst wird das Substratmodell betrachtet. In diesem Fall erhält man bei festem Einfallswinkel einen einzigen Punkt im (Δ, Ψ) -Graphen, über den sich ganz allgemein Aussagen treffen lassen. Wie man aus Abbildung 3.5 erkennt, gilt für

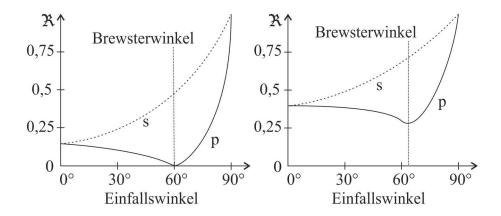


Abbildung 3.5.: Schematische Zeichnung des Reflexionsvermögens eines transparenten (links) und eines leitenden (rechts) Materials in Abhängigkeit vom Einfallswinkel für p- bzw. s-polarisiertes Licht.

das Reflexionsvermögen $\mathfrak{R}_{p,s}=r_{p,s}^2$ bei allen Winkeln $\mathfrak{R}_p<\mathfrak{R}_s$ und daher auch $|r_p|<|r_s|$. Daraus folgt:

$$\frac{|r_p|}{|r_s|} = \tan \Psi < 1 \quad \Rightarrow \quad \Psi < 45^{\circ}. \tag{3.7}$$

Auch für Δ lässt sich eine Beobachtung machen. Für Isolatoren ($\kappa=0$) ist die von der Reflexion verursachte Phasendifferenz 0° oder 180°, abhängig davon, ob der Einfallswinkel größer oder kleiner als der Brewsterwinkel α_B ist. Für diesen wird das Reflexionsvermögen der p-polarisierten Komponente minimal, bei Isolatoren also $\mathfrak{R}_p=0$. Genau genommen, tritt die Phasendifferenz von 180° für die s-polarisierte

Welle auf, wohingegen die p-polarisierte Welle für einen Winkel $\alpha < \alpha_B$ keine Phasendifferenz erfährt. Für einen Winkel $\alpha > \alpha_B$ tritt auch für die p-polarisierte Welle ein Phasensprung von 180° auf [3], sodass nach Definition $\Delta = 0$ ° wird. Für Metalle ist der Übergang von $\Delta = 180$ ° zu $\Delta = 0$ ° kontinuierlich, wie Abbildung 3.6 zeigt.

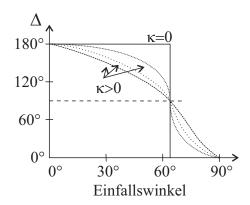


Abbildung 3.6.: Schematische Zeichnung der von der Reflexion verursachten Phasendifferenz für Isolatoren und Leiter. Die optischen Konstanten sind so gewählt, dass der Brewsterwinkel für alle Materialien der Gleiche ist.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass im Fall eines Substrates nur die Werte $0^{\circ} \leq \Delta \leq 180^{\circ}$ und $0^{\circ} \leq \Psi < 45^{\circ}$ aus dem Definitionsbereich $[0^{\circ}, 360^{\circ}] \times [0^{\circ}, 90^{\circ})$ angenommen werden. Es liegen also alle Werte im unteren, linken Quadranten des Definitionsbereichs.⁴

Beschichtet man das Substrat mit einem anderen Material und beobachtet die (Δ, Ψ) -Punkte bei wachsender Schichtdicke, so lassen sich einige charakteristische Merkmale feststellen, die im folgenden erläutert werden. Je nach dem, ob es sich bei der Schicht um einen Isolator oder einen Leiter handelt, unterscheiden sich diese Merkmale. Es gibt noch den dritten Fall, dass die Schicht auf dem Substrat so stark absorbiert, dass keine am Substrat reflektierte Strahlung mehr detektiert werden kann. Dann lässt sich diese Schicht aber wie ein Substrat behandeln und liefert auch die entsprechenden Werte für Δ und Ψ .

Ein Beispiel für einen transparenten Film (auf einem Halbleitersubstrat) ist Siliziumdioxid auf Silizium. Abbildung 3.7 zeigt die (Δ, Ψ) -Punkte jeweils bei einem Schichtzuwachs von 10 nm. Wie die Abbildung bereits andeutet, erreicht die Δ - Ψ -Kurve bei einem weiteren Schichtzuwachs wieder den Startpunkt, bei dem noch keine Schicht vorhanden war. Diese sogenannte Periodendicke d_p erhält man aus der komplexen Exponentialfunktion in den Reflexionskoeffizienten für das Einschicht-

 $[\]overline{^4\text{Für}\ \Delta}$ kann man auch den Definitionsbereich [-180°, 180°] wählen. Entsprechend liegen dann alle Werte im oberen, linken Quadranten.

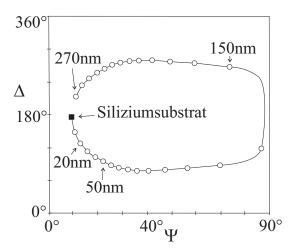


Abbildung 3.7.: Die Trajektorie zu einer wachsenden Siliziumdioxidschicht auf einem Siliziumsubstrat bei einem Einfallswinkel von 70° und einer Wellenlänge von 632,8 nm. Ein Schichtwachstum von 10 nm ist jeweils mit einem Kreis gekennzeichnet.

modell (vgl. Gl. 2.19). Aus der Bedingung $2\beta_2 = 2\pi$ folgt:

$$d_p = \frac{\lambda}{2\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \varphi_1}}. (3.8)$$

Im Beispiel von Siliziumdioxid ($n_2 = 1,46$) auf Silizium mit Luft als Umgebung ($n_1 = 1$) ergibt sich bei einer Wellenlänge von 632,8 nm und einem Einfallswinkel von 70° die Periodendicke zu $d_p = 283,2$ nm. Nach dem Erreichen des Startpunktes besitzt die Kurve für größere Schichtdicken den selben Verlauf wie vorher. Wichtig ist daher, dass die Periodendicke sowohl vom Einfallswinkel als auch von der Wellenlänge abhängt. Durch die Messung bei mehreren Winkeln bzw. Wellenlängen verhindert man also auch, dass man zu den Messpunkten keine bestimmte Schichtdicke errechnen könnte, da die errechnete Schichtdicke plus einer (oder mehrerer) Periodendicke(n) ebenfalls eine Lösung wäre.

Abbildung 3.8 zeigt die Δ - Ψ -Kurven im unteren, linken Quadranten für unterschiedliche Schichtdicken und unterschiedliche Brechungsindizes. Man erkennt, dass die Kurven für sehr kleine Schichtdicken sehr nah beieinander liegen und erst bei größeren Schichtdicken auseinanderdriften. Die Folge davon ist, dass bei sehr kleinen Schichtdicken schon ein kleiner Fehler von Δ , aber vor allem von Ψ , einen großen Fehler für den Brechungsindex zur Folge haben kann, falls dieser mitbestimmt wird.

Die besondere Empfindlichkeit von n gegenüber Ψ resultiert daraus, dass sich das Amplitudenverhältnis durch eine sehr dünne Schicht kaum ändert und daher auch Ψ kaum variiert. Die Genauigkeit der Ellipsometrie wird für sehr dünne Schichten hauptsächlich durch die verursachte Phasendifferenz Δ erreicht. Für einen Film mit Brechungsindex $n_2 = 2$ auf einem Siliziumsubstrat mit $n_3 = 3,86 - 0,02i$,

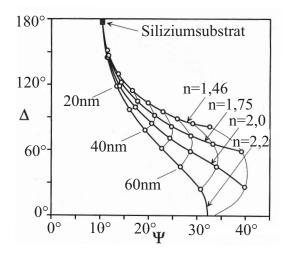


Abbildung 3.8.: Die Trajektorien zu wachsenden Schichten mit verschiedenen Brechungsindizes auf einem Siliziumsubstrat bei einem Einfallswinkel von 70° und einer Wellenlänge von 632,8 nm. Ein Schichtwachstum von 10 nm ist jeweils mit einem Kreis gekennzeichnet.

einem Einfallswinkel von 70° und einer Wellenlänge von 632,8 nm entspricht eine Änderung von Δ um 0,25° einer Änderung der Schichtdicke um etwa 0,1 nm [16]. Als Resultat aus diesen Beobachtungen wird der Brechungsindex für sehr dünne Schichten auf einen geeigneten Wert fixiert und nur die Schichtdicke errechnet. Möchte man hingegen den Brechungsindex bestimmen, wählt man eine Schichtdicke, deren (Δ, Ψ) -Werte etwa denen einer halben Periodendicke entsprechen.

In Abbildung 3.9 sind die vollständigen Kurven der in Abbildung 3.8 angedeuteten Graphen abgebildet. Man erkennt einen Sprung von $\Delta=0^\circ$ zu $\Delta=360^\circ$ für einige Kurven, der sich einfach aus der Berechnung von Δ mithilfe von $\cos\Delta$ und dem gewählten Definitionsbereich erklärt.

Ist der Film auf dem Substrat kein Isolator sondern ein (Halb-)Leiter, so wird die einfallende Welle teilweise absorbiert, sodass sich auch eine deutliche Änderung im Amplitudenverhältnis bemerkbar macht. Daher können (sehr) dünne Schichten absorbierender Materialien unter einigen Einschränkungen, die unten genauer ausgeführt werden, vermessen werden.

Abbildung 3.10 zeigt das Schichtwachstum von Tantal mit einem Brechungsindex $n_2=1,72-2,09i$ auf Silizium. Daraus lässt sich erkennen, dass in diesem Fall keine Periodendicke auftritt, da vorher aufgrund der Absorption ein Punkt erreicht wird, der dem eines Tantalsubtrates entspricht. Die Eindringtiefe d_e (vgl. Gl. 2.10) für Licht der Wellenlänge 632,8 nm in Tantal ist $d_e=24,1$ nm. Aus der Abbildung lässt sich erkennen, dass die (Δ, Ψ) -Punkte für etwa zwei Eindringtiefen $(2 \cdot d_e)$ weit genug auseinanderliegen, um eine sinnvolle Schichtdicke zu bestimmen. Für größere Schichtdicken liegen die Punkte dagegen zu nah aneinander, sodass wiederum kleine Fehler von Δ oder Ψ zu großen Fehlern für die Schichtdicke führen können. Außerdem ist die Intensität der reflektierten Welle dann kaum noch groß

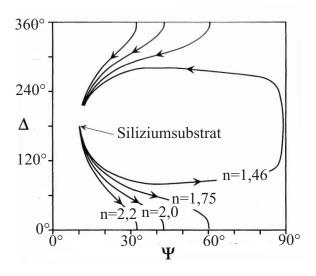


Abbildung 3.9.: Die vollständigen Trajektorien aus Abb. 3.8.

genug, um gemessen werden zu können.

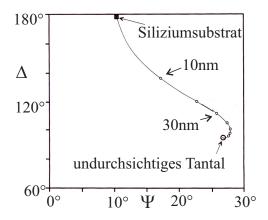


Abbildung 3.10.: Die Trajektorie einer Tantalschicht auf Silizium bei einem Einfallswinkel von 70° und einer Wellenlänge von 632,8nm.

Neben diesem Problem gibt es bei Metallen weitere Probleme auch für dünnere Schichten durch eine große Abhängigkeit der optischen Konstanten mit den Ablagerungsbedingungen des Materials und seiner Schichtdicke [16]. Weiterhin treten bei der Anpassung der Schichtdicke und des Brechungsindex starke Korrelationen auf, da der Exponent

$$\beta_2 = 2\pi \frac{d_2}{\lambda} n_2 \cos \varphi_2 \tag{3.9}$$

der Exponentialfunktion in den Reflexionskoeffizienten vom Produkt $n_2 \cdot d_2$ abhängt. Dadurch bekommt man für jede Schichtdicke entsprechende optische Konstanten, sodass diese Daten sehr gut zu den gemessenen Daten passen [16]. Eine

ellipsometrische Untersuchung von Metallschichten ist deshalb nur sehr schwierig durchzuführen und nur dann zu verwenden, wenn man die zu errechnenden Größen einigermaßen genau kennt.

4. Materialsystem

Die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Proben bestanden stets aus einem Siliziumsubstrat, auf das zunächst Siliziumdioxid und dann Silber aufgedampft wurde, um das Meßverfahren Ellipsometrie mit möglichst unterschiedlichen Schichten auszuprobieren. Die Unterschiede und wichtigen Eigenschaften der Materialien werden im folgenden genauer beschrieben.

4.1. Silizium

Silizium ist ein Halbleiter der Ordnungszahl 14 mit einer Bandlücke von 1,1 eV bei Raumtemperatur [2, 8]. Es kommt in poly- und monokristallinen Formen, aber auch in amorpher Form vor (vgl. auch Siliziumdioxid, Abschnitt 4.2). Beide können für die Ellipsometrie als optisch isotrop und nichtmagnetisch angenommen werden mit den folgenden, in der Datenbank des EL X-02C vorhandenen Brechungsindizes (inklusive der dort vorhandenen Anmerkungen).

Datei	Index	Bemerkung
	$n_r = 3.87 \pm 0.04$ $\kappa = 0.016 \pm 0.004$ $n_r = 4.20 \pm 0.05$ $\kappa = 0.422 \pm 0.005$	"Silicon Revisited" amorphes Silizium

Tabelle 4.1.: Brechungsindizes für Silizium.

Die Brechungsindizes für Silizium, die aus dem *Handbook of optical Constants of Solids* von E. D. Palik stammen, wurden im dritten Band aktualisiert, was die Bemerkung "Silicon Revisited" erklärt. Für die Experimente, die mit dem EL X-02C durchgeführt wurden, kann davon ausgegangen werden, dass kristallines Silizium als Substrat verwendet wurde, daher wird der Brechungsindex aus der Datei *Si-1.mat* verwendet.

4.2. Siliziumdioxid

Siliziumdioxid ist ein Isolator mit einer Bandlücke von ungefähr 9 eV bei Raumtemperatur, womit sich der Imaginärteil des Brechungsindex im sichtbaren Bereich des Lichtes zu $\kappa = 0$ ergibt. Es können zwei Strukturen unterschieden werden, die durch verschiedene Anordnungen von SiO_4 -Tetraedern entstehen, deren Sauerstoffatome als Brücken zwischen den Tetraedern dienen (vgl. Abb. 4.1). Ist der

Datei	Index	Bemerkung
sio2.mat SiO2-1.mat SiO2-2.mat SiO2-3.mat	$n = 1,46 \pm 0,01$ $n = 1,46 \pm 0,01$ $n = 1,542 \pm 0,005$ $n = 1,552 \pm 0,005$	$a\text{-}SiO_2$ (Quarzglas) $a\text{-}SiO_2$ (Quarzglas) $c\text{-}SiO_2$ bei 25 °C, ord. Polarisation $c\text{-}SiO_2$ bei 25 °C, außerord. Polarisation

Tabelle 4.2.: Brechungsindizes für Siliziumdioxid.

Bindungswinkel zwischen der Si-O-Si-Bindungen stets der gleiche, so entsteht kristallines Siliziumdioxid (c- SiO_2). Sind die gleichen Bindungswinkel jedoch zufällig verteilt, so entsteht amorphes Siliziumdioxid (a- SiO_2) [15].

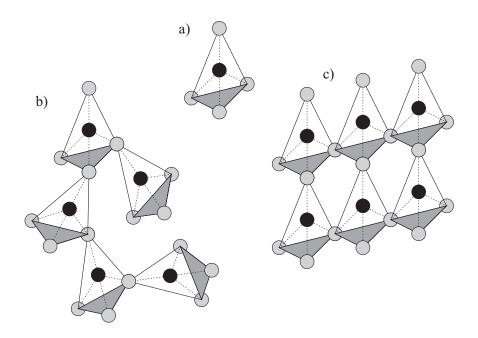


Abbildung 4.1.: Zum Aufbau von Siliziumdioxid: a) SiO_4 -Tetraeder, b) a- SiO_2 , c) c- SiO_2 . Die Siliziumatome sind schwarz gekennzeichnet, die Sauerstoffatome hellgrau.

Für die Ellipsometrie kann das amorphe Siliziumdioxid als optisch isotrop und nichtmagnetisch angenommen werden, sodass die entsprechenden Reflexionskoeffizienten benutzt werden können. Das kristalline Siliziumdioxid hingegen ist optisch anisotrop. Die verschiedenen Brechungsindizes, die für diese Materialien in der Datenbank des EL X-02C vorhanden sind, sind in Tabelle 4.2 aufgelistet.

Die Fehler für den Brechugsindex des Siliziumdioxids mussten dabei geschätzt werden. Die einzige Angabe für amorphes Siliziumdioxid ist, dass die Werte sehr genau sein sollen, daher wurde der Fehler auf $\pm 1\%$ abgeschätzt. Für kristallines Siliziumdioxid wurden keine Angaben zur Genauigkeit gemacht, daher wurden die Werte

mit den sehr genauen Werten aus [1] verglichen, die zwar nur als Näherungswerte dienen können, da die Wellenlängen nicht übereinstimmen, aber doch eine relativ kleine Fehlerangabe ermöglichen.

Welcher Brechungsindex für die untersuchten Siliziumdioxidschichten zu verwenden ist, wird in Kapitel 5 durch das Experiment geklärt.

Für sehr dünne SiO_2 -Schichten auf Silizium kann allerdings keiner dieser Brechungsindizes ohne Weiteres übernommen werden, denn in dem Fall ist der Brechungsindex aufgrund von Spannungen in der Grenzschicht, die dann einen wesentlichen Teil der SiO_2 -Schicht ausmacht, höher [15]. Wegen der großen Bedeutung von SiO_2 -Schichten auf Silizium für die Mikroelektronik-Industrie existieren dazu aber eine Reihe von Daten, deren Auswertung nach [15] ergeben hat, dass der Brechungsindex im Bereich 1 nm $\leq d_{SiO_2} \leq 8$ nm folgendermaßen modelliert werden kann:

$$n_{SiO_2} = 2,139 - 0,088 \cdot d_{SiO_2}, \quad 1 \text{ nm} \le d_{SiO_2} \le 8 \text{ nm}$$
 (4.1)

Für eine native Oxidschicht, deren Dicke man auf etwa 1 nm Dicke schätzen kann [9, 15], ergibt sich mit Gleichung 4.1 ein Brechungsindex von n = 2, 0(1). Selbstverständlich kann dieser Brechungsindex und seine Genauigkeit für das Experiment nur als Schätzung dienen, da die Dicke der Oxidschicht überhaupt erst bestimmt werden soll. Ein Fehler im Brechungsindex verursacht allerdings für sehr dünne Schichtdicken keinen großen Fehler, wie Abb. 3.8 zeigt und das Experiment bestätigen wird.

Nach [12] gibt es allerdings auch die Beobachtung, dass sich der Brechungsindex bei Kalibrierproben von dünnen Siliziumdioxidschichten auf Silizium des *National Institute of Standards and Technology* (NIST, USA) gegenüber dem Brechungsindex von Schichten größerer Dicke nur in der dritten Nachkommastelle ändert.

Für die native Oxidschicht, die im Experiment vermessen wurde, ist der Brechungsindex nicht bekannt, daher werden die beiden Möglichkeiten bei der Auswertung berücksichtigt.

Beim Aufdampfen von Siliziumdioxid auf Silizium entsteht eine dünne Grenzschicht von etwa 1 nm, die sich aus einer Oxidschicht und Ausbuchtungen von Siliziumatomen bildet, bevor auch diese oxidieren und eine reine Siliziumdioxidschicht vorhanden ist. Die Grenzschicht kann durch die Bruggemann-Approximation mit den Bestandteilen SiO_2 und Si modelliert werden [15]. Eine solche Schicht wird auch als dritte Möglichkeit für die native Oxidschicht getestet.

4.3. Silber

Silber ist ein Metall mit der Ordnungszahl 47 und besitzt die höchste elektrische Leitfähigkeit von $\sigma=61,35\cdot 10^6\,\frac{\rm A}{\rm V\,m}$ [7]. Die hohe Leitfähigkeit von Silber führt auch zu einem sehr hohen Extinktionskoeffizienten κ . Dies wird begründet durch die Gleichung

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = 1 + \frac{i4\pi}{\omega}\hat{\sigma}. \tag{4.2}$$

Dabei ist ϵ die komplexe relative Permittivität und $\hat{\sigma} = \sigma + i\sigma_2$ die komplexe Leitfähigkeit, deren Realteil oben angegeben wurde [5]. Benutzt man den Zusammenhang $n = \sqrt{\epsilon}$ und sortiert nach Real- und Imaginärteil, so erhält man mit der Frequenz ν des Lichtes für κ :

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\epsilon_1 + \sqrt{\left(\frac{2\sigma}{\nu}\right)^2 + \epsilon_1} \right)}. \tag{4.3}$$

Aufgrund des monotonen Wachstumsverhaltens der Wurzelfunktion ergibt sich dementsprechend für eine höhere Leitfähigkeit auch ein höherer Extinktionskoeffizient. Aus dem hohen Extinktionskoeffizienten folgt dann ebenfalls ein großer Absorptionskoeffizient α nach Gleichung 2.9.

Der Realteil des Brechungsindex ist hingegen sehr klein. Die genauen Werte für die Wellenlänge $\lambda = 632,8\,\mathrm{nm}$ sind in der Datei Ag.mat als $n_r = 0.13 \pm 0.03$ und $\kappa = 3.99 \pm 0.03$ angegeben. Die Fehlerangaben sind wiederum geschätzt.

Im Experiment wurde das Silber auf die Siliziumdioxidschicht auf dem Siliziumsubstrat gedampft. Da die Vermessung der Schicht hauptsächlich als Machbarkeitsstudie geplant war, wurden eventuelle Grenzschichten zwischen SiO_2 und Ag ebenso wie mögliche Rauheiten an der Oberfläche nicht berücksichtigt.

5. Experimentelle Befunde

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Messungen genannt, diskutiert und graphisch gezeigt. Für die Abbildungen gilt dabei generell, dass die Kurve, die durch die Messwerte gelegt wurde, diejenige Modellkurve ist, die sich aus der errechneten Schichtdicke und dem errechneten oder auf den Literaturwert fixierten Brechungsindex für die verschiedenen Einfallswinkel ergibt. Für die angegebenen Winkelreichweiten gilt jeweils, dass vom kleineren Winkel bis zum größeren Winkel in 5°-Schritten jeweils 5 Messwerte aufgenommen wurden. Der kleinste und der größte Einfallswinkel ist an den Werten, die unter diesem gemessen wurden, eingezeichnet. Eine Änderung des Einfallswinkels um 5° wird auch von der Kurve durch die Änderung der Farbe angezeigt, daher sollten die Messwerte immer möglichst auf einem Punkt liegen, in dem sich die Farbe der Kurve ändert. Der angegebene Wert ζ der Fehlerfunktion ist als $\zeta(\vec{p}_{min})$ zu verstehen (vgl. Abschnitt 3.3).

5.1. Thermisch oxidiertes Siliziumdioxid

Als erste Probe wurde eine Siliziumdioxidschicht auf Silizium vermessen, das Standardbeispiel der Ellipsometrie. Nach der Herstellung von zwei Proben unterschiedlicher Schichtdicke durch das IHP in Frankfurt/Oder¹ wurden sie bereits dort mit einem Ellipsometer vermessen, sodass Referenzwerte für die Messung vorlagen. Diese lagen für Probe 1 bei $d_{SiO_2} = 99,37 \,\mathrm{nm}$, wobei die Genauigkeit nicht angegeben wurde. Da vermutlich ein Rotierender-Analysator-Ellipsometer verwendet wurde, ist es jedoch unwahrscheinlich, dass die Nachkommastellen als gültig angesehen werden können, daher wird der Fehler auf ± 2 nm geschätzt. Die Schichtdicke für die zweite Probe wurde mit $d_{SiO2} = 14,7 \,\mathrm{nm}$ angegeben, wobei der Fehler für diese dünne Schicht noch vorsichtiger abgeschätzt werden muss, daher wird von ± 3 nm ausgegangen (vgl. Abschnitt 3.4).

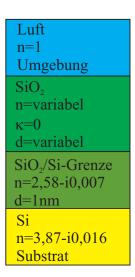


Abbildung 5.1.: Schichtsystem zu SiO_2 auf Si.

Gemeint ist das "Leibniz-Institut für innovative Mikroelektronik": Innovations for High Performance Microelectronics.

Die Messung mit dem EL X-02C wurde zunächst mit dem Rotierenden-Analysator-Modus vorgenommen und daraufhin für die dünnere SiO_2 -Schicht der Probe 2 mit der genaueren Minimumsuche wiederholt. Das Modell, das zur Interpretation der Daten beider Proben gewählt wurde, ist durch Abbildung 5.1 gegeben. Die Grenzschicht wurde auf 1 nm geschätzt und durch die BRUGGEMANN-Approximation mit Anteilen von 50% Silizium und 50% Siliziumdioxid modelliert (vgl. Abschnitt 4.2). Bei der Auswertung der Daten ist zu berücksichtigen, dass die Schichtdicke der Probe 2 von ca. 14 nm zu gering ist, um den Brechungsindex sinnvoll errechnen zu lassen (vgl. Abschnitt 3.5). Daher folgt zuerst die Auswertung der Probe 1 mit einer Schichtdicke von etwa 100 nm, um zu bestimmen, welchen Brechungsindex man für die SiO_2 -Schicht verwenden sollte.

5.1.1. Probe 1: Dicke Siliziumdioxidschicht

Es wurden unter Winkeln von 30° bis 80° Werte gemessen, deren Ergebnisse für Δ und Ψ in Abbildung 5.2 dargestellt sind.

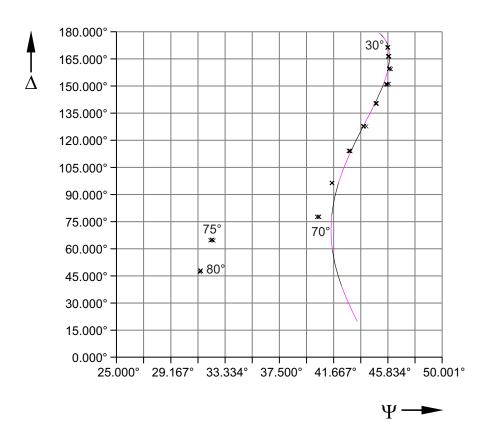


Abbildung 5.2.: Δ - Ψ -Graph zur Probe 1. Die Modellkurve gehört zu den errechneten Werten $d_{SiO_2} = 98 \text{ nm}$ und $n_{SiO_2} = 1, 47$.

Durch Minimierung der Fehlerfunktion erhält man die für die gesuchten Größen die Werte $d_{SiO_2}=(98\pm2)$ nm und $n_{SiO_2}=1,47\pm0,02$ mit einem Fehler von $\zeta=1,51^\circ$

und Abweichungen $a_{\Delta} = 1,51^{\circ}$, $a_{\Psi} = 0,12^{\circ}$. Wie man am Graphen erkennt, werden diese Abweichungen durch die Werte zu den Einfallswinkeln 80° und 75° deutlich erhöht, da sie nicht zu den anderen Werten passen.

Dies könnte daran liegen, dass die Gesamtintensität, die bei diesen Einfallswinkeln auf die Quadrantendiode traf, zu groß gewesen ist, denn bei großen Einfallswinkeln nimmt das Reflexionsvermögen nach Abbildung 3.5 stark zu. Im Programm des EL X-02C verfärbt sich die Anzeige für die Gesamtintensität rot, wenn diese einen gewissen Grenzwert überschreitet und dadurch die Gefahr besteht, dass die Diode übersteuert wird. Bei dieser Messung war genau das für die Einfallswinkel von 80° und 75° der Fall, allerdings wurde die Intensität danach mit dem Potentiometer nachkalibriert. In anderen, noch folgenden, Messungen gab es die gleiche Situation, in der allerdings die Werte bei hohem Einfallswinkel trotzdem zu den anderen Werten passten. Daher ist es wahrscheinlicher, dass die Werte durch Oberflächenrauheiten stark verändert wurden, die bei großen Einfallswinkeln einen großen Einfluss haben [12].

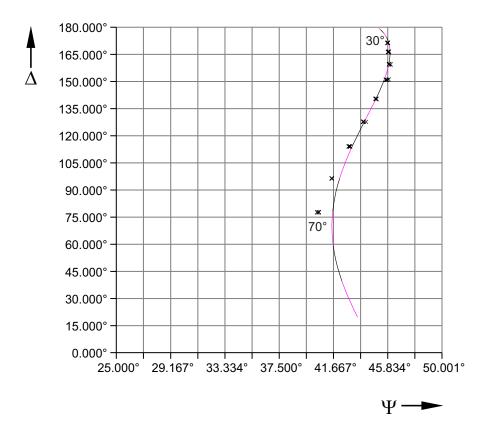


Abbildung 5.3.: Δ - Ψ -Graph zur Probe 1. Die Ausreißer bei Einfallswinkeln von 75° und 80° wurden vernachlässigt.

Lässt man die Ausreißer aus der Auswertung, so erhält man als Ergebnis für die Schichtdicke $d_{SiO_2}=(98\pm2)$ nm und für den Brechungsindex $n_{SiO_2}=1,47\pm0,02$ mit einem Fehler $\zeta=0,26^\circ$ und Abweichungen $a_\Delta=0,24^\circ,\ a_\Psi=0,1^\circ$. Damit

sind die Abweichungen sehr gering, allerdings ist das auch die einzige Änderung gegenüber der vorherigen Auswertung.

Es stimmt sowohl die Schichtdicke mit dem Referenzwert vom IHP als auch der Brechungsindex mit dem Literaturwert innerhalb der Fehlergrenzen überein. Abbildung 5.3 zeigt den Δ - Ψ -Graphen mit der Modellkurve zu den errechneten Größen, aber ohne die vorher stark abweichenden Werte. Die meisten Messwerte liegen nun, wie die Abweichungen nahe legen, in guter Übereinstimmung mit der Modellkurve. Damit kann auch davon ausgegangen werden, dass das Siliziumdioxid eine amorphe Struktur angenommen hat. Benutzt man den Literaturwert $n=1,46\pm0,01$ für die SiO_2 -Schicht, so ergibt sich eine Dicke $d_{SiO_2}=(99\pm2)$ nm mit $\zeta=0,79^\circ$, $a_{\Delta}=0,72^\circ$ und $a_{\Psi}=0,33^\circ$, womit das Ergebnis vom IHP exakt reproduziert wäre. Es darf also angenommen werden, dass dort nur die Schichtdicke bestimmt und der Brechungsindex auf den Literaturwert fixiert wurde.

5.1.2. Probe 2: Dünne Siliziumdioxidschicht

Für die zweite Probe wurde das gleiche Schichtmodell verwendet, allerdings mit der zusätzlichen Annahme aufgrund der Ergebnisse zur Probe 1, dass der Brechungsindex von SiO_2 auf $n=1,46\pm0,01$ festgelegt werden kann.

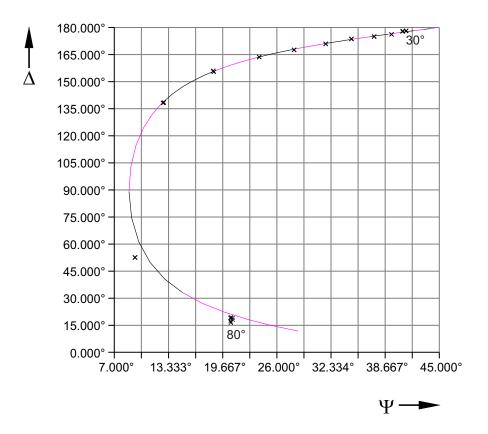


Abbildung 5.4.: Δ - Ψ -Graph zur Probe 2 mit der Modellkurve zur Dicke $d_{SiO_2} = 14 \,\mathrm{nm}$.

Der Literaturwert ist dem Ergebnis von Probe 1 aufgrund seiner größeren Genauigkeit zu bevorzugen. Die Genauigkeit kann deshalb als tatsächlich größer eingeschätzt werden, weil sich thermisch oxidierte Siliziumdioxidschichten zuverlässig herstellen lassen. Dies bedeutet, dass sich die amorphe Struktur reproduzieren lässt [16]. Die Messwerte zeigt Abbildung 5.4 wiederum mit Winkeln von 30° bis 80°. Lässt man aus diesen Werten die Schichtdicke errechnen, so erhält man $d_{SiO_2} = (14 \pm 3)$ nm mit einem Fehler $\zeta = 2,6$ ° und Abweichungen $a_{\Delta} = 1,03$ °, $a_{\Psi} = 2,39$ °. Auch in diesem Fall werden die Fehler durch die Werte bei einem Einfallswinkel von 75° und 80° erhöht, was den gleichen Grund wie oben beschrieben haben wird. Vernachlässigt man diese Werte, so ergibt sich wiederum eine Schichtdicke von $d_{SiO_2} = (14 \pm 3)$ nm, allerdings mit geringeren Fehlern von $\zeta = 0,19$ °, $a_{\Delta} = 0,01$ ° und $a_{\Psi} = 0,19$ °, sodass also die errechneten Schichtdicken für beide Proben gut mit den Referenzwerten vom IHP übereinstimmen.

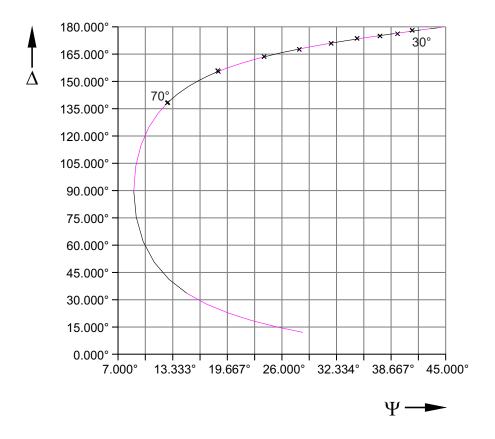


Abbildung 5.5.: Δ - Ψ -Graph zur Probe 2 nach dem Errechnen des Brechungsindex. Die Kurve passt nun sehr gut zu den Messwerten, aber der errechnete Brechungsindex ist sehr wahrscheinlich falsch.

Zur Probe wurde danach auch der Brechungsindex mit errechnet. Das Ergebnis ist $d_{SiO_2} = (17 \pm 3)$ nm und $n_{SiO_2} = 1,34$, wobei der Fehler für den Brechungsindex schwer einschätzbar ist. Die angegebenen Fehler sind $\zeta = 0,13^{\circ}$, $a_{\Delta} = 0,01^{\circ}$, $a_{\Psi} = 0,13^{\circ}$ und somit sehr viel geringer, allerdings lässt sich das zugehörige Er-

gebnis in Bezug auf den Brechungsindex ausschließen, weil die Literaturwerte weit abweichen, und passt im Falle der Schichtdicke wesentlich schlechter zum Referenzwert. Dieses Ergebnis bestätigt damit lediglich, dass der Brechungsindex für sehr dünne Schichten nicht mehr errechnet werden sollte, weil schon kleine Fehler in den Messwerten große Fehler in den errechneten Größen verursachen (vgl. Abschnitt 3.5). Abbildung 5.5 zeigt die Modellkurve zu den errechneten Daten und die Messwerte.

Zu einem späteren Zeitpunkt wurde diese Probe noch einmal mit der Minimumsuche vermessen. Dabei wurde von vornherein nur ein Winkelspektrum von 50° bis 80° berücksichtigt, um stark abweichende oder streuende Werte zu vermeiden. Die Reichweite des Spektrums richtet sich dabei nach der Intensitätsanzeige des Programms, das die Gesamtintensität des reflektierten Lichtes in der Quadrantendiode bei 50° als erstem Winkel zu niedrig und bei 80° als erstem Winkel zu hoch anzeigt. Als Schichtmodell wurde wieder das in Abbildung 5.1 gezeigte System verwendet, wobei zusätzlich $n_{SiO_2} = 1,46 \pm 0,01$ angenommen wurde.

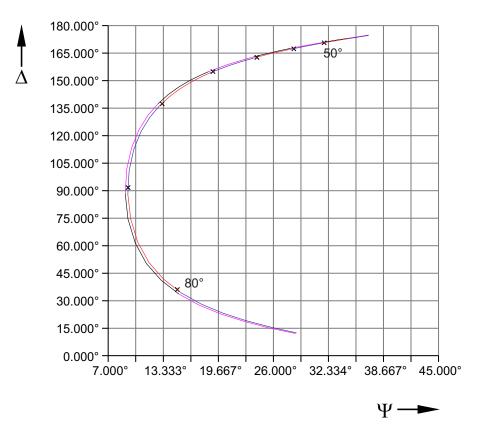


Abbildung 5.6.: Δ -Ψ-Graph zur Probe 2 nach dem Vermessen mit der Minimumsuche mit Einfallswinkeln von 50° bis 80°. Die Messwerte streuen deutlich weniger und passen gut zu den Modellkurven. Die schwarz-violette Kurve modelliert eine Schichtdicke von $d_{SiO_2} = 15,4$ nm; die blau-rote Kurve eine Schichtdicke von $d_{SiO_2} = 16,0$ nm.

Abbildung 5.6 zeigt den Δ - Ψ -Graphen mit den Messwerten, für die nun eine deutlich geringere Streuung beobachtet werden kann. Damit wäre die größere Genauigkeit der Minimumsuche gegenüber dem Rotierenden-Analysator-Modus bestätigt, wobei die Elliptizitäten in diesem Fall durchgehend kleiner als 20° waren, also in dem Bereich, in dem die Minimumsuche besonders genau arbeitet.

Die Messung wurde innerhalb von zwei Tagen vier Mal vorgenommen, um eine Abschätzung zur Reproduzierbarkeit der Ergebnisse mit der Minimumsuche zu erhalten. Selbstverständlich genügt die Anzahl der Versuche keinem statistischem Test, sondern dient lediglich als Schätzung der Genauigkeit. In jedem Versuch wurde die Schichtdicke errechnet und die restlichen Größen wurden auf den Literaturwert fixiert.

Messung	d_{SiO_2}	ζ	a_{Δ}	a_{Ψ}	Bemerkung
1	$15{,}42\mathrm{nm}$	0.68°	0.19°	$0,\!65^{\circ}$	Tag 1
2	$15{,}37\mathrm{nm}$	0.70°	$0,\!20^{\circ}$	0.67°	Tag 1
3	$16{,}02\mathrm{nm}$	0.56°	0.17°	0.53°	Tag 2
4	$15{,}36\mathrm{nm}$	$0,62^{\circ}$	0.17°	$0,59^{\circ}$	Tag 2

Tabelle 5.1.: Ergebnisse der Versuchsreihe zur Genauigkeit der Minimumsuche bei dünnen SiO_2 -Schichten.

Die Ergebnisse zeigt Tabelle 5.1. Zunächst fällt auf, dass alle errechneten Schichtdicken über der vorher errechneten Schichtdicke von (14 ± 3) nm liegen, aber innerhalb der Fehlergrenze übereinstimmen. Eine andere Möglichkeit für diese Abweichung als die Ungenauigkeit des Rotierenden Analysators ist, dass die oxidierte Schicht in den Wochen zwischen der ersten Messung und dieser Versuchsreihe durch Wechselwirkung mit der Luft weiter gewachsen ist. Es lässt sich hier jedoch nicht entscheiden, welche der beiden Möglichkeiten als richtig angesehen werden kann. Des Weiteren stimmen die Ergebnisse aus den Messungen 1, 2 und 4 sehr gut miteinander überein, jedoch findet sich eine etwas größere Abweichung zur Messung 3, die gleichzeitig den geringsten Fehler ζ aufweist. Ein Anwachsen der Oxidschicht von Tag 1 zu Tag 2 kann als Ursache aufgrund von Messung 4 sehr wahrscheinlich ausgeschlossen werden. Möglicherweise wurde während der dritten Messung ein unbemerkter Fehler begangen, der die errechnete Schichtdicke im Vergleich zu den anderen größer werden ließ. Sollte dies so sein, würde der vom Hersteller angegebene Fehler von ± 0.1 nm für Schichten, die dicker sind als 10 nm, tatsächlich passen. Da hier jedoch nicht entschieden werden kann, ob ein unbemerkter Fehler bei der Messung die Ursache für die Abweichung ist oder ob es sich um den üblichen Messfehler handelt, wird der Fehler für die Minimumsuche in dieser Arbeit etwas vorsichtiger auf ± 1 nm abgeschätzt.

5.2. Natives Siliziumdioxid

Im folgenden Versuch sollte die Vermessung einer ultradünnen Schicht getestet werden, wozu die natürlich oxidierte Schicht an der Oberfläche einer Silizium-Probe vermessen wird. Damit das zu erwartende Ergebnis von etwa 1 nm [9, 15] überhaupt aussagekräftig ist, sollte der Fehler nun geringer sein als die oben angegebenen ± 1 nm. Dies wird aber vom Hersteller auch explizit versprochen. So sollen für dünne Schichtdicken von 0 nm bis 10 nm Fehler von $\pm 0,002$ nm möglich sein [11]. Um solche Angaben zu testen, wurde die Messung wiederum vier Mal wiederholt und mit unterschiedlichen Schichtsystemen ausgewertet, da die Angaben für den Brechungsindex einer ultradünnen Siliziumdioxidschicht auf Silizium sehr unterschiedlich sind (vgl. S. 31). Natürlich genügen vier Messungen wiederum keinem statistischen Test und es kann auch nicht entschieden werden, welches der Schichtsysteme der Realität am nächsten kommt. Dennoch kann der Vergleich einige interessante Informationen bieten. Es wurden den Ausführungen in Abschnitt 4.2 entsprechend drei Möglichkeiten getestet: Ein unveränderter Brechungsindex von $n_{SiO_2}=1.46\pm0.01$ für amorphes Siliziumdioxid, da sich kristallines SiO_2 bei natürlichen Oxidschichten ausschließen lässt, ein Brechungsindex von $n_r = 2.58 \pm 0.04$ und $\kappa = 0.007 \pm 0.003$, der sich aus der Bruggemann-Approximation von 50% Si und 50% SiO₂ ergibt, und der in [15] vorgeschlagene Brechungsindex von $n=2,0\pm0,1$. Die sich daraus ergebenden Schichtsysteme zeigt Abbildung 5.7.

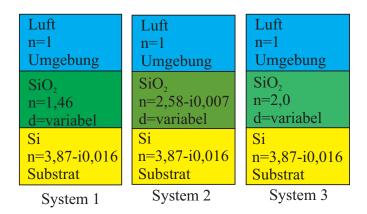


Abbildung 5.7.: Schichtsysteme zu einer nativen Siliziumdioxidschicht.

Jede der vier Messungen wurde in einem Winkelbereich von 55° bis 80° vorgenommen und mit allen drei Materialsystemen ausgewertet. Die Ergebnisse für die jeweils ausgerechnete Schichtdicke enthält Tabelle 5.2.

Darin fällt zunächst auf, dass die Abweichung a_{Δ} für alle Messungen und alle Systeme die gleiche und außerdem sehr gering ist. Dies ist positiv zu beurteilen, da nach Abschnitt 3.5 vor allem Δ die Genauigkeit der errechneten Größe gewährleistet. Des Weiteren ist mit Messung 3 eine exakte Wiederholung von Messung 2 gelungen, bei der sich lediglich die Fehler teilweise leicht unterscheiden. Dies spricht

Messung	System	d_{SiO_2}	ζ	a_{Δ}	a_{Ψ}
1	1	$1,\!31\mathrm{nm}$	$1,19^{\circ}$	0.01°	1,19°
1	2	$1{,}21\mathrm{nm}$	$1,21^{\circ}$	0.01°	$1{,}21^{\circ}$
1	3	$1{,}09\mathrm{nm}$	$1,20^{\circ}$	0.01°	$1,20^{\circ}$
2	1	$1,41\mathrm{nm}$	1,21°	0,01°	1,21°
2	2	$1{,}31\mathrm{nm}$	$1,23^{\circ}$	0.01°	$1,\!23^{\circ}$
2	3	$1{,}19\mathrm{nm}$	$1,22^{\circ}$	$0{,}01^{\circ}$	$1,22^{\circ}$
3	1	$1,\!41\mathrm{nm}$	$1,20^{\circ}$	0.01°	1,20°
3	2	$1{,}31\mathrm{nm}$	$1,23^{\circ}$	0.01°	$1,\!23^{\circ}$
3	3	$1{,}19\mathrm{nm}$	$1,21^{\circ}$	0.01°	$1,21^{\circ}$
4	1	$1,49\mathrm{nm}$	1,18°	0,01°	1,18°
4	2	$1{,}41\mathrm{nm}$	$1,21^{\circ}$	0.01°	$1,\!21^{\circ}$
4	3	$1{,}21\mathrm{nm}$	$1,19^{\circ}$	$0{,}01^{\circ}$	$1,19^{\circ}$

Tabelle 5.2.: Ergebnisse der Versuchsreihe zur Genauigkeit der Minimumsuche bei ultradünnen SiO_2 -Schichten.

tatsächlich für eine hohe Genauigkeit der Minimumsuche.

Außerdem unterscheiden sich die errechneten Schichtdicken für die verschiedenen Brechungsindizes nicht zu sehr. Das Minimum liegt bei 1,09 nm für Messung 1 und System 3, das Maximum liegt bei 1,49 nm bei Messung 4 und System 1. Eine sinnvolle Angabe für die Dicke der nativen Siliziumdioxidschicht einer Siliziumprobe wäre nach diesen Daten also $d_{SiO_2}=(1,3\pm0,3)$ nm. Ist man sich hingegen sicher, den Brechungsindex der Schicht zu kennen, so kann die Fehlerabschätzung sogar geringer gewählt werden. Für System 1 ergibt sich $d_{SiO_2}=(1,4\pm0,1)$ nm, für System 2 $d_{SiO_2}=(1,3\pm0,1)$ nm und für System 3 $d_{SiO_2}=(1,2\pm0,1)$ nm. Damit liegt der Fehler zwar deutlich über der Angabe des Herstellers, ist aber immer noch sehr gering. Dazu sei auch festgehalten, dass die gemessenen Elliptizitäten des reflektierten Lichtes sehr klein waren ($e\approx1^{\circ}$), aber der Fehler von $\pm0,001^{\circ}$, der vom Hersteller angegeben wird, nicht erreicht wurde, sondern eine Angabe von $\pm0,01^{\circ}$ passend wäre. Beispielhaft sind in Tabelle 5.3 die gemessenen Elliptizitäten von Messung 2 und 4 bei einem Einfallswinkel von 60° gegeben.

Messung	e_1	e_2	e_3	e_4	e_5
2	1,009°	1,008°	$1,003^{\circ}$	0.997°	0,995°
4	0,988°	0,989°	$0,985^{\circ}$	0.986°	0,982°

Tabelle 5.3.: Elliptizitäten aus Messung 2 und 4 bei einem Einfallswinkel von 60° zur nativen SiO_2 -Schicht.

Neben den Unterschieden innerhalb einer Messung fällt auch der noch etwas größe-

re Unterschied zwischen den beiden Messungen auf. Die gemessenen Elliptizitäten lagen für diese beiden Messungen am weitesten auseinander, daher wurden die Elliptizitäten dieser zwei Messungen in Tabelle 5.3 wiedergegeben. Da die Probe zwischen den Messungen nicht bewusst umgelegt wurde, aber auch nicht genau fixiert werden konnte, ist vermutlich eine ungewollte Vibration bei der manuellen Winkeländerung des Lasers bzw. Detektors die Ursache für eine leichte Verschiebung der Probe und damit für die abweichenden Elliptizitäten. Dies ist außerdem als ein zusätzlicher experimenteller Fehler für die Schichtdickenbestimmung zu sehen, der in den oben ausgeführten Vergleich mit eingegangen ist.

Als graphische Zusammenfassung sind im folgenden die Δ - Ψ -Graphen der vier Messungen mit den Kurven zu den jeweils drei errechneten Schichtdicken gegeben, allerdings kann man mit dem Auge keinen Unterschied zwischen den Kurven feststellen, da diese zu nah beieinander liegen, wie auch die Tabellenwerte nahelegen.

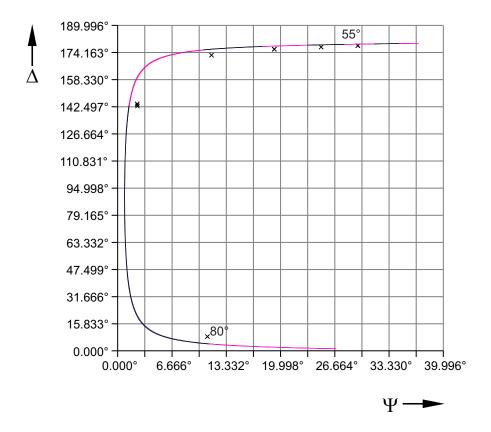


Abbildung 5.8.: Δ - Ψ -Graph zur ersten Messung der natürlichen SiO_2 -Schicht auf Si. Das Winkelspektrum reicht von 55° bis 80°. Die angezeigten Kurven modellieren die errechneten Schichtdicken für die verschiedenen Schichtsysteme, sind aber mit dem Auge kaum zu unterscheiden.

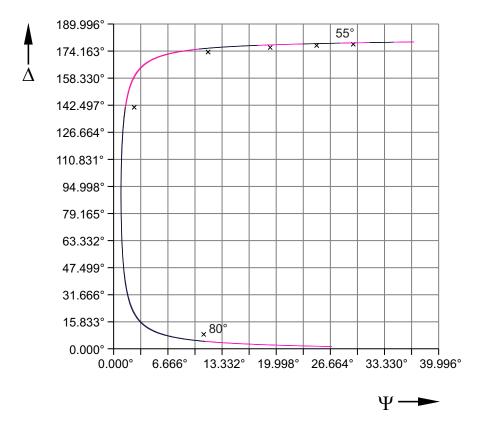


Abbildung 5.9.: Δ - Ψ -Graph zur zweiten Messung der natürlichen SiO_2 -Schicht auf Si. Das Winkelspektrum reicht von 55° bis 80°. Die angezeigten Kurven modellieren die errechneten Schichtdicken für die verschiedenen Schichtsysteme, sind aber mit dem Auge kaum zu unterscheiden.

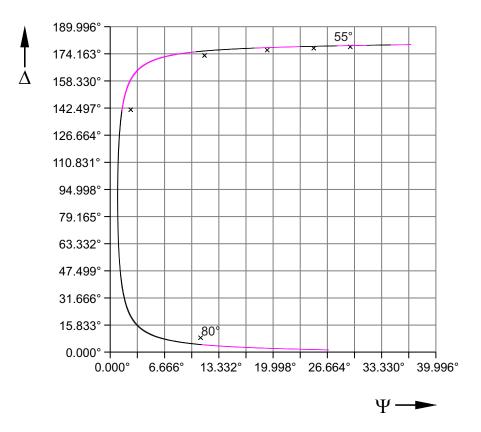


Abbildung 5.10.: Δ - Ψ -Graph zur dritten Messung der natürlichen SiO_2 -Schicht auf Si. Das Winkelspektrum reicht von 55° bis 80°. Die angezeigten Kurven modellieren die errechneten Schichtdicken für die verschiedenen Schichtsysteme, sind aber mit dem Auge kaum zu unterscheiden.

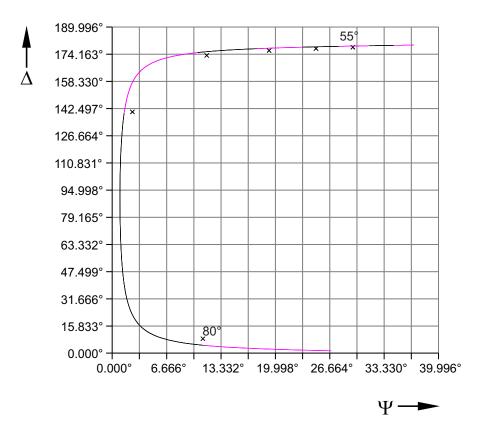


Abbildung 5.11.: Δ - Ψ -Graph zur vierten Messung der natürlichen SiO_2 -Schicht auf Si. Das Winkelspektrum reicht von 55° bis 80°. Die angezeigten Kurven modellieren die errechneten Schichtdicken für die verschiedenen Schichtsysteme, sind aber mit dem Auge kaum zu unterscheiden.

5.3. Silber

In diesem Versuchsteil wurde auf die zwei Proben vom IHP eine Silberschicht aufgedampft. Für Metalle wie Silber sind nach [16] einige Schwierigkeiten bei der ellipsometrischen Analyse zu erwarten, darunter neben der starken Absorption auch Korrelationen der optischen Konstanten mit der Schichtdicke und generell eine starke Variation der optischen Konstanten mit den Ablagerungsbedingungen. Um dies zu testen, wird daher nach der Schichtdickenbestimmung auch der Brechungsindex des Silbers mit angepasst.

Die Bedampfung der Proben vom IHP fand gleichzeitig statt, sodass davon ausgegangen werden kann, dass beide Silberschichten die gleiche Schichtdicke besitzen. Das Materialsystem zu diesem Versuch ist durch Abbildung 5.12 gegeben. Eine mögliche oxidierte Silberschicht an der Oberfläche wurde nicht berücksichtigt, da die Messung kurz nach der Herstellung der Silberschicht stattfand.

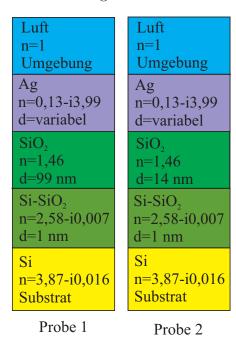


Abbildung 5.12.: Schichtsysteme zu den Silberschichten.

Die Messungen mit dem EL X-02C wurden mit dem Rotierenden-Analysator-Modus vorgenommen, da die gemessenen Elliptizitäten des reflektierten Lichtes für Probe 1 zwischen 8° und 42° sowie für Probe 2 zwischen 7° und 39° lagen. Es treten also auch einige sehr große Elliptizitäten auf, für die die Minimumsuche nur sehr ungenau arbeitet, wohingegen der Rotierende-Analysator-Modus für große Elliptizitäten sehr präzise arbeitet und auch für kleine Elliptizitäten noch relativ brauchbare Ergebnisse liefert. Da es bei diesem Versuch um eine Machbarkeitsstudie ging und die zu erwartende Schichtdicke aufgrund der Bedampfungszeit groß genug sein sollte, um sie mit diesem Modus sinnvoll bestimmen zu können, sollte die Messung mit dem Rotierenden Analysator also genügen. Das Winkelspektrum

beider Messungen reichte von 40° bis 80°. Dabei wurde die reflektierte Intensität vom Ellipsometer jeweils bei 80° und 75° als etwas zu hoch sowie bei 40° und 45° als etwas zu niedrig angezeigt. Wie jedoch Abbildung 5.13 für Probe 1 und Abbildung 5.14 für Probe 2 zeigt, konnten die Intensitätswerte durch die anschließende Kalibrierung des Potentiometers annähernd so verändert werden, dass trotzdem sinnvolle Messwerte bestimmt werden konnten.

Probe	d_{Ag}	$n_{r,Ag}$	κ_{Ag}	ζ	a_{Δ}	a_{Ψ}
1	32 nm	0,13	3,99	0,28°	0,11°	0,26°
1	32 nm	0,13	3,99	0,28°	0,11°	0,26°
1	29 nm	0,10	4,06	0,27°	0,10°	0,25°
2	29 nm	0,13	3,99	0,45°	0,44°	0,08°
2	37 nm	0,41	3,99	0,12°	0,11°	0,05°
2	37 nm	0,41	3,99	0,12°	0,11°	0,05°

Tabelle 5.4.: Ergebnisse aus der Vermessung der Silberschichten. Die kursiv geschriebenen Werte wurden nicht durch Anpassung der Fehlerfunktion erhalten, sondern auf den Literaturwert festgelegt.

Zur Auswertung wurde jeweils zunächst nur die Schichtdicke, dann Schichtdicke und Realteil des Brechungsindex und schließlich die Schichtdicke sowie Real- und Imaginärteil des Brechungsindex angepasst. Die Ergebnisse zeigt Tabelle 5.4.

Zunächst fällt auf, dass die errechneten Schichtdicken der Silberschicht von Probe 1 deutlich besser zueinander passen, was daran liegt, dass die angepassten Werte für den Brechungsindex, die mit der Schichtdicke korrelieren, wesentlich besser zu den Literaturwerten passen. Dies gilt sowohl für den Real- als auch für den Imaginärteil des Brechungsindex, was möglicherweise die Beobachtung aus [16] bestätigt, dass sich eine Metallschicht auf einer relativ dicken Isolatorschicht noch einigermaßen gut vermessen lässt.

Bei der Silberschicht der Probe 2 liegt das Minimum der Fehlerfunktion für den Realteil des Brechungsindex auf dem gut dreifachen Literaturwert - ein Ergebnis, das sich aufgrund des Literaturwertes und des Ergebnisses von Probe 1 ausschließen lässt. Gleichzeitig erhöht sich dabei auch die errechnete Schichtdicke, ohne dass sich die Fehler/Abweichungen allzu sehr ändern. Demnach passen beide Ergebnisse sehr gut zu den Messwerten, obwohl die errechneten Werte sich einigermaßen stark unterscheiden. Dies kann als Bestätigung der in Abschnitt 3.5 besprochenen Korrelationen gesehen werden.² Dementsprechend kann die Schichtdicke, die mit dem physikalisch auszuschließenden Brechungsindex korreliert, ebenfalls ausgeschlossen werden.

²Dass n und d nicht unabhängig voneinander bestimmt werden können, hat auch schon die Anpassung des Brechungsindex und der Schichtdicke bei der dünnen SiO_2 -Schicht gezeigt. Die Korrelation der Parameter ist also keine Besonderheit von Metallen.

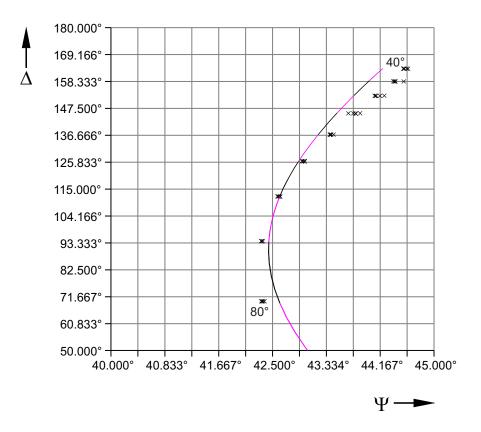


Abbildung 5.13.: Die Messwerte und Kurven zu den errechneten Schichtdicken/Brechungsindizes der Probe 1. Die Abweichungen der Kurven untereinander sind so gering, dass sie für das Auge ununterscheidbar sind.

Der Extinktionskoeffizient hingegen scheint in diesem Fall weitgehend unabhängig von Schichtdicke und Realteil des Brechungsindex zu sein, da er sich nach der Anpassung an die Messwerte kaum vom Literaturwert unterscheidet und die vorher angepassten Größen für Brechungsindex und Schichtdicke reproduziert wurden.

Die Messwerte zusammen mit den Kurven zu den errechneten Schichtdicken und Brechungsindizes enthält Abbildung 5.13 für Probe 1 und Abbildung 5.14 für Probe 2. Die Abweichungen der Kurven untereinander sind so gering, dass sie für das Auge ununterscheidbar sind. In beiden Abbildungen erkennt man die relativ große Streuung für kleine Winkel (etwa 40° bis 55°), die sich aus der winkelabhängigen Ungenauigkeit (für 40° ist die Ungenauigkeit am größten) und dem Rotierenden-Analysator-Modus erklärt, da bei kleinen Winkeln die niedrigsten Elliptizitäten dieser Messung vorgefunden wurden. Außerdem passen diese Werte etwas schlechter zu den Kurven, die die errechneten Parameter modellieren. Dies könnte mit der zu niedrigen Gesamtintensität auf der Quadrantendiode zusammenhängen, die vom Potentiometer möglicherweise ungeeignet verstärkt wurde. Bei der Auswertung wurden daher probeweise die Winkel von 40° bis 55° weggelassen und die

Berechnung wiederholt. Die Ergebnisse ändern sich jedoch nur in den Nachkommastellen, die aufgrund der Ungenauigkeit nicht mehr angegeben wurden. Dafür verringert sich allerdings leicht der angegebene Fehler ζ und die Abweichungen a_{Δ} sowie a_{Ψ} , wie das bereits bei der Probe 1 (und in geringerem Maße bei Probe 2) der SiO_2 -Schicht der Fall war. Die genauen Werte sind hier nicht mit angegeben, da sie sich nicht groß von den Werten in Tabelle 5.4 unterscheiden und an den Ergebnissen nichts ändern.

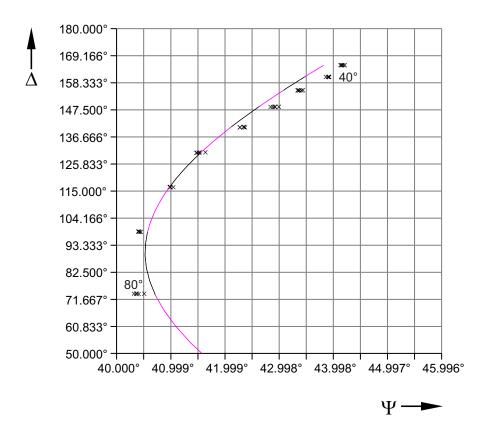


Abbildung 5.14.: Die Messwerte und Kurven zu den errechneten Schichtdicken/Brechungsindizes der Probe 2. Die Abweichungen der Kurven untereinander sind so gering, dass sie für das Auge ununterscheidbar sind.

Da die beiden Proben gleichzeitig bedampft wurden, sollte die Schichtdicke der Silberschicht für beide Proben übereinstimmen. Beim Vergleich der Ergebnisse findet man tatsächlich eine Übereinstimmung in der Schichtdicke mit $d_{Ag}=29\,\mathrm{nm}$, wobei die gleichzeitig angepassten Werte der Probe 1 nur wenig von den Literaturwerten abweichen, die wiederum bei der Probe 2 zu eben dieser Schichtdicke geführt haben. Die Fehlergrenzen für diese Schichtdicke müssen allerdings aufgrund des Rotierenden-Analysator-Modus vorsichtig abgeschätzt werden.

Zur Fehlerabschätzung muss außerdem die Eindringtiefe vom verwendeten Laser in Silber berücksichtigt werden. Diese beträgt $d_e = 12,6$ nm, sodass die errechneten

Schichtdicken bei etwa 2,5 Eindringtiefen liegen. In Abschnitt 3.5 wurde festgehalten, dass sich die Schichtdicke für etwa zwei Eindringtiefen gut bestimmen lässt. Demnach ist die errechnete Schichtdicke mindestens an der Grenze dessen, was sich mit dem Ellipsometer sinnvoll angeben lässt; vor allem muss die Fehlerabschätzung sehr vorsichtig geschehen. Daher wurden die Proben zusätzlich mit einem Röntgenreflektometer vermessen, damit ein Referenzwert für die Schichtdicke vorlag. Das Ergebnis dieser Messungen ist eine Silberschicht von $d_{Ag} = (27 \pm 1)$ nm und eine zusätzliche Schicht an der Oberfläche von $d = (3 \pm 1)$ nm, die vermutlich durch Korrosion entstanden ist. Da die optischen Konstanten dieser Schicht nicht bekannt sind, kann sie für das ellipsometrische Modell nicht berücksichtigt werden und geht in diesem daher in die Silberschicht mit ein. Nach der XRR-Messung ist also eine Schichtdicke von $d_{Ag} = (30 \pm 2)$ nm zu erwarten, ein Ergebnis, das gut mit den oben beschriebenen Ergebnissen übereinstimmt.

Insgesamt haben sich also die Schwierigkeiten bestätigt, aber die Messung nicht unmöglich gemacht. Eine dünnere Silberschicht, die unter der zweifachen Eindringtiefe liegt, dürfte außerdem die Genauigkeit erhöhen. Als Ergebnis der ellipsometrischen Messung lässt sich in diesem Fall eine Schichtdicke von $d_{Ag} = (29 \pm 5)$ nm festhalten. Innerhalb dieser Fehlergrenzen stimmen auch die anderen, aus der Vermessung der Probe 1 errechneten Schichtdicken von $d_{Ag} = 32$ nm mit diesem Ergebnis überein.

Für den Brechungsindex lässt sich festhalten, dass er sich bei einer Silberschicht auf einer dicken Isolatorschicht anscheinend, wie in [16] berichtet, besser anpassen lässt als bei der gleichen Silberschicht auf einer dünnen Isolatorschicht. Es lässt sich mit Silber aber nicht endgültig klären, ob die Ursache dafür tatsächlich die Dicke der darunter liegenden Isolatorschicht ist oder ob es vielleicht an der immer noch dünnen Silberschicht selbst liegt und hier der gleiche Effekt beobachtet wurde, der die Berechnung des Brechungsindex einer dünnen SiO_2 -Schicht in Abschnitt 5.1.2 unmöglich gemacht hat. Die gute Übereinstimmung des komplexen Brechungsindex für die erste Probe könnte immerhin auch aus zufällig geringeren Messfehlern resultieren. Eine Überprüfung mit einer dickeren Silberschicht ist allerdings unmöglich, da die Absorption dann zu groß wird. Somit bleibt die Anpassung des Brechungsindex für sehr dünne Schichten eine kritische Methode, deren Abhängigkeit von der Leitfähigkeit des Materials³ (Isolator/Metall) hier nicht abschließend überprüft werden konnte. Die einzige Überprüfungsmöglichkeit mit Silberproben ist wohl eine Versuchsreihe mit vielen dünnen Silberschichten von knapp 25 nm (der zweifachen Eindringtiefe) auf unterschiedlich dicken Isolatorschichten, damit zum einen die Absorption nicht zu groß und zum anderen die Schicht dick genug ist, um den Brechungsindex sinnvoll bestimmen zu können. Eine statistische Auswertung der Ergebnisse könnte den behaupteten Zusammenhang belegen. Einfacher wäre hingegen der Vergleich mit weniger absorbierenden Materialien, der sich auf Silber übertragen lassen sollte.

³Die Anpassung des Brechungsindex wird in [16] für Metalle als sehr schwierig berichtet; für Isolatoren finden sich hingegen keine Bedenken.

Ausblick und Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das Messverfahren Ellipsometrie mit dünnen und ultradünnen Silizimdioxidschichten sowie mit Silberschichten auf Siliziumsubstraten erprobt. Die Auswahl der Materialien erfolgte dabei nach den unterschiedlichen Eigenschaften der Schichten (dünne und ultradünne Isolatoren sowie dünne Leiter), die dem Ellipsometer unterschiedliche Schwierigkeiten abverlangen sollten.

Der erste Test mit den thermisch bedampften SiO_2 -Schichten kann als sehr erfolgreich angesehen werden, da er die Referenzwerte vom IHP sowie auch alle Informationen aus der Literatur bestätigt. So hat sich der Brechungsindex der von Siliziumdioxid mit einer relativ dicken Schicht von 99 nm gut berechnen lassen; er stimmte mit $n=1,47\pm0,02$ innerhalb der Fehlergrenzen mit dem Literaturwert n=1,46 überein. Für eine dünne Siliziumdioxidschicht von 14 nm ließ er sich hingegen, wie in der Literatur beschrieben, nur ungenügend aus der Messung ermitteln. Lediglich die Fehlerangaben des Herstellers mussten überdacht werden, sind aber mit ± 1 nm immer noch ausreichend klein. Auch bei ultradünnen SiO_2 -Schichten hat sich das EL X-02C bewährt und seine hohe Genauigkeit für ultradünne Schichten mit $\pm 0,1$ nm (bei bekanntem Brechungsindex) belegt.

Die Vermessung von Silberschichten hat in Bezug auf die Schichtdicke ebenfalls gut funktioniert, allerdings stimmt die Anpassung der optischen Konstanten nur bei der ersten Probe grob mit den Literaturwerten überein. Die Ursache dafür konnte mit einer Silberschicht nicht abschließend geklärt werden, da sie sowohl durch die Ablagerungsbedingung auf einer dünnen bzw. relativ dicken Isolatorschicht als auch durch die relativ kleine Dicke der Silberschicht verursacht sein könnte. Dies lässt sich allerdings nicht mit dickeren Silberschichten überprüfen, da die Absorption dann zu groß wird. Hier könnte der Vergleich mit einem anderen absorbierenden Material, das einen kleineren Extinktionskoeffizient hat, hilfreich sein.

Des Weiteren bleibt die Vermessung von Halbleitern mit dem Ellipsometer zu testen. Außerdem könnte man ultradünne absorbierende Filme erproben, sofern man sich sicher ist, welchen Brechungsindex man für diese ansetzen kann. Dazu wären auch Informationen über den Wachstumsprozess des Films auf dem Substrat nützlich, um ein möglichst genaues Modell anfertigen zu können.

Für das geplante Fortgeschrittenen-Praktikum an der Universität Osnabrück haben sich die SiO_2 -Schichten als unproblematisch erwiesen, weshalb sie für erste Vermessungsversuche sehr gut geeignet sind. Auch eine Vermessung von nativen Oxidschichten auf Silizium ist durchaus denkbar. Bei einer Beschichtung mit Silber

durch die Praktikanten im nächsten Schritt sollte darauf hingewiesen werden, dass die Schichtdicke nicht zu groß werden sollte.

Die Herausforderungen eines solchen Praktikums können unterschiedlich angesetzt werden. Für alle Schichten kann eine Diskussion des Fehlers für die Schichtdicke erfolgen, die entweder über wiederholte ellipsometrische Messungen oder über Referenzmessungen mit anderen Methoden wie der Röntgenreflektometrie geschehen kann. Für sehr dünne SiO_2 -Schichten gilt es, zu erkennen, dass sich der Brechungsindex nur schlecht anpassen lässt, da kleine Messfehler für Δ oder Ψ große Abweichungen im Brechungsindex hervorrufen, und dieser daher auf den Literaturwert fixiert werden sollte. Eine Diskussion des experimentell bestimmten Brechungsindex für Silber ist anspruchsvoller und kann, wie hier festgestellt wurde, nicht abschließend beantwortet werden. Entsprechende Informationen über die Schwierigkeiten mit Metallen, aber auch mit dünnen Schichten müssen vorher in der Praktikumsanleitung erwähnt werden.

Es ergeben sich also viele Anwendungsmöglichkeiten für das EL X-02C, das im Rahmen dieser Arbeit als zuverlässig, einfach zu bedienen und sehr genau herausgestellt hat.

A. Exkurse

Um diese Bachelorarbeit nicht zu lang werden zu lassen, wurden einige Spezialfälle ausgegliedert, die dem interessierten Leser aber nicht vollkommen enthalten werden sollen. Daher werden sie hier im Anhang genauer ausgeführt.

A.1. Spezialfälle der Ellipsengleichung

Die Ellipsengleichung für die verschiedenen Polarisationszustände des elektrischen Feldes ist gegeben durch:

$$\frac{E_x^2}{E_{x0}^2} + \frac{E_y^2}{E_{y0}^2} - 2\frac{E_x E_y}{E_{x0} E_{y0}} \cos \delta = \sin^2 \delta. \tag{A.1}$$

Man kann zwei einfache Spezialfälle ausmachen:

1. Für $\delta = z \cdot \pi$, $z \in \mathbb{Z}$, wird Gl. A.1 zu:

$$\left(\frac{E_x}{E_{x0}} \pm \frac{E_y}{E_{y0}}\right)^2 = 0. (A.2)$$

Das resultierende elektrische Feld schwingt in einer konstanten Schwingungsebene, die im Querschnitt wie eine Linie aussieht. Daher bezeichnet man diesen Zustand als linear polarisiertes Licht. Allerdings müssen zusätzlich die Bedingungen $E_{x0} \neq 0$ und $E_{y0} \neq 0$ erfüllt sein. Das bedeutet, dass die Ellipsengleichung für eine lineare Polarisation entlang der Koordinatenachsen ungeeignet ist.

2. Für $\delta=(2z+1)\cdot\frac{\pi}{2}$, $z\in\mathbb{Z}$, und $E_{x0}=E_{y0}$ erhält man aus Gl. A.1:

$$\frac{E_x^2}{E_{x0}^2} + \frac{E_y^2}{E_{y0}^2} = 1. (A.3)$$

Das resultierende elektrische Feld bildet eine Spirale um die Ausbreitungsrichtung, die im Querschnitt wie ein Kreis aussieht. Daher bezeichnet man diesen Zustand als zirkular polarisiertes Licht.

Ein weiterer Spezialfall dient als Einführung für die Größe $\tan \psi = E_{y0}/E_{x0}$: Für $\delta = (2z+1) \cdot \frac{\pi}{2}$, $z \in \mathbb{Z}$ und $E_{x0} \neq E_{y0}$ erhält man aus Gl. A.1 wiederum Gl. A.3, jedoch beschreibt diese nun eine Ellipse, deren Hauptachsen in Richtung der Koordinatenachsen zeigen (vgl. Abb. A.1).

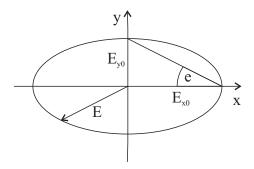


Abbildung A.1.: Ungedrehte Polarisationsellipse mit den Halbachsen E_{x0} , E_{y0} und der Elliptizität e. E bezeichnet den Vektor des el. Feldes.

In diesem Fall gilt $\Theta = 0$ und $\tan e = E_{y0}/E_{x0}$, da die Halbachsen nun durch die Amplituden der y- bzw. x-Komponente gegeben sind. In Analogie zur Grundgleichung der Ellipsometrie (vgl. Abschnitt 2.4) wird dieses Maß für das Amplitudenverhältnis beibehalten und dazu $\psi := \arctan(E_{y0}/E_{x0})$ definiert. In dem Fall, dass die Halbachsen der Ellipse mit den Amplituden des el. Feldes übereinstimmen, gilt also $\psi = e$; in allen anderen Fällen wird der Zusammenhang durch die Gleichungen 2.5 und 2.6 hergestellt. An dieser Stelle sei auch folgende Gleichung festgehalten, die schon sehr an die Grundgleichung der Ellipsometrie erinnert:

$$\frac{E_y}{E_x} = \frac{E_{y0} \cdot e^{i(\omega t - kz + \delta)}}{E_{x0} \cdot e^{i(\omega t - kz)}} = \tan \psi \cdot e^{i\delta}$$
(A.4)

Das Verhältnis der beiden Komponenten des elektrischen Feldes lässt sich also aus der Information über den Polarisationszustand ermitteln.

A.2. Herleitung des elektrischen Feldes nach Durchlaufen eines Mediums

Breitet sich eine Welle in z-Richtung durch ein Medium der Dicke Δz aus, so braucht sie dafür die Zeit

$$t_M = \frac{\Delta z}{c} = \frac{n \cdot \Delta z}{c_0}. (A.5)$$

Die gleiche Welle benötigte im Vakuum die Zeit

$$t_V = \frac{\Delta z}{c_0}. (A.6)$$

Insgesamt verursacht das Medium für die Welle also eine Zeitdifferenz

$$\Delta t = t_M - t_V = (n-1)\frac{\Delta z}{c_0},\tag{A.7}$$

sodass die Welle nach Durchlaufen des Mediums (und unter Ausnutzung der Beziehung $c = \frac{\omega}{k}$) folgendermaßen beschrieben werden kann:

$$E(\vec{z},t) = \vec{E_0} \cdot \exp(i\omega(t - \Delta t - \frac{z}{c_0}))$$
(A.8)

$$= \vec{E_0} \cdot \exp(i\omega(t - \frac{z}{c_0})) \cdot \underbrace{exp(-i\omega(n-1)\frac{\Delta z}{c_0})}_{\text{Einfluss des Mediums}}.$$
 (A.9)

Der Einfluss des Mediums, also die zeitliche Verzögerung (Phasenverzögerung) $\Delta \varphi$ der Welle, kann demnach makroskopisch durch den Brechungsindex n und die Dicke Δz des Mediums beschrieben werden:

$$\Delta \varphi = \frac{\omega}{c_0} (n-1) \Delta z = \frac{2\pi}{\lambda} (n-1) \Delta z. \tag{A.10}$$

A.3. Gebräuchliche Effektivmediumtheorien

Es gibt zwei weitere Effektivmediumtheorien, die durchaus gebräuchlich sind. Sie setzen wie die Bruggemann-Approximation $\gamma=2$ für kugelförmige Partikel, aber unterscheiden sich durch die Wahl des einbettenden Mediums.

1. LORENTZ-LORENTZ: Als einbettendes Medium wird das Vakuum aufgefasst, was zu $\epsilon_h = 1$ führt. Es wird dabei angenommen, dass die einzelnen Komponenten auf atomarer Ebene vermischt sind, was in der Realität allerdings selten der Fall ist. Für ein Beispiel mit zwei Medien ergibt sich:

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = f_1 \frac{\epsilon_1 - 1}{\epsilon_1 + 2} + f_2 \frac{\epsilon_2 - 1}{\epsilon_2 + 2}.$$
 (A.11)

2. MAXWELL-GARNETT: Diese Theorie setzt ein Medium mit sehr großem Volumenanteil gegenüber den anderen Medien als einbettendes Medium voraus. Mit $\epsilon_h = \epsilon_1$ führt dies im obigen Beispiel zu:

$$\frac{\epsilon - \epsilon_1}{\epsilon + 2\epsilon_1} = f_2 \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1}.$$
 (A.12)

A.4. Der Glan-Thompson-Polarisator

Der Glan-Thompson-Polarisator besteht aus einem doppelbrechenden Kristall, z.B. Kalkspat, dessen Grenzfläche entlang der optischen Achse geschnitten wurde (vgl. Abb. A.2). Durch diesen Aufbau wird die senkrecht auf die Grenzfläche treffende, unpolarisierte Welle in eine außerordentliche (a) und eine ordentliche (o) Welle mit der Geschwindigkeit c_0/n_a bzw. c_0/n_o aufgespalten, die allerdings ihre Ausbreitungsrichtung beide nicht ändern und daher parallel zueinander durch den Kristall

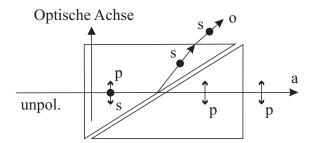


Abbildung A.2.: Der Glan-Thompson-Polarisator. Die ordentliche Welle ist mit o, die außerordentliche Welle mit a gekennzeichnet. Die Bezeichnungen p bzw. s stehen für die Polarisation parallel bzw. senkrecht zur Grenzfläche und damit auch zur optischen Achse.

laufen. Außerdem sind diese beiden Wellen nun linear polarisiert - die außerordentliche Welle parallel zur optischen Achse und die ordentliche Welle senkrecht dazu. Der Kristall ist in der Diagonalen aufgeschnitten und durch einen Kleber wieder zusammengekittet worden, dessen Brechungsindex n_K kleiner ist als der Brechungsindex n_o der ordentlichen Welle, aber größer als der Brechungsindex n_a der außerordentlichen Welle. Dadurch wird der ordentliche Strahl total reflektiert, wohingegen der außerordentliche Strahl, wiederum ohne seine Ausbreitungsrichtung zu ändern, transmittiert wird. Nach Durchlaufen des Glan-Thompson-Polarisators ist das Licht demnach linear und parallel zur optischen Achse polarisiert. Im Programm zum Ellipsometer ist es möglich die Orientierung des linear polarisierten Lichtes (den Winkel zwischen Einfallsebene und Schwingungsebene) einzustellen, was demnach durch eine Drehung des Polarisators, und damit seiner optischen Achse, ermöglicht wird.

A.5. Nullellipsometrie

Die Nullellipsometrie ist die älteste Methode, von der eine moderne Variante vorgestellt werden soll [15], die am besten die ellipsometrische Grundgleichung veranschaulicht.

In den Anfängen der Ellipsometrie waren die Messgrößen die Azimutwinkel von Polarisator (P_0) , Kompensator (C_0) und Analysator (A_0) zur Einfallsebene sowie der Einfallswinkel des Lichtes (φ_1) , weil man bis dahin nur wenig genaue quantitative Überlegungen zur Intensität des Lichtes zur Verfügung hatte [15].

Das Messprinzip funktioniert folgendermaßen (vgl. Abb. A.3): Der Kompensator wird auf einen bestimmten Azimutwinkel gegenüber der Einfallsebene fixiert; daraufhin wird der Polarisator so gedreht, dass das reflektierte Licht linear polarisiert ist und vom Analysator daher beim richtigen Azimutwinkel gegenüber der Einfallsebene ausgelöscht wird. Dementsprechend misst man im Detektor eine verschwin-

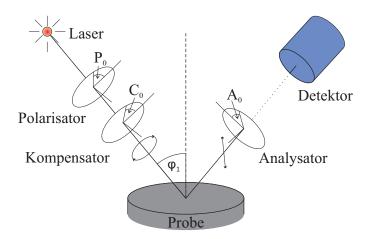


Abbildung A.3.: Schematische Darstellung der Nullellipsometrie. Die Messgrößen waren die Azimutwinkel von Polarisator (P_0) , Kompensator (C_0) und Analysator (A_0) zur Einfallsebene sowie der Einfallswinkel des Lichtes (φ_1) .

dende Intensität des Lichtes, wobei man in der Praxis eher ein Minimum findet. In [15] wird hergeleitet, dass für einen Azimutwinkel $C_0 = -45^{\circ}$ des als Kompensator genutzten $\lambda/4$ -Plättchens folgende Zusammenhänge zwischen den Grundgrößen (Δ, Ψ) und den Azimutwinkeln P_0 , A_0 des Polarisators bzw. Analysators bestehen:

$$\Psi = |A_0|$$
 und $\Delta = 2P_0 \pm 90^{\circ}$ (für $C_0 = -45^{\circ}$). (A.13)

Durch den Ansatz von $|\rho|=\tan\Psi$ in der Grundgleichung findet sich Ψ also als Winkel des Analysators gegenüber der Einfallsebene in dem Messaufbau wieder! Dies ist die Begründung für das bei anderen Messmethoden unanschauliche Maß des Verhältnisses der Amplitudenverhältnisse in der ellipsometrischen Grundgleichung. Da die Nullellipsometrie allerdings die Anfänge der Ellipsometrie begründete, hat sich die Betrachtung von Ψ auch für andere Verfahren durchgesetzt.

Mit dem Verfahren können dünne Schichten sehr genau vermessen werden, allerdings arbeitet diese Methode auch sehr langsam, weshalb heute andere Verfahren gebräuchlicher sind [12].

B. Abbildungsverzeichnis

2.1.	Gedrehte Polarisationsellipse	4
2.2.	Die Einfallsebene	5
2.3.	Die Lichtbrechung an der Grenzfläche zweier Medien	8
2.4.	Das Substratmodell	9
2.5.	Das Einschichtmodell	10
2.6.	Heterogene Schichten	12
3.1.	Das EL X-02C und der schematische Aufbau eines Ellipsometers	15
3.2.	Rotierender Analysator	17
3.3.	Aufweitung der Polarisatiosellipse	17
3.4.	Das Meßverfahren zur Suche des Intensitätsminimums	18
3.5.	Reflexionsvermögen	23
3.6.	Phasendifferenz	24
3.7.	Schichtwachstumskurve von Siliziumdioxid auf Silizium	25
3.8.	Schichtwachstumskurven für verschiedene Brechungsindizes	26
3.9.	Schichtwachstumskurven über dem ganzen Definitionsbereich	27
3.10.	Schichtwachstumskurve von Tantal auf Silizium	27
4.1.	Aufbau von Siliziumdioxid	30
5.1.	Schichtsystem zu SiO_2 auf Si	33
5.2.	Δ - Ψ -Graph zur Probe 1 (alle Werte)	34
5.3.	Δ - Ψ -Graph zur Probe 1 (gute Werte)	35
5.4.	Δ - Ψ -Graph zur Probe 2	36
5.5.	$\Delta\text{-}\Psi\text{-}\mathrm{Graph}$ zur Probe 2 (mit Anpassung des Brechungsindex)	37
5.6.	$\Delta\text{-}\Psi\text{-}Graph$ zur Probe 2 (Messungen mit Minimumsuche)	38
5.7.	Schichtsysteme zu einer nativen Siliziumdioxidschicht	40
5.8.	Δ - Ψ -Graph zur ersten Messung der natürlichen SiO_2 -Schicht auf Si .	42
5.9.	$\Delta\text{-}\Psi\text{-}\mathrm{Graph}$ zur zweiten Messung der natürlichen $SiO_2\text{-}\mathrm{Schicht}$ auf $Si.$	43
5.10.	$\Delta\text{-}\Psi\text{-}\mathrm{Graph}$ zur dritten Messung der natürlichen $SiO_2\text{-}\mathrm{Schicht}$ auf $Si.$	44
5.11.	$\Delta\text{-}\Psi\text{-}\mathrm{Graph}$ zur vierten Messung der natürlichen $SiO_2\text{-}\mathrm{Schicht}$ auf $Si.$	45
5.12.	Schichtsysteme zu den Silberschichten	46
5.13.	Messwerte und Kurven zu den errechneten Schichtdicken der Probe	40
F 1 1	1 (Silber)	48
5.14.	Messwerte und Kurven zu den errechneten Schichtdicken der Probe	10
	2 (Silber)	49

B. Abbildungsverzeichnis

A.1.	Ungedrehte Polarisationsellipse						54
A.2.	Der Glan-Thompson-Polarisator						56
A.3.	Schematische Darstellung der Nullellipsometrie.						57

C. Literatur

- [1] AG Prof. Dr. L. Bohatý. Eigenschaften und Tensorgrößen von Quarz. Aufgerufen am 07.08.2012. Universität Köln. URL: http://www.uni-koeln.de/math-nat-fak/kristall/forschung/kristallphysik/quarz.html.
- [2] W. Braunschweig und K. Klein. *Halbleiter*. Aufgerufen am 26.07.2012. RWTH Aachen. 2004. URL: http://accms04.physik.rwth-aachen.de/~kirn/praktikum/teil2/anleitung2/v2_3.pdf.
- [3] Wolfgang Demtröder. Experimentalphysik 2. 5. Auflage. Springer-Verlag, 2009.
- [4] T.M. Donovan u. a. "Optical Properties of Amorphous Germanium Films". In: *Physical Review B* 2 (1970).
- [5] Marcus Eichfelder. Wechselwirkung von Licht mit Materie: Reflexion und Brechung. Aufgerufen am 26.07.2012. 2004. URL: http://www.pi1.uni-stuttgart.de/teaching/HauptseminarWS0405/Eichfelder.pdf.
- [6] Thorsten Fließbach. Elektrodynamik Lehrbuch zur theoretischen Physik II.
 5. Auflage. Spektrum Akademischer Verlag, 2008.
- [7] Sören Lindemann. Charakterisierung dünner Eisenoxidschichten auf Ag(111). Bachelorarbeit. 2012.
- [8] Jeremy Low u. a. "Band Gap Energy in Silicon". In: American Journal of Undergraduate Research 7 (2008), S. 27–32.
- [9] M. Morita u. a. "Growth of native oxide on a silicon surface". In: Journal of Applied Physics 68 (1990), S. 1273. URL: http://dx.doi.org/10.1063/1. 347181.
- [10] Roy F. Potter. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Hrsg. von Edward D. Palik. Academic Press, 1998, S. 465–469.
- [11] Udo Riß. Error Analysis of Ellipsometry for Thin Semiconductor Layers. Aufgerufen am 12.06.2012. URL: www.dre.de/Daten/error%20analysis.pdf.
- [12] Udo Riß. Persönliche Mitteilungen.
- [13] Udo Riß. Submonolayer-Ellipsometer EL X-02C. Aufgerufen am 31.05.2012. URL: www.dre.de/Daten/hauptseiten.pdf.
- [14] Ralf Rochotzki. "Ellipsometrische Untersuchungen an Plasmapolymeren und plasmamodifizierten Polymeroberfächen". Diss. TU Chemnitz, 1993.

- [15] Harland G. Tompkins und Eugene A. Irene, Hrsg. *Handbook of Ellipsometry*. William Andrew, 2005.
- [16] Harland G. Tompkins und William A. McGahan. Spectroscopic Ellipsometry and Reflectometry A User's Guide. John Wiley & Sons, Inc., 1999.

Danksagung

Mein Dank gilt all denjenigen Personen, die durch ihren Einsatz und ihre wertvollen Ratschläge maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Hierzu zähle ich ohne pathetische Worte:

Prof. Dr. rer. nat. Joachim Wollschläger,

Prof. Dr. rer. nat. Mirco Imlau,

Sebastian Gevers,

Dr. Udo Riß,

Jasmin Jansen,

Wilhelm, Ingrid und Franziska Voß,

die jetzigen und ehemaligen Bürokollegen und Arbeitsgruppenmitglieder sowie das Verwaltungs- und Werkstattspersonal des Fachbereichs.