

MIWAOPTO

エリプソメトリ

薄膜測定の理論と実際

ミワオプト株式会社

MIWAOPTO

1. エリプソメトリの原理

エリプソメトリは、試料に光を照射しその反射率を測定することにより、最終的に薄膜の屈折率、膜厚などの情報を得る手法である。

エリプソメトリ (Ellipsometry) をそのまま訳せば、“楕円 (Ellipse) 測定法 (-metry)”

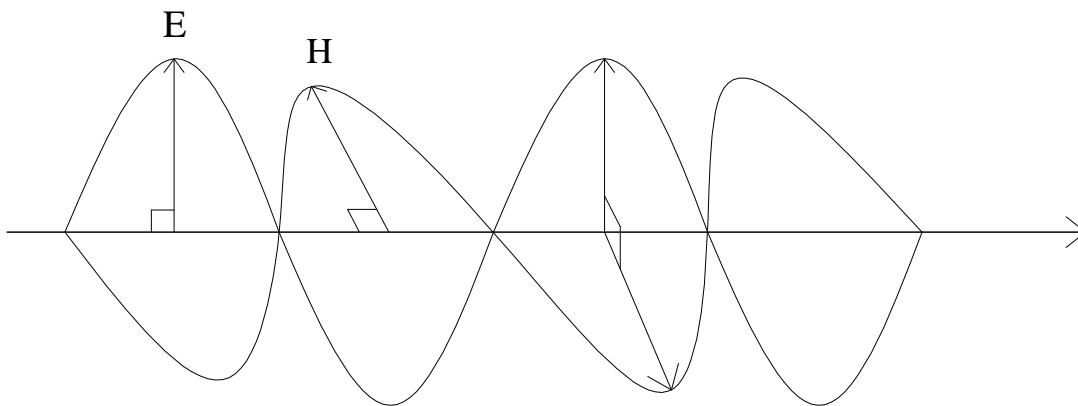
つまり、まず楕円偏波を解析 (具体的には楕円の楕円率と方位角を測定) し、その結果から薄膜表面の情報 (具体的には屈折率、薄膜) を得る技術なのである。

2. 電磁波と波動方程式

(1) 電磁波

電磁波とは、光速で伝搬する振動磁界と振動電界からなる波のことである。

その電界ベクトル \mathbf{E} および磁界ベクトル \mathbf{H} は互いに垂直で伝搬方向にも垂直である。これを図解すると、下図のようになる。



真空中で電磁波が伝搬する速度 c は一定であり、それは光速に等しい。ちなみに、電磁波の周波数を f 、波長を λ とすれば、

$$c = f \cdot \lambda$$

である。電磁波の伝搬速度は同じ媒質の中であれば全て同じであるが、その波長によって以下のような呼び方で分類される。

波長					
1pm	0.1nm	10nm	(3800 nm)	(7800 nm)	1mm
ガンマ線	X線	紫外線	可視光線	赤外線	電波

我々の周りにある光は、X線、電波等と同様にこの電磁波の一種であり、これら電磁波は全て共通の性質を持っている。

MIWAOPTO

(2) マクスウェルの方程式

1864年マクスウェルによって、電磁波は電界と磁界が波として伝搬する現象であることが、理論的に導かれた。

電磁波を支配する基本法則は、マクスウェルの方程式である。すなわち電界ベクトル \mathbf{E} , 磁界ベクトル \mathbf{H} として、電磁波は

$$\text{rot}\mathbf{E} = -i\omega\mu_0\mathbf{H} \qquad \text{rot}\mathbf{H} = i\omega\varepsilon\mathbf{E}$$

rot P.5 * 1 参照

i : 電流密度 ω : 単位体積当たりのエネルギー
 μ_0 : 真空中の透磁率 ε : 誘電率

と表される。つまり、マクスウェルの方程式により、電磁波という現象における電界と磁界との関係が、数学的に明解な形として表されているのである。

(3) 電磁波の速度

マクスウェルの方程式において \mathbf{E} と \mathbf{H} を互いに代入すると、

$$\nabla^2\mathbf{E} - \kappa_0^2\mathbf{E} = 0$$

$$\nabla^2\mathbf{H} - \kappa_0^2\mathbf{H} = 0 \qquad \text{: P.5 * 2 参照}$$

となる。

電磁波の伝搬方向を z として、この方程式を解くと

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon\mu_0} \times \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2}$$
$$\frac{\partial^2 H_x}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon\mu_0} \times \frac{\partial^2 H_x}{\partial z^2}$$

この波動方程式は、 E_y , H_x が z 軸の方向に伝搬する。いいかえれば、ベクトルとして電界と磁界とが互いに垂直であり、伝搬方向も電界・磁界に垂直であることを表わしており、さらにはその伝搬速度 V が、

$$V = 1/\sqrt{\varepsilon\mu_0} \dots\dots\dots$$

であることを示している。つまり、2(1)の図にある電磁波の様子が数学的に表されているのである。以上で光の伝搬速度が誘電率で表せたことになる。

MIWAOPTO

たとえば 式から、真空中での電磁波の伝搬速度（すなわち光の速さ） c は

$$c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0} \quad \epsilon_0 : \text{真空の誘電率}$$

$$c = 1/\sqrt{8.857 \times 10^{-12} \times 1.257 \times 10^{-6}}$$

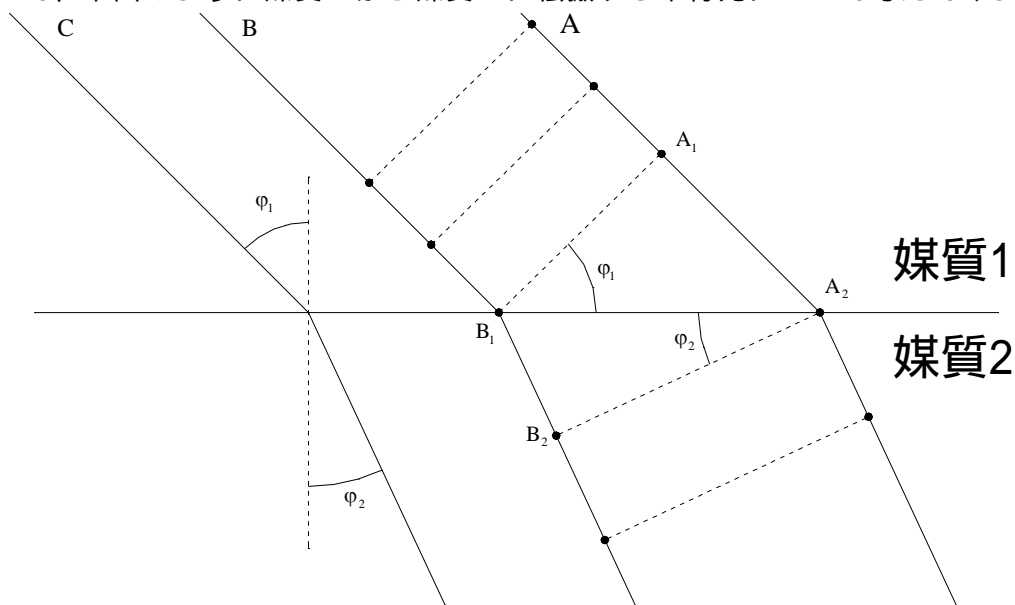
$$= 2.997 \times 10^{10} (\text{cm/sec})$$

となる。

(4) 屈折率と誘電率の関係

ある媒質から他の媒質に光が進む時、屈折することは周知であるがエリプソメトリの原理を説明する上で、この光の屈折が重要な要素となる。この屈折という現象は、実は媒質の誘電率の違いによって起こるのである。

さて、下図のように媒質1から媒質2に伝搬する平行光について考えてみよう。



図中の光路上でひとつの点から次の点までの距離が速度 V で表されているとすれば

Aの光について	$A_1A_2 = V_1$	V_1 : 媒質1での速度
Bの光について	$B_1B_2 = V_2$	V_2 : 媒質2での速度

となる。

光の直進性から、 A_1B_1 および A_2B_2 が光路に垂直であることは明らかである。直角三角形 $B_1A_2A_1$ および $A_2B_1B_2$ それぞれ

$$A_1A_2 = A_2B_1 \sin\phi_1$$

$$B_1B_2 = A_2B_1 \sin\phi_2$$

であるから

MIWAOPTO

$$\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} = \frac{V_1}{V_2} \dots\dots\dots$$

となる。さらに A , B に平行な C の光を示したように、媒質 2 の媒質 1 に対する屈折率 n_{21} は

$$\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} = n_{21} \dots\dots\dots \quad \begin{array}{l} \varphi_1 : \text{入射角} \\ \varphi_2 : \text{屈折角} \end{array}$$

と定義されるから、式より屈折率と誘電率の関係が以下のように表させる。

$$n_{21} = \frac{V_1}{V_2} = \frac{1/\sqrt{\varepsilon_1\mu_0}}{1/\sqrt{\varepsilon_2\mu_0}} = \frac{\sqrt{\varepsilon_2}}{\sqrt{\varepsilon_1}}$$

真空の屈折率を 1 として、真空に対する物質の屈折率を絶対屈折率という。

$$n = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} \quad \begin{array}{l} n : \text{物質の絶対屈折率} \\ \varepsilon : \text{物質の誘電率} \\ \varepsilon_0 : \text{真空の誘電率} \end{array}$$

以上で屈折率と誘電率の関係が表されたことになる。つまり屈折とは 2 つの媒質の誘電率の違いによって起こる現象であることがわかる。

* 1

rot(rotation : 回転)とはベクトル演算子で
任意のベクトル \mathbf{A} の成分を A_x , A_y , A_z とすると

$$\text{rot}\mathbf{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \mathbf{k}$$

* 2

(nabla : ナブラ)とは演算子で

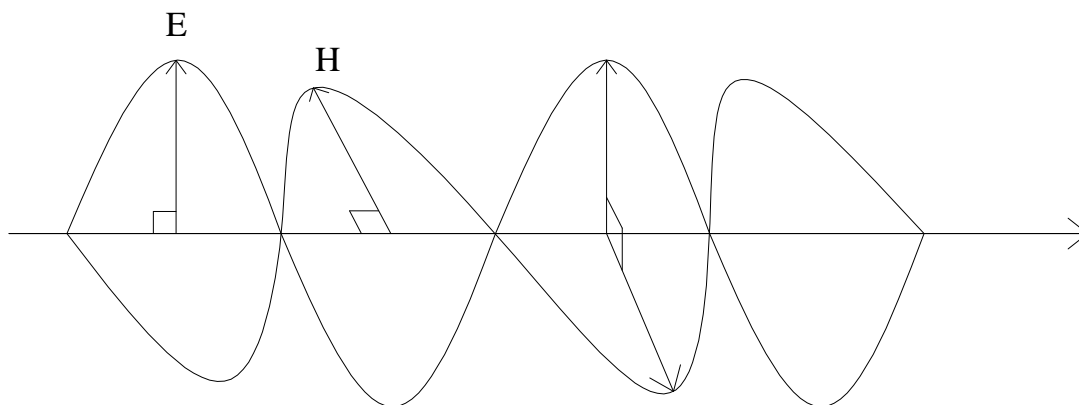
$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

MIWAOPTO

3. 波動

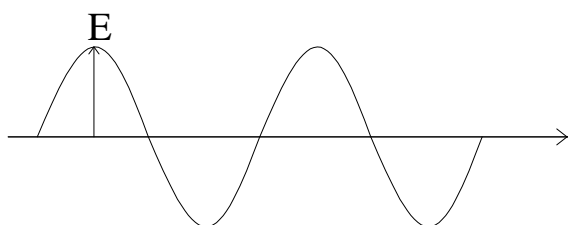
電磁波という波動現象についてもう少し詳しく説明しよう。

マクスウェルの方程式が示すように、電磁波は、電界 \mathbf{E} 、磁界 \mathbf{H} が互いに直交しながら波として伝搬する現象である。



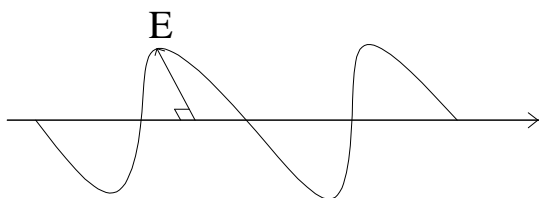
このような状態は、光子ひとつひとつについて成り立っている。通常我々の周りにおける自然光は光子が無秩序に集まった状態のものであるが、レーザー光はその光束全体について振動の位相がそろっているという特徴を有する。

エリプソメータではこのレーザー光の振動面をそろえ、いわゆる偏波（偏光）として測定に利用している。



磁界 \mathbf{H} の振動は、電界 \mathbf{E} の振動と同じ位相でその振幅も電界 \mathbf{E} の振幅から一義的に決まるので、簡単のため以下電界 \mathbf{E} の振動にのみ着目して説明することとする。

まわりに何も無い自由空間では \mathbf{E} の振動面は縦でもまた横でもかまわない。

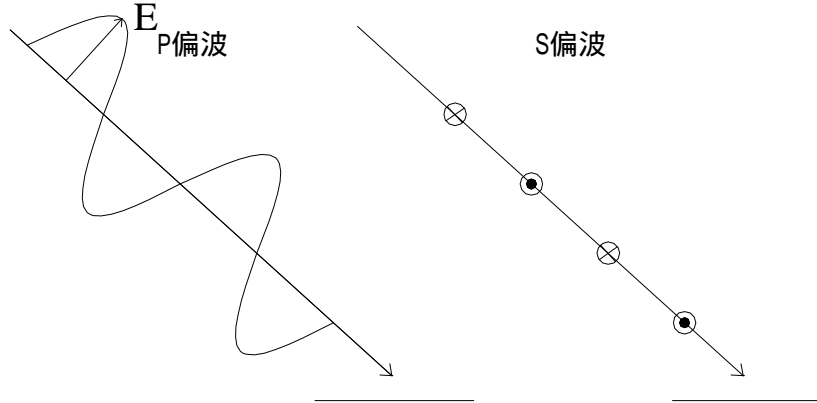


しかし、波が進んで壁に当たると振動面の方向により作用が異なってくる。エリプソメトリでは、この作用の違いを利用して薄膜表面の情報を得ているのである。

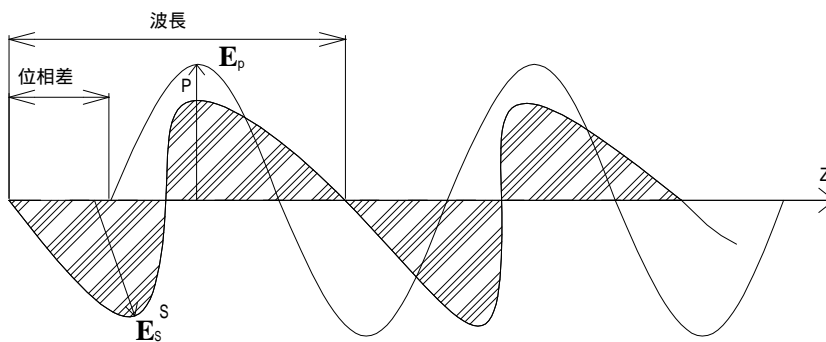
MIWAOPTO

4 . 偏波

入射面内に含まれて電界が振動する成分を P 偏波といい、入射面に垂直に電界が振動する成分を S 偏波という。

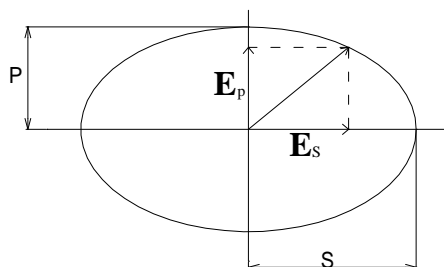


今、仮に下図のように、電界ベクトル（振幅 S） \mathbf{E}_s をもつ S 偏波と、それに対して位相 $\pi/4(90^\circ)$ 遅れた（振幅 P） \mathbf{E}_p をもつ P 偏波から成る偏波を考える。



電界ベクトルの絶対値をそれぞれ E_s, E_p とすると

$$E_s = S \sin 2\pi z / \quad E_p = P \sin (2\pi z / + \pi/4) \\ = P \cos 2\pi z /$$

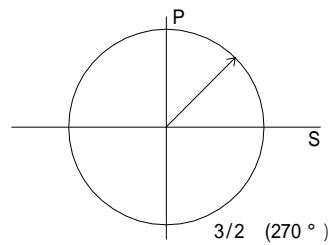
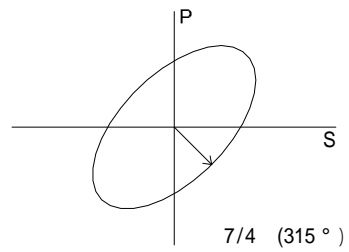
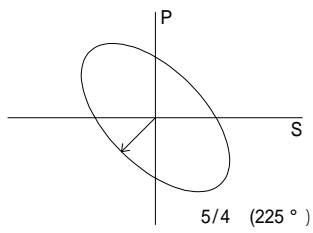
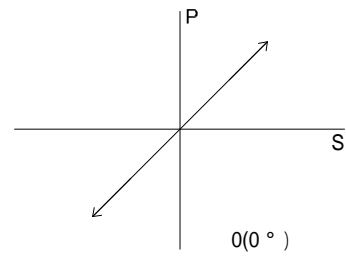
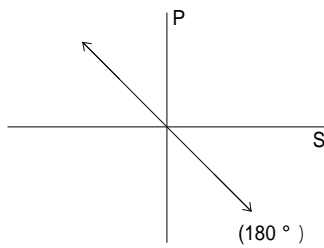
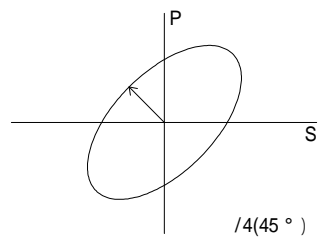
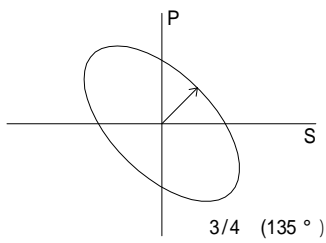
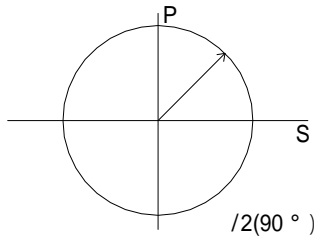


従って、合成電界ベクトル \mathbf{E} は伝搬方向（z 軸）から見ると、波が進むにつれ左図のように楕円上を回転することがわかる。

位相差 Δ によりこの楕円の楕円の形が変わり、またある時は直線になる。

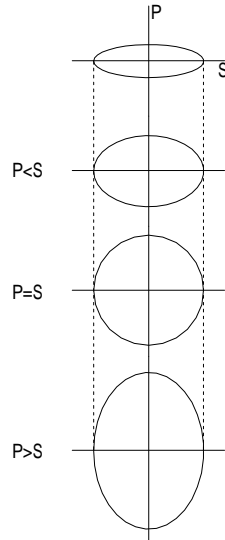
MIWAOPTO

位相差 Δ が変わることによる楕円の形の変化を以下に示す。
(矢印は合成電界ベクトル \mathbf{E} , 数字は位相差 Δ を表す。)

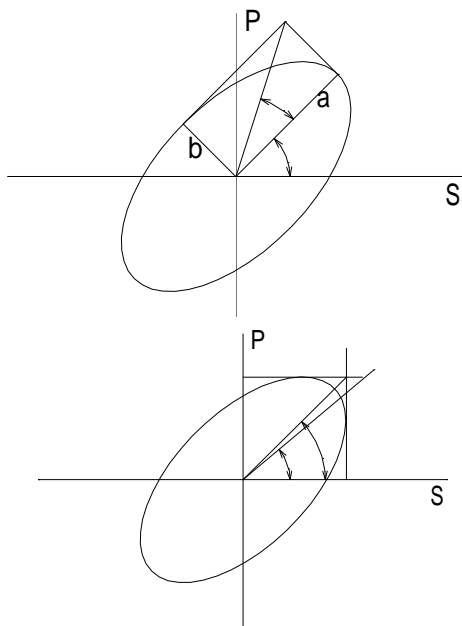


MIWAOPTO

また位相差 Δ が同じでも、P 偏波、S 偏波の振幅によって楕円の形が変わる。
 例えば位相差が $\pi/2(90^\circ)$ の場合、楕円の形は以下のように変わる。



5 . 楕円偏波の表し方



楕円を表すパラメータには、方位角 χ と楕円率 $\tan\rho$ の 2 つがある。

楕円率は
 $\tan\rho=b/a$

で表される。

電界ベクトル振幅の P 成分、S 成分の比から

$$\tan\Psi=P/S$$

とすれば、この Ψ と、P 偏光、S 偏光間の位相差 Δ を使って

$$\tan 2\chi=(\tan 2\Psi)\cos\Delta$$

$$\tan 2\rho=(\sin 2\Psi)\cos\Delta$$

と、楕円を表す χ と ρ が表せる。つまり偏波の振幅が決まれば楕円を表すパラメータがわかり、またその逆も成り立つ。

MIWAOPTO

6 . 波の反射と屈折

波は、均質な媒質の中では直進するが、異なる媒質の境界面では、波の一部が反射し、残りが屈折する。そしてこの現象は全て以下に示す反射の法則と屈折の法則に従う。

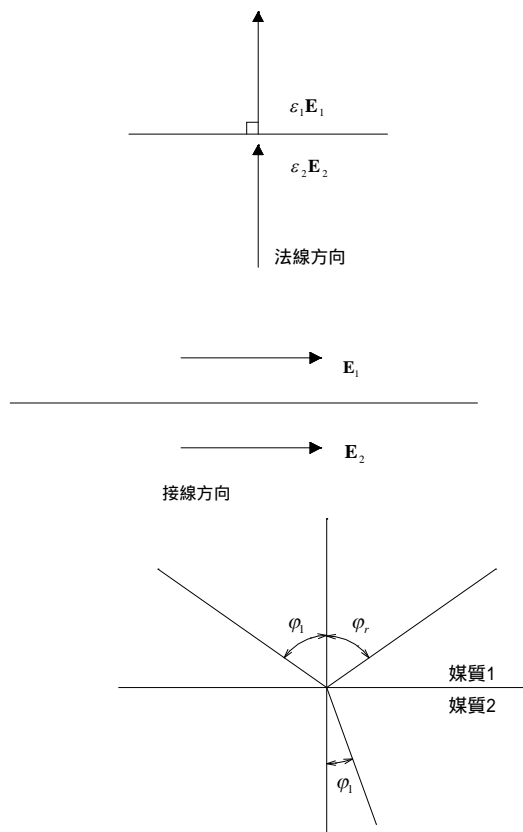
* 反射の法則

反射率は、入射線と境界面の法線を含む（入射面）内にあり、この二つの波線は法線に関して互いに反対側にあり、入射角 φ_i と反射角 φ_r は等しい。

* 屈折の法則

屈折波は、入射面内にあり、入射角 φ_1 と屈折角 φ_2 の各正弦（ \sin ）の比は、入射角によらず一定である。

2（4）で示した屈折の法則は、マクスウェルの方程式から導かれる連続の方程式より求めることができる。



* 連続の法則

二つの媒質の境界面で電界ベクトル \mathbf{E} の境界面に水平な成分と、 $\epsilon\mathbf{E}$ の境界面と垂直な成分 $\epsilon\mathbf{E}$ は、それぞれ連続である。

* スネルの法則

媒質 1、2 の屈折率をそれぞれ n_1, n_2 とすると、 $n_1 < n_2$ のとき光が媒質 1 から 2 へ斜めに入射するとき、この光線は屈折あるいは反射し、次のような関係が成り立つ。

(a) 入射波、屈折波、反射波の進む方向と境界面の法線は全て同一面内にある。

(b) $\varphi_1 = \varphi_r$

(c)
$$\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} = \frac{n_2}{n_1}$$

MIWAOPTO

7 . P 偏波、S 偏波と反射率

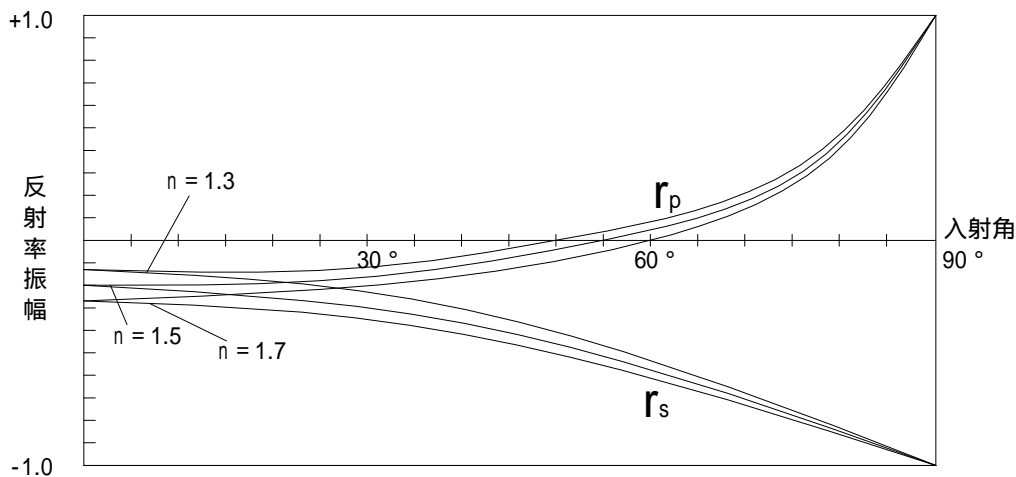
マクスウェルの方程式から導かれる連続の法則により、P 偏波と S 偏波の反射率が求まる。これを計算すると、P 偏波と S 偏波の反射率 r_p , r_s はそれぞれ

$$r_p = \frac{n^2 \cos \varphi - \sqrt{n^2 - (\sin \varphi)^2}}{n^2 \cos \varphi + \sqrt{n^2 - (\sin \varphi)^2}} \quad \varphi : \text{入射角}$$

$$r_s = \frac{\cos \varphi - \sqrt{n^2 - (\sin \varphi)^2}}{\cos \varphi + \sqrt{n^2 - (\sin \varphi)^2}} \quad \begin{array}{l} n : \text{相対屈折率} \\ n = n_2/n_1, n > 1 \end{array}$$

となる。これにより、入射角 φ を決めて r_p , r_s を測れば屈折率 n が決定できる。これがエリプソメータによって屈折率を求める原理である。

入射角 φ を変えていった時の振幅反射率の変化を以下のグラフに示す。



P 偏波の反射率が 0 となる時の入射角 φ をブルースタ角という。

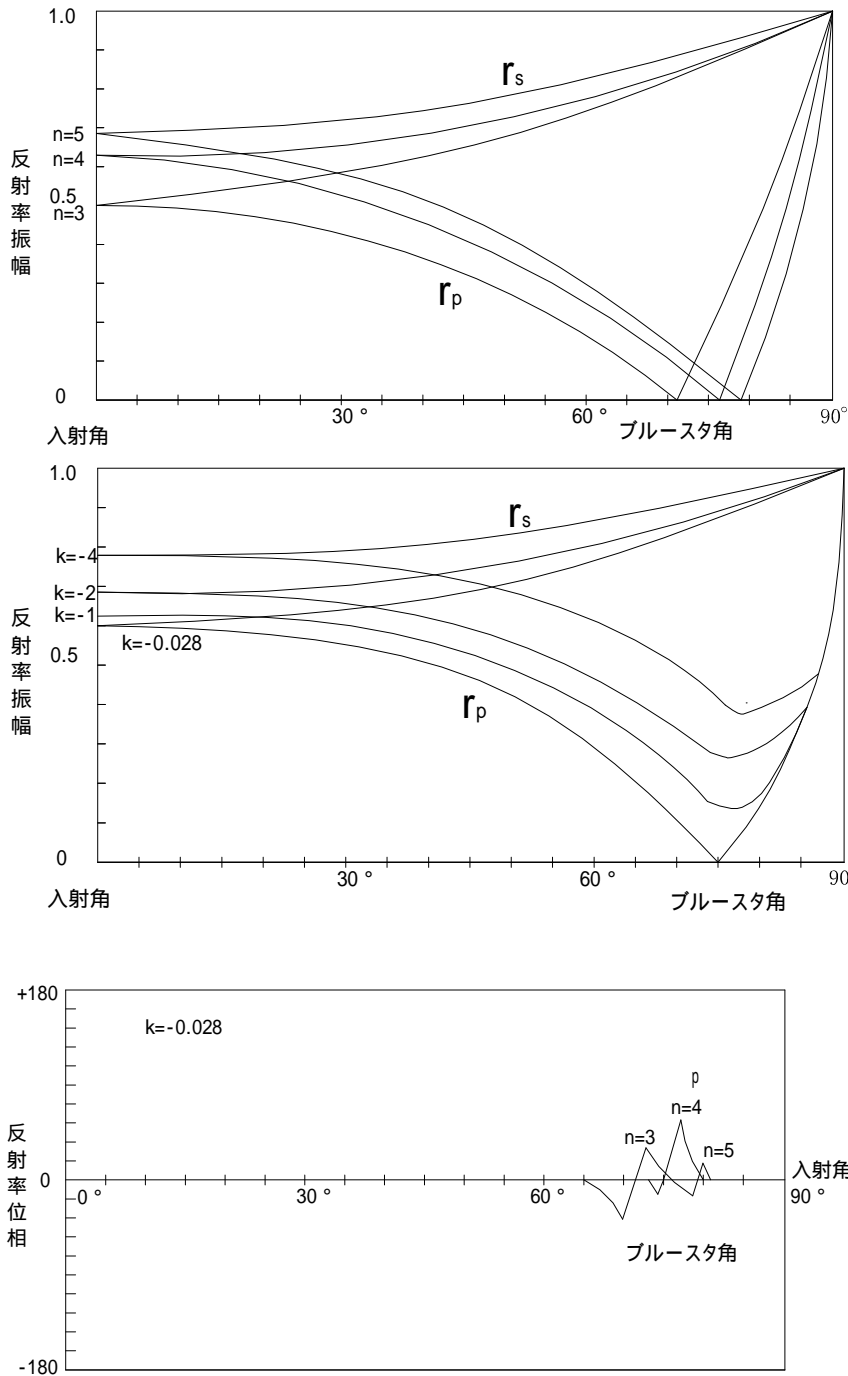
媒質 1 から媒質 2 へ斜めに波が入射するときの入射角、屈折角をそれぞれ φ_1 , φ_2 として $n_2 > n_1$ のときに $\varphi_1 + \varphi_2 = 90^\circ$ となる入射角 φ_1 がブルースタ角 φ_B である。従ってスネルの法則より

$$n = n_2/n_1 = \tan \varphi_B$$

例えば P 偏波の反射率が 0 となった入射角 $\varphi_B = 56.3^\circ$ であった場合、ただちに屈折率が $n = 1.5$ 求められる。

MIWAOPTO

入射角 φ を変えていった時の反射率振幅、反射率位相の変化を以下グラフに示す。



グラフからわかるように、入射角がブルースタ角の近くで反射率振幅 r_p の値が大きく変化しているため、入射角をブルースタ角近くに設定すると高い感度で測定できる。従って、エリプソメータでは、レーザー光の入射角をブルースタ角近くとしてより精度の高い測定ができるように配慮されている。

MIWAOPTO

8 . 媒質に吸収がある場合

以上は測定する試料が透明膜の場合であり、試料が吸収膜である場合用いられる式は少し複雑になるが、本質的には同じである。

正弦波を数学的に表すとき、便宜のため複素数の指数関数を用いることがよくある。これを正弦波の波動に適用した場合、吸収のある媒質では、前述の屈折率が複素数で表される。この複素屈折率を

$$\hat{n} = n + i k$$

とすると、P 偏波、S 偏波 r_p, r_s の反射率も複素数になって

$$\frac{r_p}{r_s} = \tan \psi e^{i\Delta}$$

すなわち、 $\tan \psi$ と Δ が測定できれば入射角 φ をとして以下のように n と k が求まる。

$$n^2 - k^2 = (\sin \varphi) \left[1 + \frac{(\tan \varphi)^2 \{ (\cos 2\psi)^2 - (\sin 2\psi)^2 (\sin \Delta)^2 \}}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2} \right]$$
$$2nk = \frac{(\sin \varphi)^2 (\tan \varphi) (\sin 4\psi) \sin \Delta}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2}$$

ちなみに P 偏波と S 偏波の位相差 Δ が $\pi/2$ (90°) の時は、入射角 φ_p として複素屈折率を求める式は簡単になり、以下のようなになる。

$$n^2 - k^2 = (\sin \varphi_p)^2 \{ 1 + (\tan \varphi_p)^2 \cos 4\psi \}$$
$$2nk = -(\sin \varphi_p)^2 (\tan \varphi_p)^2 (\sin 4\psi)$$

P 偏波、S 偏波の反射率 r_p, r_s は透明な試料の時と同様に以下のようなになる。

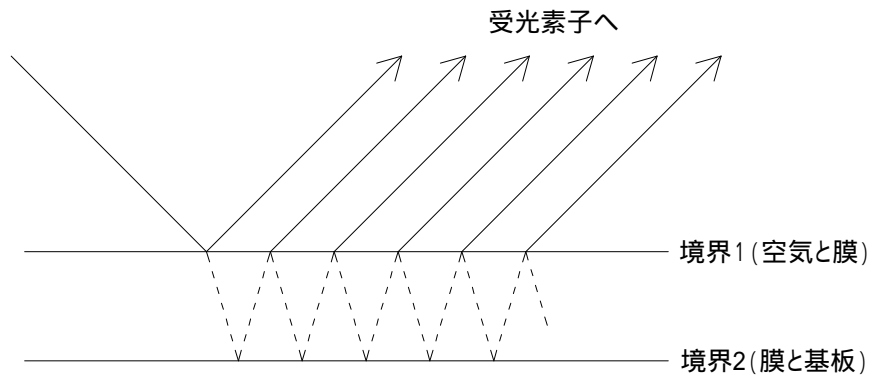
$$r_p = \frac{\hat{n}^2 \cos \varphi - \sqrt{\hat{n}^2 - (\sin \varphi)^2}}{\hat{n}^2 \cos \varphi + \sqrt{\hat{n}^2 - (\sin \varphi)^2}}$$
$$r_s = \frac{\cos \varphi - \sqrt{\hat{n}^2 - (\sin \varphi)^2}}{\cos \varphi + \sqrt{\hat{n}^2 - (\sin \varphi)^2}}$$

MIWAOPTO

9 . 膜厚の測定

複素屈折率が求めれば、多重反射による等価的複素屈折率から膜厚を求めることができる。

多重反射した光が干渉して、受光素子で検出される。



境界 1 , 2 の反射率 r_1 , r_2 をそれぞれとすると

$$r e^{i\Delta} = \frac{r_1 + r_2 e^{-i\delta}}{1 + r_2 r_1 e^{-i\delta}}$$

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \times n_1 (2d) \cos \varphi$$

r : 等価的な反射率

r_1 : 境界 1 の反射率

r_2 : 境界 2 の反射率

d : 膜厚

φ : 入射角

前述のように P 偏波、S 偏波では反射率 r_1 , r_2 が異なる。
そしてその比は次の式で表される。

$$\frac{r_p}{r_s} \times e^{i(\Delta_p - \Delta_s)} = \tan \psi e^{i\Delta}$$

以上の式から Δ と ψ が求まり、これらは試料の膜厚、屈折率によって変化する。すなわち、楕円偏波を測定すると、方位角 ψ と楕円率 ρ から位相差 Δ と振幅反射率 r_p/r_s が求まり、屈折率と膜厚が求められる。

これがエリプソメータによる膜厚および屈折率測定の原理である。

MIWAOPTO

10 . 屈折率、膜厚の求め方

(1) チャート法

Ψ 、 Δ の二つのパラメータから、屈折率、膜厚を求める計算チャートをあらかじめ作成し、それらに対応する点から屈折率及び膜厚を求める。

Ψ - Δ 図表の一例を以下に示す。(* 下図参照)

(2) 計算機法

計算機(コンピュータ等)にデータを入力して屈折率、膜厚を求める。これには次の二つがある。

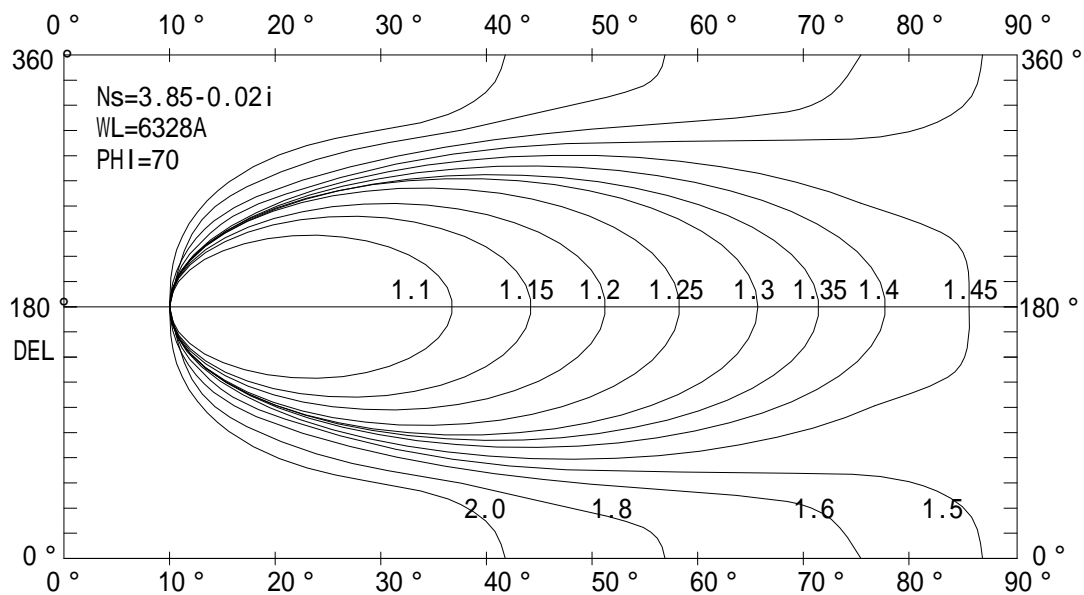
A. オフライン法

オペレータが測定値を入力し、計算する。

B. オンライン法

エリプソメータと計算機を直接接続して計算する。

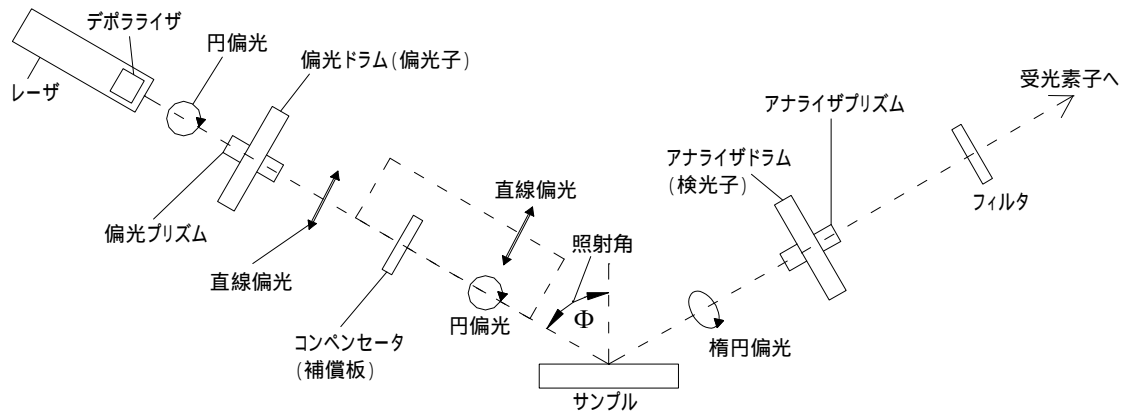
* Ψ - Δ 図表



MIWAOPTO

1.1. エリブソメータの構成

一般的なエリブソメータの構成を以下に示す。



測定法は偏光子、検光子、補償板の三つのうち二つの方位角を変化させて測定する。その測定法の一つに R. J. Archer の方法があり、これは光検出器の出力が最小になるように偏光子、検光子を調整し、これから

$$\Delta = \pi/2 - 2P$$

$$\Psi = A_p = A_s$$

出力が最小になる時の

P : 偏光子の方位角

A : 検光子の方位角

により、 Δ 、 Ψ を求める手法である。

MIWAOPTO

1 2 . 測定法

測定法には下記の種類がある。

(1) ストークス法

光源からの光（直線偏光）を試料に入射させ、試料から反射した光を4つのフォトディテクターによって取り込み、4つのストークス・パラメーターを導くことにより測定する。測定スピードが速く、測定再現性も良いという長所を有する。また、可動部が無いために長期間使用によっても測定性能が損なわれないという長所も持ち合わせている。

(2) 回転検光子法（回転偏光子法）

回転検光子法は光源からの光を固定偏光子により直線偏光とし、直線偏光のまま試料に入射させる。反射した楕円偏光を回転検光子で直線偏光にしながらか360°回転する間の光強度の変化を解析する。

回転偏光子法は光源からの光を回転偏光子により楕円偏光とし、楕円偏光のまま試料に入射させる。反射した楕円偏光を固定検光子で直線偏光として偏光子が360°回転する間の光強度の変化を解析する。

回転検光子法・回転偏光子法を用いて自動的に偏光解析を行う場合、光学素子を少なくできるという利点がある。しかし $= 180^\circ \sim 360^\circ$ が測定できないという欠点もあり、測定値の信頼性が低いものとなる。

ただし、補償板をサンプルの前もしくは後に設置することによりその欠点は解消される。

(3) 回転補償子法

光源からの光を固定偏光子により直線偏光とし、直線偏光のまま試料に入射させる。反射した楕円偏光を回転補償子で右回り・左回りの偏光を区別し、検光子で直線偏光にしながらか360°回転する間の光強度の変化を解析する。

(4) 位相変調法

光源からの光を固定偏光子により直線偏光とし、直線偏光のまま試料に入射させる。反射した楕円偏光を光弾性変調器で数十 kHz の周波数に位相変調し検光子で直線偏光にしながらか光強度の変化を解析する。高速での測定が可能となり、さらには の測定精度がよいという利点を有する。

(5) 消光法

光源から光を回転偏光子により直線偏光とし、補償板で楕円偏光として試料に入射させる。反射した光が直線偏光になるように偏光子を調整しておいて回転検光子でこの直線偏光に対し偏光面が90°となる位置（消光点：検出する光強度が0となる）を検出する。

手動で偏光子、検光子を動かし消光点を取るか、モータなどを用いて自動で行う方法があるが、消光法では自動の場合、光源強度、検出器感度の不安定性の影響が比較的少ないという利点がある。

MIWAOPTO

1 3 . エリプソメータに要求される条件

測定装置として、自動エリプソメータに要求される条件を以下に挙げる

- (1) 光源の出力安定性
- (2) 光源の波長安定性
- (3) 入射角設定精度
- (4) 偏光子、検光子の角度読み取り精度
- (5) 光検出器の S/N 比
- (6) 計算機の計算精度
- (7) 計算機の表示精度

その他、エリプソメータの測定ソフトウェアに要求される条件として、屈折率と膜厚に関してユーザが求める測定精度がある。

1 4 . エリプソメータの特徴

- (1) 非破壊のため製品検査に相当であること
- (2) 精度の高い膜厚測定および屈折率測定ができること
- (3) 計算機との結合により、高速測定ができること
- (4) レーザ、光学系、計算機などが比較的簡単なため、安価で導入できること
- (5) ステージにモータを取り付けることにより、試料の自動分布測定ができること。

1 5 . エリプソメータの応用分野

- (1) 半導体、誘電体の屈折率および膜厚の測定に応用できること
- (2) 半導体、電子部品などの製造、材料研究などの分野に広く応用できること
- (3) その他、医学、宇宙開発などの分野にも応用できること