

快速橢偏單層膜計算模組開發

The Software Module Development of Fast Data Calculation in Ellipsometry for Single Layer Film

謝余松、盧宥任、張益三

Yu-Sung Hsieh, Yu-Jen Lu, Yi-San Chang

橢圓偏光術是一種特殊的薄膜特性量測技術，利用該方法可獲得待測樣品之薄膜厚度、折射率、消光係數與表面粗糙度等重要參數。本文探討將橢偏術應用於單層薄膜之膜厚計算過程所需建立的演算模型、軟體架構及使用者介面設計等項目，經以標準片測試後發現，本文使用的代數解析模型，具有運算時間短、能快速得到膜厚值且能避免多重解之優勢。

Ellipsometry is a special technology of thin film characteristics measurement and can help obtain several key parameters of the sample: film thickness, refractive index, extinction coefficient, surface roughness and so on. In this study, some required items of thin film thickness calculation including math algorithm, software framework and user interface design are discussed here and the results show it'll get high calculation rate of thin film thickness and avoid appearing multiple solutions using algebraic analytic model compared with standard film sample.

一、前言

橢偏儀是一套薄膜特性量測設備，其原理是運用橢圓偏光術（一般簡稱為橢偏術）為基礎之光學量測方法，可得到薄膜厚度、折射率、消光係數與表面粗糙度等重要的結構與材料參數。其厚度精確度達奈米以上的等級，折射率上的精確度達 0.01 以內，是高精度性的量測設備。非破壞性之量測方式，在各個領域中，如物理、化學、材料、照相科學、生物學、光學、半導體、機械、冶金和生物醫學等工程中，都有廣泛的應用。

橢偏儀在量測發展上可分為三種。(1) 歸零式橢圓偏光儀 (null ellipsometry)：是最早發展之橢偏

量測方法，在架構上採用偏光片 (polarizer)、1/4 波長補波片 (quarter wave plate)、待測物 (sample) 及析光片 (analyzer)，以特定光波入射後，將補波片之光軸放在 45° 處，找出最暗的偏光片及析光片之方位角，並測量出振幅 (ψ) 及相位差 (Δ) 之光學參數⁽¹⁻²⁾。此種操作方法構造簡單，操作原理簡易，且不需太多的電子裝置，造價成本低。但其操作不便，且操作時間較長，所以不適合自動化量測。(2) 旋轉元件橢圓偏光儀 (rotating element ellipsometry)：此種橢圓儀與歸零式橢圓儀的差別，在於在整個量測過程中，光學元件 (偏振片或析光片) 以低速連續性旋轉 (約 10–60 Hz)。一般而言，整個系統以旋轉偏振片或旋轉析光片為主，

而偵測器量測到的訊號為時間函數，之後，再經由傅立葉分析獲得橢圓參數 ψ 和 Δ ⁽¹⁻²⁾。優點為較自動化、操作簡單，而且用到光學元件較少，所以較沒有光學元件特性和波長相關的問題，可用作全光譜的量測。缺點為元件旋轉時會使光線有小的橫向位移 (lateral displacement)，容易使得偵測器偵測到光點有抖動現象，容易造成光路上的誤差。(3) 光彈調變式橢圓偏光儀 (phase modulated ellipsometry)：在 PCSA (polarizer-compensator-sample-analyzer) 橢圓偏光儀中，將光彈調變器取代原有之機械轉動元件，藉由其相位的週期變化，從輸入的各種偏極態分析其反射光，即可獲得橢圓偏光參數。一般使用兩個鎖相放大器 (lock-in amplifier)，以達到即時量測之功能。其優點為調制器可以高速運作，且光學元件不需轉動，其缺點為調制器會受溫度的影響⁽¹⁻²⁾。

橢圓偏光儀無法直接測量樣品的物理參數，而是必須藉由一模型來描述樣品的物理性質，以數值分析求得實際上樣品的物理參數，因此數值分析方法亦決定橢圓偏光儀量測的準確性及應用的範圍。在橢圓術計算上，有擬合及代數解析兩種作法，在

進行數值擬合計算時，需要藉助色散模型減少擬合參數⁽³⁾，選用不同色散模型對結果影響有很大之差異，在測量吸收薄膜，特別是厚度小於 100 nm 之吸收薄膜時，由於厚度與光學參數之間有很強之關聯性⁽⁴⁾，會有難以得到唯一解之情況產生。有鑑於此，本文採用代數解析作法，在單層膜之條件下，具有求解快速、避免產生多重解之優勢，此作法缺點為每次僅能計算單一波長之材料參數。

二、快速橢圓單層膜計算模組開發

1. 橢圓量測分析軟體架構

橢圓量測分析軟體架構參見圖 1 所示，由光學擷取訊號讀取、量測模型建立、核心演算式及繪製分析圖表等四大功能模組所架構而成。(1) 在光學訊號擷取模組功能上，主要取得由對應不同波段之振幅 ($\tan\psi$) 及相位差 ($\cos\Delta$) 之光學量測訊號，再進行資料前處理，將擷取到之光學參數訊號 (raw data) 匯入，並轉換成振幅 (ψ) 及相位差 (Δ) 之資訊。(2) 量測模型建立之模組，提供使用者可以建立或選擇所需分析的材料層別之屬性參數設定。

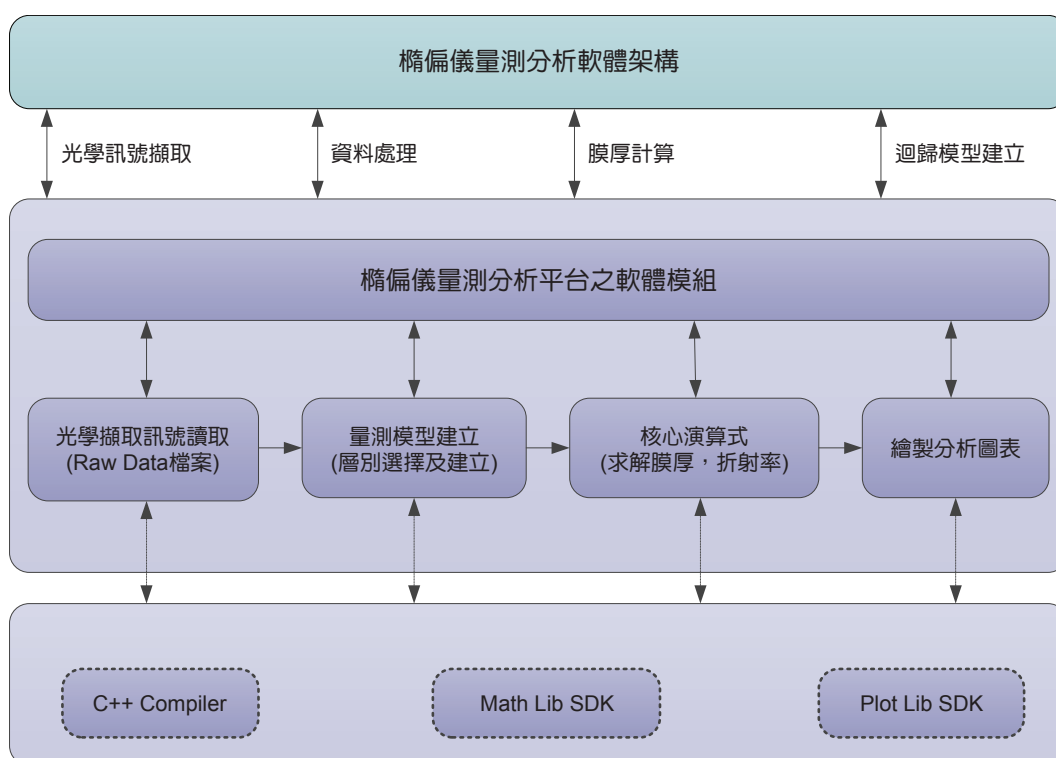


圖 1. 橢圓量分析軟體架構圖。

(3) 核心演算式之模組，為提供計算或評估單層膜或多層膜之膜厚計算之演算法。(4) 繪製分析圖表之模組，為建立不同波長區間之材質模型 (如，折射率 n 、消光係數 k)，並繪製出迴歸相關之分析圖表。相關功能示意圖請參見圖 2 所示。

2. 橢偏術膜厚計算程式之演算法架構

橢偏儀之基本構想基於橢圓偏光術，是藉由分析光極化態的變化來求得其待測物之特定物理性質，通常橢圓偏振多在反射模式下進行。偏振性質改變主要藉由樣品性質來決定。一般情況下，入射光將會控制為線性極化光，而反射光則會受樣品改變為橢圓極化光，這也是該項技術為什麼稱為橢圓偏光術的原因。如圖 3 所示，從光源出來的光一般為非偏極光，因此需藉由偏光片，將光源轉換成線性偏極光，並藉由析光片以分析反射光之極化狀況，最後經由偵測器來量測析光片的光強度，而偵測器量測到的訊號為時間的函數，之後再經由傅立葉轉換 (Fourier transform) 獲得橢圓參數 ψ 和 Δ ，藉由反射光及入射光之振幅及相位改變，以決定表面特性及薄膜的光學常數 (如：複折射率或介電性質) 與厚度。

在橢偏術膜厚計算程式之演算法計算上，會應用到光學之理論定律，在下文中以單層膜樣本作介紹 (參見圖 4)：

(1) 反射及折射定律

當一束光抵達物質表面，即會發生反射 (reflection) 與折射現象 (refraction)，依據司乃爾定律 (Snell's law)，可以定義為：

$$N_1 \sin \phi_1 = N_0 \sin \phi_0 \quad (1)$$

其中， $N_1 = n_1 - ik_1$ ，為複數折射率 (complex index of refraction)， n 通稱為介質折射率 (index of refraction)， k 稱為消光係數 (extinction coefficient)。

(2) 菲涅耳反射

光在薄膜中的行為，實際上是光波在分層介質的各個介面上之菲涅耳係數相互疊加的結果，使用這些係數來處理多層膜非常方便，是反射橢偏測量之理論基礎。如圖 4 所示，考慮光由折射率 N_i 的介質入射到折射率 N_t 的介質，則其 s 波與 p 波菲涅耳反射率如下所示：

$$R_s = \frac{N_i \cos \phi_i - N_t \cos \phi_t}{N_i \cos \phi_i + N_t \cos \phi_t} \quad (2)$$

$$R_p = \frac{N_t \cos \phi_i - N_i \cos \phi_t}{N_t \cos \phi_i + N_i \cos \phi_t} \quad (3)$$

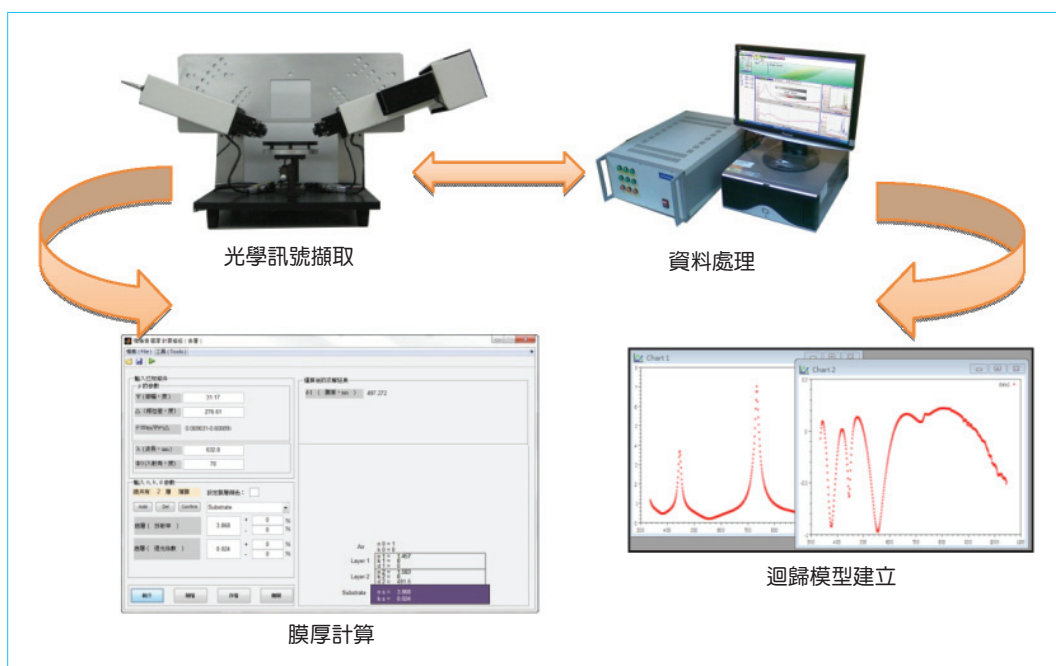


圖 2. 橢偏儀量測流程圖。

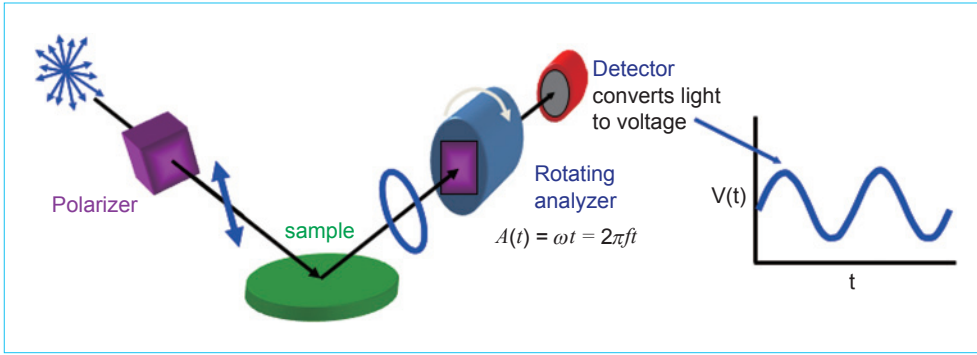


圖 3. 橢偏儀原理示意圖。

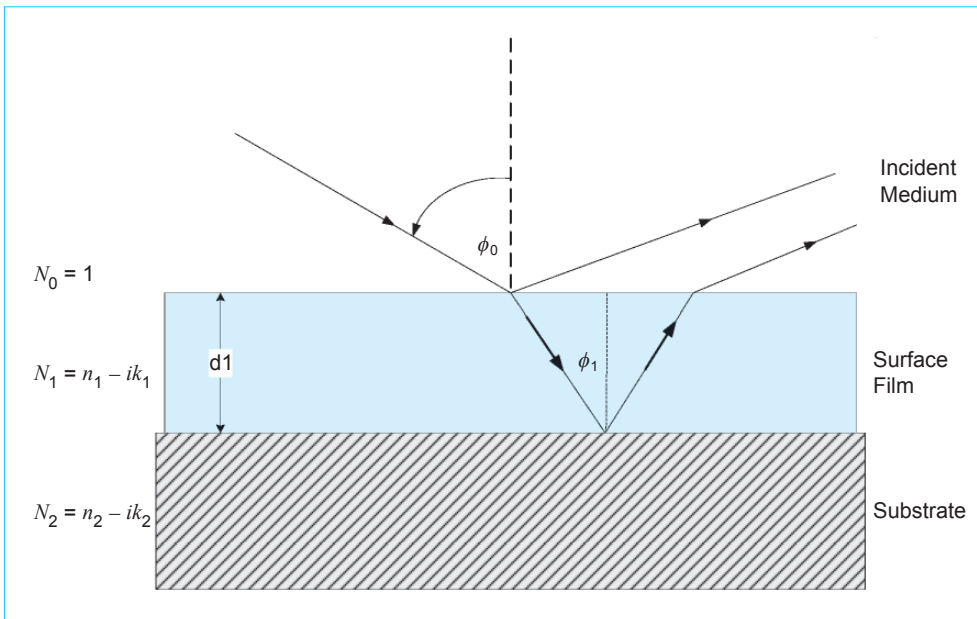


圖 4. 單層膜樣本示意圖。

R_p 和 R_s 分別表示 p 平面和 s 平面上電場分量的複合 Fresnel 反射係數。 R_s 和 R_p 的數學運算式是通過解 Maxwell 方程在相異材料邊界條件下的電磁場而推導得出的，其中， ϕ_i 為入射角， ϕ_t 為折射角。一般而言，材料的布魯斯特角 (Brewster angle) 多落於 $50^\circ - 80^\circ$ 之間，這樣的測量角度對於材料屬性最為靈敏。

(3) 橢圓偏光術

利用光感測器量測到的數值可分析光訊號振幅與相位，將入射光與反射光譜比較，則利用上述之菲涅耳反射得到橢偏參數 (elliptical parameter)：

$$\rho \equiv \tan \psi \cdot e^{i\Delta} = \frac{r_p}{r_s} \quad (3)$$

數學上，偏振態變化量，即橢偏參數，以複數 ρ 表示。實部及虛部則分別以 ψ 和 Δ 來代表振幅和相位上的變化。而推算得到的 ψ 和 Δ ，無法立即對應到樣品光學參數，必須建構光學模型來加以分析。光學模型是藉著層狀結構，再加上已知光學參數與厚度，反推原始光學薄膜真實狀況。

在本文中，關於橢偏光學參數之程式實作是採用光學觀點作設計，參見表 1 所示，在光學與物理學的觀點上，會有正負號差異⁽⁵⁾。而文中橢偏術膜厚計算程式之演算法架構，請參閱圖 5 所示，其中 ψ 、 Δ 、材質複數折射率，從本實驗室橢偏儀器及標準片提供之已知條件，本研究求解橢偏膜厚參數之主要流程步驟說明如下⁽⁶⁻⁷⁾：

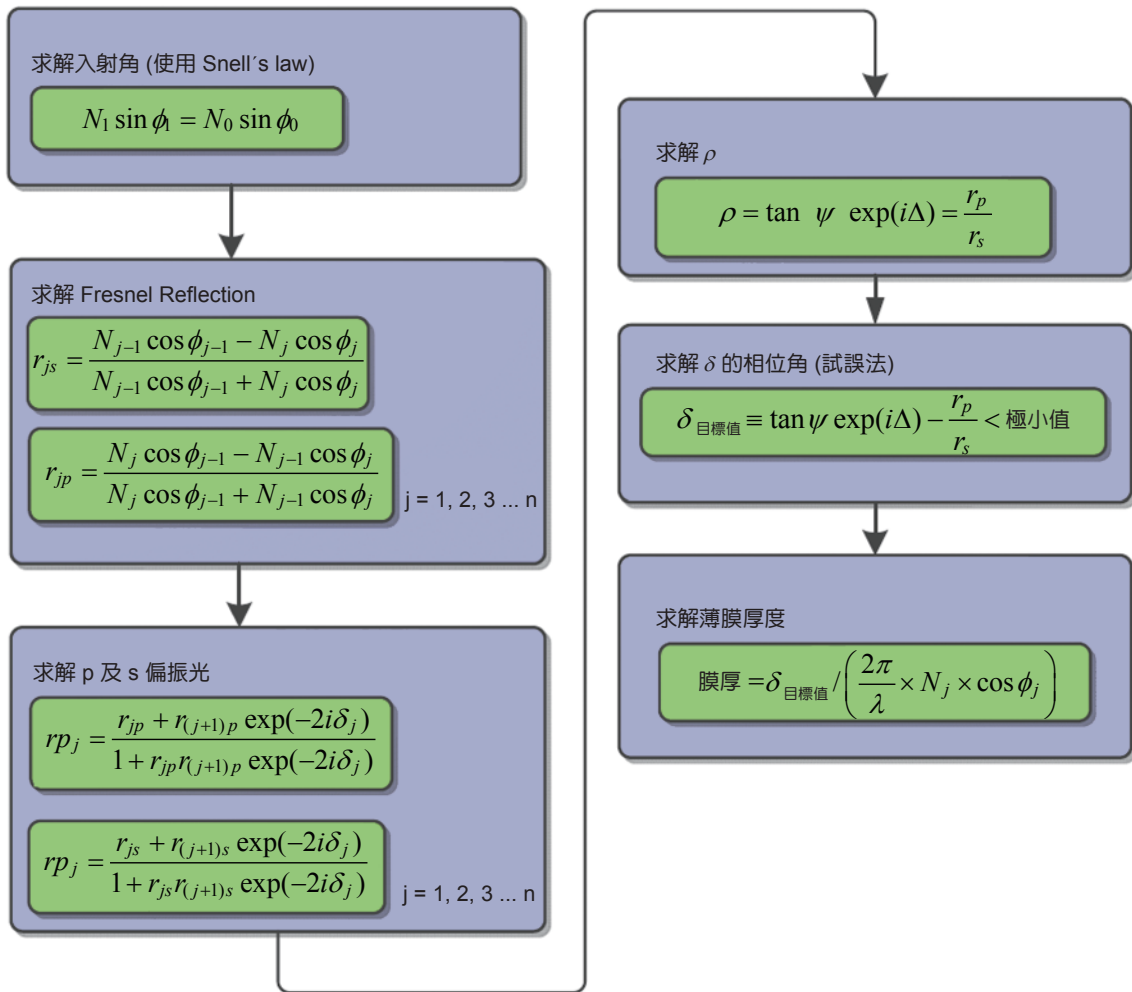


圖 5. 橢偏術膜厚計算程式之演算法架構圖。

[步驟 1]：利用司乃爾定律，求解不同材質之入射角。

$$n_{j+1} \sin \phi_{j+1} = n_j \sin \phi_j$$

其中 ϕ_j 表材質的入射角； n_j 表材質複數折射率； $j = 0, 1, 2 \dots n$

[步驟 2]：求解菲涅耳反射係數

$$r_{js} = \frac{n_{j-1} \cos \phi_{j-1} - n_j \cos \phi_j}{n_{j-1} \cos \phi_{j-1} + n_j \cos \phi_j}$$

$$r_{jp} = \frac{n_j \cos \phi_{j-1} - n_{j-1} \cos \phi_j}{n_j \cos \phi_{j-1} + n_{j-1} \cos \phi_j}$$

$$j = 1, 2, \dots n$$

表 1. 橢偏光學參數在光學與物理學上之比較表。

| 參數 | 光學觀點 | 物理學觀點 |
|------------------|--|--|
| 複數折射率 | $N \equiv n - ik$ | $N \equiv n + ik$ |
| 光干涉 | $r_{012} = \frac{n_{01} + n_{12} \exp(-2i\delta_1)}{1 + n_{01}n_{12} \exp(-2i\delta_1)}$ | $r_{012} = \frac{n_{01} + n_{12} \exp(2i\delta_1)}{1 + n_{01}n_{12} \exp(2i\delta_1)}$ |
| (ψ, Δ) | $\rho \equiv \tan \psi \exp(i\Delta)$ | $\rho \equiv \tan \psi \exp(-i\Delta)$ |

[步驟 3]：求解 p 及 s 偏振光

$$r_{pj} = \frac{r_{jp} + r_{(j+1)p} \exp(-2i\delta_j)}{1 + r_{jp}r_{(j+1)p} \exp(-2i\delta_j)}$$

$$r_{sj} = \frac{r_{js} + r_{(j+1)s} \exp(-2i\delta_j)}{1 + r_{js}r_{(j+1)s} \exp(-2i\delta_j)}$$

$$j = 1, 2, \dots, n$$

[步驟 4]：求解 ρ 橢偏參數

$$\rho \equiv \tan \psi \exp(i\Delta) = \frac{r_p}{r_s}$$

其中 ψ 表振幅， Δ 為相位差。由於 ψ 及 Δ 在式中為已知輸入參數，從 ρ 橢偏參數定義式中 $\tan \psi \exp(i\Delta)$ ，可以得知 r_p/r_s 運算值，從 [步驟 3] 得知 p 及 s 偏振光式中包含 δ 相位角資訊量，而 δ 相位角隱含 d 膜厚之待求資訊。

[步驟 5]：利用試誤法 (trial and error) 找出最小誤差之 δ 相位角。

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j d_j \cos \phi_j$$

其中相位角分布為 $0-2\pi$ (單位：度)；其中 $j = 1, 2 \dots n$

$$\delta_{\text{目標值}} \equiv \tan \psi \exp(i\Delta) - \frac{r_p}{r_s} < \text{極小值}$$

其中極小值為小於 10^{-2} 之評估值。由於 δ 相位角包含 d 膜厚之資訊，且 δ 分布範圍介於 $0-2\pi$ ，故採用試誤法將 $0-2\pi$ 範圍切割為 n 等份 (n 為一個極大值，視計算精準度而定，建議至少要大於 10^3)，帶入 $\delta_{\text{目標值}}$ 式子中作求解，當 r_p/r_s 理論值與 $\tan \psi \exp(i\Delta)$ 實際量測值相減為零時，即找到最佳 $\delta_{\text{目標值}}$ ，但程式浮點運算結果不可能有為零情況，故需設定一個極小值用來收斂 $\delta_{\text{目標值}}$ 。

在程式設計中，為了避免產生多重解之情況，當符合定義極小值 (10^{-2} 之評估值) 之 $\delta_{\text{目標值}}$ ，程式會採用 $(\tan \psi \exp(i\Delta) - r_p/r_s)$ 相減誤差之最小值來當作最終 $\delta_{\text{目標值}}$ 之求解結果。

[步驟 6]：求解薄膜厚度

由膜厚 = $\delta_{\text{目標值}} / (2\pi/\lambda \times N_j \times \cos \phi_j)$ 公式，找出評估之材質膜厚，其中， $j = 1, 2, \dots, n$

3. 橢偏術膜厚之使用者介面程式

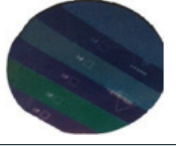
橢偏術膜厚計算之使用者介面 (user interface) 設計請參見圖 6 的使用者案例說明，考慮到要能提供光學參數設定、薄膜材質屬性設定、薄膜圖層結構顯示，以及膜厚計算結果呈現，各項使用者介面設計功能說明如下：

- (1) 設定光學參數之輸入介面：用於輸入橢偏儀量測之光學參數，相關參數包含波長 (λ)、振幅 (ψ)、相位差 (Δ) 及入射角 (ϕ_0) 等輸入設定參數。
- (2) 設定材質屬性之輸入介面：提供使用者輸入材質之折射率 (n)、消光係數 (k) 及膜厚 (d)，此介面可讓使用者以新增、刪除的動作來設定多層膜的材質特性，並提供 n 、 k 值設定公差比之功能。
- (3) 薄膜圖層顯示介面：將輸入材質屬性作視覺化呈現。
- (4) 計算結果呈現區之介面：將計算後之膜厚值作輸出呈現。

4. 橢偏術膜厚計算結果呈現

橢偏術膜厚計算之驗證手法，由自行開發程式計算出之膜厚值，與標準片 (參見表 2) 之膜厚值作比對，經由程式計算出之膜厚值與標準片作驗證後結果 (參見表 3)，其誤差量在 $0.01-0.20$ nm 範圍，在程式運算速度上，測試主機為 OS: Win7 32 位元、CPU 2.2 GHz、RAM 4 GB 之平台，運算時間執行結果皆小於 0.02 秒。

表 2. 標準片資訊。

| | | |
|------|---|---|
| 類型 | Stepwafer SiO ₂ on Si |  |
| 型號 | ID0372 | |
| 膜厚範圍 | ≤ 500 nm | |
| 校準儀器 | Plasmos Ellipometer | |
| 實驗室 | Labor für Mikrosystemtechnik FH-München | |
| 測試者 | Dipl-ing (FH) Michael Kaiser | |

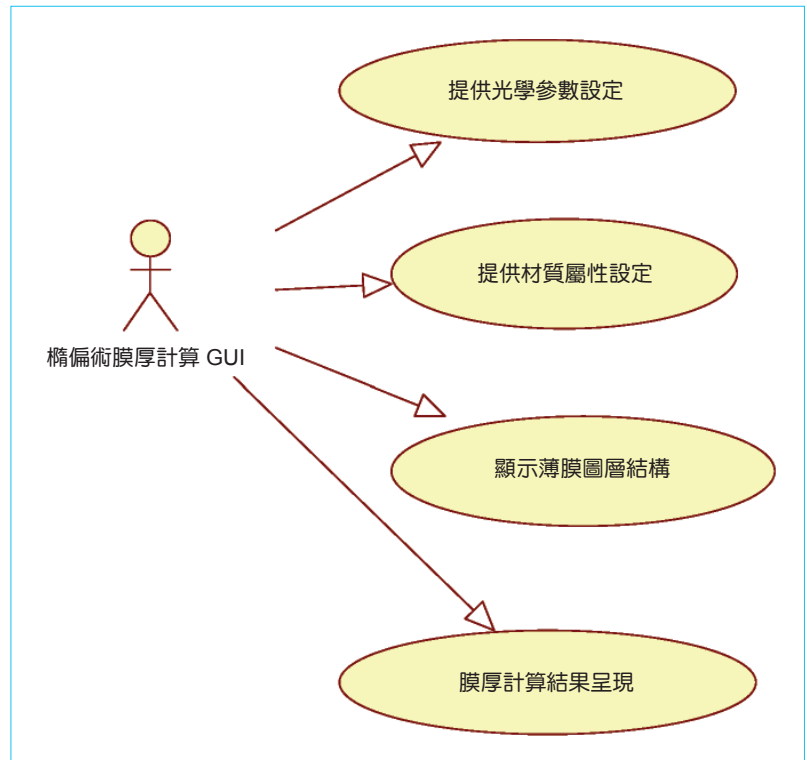


圖 6. 橢圓術膜厚計算之使用者案例。

三、結語

目前本實驗室自行開發之橢圓術模擬軟體，針對單層膜之膜厚計算與標準片之比對結果，已達到極小誤差範圍，採用代數解析作法，具有程式計算快速之優點。對於單層膜比較單純結構，尚可以等比級數的公式加以計算，當考慮多層膜結構計算時，由於各層間皆有交互作用，無法利用級數法來求解，必須利用遞迴計算之方式，以電腦程式計算反射係數及穿透係數。考慮到應用的多樣性，未來程式將朝往多層膜計算應用發展。

參考文獻

1. 趙于飛, 王夢偉, 莊俊逸, 韓建遠, 科儀新知, **33** (2), 59 (2011).
2. 黃毓中, 利用調制式橢圓偏光術於研究光學參數、薄膜厚度與光學性質, 逢甲大學電子工程學系碩士論文 (2002).
3. J. N. Hilfiker, C. L. Bungay, R. A. Synowicksi, T. E. Tiwald, C. M. Herzinger, B. John, G. K. Pribil, and J. Woollam, *Vac. Sci. Technol.*, **21**, 1103 (2003).
4. K. Jarrendahl, *Arwin H Thin Solid Films*, **313**, 114 (1998).
5. H. Fujiwara, *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications*, Chichester, England, Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, **347** (2007).
6. S. S. So, *Surface Science*, **56**, 99 (1976).
7. K. Vedam and S. S. So, *Surface Science*, **29**, 380 (1972).

表 3. 單層膜厚計算結果比較表。

| # | 振幅 (deg.) | 相位差 (deg.) | 膜厚 (nm) | | | 程式運算時間 (sec.) |
|---|-----------|------------|---------|--------|-------|---------------|
| | | | 標準片 | 自行開發 | 誤差值 | |
| 1 | 31.17 | 276.61 | 491.52 | 491.59 | 0.07 | 0.018 |
| 2 | 44.18 | 79.90 | 389.35 | 389.29 | -0.06 | 0.017 |
| 3 | 11.52 | 150.29 | 294.75 | 294.95 | 0.20 | 0.017 |
| 4 | 35.76 | 279.38 | 194.92 | 194.93 | 0.01 | 0.016 |
| 5 | 35.72 | 79.95 | 88.71 | 88.66 | -0.05 | 0.016 |
| 6 | 10.51 | 174.61 | 1.60 | 1.70 | 0.10 | 0.017 |

橢偏術膜厚計算使用者介面

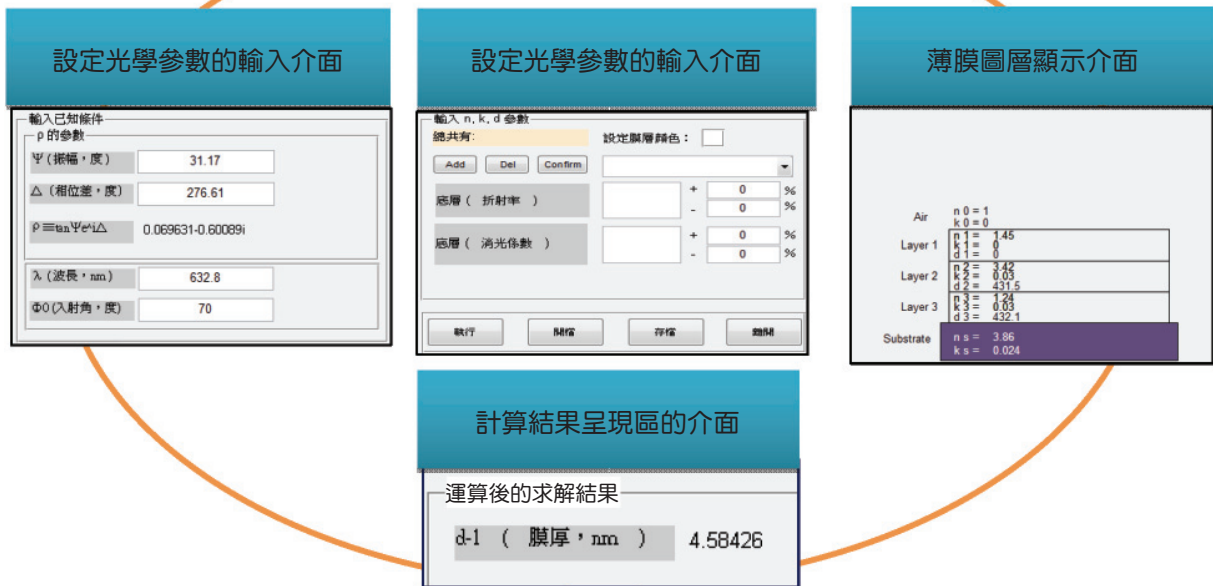
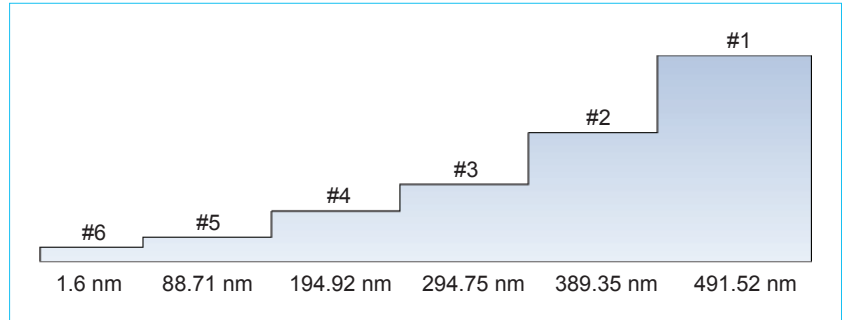


圖 7. 橢偏術膜厚計算之使用者介面設計。



圖 8. 橢偏術程式計算結果。

圖 9.
標準片之膜厚分佈圖。



謝余松先生為元智大學工業工程碩士，現任金屬工業研究發展中心工程師。

Yu-Sung Hsieh received his M.S. in industrial engineering from Yuan Ze University. He is currently an engineer at Metal Industries Research & Development Center.



張益三先生為國立成功大學機械工程博士，現任金屬工業研究發展中心工程師。

Yi-San Chang received his Ph.D. in mechanical engineering from National Cheng Kung University. He is currently an engineer at Metal Industries Research & Development Center.



盧宥任先生為國立中山大學光電碩士，現任金屬工業研究發展中心工程師。

Yu-Jen Lu received his M.S. in photonics from National Sun Yat-sen University. He is currently an engineer at Metal Industries Research & Development Center.