

# Influencia del error en el ángulo de incidencia sobre los resultados elipsométricos

Rolando A. Díaz Delgado, Justo Ravelo Triana y Pablo V. Martínez Mesa,  
Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos,  
Academia de Ciencias de Cuba

## RESUMEN

En el presente trabajo se realizó un estudio detallado de la influencia del error del ángulo de incidencia sobre la determinación del espesor y del índice de refracción complejo en general, en varios tipos de estructuras (capa simple, doble y sustrato sin recubrimiento) y diferentes películas (dióxido, nitruro y poli silicio) sobre silicio, con el fin de evaluar el intervalo de validez de los resultados elipsométricos respecto al error del ángulo de incidencia.

## ABSTRACT

In this paper a detailed study about the influence of errors in the angle of incidence on thickness and refractive index evaluation was performed, considering several structures (single layer, double layer and bare substrate) and various films (dioxide, nitride and polysilicon) over silicon with the aim to evaluate the validity of ellipsometric results as concern to angle of incidence errors.

## 1. INTRODUCCIÓN

La elipsometría es una técnica óptica altamente sensible y no destructiva para la determinación de las propiedades físicas de superficies y

películas delgadas (constantes ópticas, espesor de las películas, etc.) que consiste en la evaluación del cambio del estado de polarización entre la luz que incide y la que se refleja en una muestra dada.

La elipsometría en los últimos años se ha convertido en una herramienta muy poderosa y versátil para el estudio de superficies, especialmente en la industria nitroelectrónica donde hay necesidad de medir capas tan delgadas como de algunas decenas de angstrom (A), lo cual obliga a tener un cuidado especial para disminuir los errores, tanto aleatorios como sistemáticos.

En el trabajo de *Pshenicyn et. al.* (1986) se presenta un análisis del comportamiento del error del índice de refracción y del espesor respecto a la variación del espesor de una capa de óxido de silicio sobre silicio, donde la fuente de error considerada fue el redondeo a un minuto de los valores de los ángulos elipsométricos Delta y Psi, empleados como datos de entrada del programa para la tarea inversa de la elipsometría. Este análisis resulta limitado en el sentido de que sólo se estudió una estructura y no se consideró el error en el ángulo de incidencia.

Una fuente importante de error en la elipsometría lo constituye el establecimiento y medición del ángulo de incidencia del haz de luz sobre la muestra y la alineación de ésta y del eje óptico del equipo (*Shewohun*, 1970), (*Hauge*, 1973).

En el presente trabajo se realizó un estudio detallado de la influencia del error del ángulo de incidencia sobre la determinación del espesor y del índice de refracción complejo en general, en varios tipos de estructuras y diferentes películas y substratos, con el fin de evaluar el intervalo de validez de los resultados elipsométricos respecto al error del ángulo de incidencia.

## 2. DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO

En este trabajo se utilizó el llamado experimento por computadora, que consiste en modelar mediante programas de simulación el proceso de elaboración de datos y se realiza introduciendo a los datos de entrada diferentes valores de error, estudiando posteriormente su influencia en los resultados de salida.

Se empleó un programa generador de datos (*Ravelo*, en prensa), que mediante un algoritmo adecuado al modelo que describe el sistema físico de la estructura de películas y substrato que se desea estudiar, tarea directa de la elipsometría, produce los valores de los ángulos elipsométricos Psi y Delta. Estos se obtienen para el ángulo de incidencia verdadero y para varios más sujetos a cierto error. Los resultados de los ángulos elipsométricos con y sin error se emplean como datos de entrada de los programas de cálculo que determinan las constantes ópticas del sistema físico dado, tarea inversa de la elipsometría.

Los casos estudiados, para los cuales los autores desarrollaron el algoritmo y los programas de cálculo (*Ravelo*, en prensa), son los siguientes:

- a) determinación del índice de refracción (N) y el coeficiente de absorción (Ka) de un sustrato,
- b) determinación del índice de refracción (N) y el espesor (D) de una capa transparente sobre sustrato absorbente conociendo el índice de refracción complejo (Nc) de este último y los valores esperados de N y D de la capa en cuestión,
- c) determinación unívoca del espesor de una capa transparente sobre sustrato absorbente empleando dos mediciones y conociendo el Nc del sustrato y el N de la capa dada,
- d) determinación de los valores de D de dos capas transparentes sobre sustrato absorbente conociendo el valor esperado de los D, los N de las capas y el Nc del sustrato.
- e) determinación de D de una capa absorbente con una medición conociendo el D esperado y el Nc de la capa y del sustrato.

El ángulo de incidencia considerado es de  $70^\circ$  cuando la medición es simple e incluye el de  $60^\circ$  cuando la medición es doble.

### 3. DISCUSIÓN Y ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

Los resultados se analizan en lo sucesivo separadamente según el caso específico dado. Se presentan en forma de gráficos que muestran en la ordenada el error relativo en por ciento del índice de refracción y el espesor (evaluado como la razón del valor calculado para el ángulo de incidencia con error, sobre el valor calculado para el ángulo de incidencia sin error) respecto del espesor de la capa dada. En el caso del sustrato limpio, sin capa ninguna, no se presentan gráficos pues los resultados indican un error muy pequeño y de variación muy lenta en toda la región analizada. Los intervalos estudiados para el espesor y el índice de refracción complejo son los que más comúnmente aparecen en la industria microelectrónica.

### 4. CASO: SUBSTRATO

Se realizó el estudio de la influencia del error del ángulo de incidencia en el intervalo de  $\pm 0.02^\circ$  sobre la determinación del N y el Ka de un sustrato limpio, sobre el cual no existe ninguna capa, para los casos siguientes:

- a)  $N > K_a$
- b)  $N < K_a$
- c)  $K_a = 0$  (sustrato transparente)

En el caso a) se estudió el intervalo para N de 3.85 a 3.91 y para Ka de 0.02 a 0.04, obteniéndose un error de  $\pm 0.13\%$  para N y  $\pm 0.00\%$  para Ka, también se analizó el intervalo de 5 a 6 para N y de 0.4 a 1.20 para Ka, obteniéndose un error de  $\pm 0.13\%$  para N y  $\pm 0.25\%$  para Ka. En el caso b) se estudió el intervalo para N de 0.2 a 0.7 y para Ka de 2.2 a 2.6, obteniéndose un error de  $\pm 0.20\%$  para N y  $\pm 0.15\%$  para Ka. En el caso c), se analizó el intervalo de 1.3 a 1.8 para N y se obtuvo un error de  $\pm 0.08\%$ .

De modo general, para todos los casos estudiados el error en la determinación de N fue menor o igual que  $\pm 0.20\%$  y de Ka fue menor o igual que  $\pm 0.25\%$  para un error en el ángulo de incidencia de  $\pm 0.02^\circ$ .

## 5. CASO: CAPA TRANSPARENTE

Se estudió la influencia del error en el ángulo de incidencia con valores de  $\pm 0.01^\circ$ ,  $\pm 0.02^\circ$  y  $\pm 0.05^\circ$  sobre la determinación de N y D en estructuras de una y dos capas transparentes sobre substrato absorbente, comúnmente usados en la industria microelectrónica como las capas de dióxido de silicio y nitruro de silicio sobre silicio.

### 5.1. UNA CAPA TRANSPARENTE SOBRE SUBSTRATO ABSORBENTE

Este caso se estudió acorde con el inciso b) del aspecto 2, para el primer período de variación de espesor y para un error en el ángulo de incidencia de  $\pm 0.01^\circ$  y de  $\pm 0.02^\circ$ . En la Figura 1 se presentan los resultados para el  $\text{SiO}_2$  y los del  $\text{Si}_3\text{N}_4$  no se presentan por ser muy similares. En ambos casos, los errores aumentan sustancialmente en las zonas próximas a los extremos del período, siendo el  $\text{SiO}_2$  más sensible al error en el ángulo de incidencia que el  $\text{Si}_3\text{N}_4$ .

A partir de los resultados obtenidos en este caso, se puede concluir que no es posible determinar espesores por debajo de los 100 Å si el error en el ángulo de incidencia es de  $\pm 0.02^\circ$ , si este llega a ser menor que  $\pm 0.01^\circ$  entonces se pueden evaluar espesores hasta de 60 Å con errores aún tolerables.

### 5.2. UNA CAPA TRANSPARENTE SOBRE SUBSTRATO ABSORBENTE CON 2 MEDICIONES

También se estudió el caso correspondiente al inciso c) del aspecto 2, en el cual se obtiene la determinación unívoca del espesor y se elimina el efecto de la periodicidad de la solución. Para el  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  se presentan los resultados (Figura 2) en el intervalo de 0 a 6000 Å con un error de  $\pm 0.02^\circ$ , donde se observa que el error máximo en la evaluación del espesor es pequeño y éste no varía periódicamente con el espesor de la capa. También se muestran los resultados para errores de  $\pm 0.05^\circ$  y se evidencia que aún con este error en el ángulo de incidencia se pueden determinar espesores tan pequeños como unidades de angstrom con un error menor que el 5 %.

### 5.3. DOS CAPAS TRANSPARENTES SOBRE SUBSTRATO ABSORBENTE

Este estudio se realizó en correspondencia con el inciso d) del aspecto 2 y se consideró una estructura constituida por una capa exterior (segunda) de  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , una interior (primera) de  $\text{SiO}_2$  y el substrato Si. Se obtuvieron resultados del comportamiento del error en la determinación del espesor de ambas capas variando el espesor de la primera.

En la Figura 3 se muestran estos resultados para el intervalo de espesor de la primera capa de 0-4500 Å y cuatro espesores de la segunda capa, con un error del ángulo de incidencia de  $\pm 0,02^\circ$ . Aquí se evidencia que el error en la determinación del espesor de la capa exterior es generalmente superior que el de la capa interior. Se estudió con más detalle el intervalo de 100 a 800 Å en la capa interior para errores del ángulo de incidencia de  $\pm 0,01^\circ$  y  $\pm 0,02^\circ$  y se observó una disminución del error de ambas capas con el aumento del espesor de la capa exterior, mientras que para espesores superiores a 100 Å con  $\pm 0,01^\circ$  se obtienen errores menores que el 4 % y con  $\pm 0,02^\circ$  superan el 5 % pero son menores que el 10 %.

Los resultados obtenidos indican que se puede realizar la determinación del espesor de ambas capas con un error tolerable (menor que el 5 %) aún con  $\pm 0,02^\circ$  de error en el ángulo de incidencia para espesores superiores a 200 Å, para espesores menores es necesario asegurar  $\pm 0,01^\circ$  o menos.

### 6. CASO: CAPA ABSORBENTE SOBRE SUBSTRATO ABSORBENTE

Este estudio se corresponde con el inciso e) del aspecto 2 y se realizó para el polisilicio sobre silicio. En la Figura 4 se muestran los resultados para  $\pm 0,02^\circ$  en el intervalo de 300 a 3000 Å.

Para  $\pm 0,05^\circ$  el cuadro de resultados es similar aunque los errores son dos veces peores. También se muestran los resultados para  $\pm 0,01^\circ$  en el intervalo de 100 a 1000 Å, observándose que los errores para espesores superiores a 300 Å son inferiores al 1 % y para espesores entre 100 y 300 son inferiores al 6 %.

Los resultados obtenidos indican que para determinar espesores de polisilicio menores que 100 Å con errores aceptables es necesario incrementar la precisión en el establecimiento del ángulo de incidencia de modo que su error sea mucho menor que  $\pm 0,01^\circ$ .

### CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos respecto a los errores en la evaluación del espesor D y el índice de refracción complejo  $N_c$  de las capas delgadas consideradas, por causa de la existencia de un determinado error en el ángulo de incidencia del haz de luz que ilumina la muestra, están íntimamente vinculados y dependen en primera instancia de la solución encontrada para la tarea inversa de la elipsometría en cada uno de los sistemas físicos que se presentan.

Cuando es posible obtener una solución analítica como en el caso del substrato sin capa superficial, entonces se pueden lograr resultados con pequeños errores de las magnitudes de interés aún con errores relativamente altos del ángulo de incidencia. Lo mismo ocurre en el caso de una capa transparente con 2 mediciones, que presentó un elevado nivel de precisión en los resultados de la búsqueda de la solución hasta el punto de que se pueden determinar espesores tan pequeños como unidades de angstrom con errores menores que el 5 % tolerando un error del ángulo de incidencia tan alto como  $\pm 0,05^\circ$ .

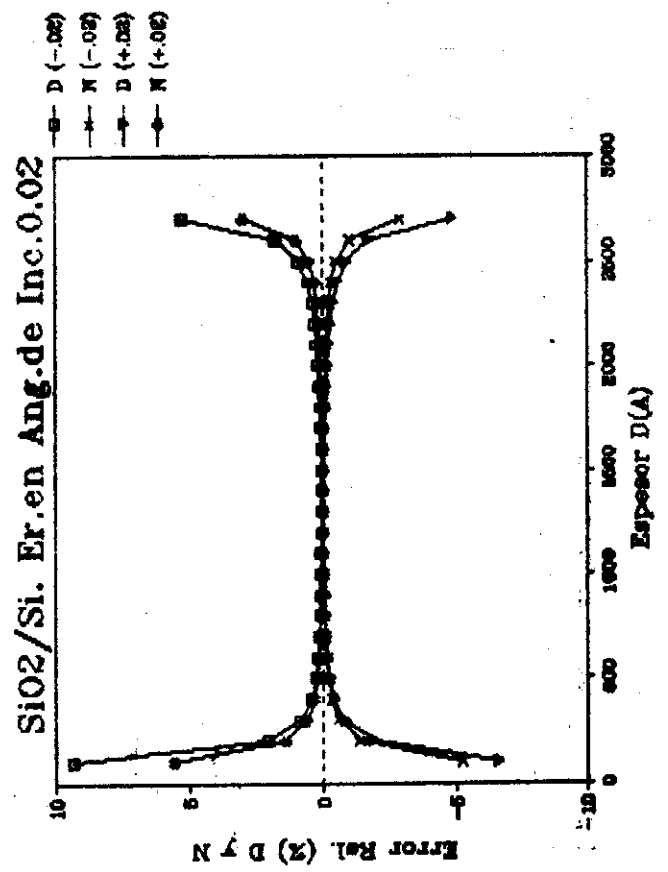
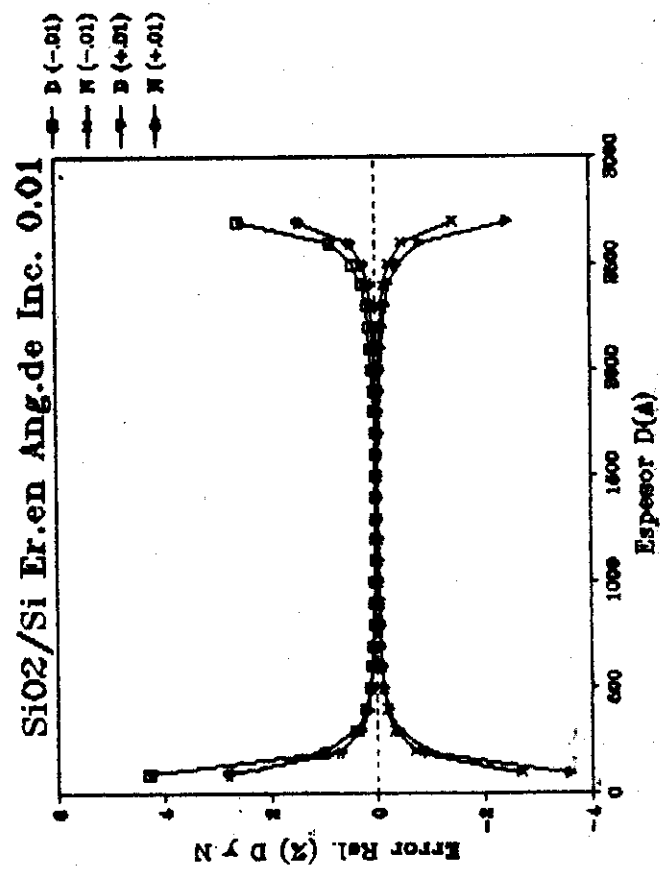
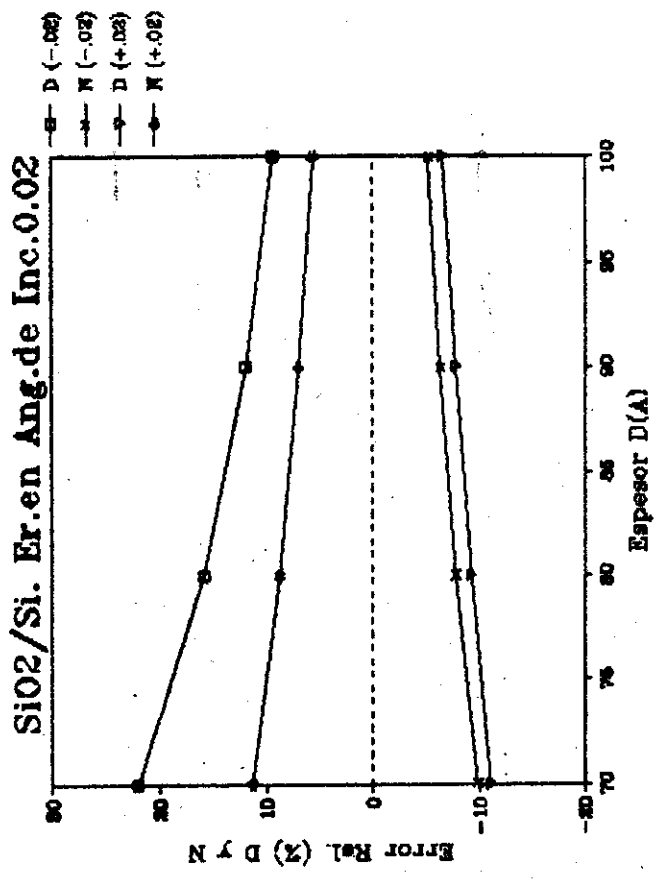
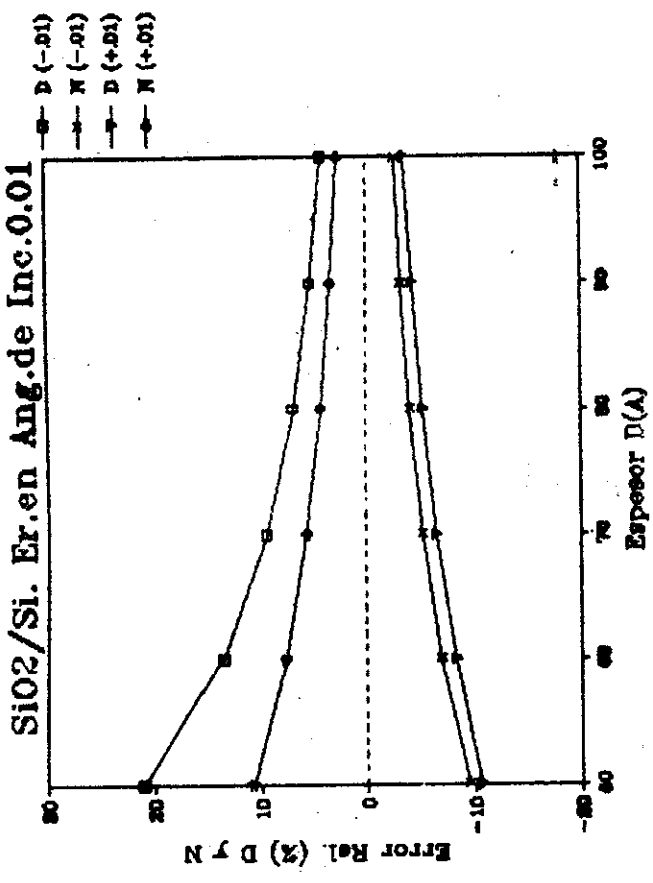
Cuando se determina simultáneamente el espesor D y el índice de refracción N de una capa transparente sobre substrato absorbente con una sola medición los autores emplearon el método propuesto por *Holmes* (1967) para la búsqueda iterativa de la solución de la tarea inversa de la elipsometría, entonces se observa un incremento brusco del error, tanto para D como para N, en los extremos del intervalo que se manifiesta periódico con el aumento del espesor. Una forma muy similar a las curvas obtenidas aquí, se observa en *Pshenicyn* (1986:20).

En el presente trabajo se evidencia una alta sensibilidad del dióxido y el nitruro de silicio al error en el ángulo de incidencia de modo que para  $\pm 0,02^\circ$  no se pueden determinar espesores menores que 100 Å. Algo semejante ocurre en el caso de dos capas transparentes donde también se emplea un método iterativo de aproximaciones sucesivas en la búsqueda de los espesores verdaderos de ambas capas, donde para  $\pm 0,02^\circ$  no se pueden determinar espesores menores que 200 Å. Tampoco en el caso de la determinación del espesor en una capa absorbente es recomendable con  $\pm 0,02^\circ$ , evaluar espesores menores que 200 Å pues el error crece bruscamente por encima del 5 %.

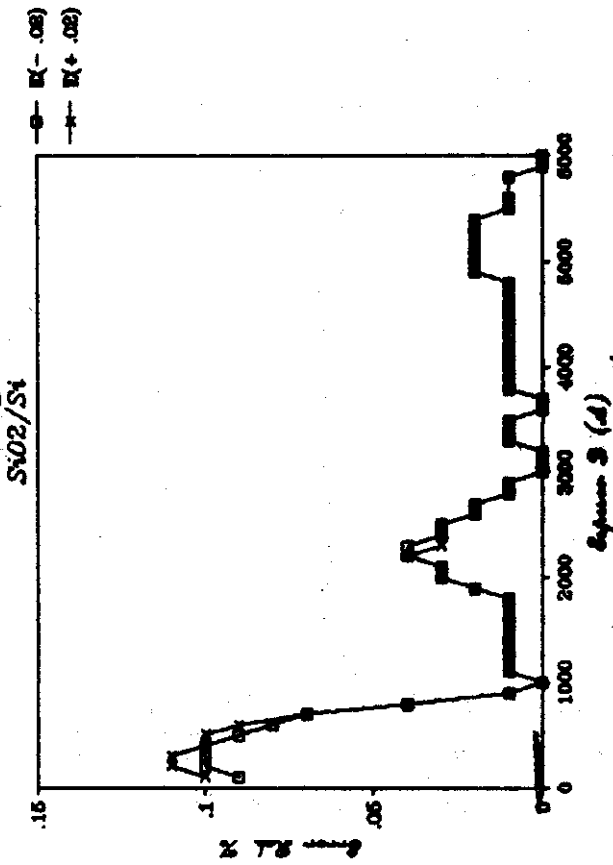
Finalmente es necesario señalar que los resultados obtenidos en el presente trabajo han brindado información cuantitativa suficiente para valorar la influencia del error del ángulo de incidencia sobre los errores en la determinación del espesor y el índice de refracción en los casos considerados.

## RECONOCIMIENTOS

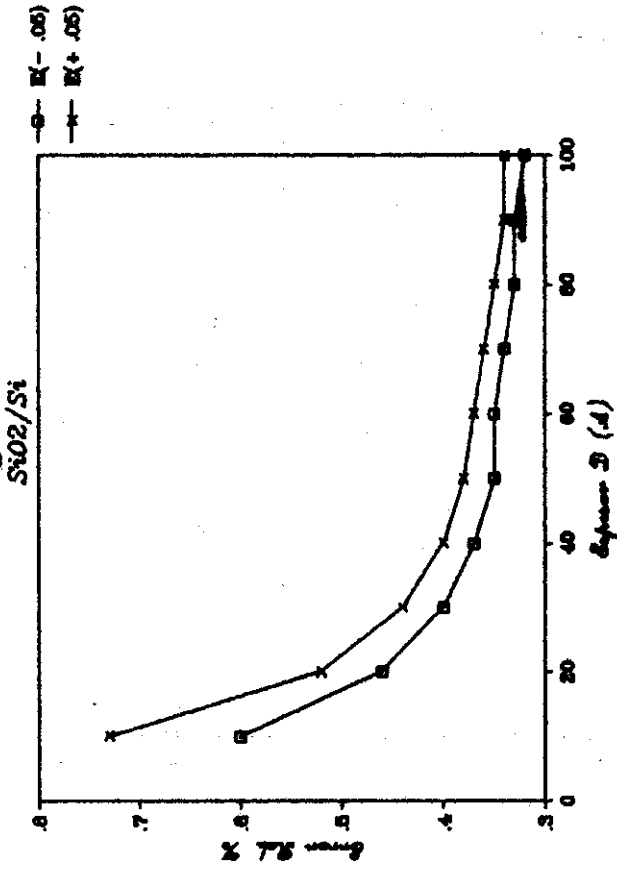
Los autores consideran necesario expresar su agradecimiento al especialista en elipsometría Marat I. Abaev de Leningrado por sus valiosos consejos y sugerencias sobre algunos aspectos importantes de este trabajo, así como a la compañera Marta B. Herrera Lichilín por su esforzada labor en la introducción del documento en el soporte magnético de información.



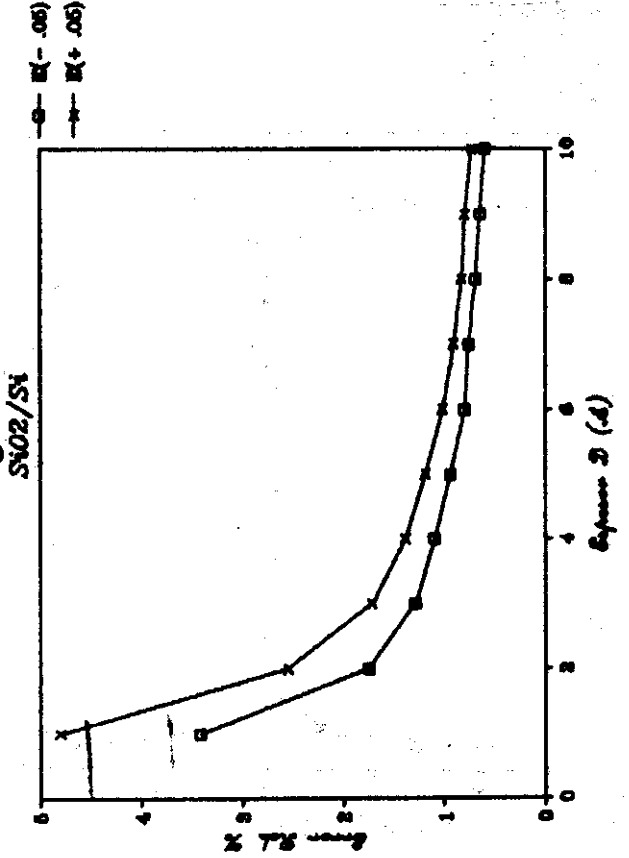
Error en los Ang. de Inc. .02



Er.enAng.deInc. .05

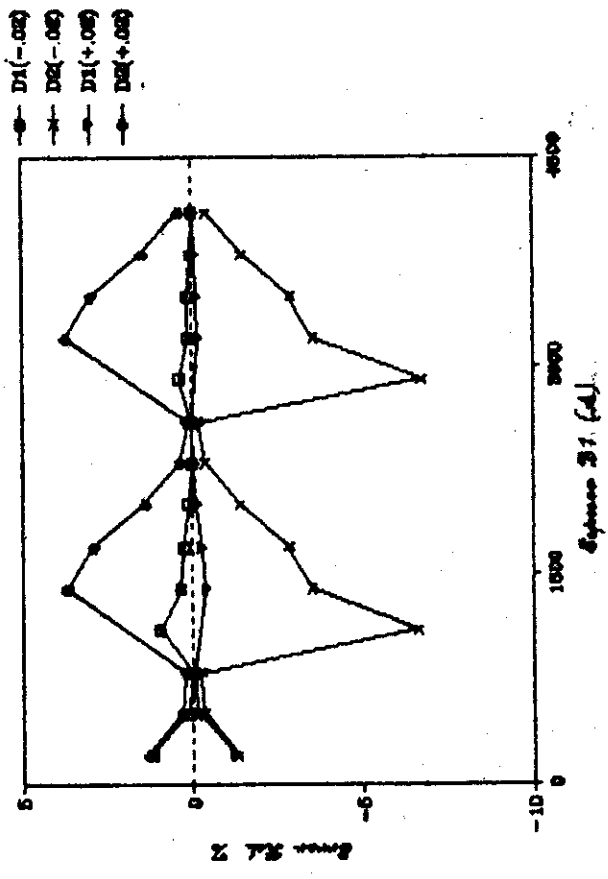


Er.enAng.deInc. .05

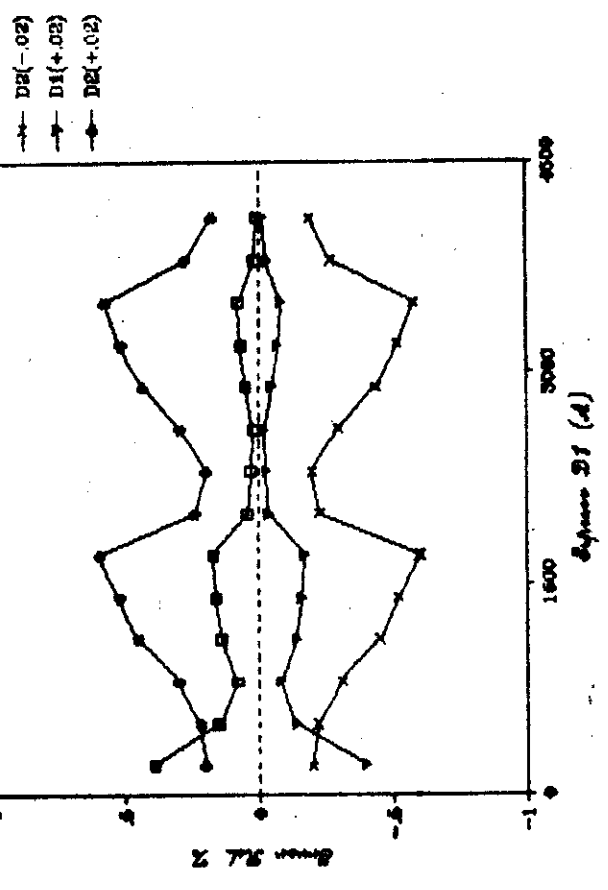




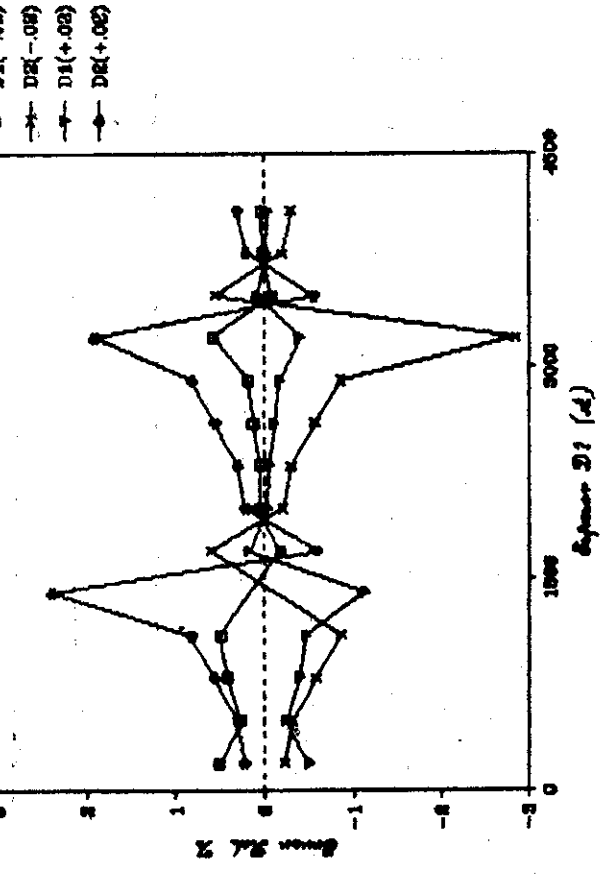
Si3N4/SiO2/Si.Er.en Ang.de Inc.0.02.D2= 200



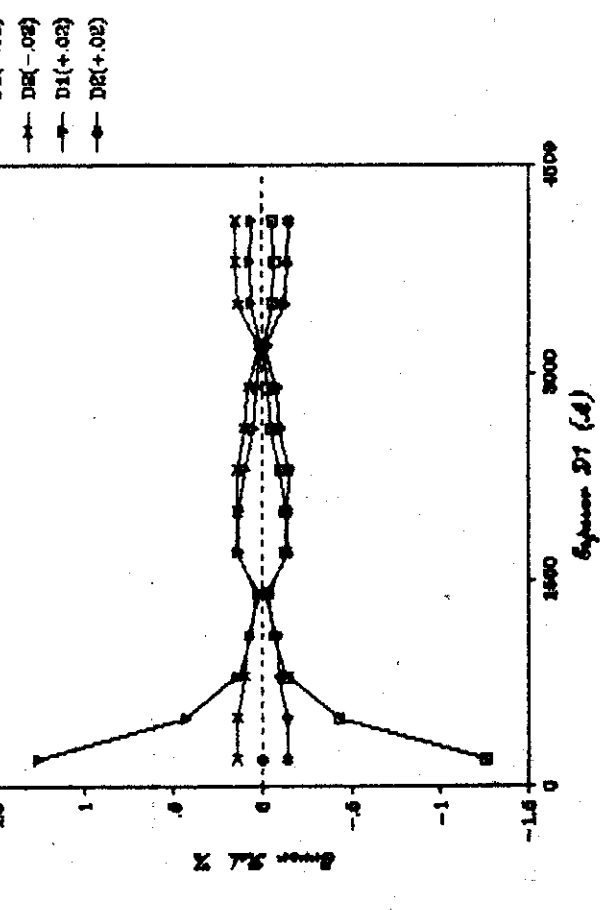
Si3N4/SiO2/Si.Er.en Ang.de Inc.0.02.D2= 700



Si3N4/SiO2/Si.Er.en Ang.de Inc.0.02.D2=1200

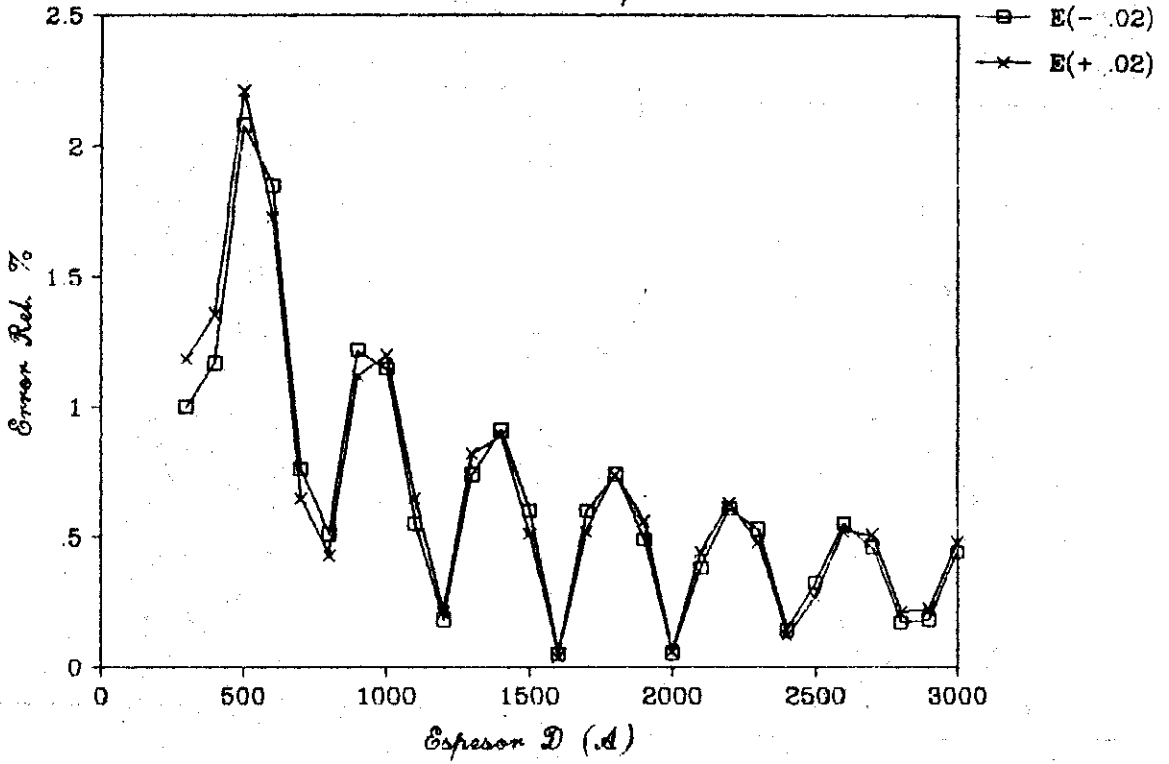


Si3N4/SiO2/Si.Er.en Ang.de Inc.0.02.D2=2200



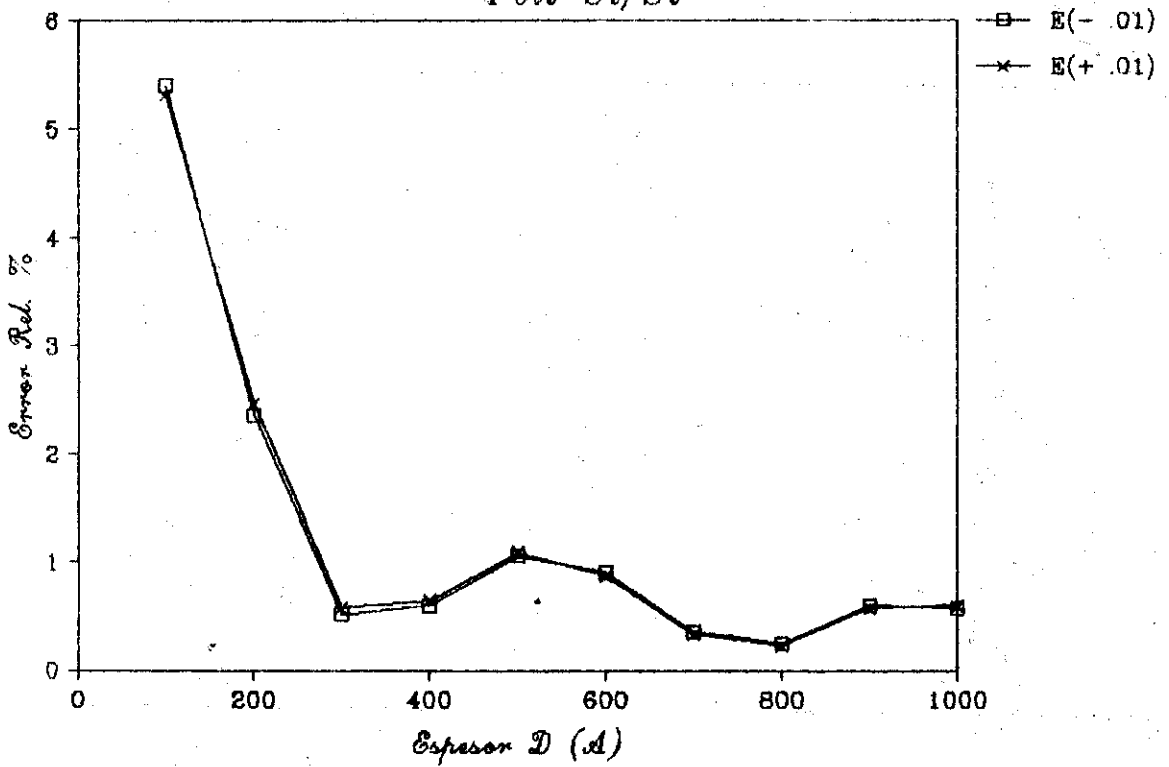
# Er.enAng.deInc. .02

Poli-Si/Si



# Er.enAng.deInc. .01

Poli-Si/Si



## BIBLIOGRAFIA

1. Hauge, P.S. y F.H. Dill (1973)  
*Design and operation of ETA, an automated ellipsometer.* IBM J. Res. Develop., 17(6):472-489.
2. Holmes, D.A. (1967)  
*On the calculation of thin film refractive index and thickness by ellipsometry.* Appl. Opt., 6(1):168.
3. Pshenicyn, V.I.; M.I. Abaev y N.Iu. Lyzlov (1986)  
*Elipsometría en las investigaciones físico-químicas [en ruso].* Química, Leningrado, 152 pp., 12 tablas.
4. Ravelo Triana, J.; R.A. Díaz Delgado y P.V. Martínez Mesa  
*Algoritmos y programas para el empleo de la elipsometría en la microelectrónica.*
5. Shewchun, J. y E.C. Rowe (1970)  
*Ellipsometric technique for obtaining substrate optical constants.* J. Appl. Physics, 41(10):4128-4138.