

Elipsometria

Autor: Mauricio Massazumi Oka

Versão 1.1 (janeiro 2000)

Introdução

A elipsometria é um método óptico não destrutivo que permite medir:

- o índice de refração (n) e o coeficiente de extinção (k) de um substrato;
- a espessura (d) e o índice de refração (n) de filmes finos transparentes sobre um substrato altamente absorvente, cujos valores de n e k sejam conhecidos;
- se houver duas camadas de filmes transparentes sobre um substrato com n e k conhecidos, pode-se determinar dois dentre os valores n_s , d_s , n_i e d_i , onde os índices s denota o filme superior e o índice i , o inferior, desde que os outros dois valores sejam conhecidos.

O método consiste em avaliar as mudanças no estado de polarização da luz causada pela reflexão numa superfície. Suponhamos, por exemplo, que a luz incidente tenha polarização plana que possa ser resolvida em duas componentes, uma paralela ao plano de incidência e outra perpendicular a este plano. O plano de incidência é o definido pelos feixes incidente e refletido. O estado de polarização é determinado pela amplitude relativa das amplitudes das componentes paralela (ρ_p) e perpendicular (ρ_s) ao plano de incidência, bem como pela diferença de fase entre as duas fases ($\Delta_p - \Delta_s$).

Vamos considerar o caso de um substrato coberto por um único filme transparente: a relação entre as duas amplitudes relativas ρ_p/ρ_s e a diferença de fase ($\Delta_p - \Delta_s$), sofrem mudanças durante a reflexão que são funções das constantes ópticas do substrato (n_3 e k_3), do ângulo de incidência (θ_1), das constantes ópticas do filme (n_2 e k_2), e da espessura do filme (d). Se as constantes ópticas do substrato são conhecidas e se o filme é não-absorvente (i.e., $k_2 = 0$), então os únicos parâmetros desconhecidos serão o índice de refração (n_2) e a espessura do filme transparente (d). Em princípio, portanto, conhecendo-se o estado de polarização das luzes incidente e refletida, o índice de refração e a espessura do filme transparente podem ser determinados.

Interferência Óptica na Elipsometria

A teoria básica da elipsometria foi desenvolvida por Drude [1] mas não será detalhada aqui e limitar-nos-emos a discutir os resultados de seus estudos.

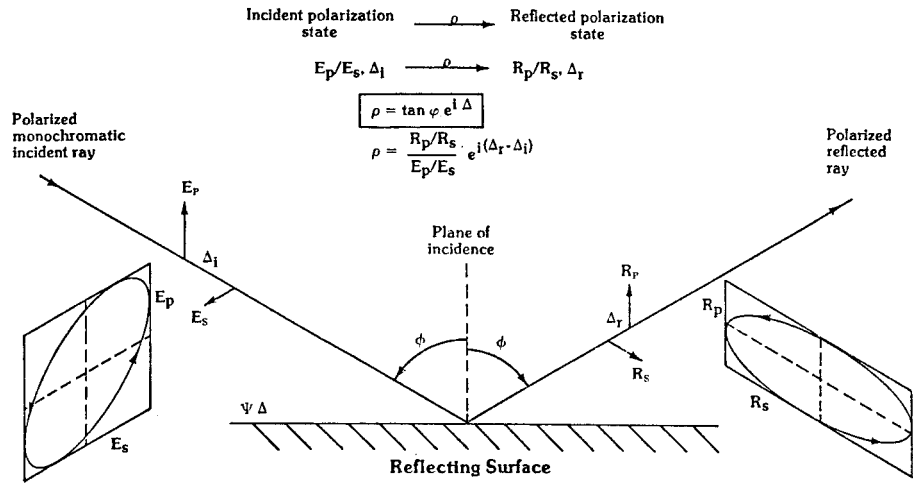


Fig. 1: Reflexão da luz polarizada

Na **Fig. 1** é mostrado esquematicamente a luz incidente com polarização elíptica (\vec{E}) sendo refletida numa superfície, resultando um sinal refletido (\vec{R}). Uma luz polarizada pode ser decomposta em duas componentes, uma paralela ao plano de incidência e outra perpendicular a ele e se houver uma diferença de fase entre as duas, a luz terá uma polarização elíptica. Se a defasagem causada pela reflexão for diferente para as duas componentes, a forma da elipse muda e o método da elipsometria permite determinar parâmetros ópticos da superfície a partir da medida dessa mudança. Tem-se que:

$$\vec{E} = E_p e^{i\omega t} e^{i\alpha_p} \hat{p} + E_s e^{i\omega t} e^{i\alpha_s} \hat{s}$$

$$\vec{R} = R_p e^{i\omega t} e^{i\gamma_p} \hat{p} + R_s e^{i\omega t} e^{i\gamma_s} \hat{s}$$

onde os índices p e s indicam, respectivamente, as componentes paralela e perpendicular ao plano de incidência, i.e., ao plano definido pelos feixes incidente e refletido. ω é a frequência angular e α_v e γ_v são as fases dos sinais incidente e refletido, respectivamente, onde o índice v pode ser p ou s .

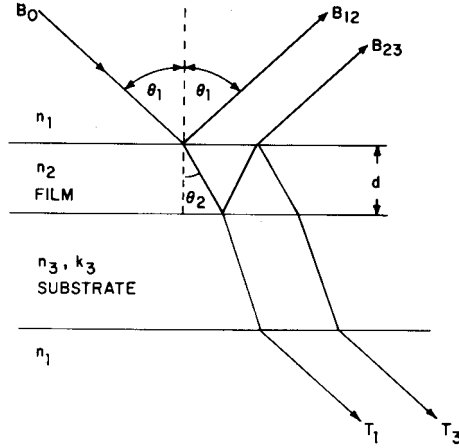


Fig. 2: Esquema indicando os feixes incidente, refletido e transmitido num sistema composto pelo meio de propagação (1), o filme fino transparente (2) e o substrato (3)

Em termos dos parâmetros definidos na **Fig. 2**, a reflexão das componentes paralela (p) e perpendicular (s) podem ser descritas pelos coeficientes de reflexão r_p e r_s dados por:

$$r_p \equiv \frac{R_p e^{i\omega t} e^{i\gamma_p}}{E_p e^{i\omega t} e^{i\alpha_p}} = \frac{R_p}{E_p} e^{i(\gamma_p - \alpha_p)} = \rho_p e^{i\Delta_p} = \frac{r_{12p} + r_{23p} e^{-2i\beta}}{1 + r_{12p} r_{23p} e^{-2i\beta}}$$

$$r_s \equiv \frac{R_s e^{i\omega t} e^{i\gamma_s}}{E_s e^{i\omega t} e^{i\alpha_s}} = \frac{R_s}{E_s} e^{i(\gamma_s - \alpha_s)} = \rho_s e^{i\Delta_s} = \frac{r_{12s} + r_{23s} e^{-2i\beta}}{1 + r_{12s} r_{23s} e^{-2i\beta}}$$

Os valores de r_p e r_s não podem ser medidos isoladamente mas a sua relação pode, pelo método elipsométrico.

$$\frac{r_p}{r_s} = \frac{\rho_p}{\rho_s} e^{i(\Delta_p - \Delta_s)} = (tg\Psi) e^{i\Delta}$$

onde Ψ e Δ são os parâmetros que podem ser obtidos pelo método elipsométrico. Define-se que $0^\circ < \Psi < 90^\circ$ e $0^\circ < \Delta < 360^\circ$. Os coeficientes de reflexão de Fresnel r_{ijv} são dados por:

$$r_{12s} = \frac{n_1 \cos\theta_1 - n_2 \cos\theta_2}{n_1 \cos\theta_1 + n_2 \cos\theta_2}$$

$$r_{12p} = \frac{n_1 \cos \theta_{21} - n_2 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_2 + n_2 \cos \theta_1}$$

$$r_{23s} = \rho_{23s} e^{i\varphi_{23}} = \frac{n_2 \cos \theta_2 - (u_3 - iv_3)}{n_2 \cos \theta_2 + (u_3 - iv_3)}$$

$$r_{23p} = \frac{(n_3 - ik_3)^2 \cos \theta_2 - n_2 (u_3 - iv_3)}{(n_3 - ik_3)^2 \cos \theta_2 + n_2 (u_3 - iv_3)}$$

onde:

$$\rho_{23} = \frac{(n_2 \cos \theta_2 - u_3)^2 + v_3^2}{(n_2 \cos \theta_2 + u_3)^2 + v_3^2}$$

é a refletividade na interface filme-substrato,

$$\operatorname{tg} \phi_{23} = \frac{-2n_2 v_3 \cos \theta_2}{u_3^2 + v_3^2 - n_2^2 \cos^2 \theta_2}$$

onde ϕ_{23} é a mudança de fase na interface filme-substrato. Temos ainda:

$$2u_3^2 = w + (w^2 + 4n_3^2 k_3^2)^{1/2}$$

$$2v_3^2 = -w + (w^2 + 4n_3^2 k_3^2)^{1/2}$$

onde valem:

$$w = n_3^2 - k_3^2 - n_1^2 \operatorname{sen}^2 \theta_1$$

$$\beta = 2\pi d n_2 \frac{\cos \theta_2}{\lambda} = N\pi$$

Logo, a relação básica da elipsometria pode ser dada também por:

$$(\operatorname{tg} \Psi) e^{i\Delta} = \frac{\rho_p}{\rho_s} e^{i(\Delta_p - \Delta_s)} = \frac{r_p}{r_s} = \frac{r_{12p} + r_{23p} e^{-2i\beta}}{1 + r_{12p} r_{23p} e^{-2i\beta}} \frac{1 + r_{12s} r_{23s} e^{-2i\beta}}{r_{12s} + r_{23s} e^{-2i\beta}}$$

Infelizmente Drude não dispunha de computadores para efetuar os cálculos necessários tendo sido obrigado, na época a considerar apenas casos particulares, mas isto é facilmente realizado hoje. Os primeiros cálculos foram realizados por Archer [2]. Dado um substrato particular com os valores n_3 e k_3 conhecidos para um dado comprimento de

onda λ , para cada índice de refração n_2 , Δ e Ψ podem ser determinados em função da espessura d do filme, que por sua vez relaciona-se na equação acima por:

$$d = \frac{(180N + \beta)\lambda}{360(n_2^2 - \text{sen}^2\theta_1)^{1/2}}$$

onde a ordem N é um valor inteiro que depende da espessura do filme. Na **Fig. 3** mostramos um gráfico resultante dos cálculos realizados por Archer supondo um filme transparente com vários índices de refração sobre o silício. No exemplo, considera-se $\lambda = 546,1$ nm, $n_3 = 4,05$, $k_3 = 0,028$ e $\theta_1 = 70^\circ$. Cada curva representa um índice de refração particular para o filme transparente, com as curvas desenhadas para cada incremento no valor de β de 20° . As setas indicam a direção do incremento de β , i.e., do incremento da espessura. Ou seja, uma vez medido os valores de Δ e Ψ pelo elispômetro, do gráfico obtém-se o índice de refração n_2 e β , por onde se calcula a espessura d uma vez conhecido N .

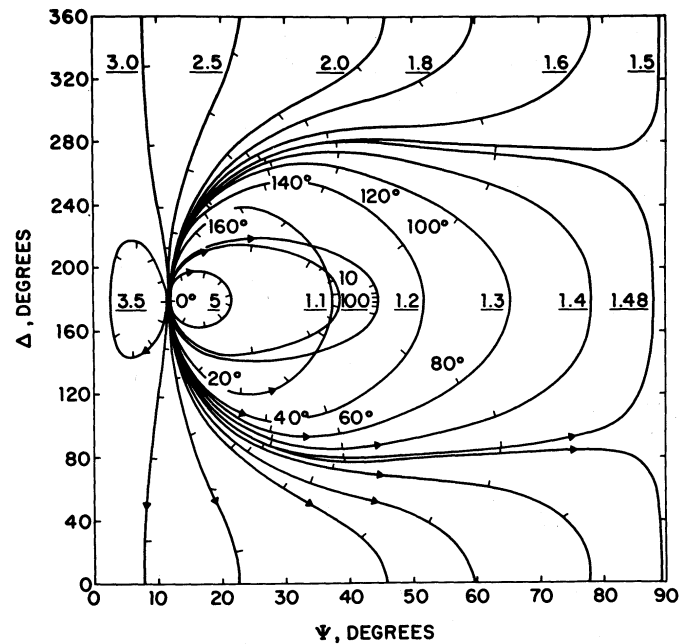


Fig. 3) Variações de Δ e Ψ como função do índice de refração e espessura (em termos de β) de filmes transparentes sobre silício com $n_3 = 4,05$, $k_3 = 0,028$, $\lambda = 546,1$ nm, $\theta_1 = 70^\circ$. Os valores em subscripto são os índices de refração.

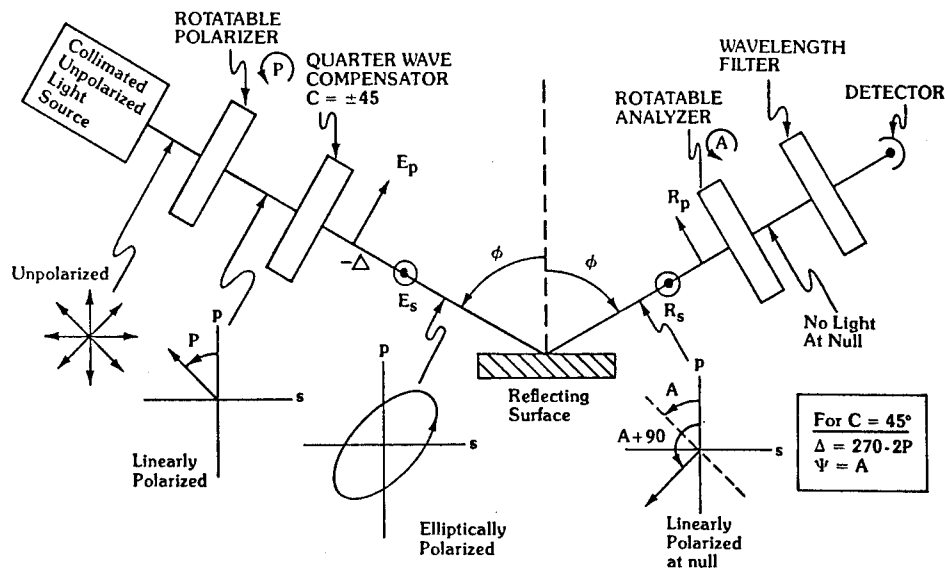


Fig. 4) Representação esquemática de um elipsômetro do tipo anulação.

O esquema típico de um elipsômetro do tipo anulação é mostrado na **Fig. 4**. Uma luz colimada, monocromática é inicialmente polarizada linearmente pelo polarizador. Ela é então polarizada elipticamente pelo compensador. O compensador é um cristal birefringente que possui dois eixos, um rápido e outro lento, de modo a criar uma defasagem entre as componentes de uma onda eletromagnética decomposta nestes dois eixos. Na técnica de elipsometria o compensador é tal que cria um atraso de 90° entre as duas componentes e é também chamado de compensador de um quarto de onda. Embora o compensador possa ser ajustado em qualquer azimuth, por simplicidade costuma-se orientá-lo para que o eixo rápido fique a $\pm 45^\circ$ com relação ao plano de incidência. Após a reflexão na amostra, a luz é transmitida através do segundo polarizador, chamado de analisador. Finalmente a intensidade da luz é determinada por uma fotomultiplicadora. O polarizador e o analisador são ajustados até que se observe a extinção completa da luz na fotomultiplicadora. Sob esta condição sabe-se que a “elipsidade” causada pelo conjunto polarizador e compensador é exatamente a complementar da causada pela reflexão no filme e no substrato. Existem 32 possíveis conjuntos de ajustes do polarizador (P) e analisador (A) que resultem em extinção completa do feixe. Contudo apenas quatro delas são independentes. Pelas leituras de P e A que causa extinção pode-se determinar a diferença de fase (Δ) e relação entre as amplitudes ($tg(\Psi)$).

Tabela I: Relação entre A , P , a_s , a_p e p , onde $\Delta\Psi$

Zona	Compensador	p	a_p	a_s	P	A
I	-45°	P $P-180^\circ$ P $P-180^\circ$	A A $A-180^\circ$ $A-180^\circ$		p $p+180^\circ$ p $p+180^\circ$	a_p a_p a_p+180° a_p+180°
III	-45°	$P-90^\circ$ $P-270^\circ$ $P-90^\circ$ $P-270^\circ$		$180^\circ-A$ $180^\circ-A$ $360^\circ-A$ $360^\circ-A$	$p+90^\circ$ $p+270^\circ$ $p+90^\circ$ $p+270^\circ$	$180^\circ-a_s$ $180^\circ-a_s$ $360^\circ-a_s$ $360^\circ-a_s$
II	$+45^\circ$	$90^\circ-P$ $270^\circ-P$ $90^\circ-P$ $270^\circ-P$		A A $A-180^\circ$ $A-180^\circ$	$90^\circ-p$ $270^\circ-p$ $90^\circ-p$ $270^\circ-p$	a_s a_s a_s+180° a_s+180°
IV	$+45^\circ$	$180^\circ-P$ $360^\circ-P$ $180^\circ-P$ $360^\circ-P$	$180^\circ-A$ $180^\circ-A$ $360^\circ-A$ $360^\circ-A$		$180^\circ-p$ $360^\circ-p$ $180^\circ-p$ $360^\circ-p$	$180^\circ-a_p$ $180^\circ-a_p$ $360^\circ-a_p$ $360^\circ-a_p$

P é o ângulo do polarizador e A , o do analisador. a_p , a_s e p são definidos na tabela. Na tabela acima dezesseis das possíveis combinações, supondo o compensador ajustado em $\pm 45^\circ$ são mostrados, divididos como o usual, em quatro zonas. Um outro conjunto de dezesseis combinações é possível para o compensador ajustado em $\pm 135^\circ$.

Quando o compensador causa um atraso de 90° tem-se:

$$\Delta = 90^\circ + 2p$$

$$\Psi = a_p = a_s$$

Em princípio apenas um valor para cada p e a é necessário, mas na prática os valores calculados de p e a serão ligeiramente diferentes de zona para zona. Em outras palavras, cada uma das zonas são tais que apresentam os mesmos valores de p . Observa-se experimentalmente que tomando a média dos valores das zonas apropriadas o erro é minimizado. Ou seja, toma-se:

$$p(\text{zonaI}) + p(\text{zonaIII}) = 2p$$

$$p(\text{zonaII}) + p(\text{zonaIV}) = 2p$$

No caso dos valores de a , a_p e a_s serão iguais apenas quando o compensador for exatamente de 90° . Pode-se calcular, por exemplo, considerando as relações das zonas I e III por:

$$(tg(a_p)tg(a_s))^{1/2} = tg \frac{a_p + a_s}{2} = tg\Psi$$

$$\Psi = \frac{a_p + a_s}{2} = \frac{180^\circ - A_{III} + A_I}{2}$$

Como existe uma grande número de condições de extinção, conforme listadas na **Tabela I**, existe o problema de se determinar qual o conjunto de relações usar. Vamos ilustrar com um exemplo como podemos proceder para realizar a medida de A e P dentro de certas restrições e ainda descobrir quais são as relações válidas para determinar p e a destas medidas.

Suponhamos que decidimos usar as relações das zonas I e III. Como Ψ deve ser um valor entre 0 e 90° , se a procura da condição de extinção para um valor da zona I for feita com A restrita ao primeiro quadrante ($0^\circ < A < 90^\circ$), isto garantirá que $A = a$ embora haja dois valores possíveis de P (p e $p + \Pi$). Depois procuramos a condição de extinção em $90^\circ < A < 180^\circ$, ou seja, com A restrito ao segundo quadrante. Neste caso, apenas $A = 180^\circ - a$ será encontrado, embora, novamente, existam dois valores possíveis para P ($p + 90^\circ$ e $p + 270^\circ$). Para o par correto:

$$P_I + P_{III} = p + p + 90^\circ \equiv \Delta$$

onde P_I é um dos valores lidos na zona I e P_{III} é um dos dois valores da zona III. Se o par não for corretamente escolhido pode ocorrer:

$$P_I + P_{III} = p + 180^\circ + p + 90^\circ = \Delta + 180^\circ$$

ou

$$P_I + P_{III} = p + p + 270^\circ = \Delta + 180^\circ$$

Para estes dois últimos casos os valores da espessura e índice de refração resultarão em valores absurdos. Portanto, na prática pode-se muito bem determinar o valor de Δ subtraindo 180° dos valores calculados.

Um cuidado que deve ser tomado é que várias espessuras podem resultar num mesmo par (Δ, Ψ) , pois:

$$t_{real} = mt_0 + t_m$$

onde t_m é a espessura medida e t_0 é a espessura de ordem que depende do comprimento de onda e do ângulo de incidência, conforme mostrado na Tabela II. Logo, é necessário conhecer previamente a espessura aproximada do filme para não incorrer em erros de medida.

Tabela II: Espessura de ordem do elipsômetro

Índice de Refração	Espessura de Ordem [nm]
1,4	262,7
1,5	233,2
1,6	210,5
1,7	192,5
1,8	177,6
1,9	165,0
2,0	154,4
2,1	145,1

O Elipsômetro do LSI

No LSI dispomos de um elipsômetro fabricado pela Rudolph Research Corporation, modelo AutoEL IV MS, com possibilidade de usar três comprimentos de onda para efetuar as medidas. A fonte de luz utilizada é uma lâmpada halogênica de tungstênio que gera luz com um espectro amplo seguido de filtros que permitem selecionar um dos seguintes comprimentos de onda: 405, 633 ou 830 nm. Um sistema óptico de colimação permite a obtenção de um feixe com aproximadamente 0.1 mm de diâmetro. Este feixe resulta uma região analisada de 0,1 mm x 0,3 mm. O ângulo de incidência é fixo em 70° . A amostra a ser analisada é presa no estágio, que é móvel em R e θ , por meio de vácuo. O polarizador e o analisador podem ser girados com passos de $0,0416^\circ$.

Neste equipamento, para restringir o número de soluções possíveis, ajusta-se o azimute do compensador em $+45^\circ$ e usa-se as relações das zonas II e IV. As medidas de A são feitas, para a zona II, restrito ao primeiro quadrante e para a zona IV, ao quarto quadrante. Prova-se que as relações válidas para P nas duas zonas são:

$$P_{II} = 90^\circ - p$$

$$P_{IV} = 360^\circ - p$$

ou seja, sabemos que as medidas de A e P ficarão restritas a:

$$\text{Zona II} : -45^\circ \leq P_{II} \leq 135^\circ, 0^\circ \leq A_{II} \leq 90^\circ, \text{Compensador} = 45^\circ$$

$$\text{Zona IV} : -135^\circ \leq P_{IV} \leq 45^\circ, -90^\circ \leq A_{IV} \leq 0^\circ, \text{Compensador} = 45^\circ$$

As equações relacionando Δ e Ψ com P e A tornam-se:

$$\Delta_{II} = 270^\circ - 2P_{II}$$

$$\Psi_{II} = A_{II}$$

$$\Delta_{IV} = 90^\circ - 2P_{IV}$$

$$\Psi_{IV} = -A_{IV}$$

O cálculo da média por zona é feito por:

$$\bar{\Delta} = \frac{\Delta_{II} + \Delta_{IV}}{2} = 180^\circ - (P_{II} + P_{IV})$$

$$\bar{\Psi} = \frac{\Psi_{II} + \Psi_{IV}}{2} = \frac{A_{II} - A_{IV}}{2}$$

Referências

- [1] Born, M. e E. Wolf; "Principle of Optics", 3ª Edição, Pergamon Press, Oxford, 1965.
[2] R. J. Archer; J. Opt. Soc. Am.; 52; p. 970; 1962.

Bibliografia

- 1) "AutoEL MS Manual", Rudolph Reserarch Co.; April 1989
- 2) L. I. Maissel e R. Glang; "Handbook of Thin Film Technology"; McGraw-Hill; New York; 1970.
- 3) P. F. Kane e G. B. Larrabee; "Characterization of Semiconductor Materials"; McGraw Hill; New York; 1970.
- 4) W. R. Runyan; "Semiconductor Measurements and Instrumentation"; McGraw Hill; New York; 1975.