

DIN 50989-1

ICS 19.100

**Ellipsometrie –
Teil 1: Grundlagen;
Text Deutsch und Englisch**

Ellipsometry –
Part 1: Principles;
Text in German and English

Ellipsométrie –
Partie 1: Principes;
Texte en allemand et anglais

Gesamtumfang 35 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)

Inhalt

	Seite
Vorwort.....	4
Einleitung	6
1 Anwendungsbereich.....	8
2 Normative Verweisungen	8
3 Symbole und Abkürzungen	8
4 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Probe	8
5 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Messung.....	12
6 Modellkorrelierte Randbedingungen der Simulation.....	14
7 Grundlegende Modelle	16
7.1 Allgemeines.....	16
7.2 Volumenmaterial (Fall 1 der Anwendung, DIN 50989-2)	16
7.3 Transparente Einzelschicht (Fall 2 der Anwendung, DIN 50989-3)	16
7.4 Semi-transparente Einzelschicht (Fall 3 der Anwendung, DIN 50989-4)	16
7.5 Mehrschichten und periodische Schichten (Fall 4 der Anwendung, DIN 50989-5).....	16
7.6 Effektive Materialien (Fall 5 der Anwendung, DIN 50989-6)	16
8 Rohdaten.....	16
9 Überprüfung des Geräts auf korrekte Justierung.....	18
9.1 Straight-Line-Messung.....	18
9.2 Einfache Messung von Winkeln	20
9.2.1 Messung an einer bekannten Probe, z. B. SiO ₂ /Si, mit Fitanpassung des Einfallswinkels	20
9.2.2 Messung des Brewster-Winkels von Wasser, eines Lösungsmittels oder eines technischen Glases.....	22
10 Überprüfung des Geräts auf korrekte Kalibrierung	24
11 Prüfbericht	24
Anhang A (informativ) Mathematische und physikalische Grundlagen der Ellipsometrie.....	26
A.1 Optische Kenngrößen	26
A.2 Optische Materialkonstanten und Funktion	26
A.3 Dielektrische Konstanten und Funktion	26
A.4 Zusammenhang zwischen komplexem Brechungsindex N und dielektrischer Funktion ϵ	28
A.5 Definition der pseudo-dielektrischen Funktion	28
A.6 Grenzflächenkenngrößen.....	28
A.7 Gütefunktion zwischen Modell basiert simulierten (mod.) und experimentell bestimmten (exp.) ellipsometrischen Transfergrößen.....	30
A.8 Jones-Vektoren und Jones-Matrizen	32
A.9 Stokes-Vektoren und Müller-Matrizen.....	32
Literaturhinweise	34

Contents

	Page
Foreword	5
Introduction.....	7
1 Scope.....	9
2 Normative references	9
3 Symbols and abbreviations	9
4 Experimental boundary conditions with respect to the sample	9
5 Experimental boundary conditions with respect to the measurement.....	13
6 Model-correlated boundary conditions of the simulation.....	15
7 Basic models	17
7.1 General.....	17
7.2 Bulk material (case 1 of application, DIN 50989-2)	17
7.3 Transparent single layer (case 2 of application, DIN 50989-3)	17
7.4 Semi-transparent single layer (case 3 of application, DIN 50989-4).....	17
7.5 Multiple layers and periodic layers (case 4 of application, DIN 50989-5).....	17
7.6 Effective materials (case 5 of application, DIN 50989-6)	17
8 Raw data	17
9 Verification of correct adjustment of the device	19
9.1 Straight line measurement.....	19
9.2 Simple measurement of angles	21
9.2.1 Measurement on a known sample, e.g. SiO ₂ /Si, with fitting of the angle of incidence	21
9.2.2 Measurement of the Brewster's angle of water, of a solvent or of technical glass	23
10 Verification of the device regarding correct calibration	25
11 Test report.....	25
Annex A (informative) Mathematical and physical principles of ellipsometry	27
A.1 Optical parameters	27
A.2 Optical material constants and function.....	27
A.3 Dielectric constants and function	27
A.4 Relationship between complex refractive index N and dielectric function ϵ	29
A.5 Definition of the pseudo-dielectric function	29
A.6 Interface parameters	29
A.7 Quality function between model-based simulated (mod.) and experimentally determined (exp.) ellipsometric factors	31
A.8 Jones vectors and Jones matrices.....	33
A.9 Stokes vectors and Mueller matrices.....	33
Bibliography.....	35

Vorwort

Diese Norm wurde vom Arbeitsausschuss NA 062-01-61 AA „Mess- und Prüfverfahren für Schichten und Schichtsysteme“ des DIN-Normenausschusses Materialprüfung (NMP) erarbeitet.

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. DIN ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren.

DIN 50989, *Ellipsometrie*, besteht aus den folgenden Teilen:

- *Teil 1: Grundlagen*
- *Teil 2: Volumenmaterial¹⁾*
- *Teil 3: Transparente Einzelschicht¹⁾*
- *Teil 4: Semi-transparente Einzelschicht¹⁾*
- *Teil 5: Mehrschichten und periodische Schichten¹⁾*
- *Teil 6: Effektive Materialien¹⁾*

1) In Vorbereitung.

Foreword

This standard has been prepared by Working Committee NA 062-01-61 AA „Mess- und Prüfverfahren für Schichten und Schichtsysteme“ („Measuring and test methods for coatings and coating systems“) of DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP, DIN Standards Committee Materials Testing).

Attention is drawn to the possibility that some of the elements of this document may be the subject of patent rights. DIN shall not be held responsible for identifying any or all such patent rights.

DIN 50989, *Ellipsometry*, consists of the following parts:

- *Part 1: Principles*
- *Part 2: Bulk material²⁾*
- *Part 3: Transparent single layer²⁾*
- *Part 4: Semi-transparent single layer²⁾*
- *Part 5: Multiple layers and periodic layers²⁾*
- *Part 6: Effective materials²⁾*

2) In preparation.

Einleitung

Bei dem Messverfahren Ellipsometrie handelt es sich um ein phasenempfindliches Reflexionsexperiment mit polarisiertem Licht im optischen Fernfeld. Die Ellipsometrie ist als nicht invasives Messverfahren seit langem in der Halbleitertechnik – speziell in der integrierten Fertigung – zunächst als Ein-Wellenlängen, dann als Mehrwellen-, später als spektroskopisches Messverfahren etabliert.

Mittels Ellipsometrie können optische bzw. dielektrische Konstanten beliebiger Materialien sowie Schichtdicken wenigstens semi-transparenter Schichten bzw. Schichtsysteme bestimmt werden. Die Ellipsometrie ist ein indirektes Messverfahren, dessen Auswertung auf einer Modelloptimierung basiert. Die je nach Verfahrensprinzip unterschiedlichen Messgrößen werden in die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ (Psi, Amplitudeninformation) und Δ (Delta, Phaseninformation) umgewandelt, aus denen die interessierenden physikalischen Zielgrößen (optische bzw. dielektrische Konstanten, Schichtdicken) dann über einen parametrisierten Fit bestimmt werden.

Die Ellipsometrie weist eine hohe Präzision in den ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ auf, die für ideale Schicht-Substrat-Systeme einer Schichtdickenempfindlichkeit von 0,1 nm entsprechen kann. Das Messverfahren kann somit geringste Abweichungen in den Oberflächeneigenschaften nachweisen. Das steht im engen Zusammenhang mit der Homogenität und der Isotropie der Materialoberfläche. Für das Erreichen der hohen Präzision ist bei inhomogenen Materialien das Messen am identischen Messort Grundvoraussetzung. Gleiches gilt für die Orientierung der Einfallsebene relativ zur Materialoberfläche für anisotrope Materialien.

Die absolute Genauigkeit, z. B. von Schichtdickenwerten, hängt im Wesentlichen von der Qualität des gewählten Modells zur Beschreibung der Materialoberfläche ab. Für ideale Schicht-Substrat-Systeme, wie zum Beispiel SiO_2 (ideal transparente Schicht) auf einem Si-Wafer (nahezu atomar glatte Substratoberfläche mit homogenen und isotropen Materialeigenschaften) kann die Genauigkeit der Schichtdicke durchaus die Werte der Präzision erreichen, weil das Modell die Realität des Schicht-Substrat-Systems in idealer Weise beschreibt. Für inhomogene, anisotrope, verschmutzte, mehrkomponentige, geschädigte, imperfekte oder raue Oberflächen bzw. Schichten kann die Genauigkeit der Schichtdickenbestimmung deutlich schlechter sein und ist generell von der Güte des gewählten Modells abhängig.

Trotz dieser Einschränkung ist die Ellipsometrie ein leistungsfähiges Verfahren, das entweder Material-Fingerprints (ohne Modellierung) ermöglicht oder modellbasiert die Bestimmung von optischen und dielektrischen Konstanten (auf bis zu 0,001 genau) bzw. Schichtdicken (auf bis zu 0,1 nm genau) in einem weiten Schichtdickenbereich von etwa 0,1 nm bis zu etwa 10 μm (in speziellen Fällen bis über 100 μm) erlaubt.

Introduction

The ellipsometry measuring method is a phase-sensitive reflection technique using polarized light in the optical far-field. Over a long time, ellipsometry has been established as a non-invasive measuring method in the field of semiconductor technology – especially within the integrated production – in the first instance as a single-wavelength, then as a multiple-wavelength and later as a spectroscopic measuring method.

By means of ellipsometry, optical or dielectric constants of any material as well as the layer thicknesses of at least semi-transparent layers or layer systems can be determined. Ellipsometry is an indirect measuring method, the analysis of which is based on model optimization. The measurands, which differ according to the procedural principle, are converted into the ellipsometric factors Ψ (Psi, amplitude information) and Δ (Delta, phase information), based on which the physical target figures of interest (optical or dielectric constants, layer thicknesses) will then be determined by means of a parameterized fit.

Ellipsometry shows a high precision regarding the ellipsometric factors Ψ and Δ , which can be equivalent to a layer thickness sensitivity of 0,1 nm for ideal layer substrate systems. As a result, the measuring method can verify even the slightest discrepancies in the surface characteristics. This is closely linked to the homogeneity and the isotropy of the material surface. In order to achieve high precision, carrying out measurements at the exact same measuring point is a prerequisite for inhomogeneous materials. The same applies to the orientation of the incident plane relative to the material surface for anisotropic materials.

The absolute accuracy, e.g. of layer thickness values, substantially depends on the quality of the chosen model for describing the material surface. For ideal layer substrate systems, such as SiO_2 (ideal transparent layer) on a Si wafer (nearly atomically smooth substrate surface with homogeneous and isotropic material properties), the accuracy of the layer thickness can indeed reach the precision values, since the model describes the reality of the layer substrate system in an ideal manner. For inhomogeneous, anisotropic, contaminated, multi-component, damaged, imperfect or rough surfaces or layers, the accuracy of the layer thickness determination can be significantly lower and generally depends on the quality of the chosen model.

Despite these limitations, ellipsometry is a powerful procedure, which either enables material fingerprints (without modelling) or which allows a model-based determination of optical and dielectric constants (to the nearest 0,001) or of layer thicknesses (to the nearest 0,1 nm) within a broad layer thickness range of approximately 0,1 nm up to approximately 10 μm (in special cases exceeding 100 μm).

1 Anwendungsbereich

Diese Norm gilt für das Messverfahren Ellipsometrie, eines Verfahrens zur Bestimmung optischer und dielektrischer Konstanten im UV-Vis-NIR Spektralbereich sowie von Schichtdicken im Bereich der at-line Fertigungskontrolle, der Qualitätssicherung, der Materialentwicklung, akkreditierter Prüflaboratorien, jeweils vorzugsweise für stand-alone Messsysteme unter besonderer Berücksichtigung einer GUM-konformen Angabe von Ergebnisunsicherheit.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente, die in diesem Dokument teilweise oder als Ganzes zitiert werden, sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

DIN EN ISO/IEC 17025, *Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien*

ISO/IEC Guide 98-3, *Uncertainty of measurement — Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM: 1995)*

3 Symbole und Abkürzungen

In Tabelle 1 werden die in dieser Norm verwendeten Symbole und Abkürzungen dargestellt.

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen

Symbol und Abkürzung	Erläuterung
P	Polarisator (en: polarizer)
C	Kompensator (en: compensator)
S	Probe (en: sample)
A	Analysator (en: analyzer)
AOI, φ	Einfallswinkel (en: angle of incidence) des einfallenden Lichts
POI	Einfallsebene (en: plane of incidence) des einfallenden Lichts, gebildet durch Einfallslot und Ausbreitungsrichtung des einfallenden Lichtes
Ψ, Δ	Ellipsometrische Transfergrößen Psi und Delta, die z. B. nach DIN EN ISO/IEC 17025 als zu archivierende Rohdaten fungieren.
d	Schichtdicke

4 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Probe

Die Bilder 1 und 2 zeigen die Prinzipdarstellungen einer ellipsometrischen Messung als phasenempfindliches Reflexionsexperiment mit polarisiertem Licht, zum einen unter lichtoptischen (siehe Bild 1), zum anderen unter messtechnischen Gesichtspunkten (siehe Bild 2).

1 Scope

This standard deals with ellipsometry, a method for determining optical and dielectric constants in the UV-Vis-NIR spectral range as well as layer thicknesses in the field of at-line production control, quality assurance and material development through accredited test laboratories, preferably for stand-alone measuring systems with special regard to a GUM conforming presentation of the uncertainty of results.

2 Normative references

The following documents, in whole or in part, are normatively referenced in this document and are indispensable for its application. For dated references, only the edition cited applies. For undated references, the latest edition of the referenced document (including any amendments) applies.

DIN EN ISO/IEC 17025, *General requirements for the competence of testing and calibration laboratories*

ISO/IEC Guide 98-3, *Uncertainty of measurement — Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM: 1995)*

3 Symbols and abbreviations

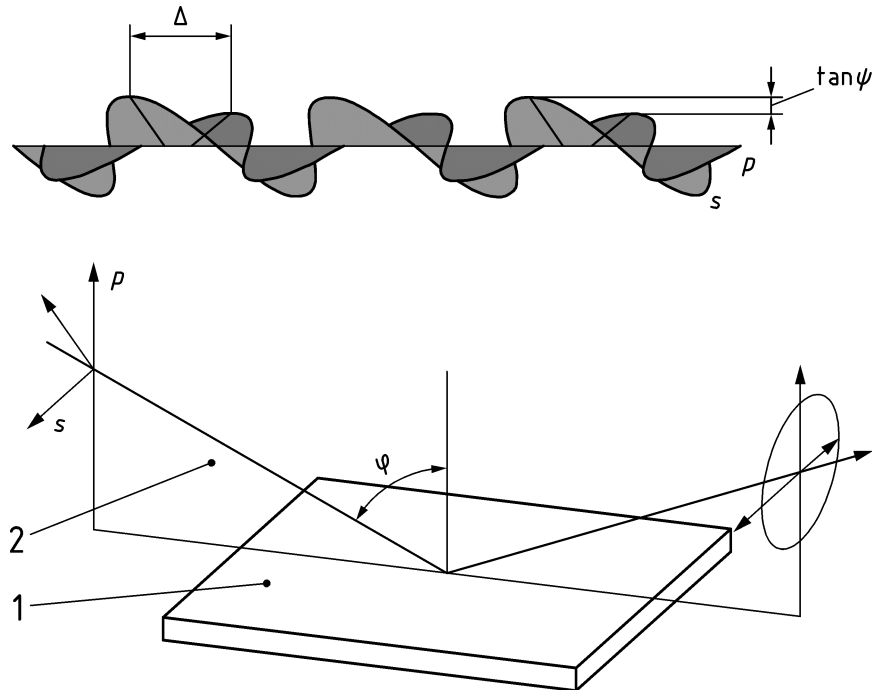
Table 1 shows the symbols and abbreviations used throughout this standard.

Table 1 — Symbols and abbreviations

Symbol and abbreviation	Description
P	polarizer
C	compensator
S	sample
A	analyzer
AOI, φ	angle of incidence light
POI	plane of incidence light, formed by the axis of incidence and the direction of propagation of the incident light
Ψ, Δ	ellipsometric factors Psi and Delta, which serve as raw data to be filed, e.g. according to DIN EN ISO/IEC 17025
d	layer thickness

4 Experimental boundary conditions with respect to the sample

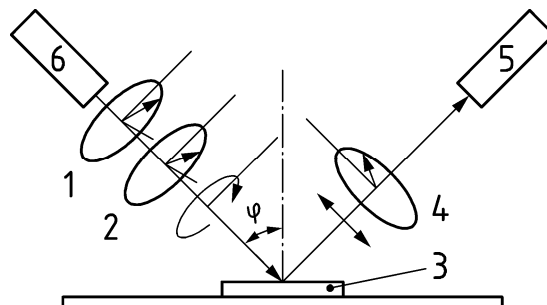
Figures 1 and 2 schematically represent an ellipsometric measurement as a phase-sensitive reflection technique using polarized light; both under photo-optical aspects (see Figure 1) as well as under metrological aspects (see Figure 2).



Legende

- 1 S Probe
- 2 POI
- φ Einfallswinkel

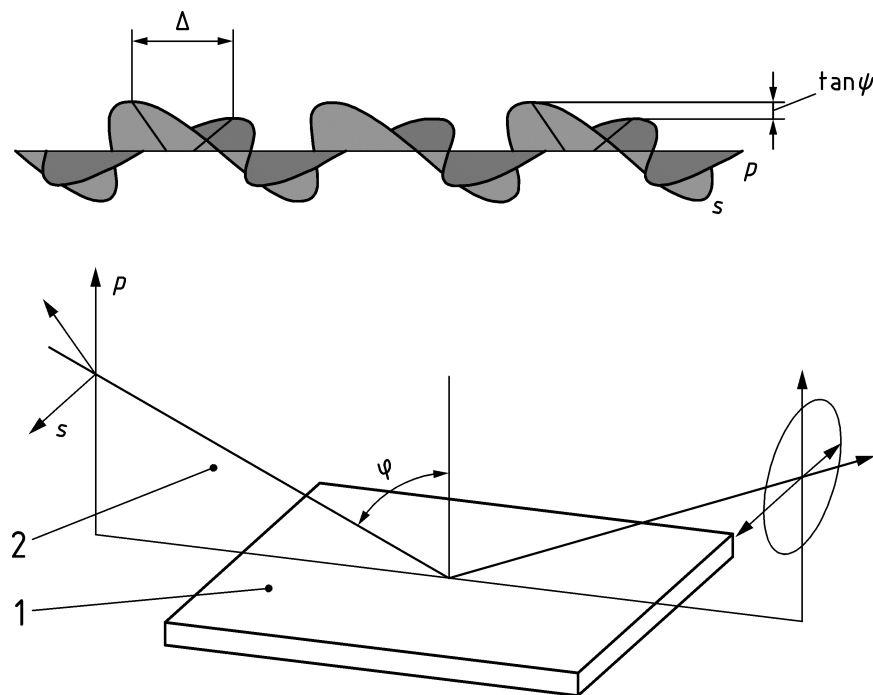
Bild 1 — Prinzipdarstellung des optischen Lichtweges/des Polarisationszustandes vor und nach der Reflexion (Substratoberfläche, Einfallslot und -winkel, Lichtweg/-welle, s- und p-Polarisation)



Legende

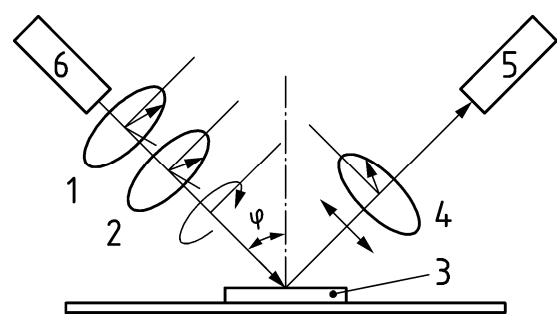
- 1 Polarisator
- 2 Kompensator
- 3 Probe
- 4 Analysator
- 5 Detektor
- 6 Lichtquelle

Bild 2 — Prinzipdarstellung des messtechnischen Aufbaus (Lichtquelle, PCSA-Konfiguration)



- Key**
- 1 S sample
 - 2 POI
 - φ angle of incidence

Figure 1 — Schematic representation of the optical path/polarization state before and after reflection (substrate surface, axis and angle of incidence, optical path/light wave, s- and p-polarization)



- Key**
- 1 polarizer
 - 2 compensator
 - 3 sample
 - 4 analyzer
 - 5 detector
 - 6 light source

Figure 2 — Schematic representation of the metrological arrangement (light source, PCSA configuration)