

L'ellipsométrie spectroscopique

L'ellipsométrie est une technique optique d'analyse de surface fondée sur la mesure du changement de l'état de polarisation de la lumière après réflexion sur une surface plane.

Cette technique, dont le principe a été découvert il y a un siècle, connaît un grand essor depuis une vingtaine d'années grâce à l'utilisation de l'informatique et de la commande électronique des moteurs, permettant l'automatisation et l'optimisation des mesures, ainsi que leur exploitation de plus en plus complexe.

La mesure proprement dite, décrite dans cet article, conduit à la détermination de seules grandeurs physiques : dans la pratique, elle doit être précédée d'une étape d'étalonnage de l'appareil utilisé et suivie d'une étape d'analyse des données afin de remonter aux paramètres utiles (en général les indices optiques et les épaisseurs des matériaux).

Principe de la mesure

Considérons une onde plane arrivant sur un échantillon plan. Une partie de l'onde est transmise ou absorbée à travers la surface, une autre partie est réfléchie (figure 1).

Le champ électrique \vec{E}_i de l'onde incidente possède deux composantes : l'une (\vec{E}_{pi}) parallèle au plan d'incidence, l'autre (\vec{E}_{si}) perpendiculaire au plan d'incidence [indices : p pour parallèle, s pour perpendiculaire (de l'allemand *senkrecht*), i pour incident].

La modification du champ électrique après réflexion sur l'échantillon peut être représentée par deux coefficients agissant sur chacune des composantes du champ :

- Le **coefficient de réflexion** de l'échantillon pour une **polarisation parallèle** au plan d'incidence est :

$$r_p = \frac{E_{pr}}{E_{pi}} = |r_p| \exp(j\delta_p)$$

- Le **coefficient de réflexion** de l'échantillon pour une **polarisation perpendiculaire** au plan d'incidence est :

$$r_s = \frac{E_{sr}}{E_{si}} = |r_s| \exp(j\delta_s)$$

Les deux coefficients r_p et r_s sont complexes. Leur module $|r_p|$, $|r_s|$ représente la modification apportée à l'amplitude de la composante du champ, et leur phase, δ_p et δ_s , le retard introduit par la réflexion.

En pratique, la quantité mesurée est le rapport de ces deux coefficients, qui s'exprime sous la forme :

$$\frac{r_p}{r_s} = \tan \Psi \cdot \exp(j\Delta) = \rho$$

Avec $\tan \Psi = \frac{|r_p|}{|r_s|}$ rapport des modules, Δ différence de phase introduite par la réflexion (figure 2).

Pour un échantillon isotrope et massif, l'angle de réfraction Φ_1 est régi par la loi de Snell-Descartes :

$$N_0 \sin \Phi_0 = N_1 \sin \Phi_1$$

Avec :

N_0 indice du milieu 0 (milieu extérieur)

$$N_1 = n_1 + jk_1 l$$

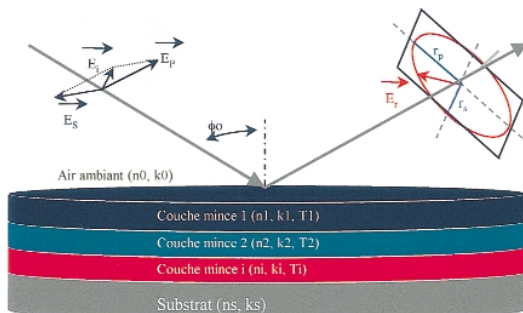
n_1 indice (réel) de réfraction et k_1 coefficient d'extinction du milieu 1,

Φ_0 angle d'incidence

Φ_1 angle de réfraction.

Pratiquement, la mesure de ρ conduit à l'identification de deux quantités (Ψ et Δ , ou $\tan \Psi$ et $\cos \Delta$). Une mesure effectuée à un angle d'incidence et à une longueur d'onde donnés permettra le calcul de deux paramètres de l'échantillon : les indices n et k d'un substrat ou d'une couche d'épaisseur connue, ou l'indice n et l'épaisseur e d'une couche connaissant son coefficient d'extinction k . C'est le type d'exploitation d'un **ellipsomètre à une seule longueur d'onde**.

Pour l'analyse d'un échantillon composé d'une **superposition de couches**, les inconnues seront à chaque fois les indices réel et imaginaire et l'épaisseur de chaque couche, ainsi que les indices du substrat, ce qui conduit, pour N couches, à $3N + 2$ inconnues. Il n'est plus possible d'identifier

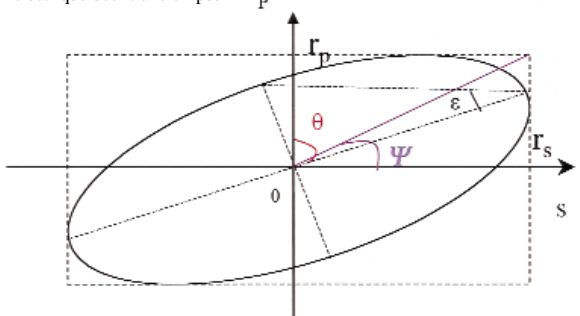


$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \tan(\Psi) \cdot e^{j\Delta} = f(n_i, k_i, T_i)$$

Paramètres mesurés : $\tan \Psi$ et $\cos \Delta$

Figure 1. Principe de l'ellipsométrie spectroscopique

- Après réflexion sur l'échantillon, l'extrémité du vecteur du champ électrique décrit une ellipse



- Cette ellipse est caractérisée par :
 - l'ellipticité $\tan \epsilon$ qui est le rapport du grand axe sur le petit axe
 - l'angle de rotation θ entre l'axe principal et l'axe P

Figure 2. Polarisation elliptique de la lumière réfléchie

toutes les inconnues, sachant que la mesure ne porte que sur deux quantités.

La solution consiste à supposer que l'indice des couches est connu ou résulte d'un mélange de matériaux connus. Les inconnues à déterminer se réduiront donc aux épaisseurs de chaque couche et, éventuellement, aux concentrations des composants d'une couche. Ces grandeurs étant invariantes avec la longueur d'onde, il suffira de faire des mesures pour un nombre suffisamment grand de longueurs d'onde pour identifier toutes les inconnues (figure 3).

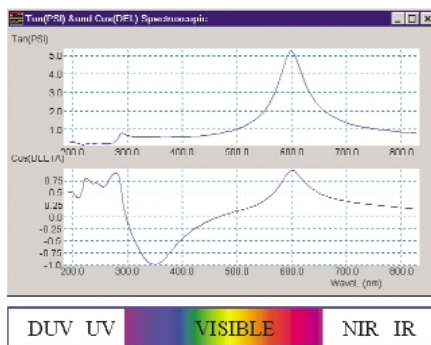


Figure 3. Mesure ellipsométrique

Techniques de mesure

Plusieurs techniques de mesure de polarisation par réflexion existent ; elles utilisent toutes le montage optique suivant : une source, un polariseur, un analyseur, un détecteur. Ce sont les éléments de base auxquels peuvent être ajoutés différents éléments tels que des modulateurs, un compensateur, etc.

Méthode de zéro

Cette méthode utilise l'extinction du signal pour effectuer une mesure angulaire.

Le montage optique est constitué d'une source monochromatique (laser ou lampe filtrée), d'un polariseur, d'un compensateur (par exemple une lame quart d'onde), d'un analyseur et d'un photomultiplicateur.

La polarisation, linéaire après le polariseur, est transformée en polarisation elliptique par le compensateur. Ce dernier est orienté de manière à obtenir une polarisation

linéaire après la réflexion sur l'échantillon ; le compensateur joue alors un rôle symétrique à l'échantillon. L'analyseur est ensuite orienté de manière à être croisé avec la polarisation linéaire ainsi obtenue, ce qui conduit à l'extinction du faisceau.

Les orientations du polariseur, de la lame quart d'onde et de l'analyseur permettent de connaître les paramètres ellipsométriques de l'échantillon :

$$\tan \Psi \exp(j\Delta) = -\tan A \frac{\tan C - \tan(P - C)}{1 + j \tan C \tan(P - C)}$$

avec A , C , P : angles de l'analyseur, du compensateur, du polariseur, repérés par rapport au plan d'incidence.

Pour une position donnée du compensateur (ici une lame quart d'onde), à chaque couple de valeurs (Ψ, Δ) correspondent deux paires d'angles P et A .

Méthode de modulation par élément tournant

Les méthodes de mesure par élément tournant se prêtent bien à l'automatisation de la mesure ainsi qu'à son utilisation sur un large domaine spectral.

Le faisceau peut être modulé en polarisation par la rotation du polariseur, de l'analyseur ou d'un compensateur.

- Un **polariseur tournant** nécessite l'utilisation d'une source dont la polarisation est parfaitement définie. Après l'échantillon, l'analyseur étant fixe, il n'est pas nécessaire d'avoir un détecteur insensible à la polarisation. Cela permet de placer le spectromètre (qui modifie la polarisation du faisceau) entre l'analyseur et le détecteur. Il dispersera et filtrera la lumière parasite présente au niveau de l'échantillon. *Cette technique, relativement facile à mettre en œuvre, nécessite quelques précautions quant à la collimation du faisceau et à l'alignement des composants optiques pour atteindre un bon niveau de précision.*

- L'**analyseur tournant** impose, au contraire, l'emploi d'un détecteur insensible à l'état de polarisation (ou étalonné en fonction de celui-ci). Cela implique de placer le spectromètre entre la source et le polariseur, le détecteur sera donc beaucoup plus sensible à la lumière parasite.

- Les ellipsomètres à **compensateur tournant** permettent de s'affranchir de toutes les contraintes de polarisation au niveau de la source et du détecteur mais nécessitent un étalonnage spectral du compensateur, ce qui est source d'erreurs systématiques sur la mesure.

Méthode à modulation de phase

Le montage optique reprend les mêmes éléments que précédemment (source, polariseur, analyseur, détecteur) et inclut un modulateur auprès du polariseur.

Dans cette configuration, aucune caractéristique particulière n'est requise au niveau de la polarisation pour la source et le détecteur.

L'utilisation d'un modulateur sur un large domaine spectral exige cependant quelques précautions d'utilisation.

Si elle ne nécessite pas un alignement très précis (pas d'éléments en rotation), cette méthode requiert une électronique très performante, capable d'assurer la saisie du signal et son traitement à une fréquence compatible avec la modulation à 50 kHz. Le modulateur devra être calibré en fonction de la longueur d'onde, et la tension d'excitation asservie à celle-ci.

Exploitation des paramètres ellipsométriques

Comme nous l'avons indiqué en introduction, une étape d'analyse et de régression est indissociable de celle de la mesure.

L'exploitation des résultats consiste à analyser les spectres obtenus et à les confronter au modèle de l'échantillon mesuré. À ce stade, l'outil informatique est fortement sollicité (traitement du signal, bases de données d'indices, de matériaux et de modèles, algorithmes de régression, calcul matriciel, gestion de cartographies) pour ajuster les paramètres du modèle théorique et remonter aux valeurs effectives d'épaisseur et d'indices optiques (figure 4).

La mesure ellipsométrique est sensible à l'épaisseur optique (produit de l'indice

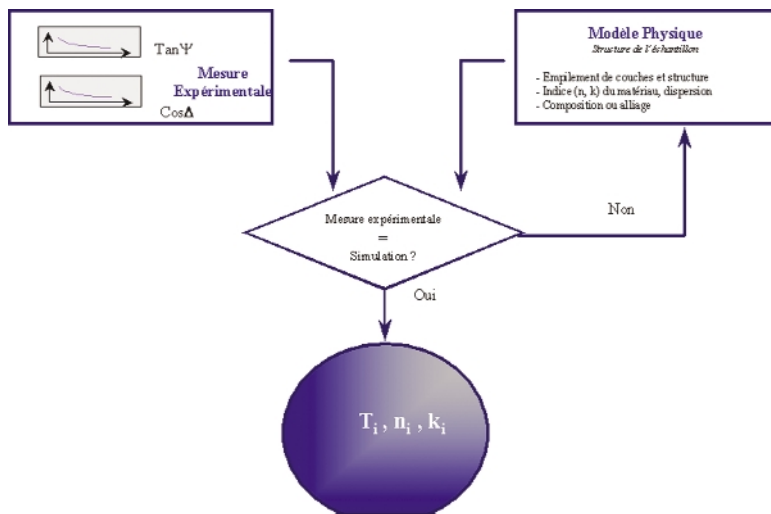


Figure 4. Analyse des résultats

REAL SAMPLE STRUCTURE

optique par l'épaisseur) de l'échantillon étudié. Le traitement du signal permet de distinguer la contribution des différentes couches traversées par le faisceau incident au signal capté en sortie de l'ellipsomètre. Dans le cas d'un échantillon multicouches, on comprend aisément que plus le contraste optique entre les différents matériaux superposés est fort, plus aisée sera l'analyse et donc la détermination des paramètres de chaque couche.

Échantillon massif

Si l'on dispose d'un échantillon massif sans couche d'oxyde et sans rugosité de surface, la quantité mesurée ρ ne dépend que de l'angle d'incidence et de l'indice des matériaux.

Cela permet, sans aucune hypothèse, de calculer l'indice complexe d'un substrat, cas le plus simple à résoudre.

Couche transparente

On se limite ici à une structure comportant une couche transparente sur un substrat opaque.

ρ étant connu par la mesure, on suppose connus les indices du substrat et par itérations successives, on détermine l'indice et l'épaisseur de la couche.

L'avantage de cette méthode réside dans le fait que la recherche de la solution est faite sur un seul paramètre, en l'occurrence l'indice de la couche. La méthode peut être

étendue à l'identification des paramètres d'une couche transparente située au milieu d'une structure multicouche ; les autres couches devront alors être parfaitement connues.

Couche opaque

L'identification de l'indice complexe d'une couche à chaque longueur d'onde n'est possible que si l'épaisseur de la couche est connue (deux quantités mesurées pour une longueur d'onde ne permettent l'identification que de deux inconnues). Dans ce cas, la méthode précédente n'est donc plus applicable. On résout un système de deux équations à deux inconnues par une méthode de Newton bidimensionnelle. On peut alors connaître les indices n_1 et k_1 à chaque longueur d'onde si l'on connaît l'épaisseur de la couche opaque et les indices du substrat.

Multicouches

Dans le cas de plusieurs couches de matériaux, il n'est plus possible de calculer les indices et les épaisseurs de chaque couche à chaque longueur d'onde. On est amené à faire des hypothèses sur la forme de variation des indices. On peut alors calculer $\tan \Psi$ et $\cos \Delta$ en fonction de la longueur d'onde et ajuster les paramètres de la structure (épaisseur et concentration des matériaux) pour retrouver la courbe de mesure.

Simulation

La méthode d'addition des réflexions multiples à l'intérieur d'un milieu limité par

deux faces parallèles devient impraticable pour une structure possédant un nombre de couches quelconque.

On emploie une autre méthode basée sur la continuité des champs à l'interface de deux couches et sur un produit de matrice 2×2 , consistant, à partir des indices des matériaux, à ajuster les épaisseurs de manière à faire coïncider les courbes des paramètres ellipsométriques calculés en fonction de la longueur d'onde (ou de l'énergie) avec les courbes mesurées.

Toutefois, il peut être difficile de connaître les indices des couches composées de mélange de matériaux. On est alors amené à calculer des indices d'un mélange de deux matériaux connus.

Calcul d'indice : mélange, rugosité

Pour une couche formée d'un mélange physique de matériaux (ne réagissant pas chimiquement entre eux), la variation de concentration d'un matériau dans l'autre conduit à faire varier l'indice sur le spectre considéré et ainsi, si le modèle est réaliste, à faire coïncider les courbes calculées avec les courbes mesurées d'un matériau non totalement connu, ceci en faisant varier des paramètres indépendants de la longueur d'onde (épaisseurs, concentrations, angle d'incidence). On peut également simuler un gradient d'indice, et donc de concentration.

La rugosité à une interface peut être traitée comme un mélange d'indice des milieux séparés par l'interface.

Dans tous les cas, pour obtenir une bonne précision, il convient d'utiliser une méthode de calcul permettant l'ajustement automatique des paramètres.

Bernard CASTELLON
SOPRA - Responsable des Ventes
Europe Nord
Tél. : 33 (0)1 46 49 67 00
sales@sopra-sa.com