

**DIN 50989-3****DIN**

ICS 19.100

**Ellipsometrie –  
Teil 3: Modell transparente Einfachsicht;  
Text Deutsch und Englisch**

Ellipsometry –  
Part 3: Transparent single layer model;  
Text in German and English

Ellipsométrie –  
Partie 3: Modèle seule couche transparente;  
Texte en allemand et anglais

Gesamtumfang 77 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)

# Inhalt

|                                                                                                                                               | Seite |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Vorwort.....                                                                                                                                  | 4     |
| Einleitung.....                                                                                                                               | 6     |
| 1 Anwendungsbereich .....                                                                                                                     | 8     |
| 2 Normative Verweisungen.....                                                                                                                 | 8     |
| 3 Begriffe, Symbole und Abkürzungen.....                                                                                                      | 8     |
| 3.1 Begriffe.....                                                                                                                             | 8     |
| 3.2 Symbole und Abkürzungen.....                                                                                                              | 8     |
| 4 Modell Transparente Einfachschicht.....                                                                                                     | 12    |
| 4.1 Strahlengang .....                                                                                                                        | 12    |
| 4.2 Annahmen.....                                                                                                                             | 14    |
| 4.2.1 Allgemeines .....                                                                                                                       | 14    |
| 4.2.2 Abweichungen von Modell-Annahme M1.....                                                                                                 | 16    |
| 4.2.3 Abweichungen von Modell-Annahme M2.....                                                                                                 | 16    |
| 4.2.4 Abweichungen von Modell-Annahme M3.....                                                                                                 | 16    |
| 4.2.5 Abweichungen von Modell-Annahme M4.....                                                                                                 | 16    |
| 4.2.6 Abweichungen von Modell-Annahme M5.....                                                                                                 | 18    |
| 4.2.7 Abweichungen von Modell-Annahme M6.....                                                                                                 | 18    |
| 4.2.8 Abweichungen von Modell-Annahme M7.....                                                                                                 | 18    |
| 4.2.9 Abweichungen von Modell-Annahme S1.....                                                                                                 | 18    |
| 4.2.10 Abweichungen von Modell-Annahme S2.....                                                                                                | 18    |
| 4.3 Besonderheiten des Modells <i>Transparente Einfachschicht</i> .....                                                                       | 18    |
| 4.4 Validierung.....                                                                                                                          | 20    |
| 4.5 Messunsicherheit.....                                                                                                                     | 24    |
| 4.5.1 Messunsicherheit der ellipsometrischen Transfergrößen $\Psi$ und $\Delta$ .....                                                         | 24    |
| 4.5.2 Messunsicherheit $u_d$ der Schichtdicke $d$ .....                                                                                       | 28    |
| 5 Prüfbericht .....                                                                                                                           | 36    |
| Anhang A (informativ) Ergänzungen zum Modell Transparente Einfachschicht.....                                                                 | 38    |
| A.1 Brechungsindizes transparenter Materialien .....                                                                                          | 38    |
| A.2 SiO <sub>2</sub> -Referenzschichten auf opaken reflektierenden Siliziumsubstraten .....                                                   | 40    |
| A.3 SiO <sub>2</sub> -Schichten auf transparenten schwach reflektierenden BK-7 Glassubstraten.....                                            | 50    |
| A.4 Einfluss des Einfallswinkels und des gewählten Wellenlängenbereiches auf den<br>Schichtdickenfit einer transparenten Einfachschicht ..... | 58    |
| A.5 $D_{\text{RMS}}$ -Minima beim Schichtdickenfit von SiO <sub>2</sub> -Schichten auf Si.....                                                | 62    |
| A.6 Empirische Standardabweichung von $\Psi$ und $\Delta$ bei SiO <sub>2</sub> -Schichten auf Si.....                                         | 64    |
| A.7 Einfluss der verwendeten Dispersionsfunktion auf den Schichtdickenfit.....                                                                | 68    |
| A.8 Hinweise für die Messpraxis .....                                                                                                         | 72    |
| Literaturhinweise .....                                                                                                                       | 76    |

# Contents

|                                                                                                                                             | Page |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| Foreword .....                                                                                                                              | 5    |
| Introduction .....                                                                                                                          | 7    |
| 1 Scope .....                                                                                                                               | 9    |
| 2 Normative references .....                                                                                                                | 9    |
| 3 Terms and definitions, symbols and abbreviations .....                                                                                    | 9    |
| 3.1 Terms and definitions.....                                                                                                              | 9    |
| 3.2 Symbols and abbreviations.....                                                                                                          | 9    |
| 4 Transparent single layer model.....                                                                                                       | 13   |
| 4.1 Optical path .....                                                                                                                      | 13   |
| 4.2 Assumptions.....                                                                                                                        | 15   |
| 4.2.1 General.....                                                                                                                          | 15   |
| 4.2.2 Deviations from model assumption M1 .....                                                                                             | 17   |
| 4.2.3 Deviations from model assumption M2 .....                                                                                             | 17   |
| 4.2.4 Deviations from model assumption M3 .....                                                                                             | 17   |
| 4.2.5 Deviations from model assumption M4 .....                                                                                             | 17   |
| 4.2.6 Deviations from model assumption M5 .....                                                                                             | 19   |
| 4.2.7 Deviations from model assumption M6 .....                                                                                             | 19   |
| 4.2.8 Deviations from model assumption M7 .....                                                                                             | 19   |
| 4.2.9 Deviations from model assumption S1.....                                                                                              | 19   |
| 4.2.10 Deviations from model assumption S2.....                                                                                             | 19   |
| 4.3 Special characteristics of the <i>transparent single layer model</i> .....                                                              | 19   |
| 4.4 Validation .....                                                                                                                        | 21   |
| 4.5 Measurement uncertainty.....                                                                                                            | 25   |
| 4.5.1 Measurement uncertainty of the ellipsometric transfer quantities $\Psi$ and $\Delta$ .....                                            | 25   |
| 4.5.2 Measurement uncertainty $u_d$ of the layer thickness $d$ .....                                                                        | 29   |
| 5 Test report .....                                                                                                                         | 37   |
| Annex A (informative) Additions to the transparent single layer model .....                                                                 | 39   |
| A.1 Refractive indices of transparent materials.....                                                                                        | 39   |
| A.2 SiO <sub>2</sub> reference layers on reflecting opaque silicon substrates .....                                                         | 41   |
| A.3 SiO <sub>2</sub> layers on transparent, weakly reflecting BK-7 glass substrates .....                                                   | 51   |
| A.4 Influence of the angle of incidence and of the selected wavelength range on the layer thickness fit of a transparent single layer ..... | 59   |
| A.5 $D_{\text{RMS}}$ minima for the layer thickness fit of SiO <sub>2</sub> layers on Si .....                                              | 63   |
| A.6 Empirical standard deviation of $\Psi$ and $\Delta$ on SiO <sub>2</sub> layers on Si .....                                              | 65   |
| A.7 Influence of the applied dispersion function on the layer thickness fit.....                                                            | 69   |
| A.8 Recommendations for measuring practice.....                                                                                             | 73   |
| Bibliography.....                                                                                                                           | 77   |

## Vorwort

Dieses Dokument 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.

Aktuelle Informationen zu diesem Dokument können über die Internetseiten von DIN ([www.din.de](http://www.din.de)) durch eine Suche nach der Dokumentennummer aufgerufen werden.

DIN 50989 besteht unter dem allgemeinen Titel *Ellipsometrie* aus den folgenden Teilen:

- *Teil 1: Grundlagen*
- *Teil 2: Modell Volumenmaterial*
- *Teil 3: Modell transparente Einfachsicht*
- *Teil 4: Modell Semi-transparente Einfachsicht<sup>1</sup>*
- *Teil 5: Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten<sup>1</sup>*
- *Teil 6: Modell effektive Materialien<sup>1</sup>*

---

<sup>1</sup> In Vorbereitung.

## Foreword

This document has been prepared by Working Committee NA 062-01-61 AA "Measuring and test methods for coatings and coating systems" of 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.

For current information on this standard, please go to DIN's website ([www.din.de](http://www.din.de)) and search for the document number in question.

DIN 50989 consists of the following parts, under the general title *Ellipsometry*:

- *Part 1: Principles*
- *Part 2: Bulk material model*
- *Part 3: Transparent single layer model*
- *Part 4: Semi-transparent single layer model<sup>1</sup>*
- *Part 5: Multiple layers and periodic layers model<sup>1</sup>*
- *Part 6: Effective materials model<sup>1</sup>*

---

<sup>1</sup> 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- und 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  $\Psi$  (Psi, Amplitudeninformation) und  $\Delta$  (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  $\Psi$  und  $\Delta$  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.

Beim Modell *Transparente Einfachschicht* wird eine Fitprozedur zur Bestimmung der Schichtdicke  $d$  und des Brechungsindex  $n$  der Schicht bei bekannten optischen Konstanten des Substrats angewandt. Für ideale transparente Materialien wird dabei  $k = 0$  angenommen. Der Fit erstreckt sich deshalb nur noch auf die Größe Schichtdicke  $d$ , die *a priori* unabhängig von der Wellenlänge und dem Einfallswinkel ist, sowie den wellenlängenabhängigen Brechungsindex  $n$ , der vom Einfallswinkel unabhängig ist. Deshalb ist mit dem Modell *Transparente Einfachschicht* die Bestimmung der Schichtdicke und des Brechungsindex möglich.

## Introduction

The ellipsometry measuring method is a phase-sensitive reflection experiment 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 in the field of integrated production — originally 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 transfer quantities  $\Psi$  (Psi, amplitude information) and  $\Delta$  (Delta, phase information), based on which the physical target quantities 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 transfer quantities  $\Psi$  and  $\Delta$ , 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 detect 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.

In the *transparent single layer* model, a fitting procedure is used to determine the layer thickness  $d$  and the refractive index  $n$  of the layer while the optical constants of the substrate are known. For ideal transparent materials, it is assumed that  $k = 0$ . Therefore, fitting only refers to the layer thickness  $d$ , which is by definition independent of the wavelength and of the angle of incidence, and the wavelength-dependent refractive index  $n$ , which does not depend on the angle of incidence. Consequently, the *transparent single layer* model allows the determination of the layer thickness and of the refractive index.

## 1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt mittels ellipsometrischer Messungen und deren Auswertung das Verfahren zur Bestimmung der Schichtdicke  $d$  einer transparenten Schicht sowie der optischen (Brechungsindex  $n$ ) bzw. dielektrischen (Realteil  $\varepsilon_1$ ) Konstanten/Funktionen in einem Spektralbereich, für den  $k = 0$  gilt, auf Basis des Modells *Transparente Einfachschicht* fest.

## 2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente werden im Text in solcher Weise in Bezug genommen, dass einige Teile davon oder ihr gesamter Inhalt Anforderungen des vorliegenden Dokuments darstellen. 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 50989-1, *Ellipsometrie — Teil 1: Grundlagen; Text Deutsch und Englisch*

DIN 50989-2:2021-04, *Ellipsometrie — Teil 2: Modell Volumenmaterial; Text Deutsch und Englisch*

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) — Supplement 2: Extension to any number of output quantities*

## 3 Begriffe, Symbole und Abkürzungen

### 3.1 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die folgenden Begriffe.

DIN und DKE stellen terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen bereit:

— DIN-TERMinologieportal: verfügbar unter <https://www.din.de/go/din-term/>

— DKE-IEV: verfügbar unter <http://www.dke.de/DKE-IEV>

#### 3.1.1

##### **transparente Einfachschicht**

Schicht, bei der die Extinktion des Schichtmaterials im betrachteten Spektralbereich vernachlässigt werden kann

### 3.2 Symbole und Abkürzungen

Für die Anwendung dieses Dokumentes gelten die Symbole nach DIN 50989-1, DIN 50989-2 und nach Tabelle 1, wobei die Anforderungen von ISO/IEC Guide 98-3 und DIN EN ISO/IEC 17025 zu berücksichtigen sind.

## 1 Scope

This document uses ellipsometric measurements and their analysis to specify the method for the determination of the layer thickness  $d$  of a transparent layer and the optical (refractive index  $n$ ) or dielectric (real part  $\varepsilon_1$ ) constants/functions based on the *transparent single layer* model within a spectral region, for which  $k = 0$  applies.

## 2 Normative references

The following documents are referred to in the text in such a way that some or all of their content constitutes requirements of this document. For dated references, only the edition cited applies. For undated references, the latest edition of the referenced document (including any amendments) applies.

DIN 50989-1, *Ellipsometry — Part 1: Principles; Text in German and English*

DIN 50989-2:2021-04, *Ellipsometry — Part 2: Bulk material model; Text in German and English*

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) — Supplement 2: Extension to any number of output quantities*

## 3 Terms and definitions, symbols and abbreviations

### 3.1 Terms and definitions

For the purposes of this document, the following terms and definitions apply.

DIN and DKE maintain terminological databases for use in standardization at the following addresses:

- DIN-TERMinologieportal: available at <https://www.din.de/go/din-term/>
- DKE-IEV: available at <http://www.dke.de/DKE-IEV>

#### 3.1.1

##### **transparent single layer**

layer the light extinction of which can be neglected within the considered spectral region

### 3.2 Symbols and abbreviations

For the purposes of this document, the symbols and abbreviations according to DIN 50989-1, DIN 50989-2 and Table 1 apply, taking into account the requirements of ISO/IEC Guide 98-3 and DIN EN ISO/IEC 17025.

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen

| Symbol und Abkürzung                                                                   | Erläuterung                                                                                                                                                                                                         |
|----------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $a$                                                                                    | halbe Spannbreite der Rechteckverteilung                                                                                                                                                                            |
| $C_{\text{ref}}$                                                                       | Erweiterungsfaktor (en: coverage factor) <sup>a</sup> , der zur Angabe der Messunsicherheit (erweiterten kombinierten Unsicherheit) der Referenzmaterialien verwendet wurde (Schichtdickenstandard/Referenzschicht) |
| $C_{\text{samp}}$                                                                      | Erweiterungsfaktor (en: coverage factor) <sup>a</sup> der Probe (samp, en: sample) zur Angabe der Messunsicherheit (erweiterten kombinierten Unsicherheit) (Probe)                                                  |
| $D_{\text{RMS}}$                                                                       | mittlere quadratische Abweichung (en: root-mean-squared deviation, in DIN 50989-1 und einigen Auswerteprogrammen noch RMSE, root-mean-squared error genannt)                                                        |
| $D_{\text{RMS,min}}$                                                                   | Minimum der mittleren quadratischen Abweichung                                                                                                                                                                      |
| $d_{\text{fit}}$                                                                       | Fitergebnis für die Schichtdicke der transparenten Einfachschicht (Probe)                                                                                                                                           |
| $i$                                                                                    | Imaginäre Einheit                                                                                                                                                                                                   |
| $d_{\text{calc}}$                                                                      | berechnete Schichtdicke der transparenten Einfachschicht (calc, en: calculation) bei Einwellenlängenellipsometrie und einem Einfallswinkel (Probe)                                                                  |
| $k$                                                                                    | Extinktionskoeffizient (Imaginärteil des komplexen Brechungsindex $N$ )                                                                                                                                             |
| $N$                                                                                    | komplexer Brechungsindex                                                                                                                                                                                            |
| $N_a$                                                                                  | komplexer Brechungsindex des umgebenden Mediums (a, en: ambient)                                                                                                                                                    |
| $N_l$                                                                                  | komplexer Brechungsindex der Schicht (l, en: layer)                                                                                                                                                                 |
| $N_s$                                                                                  | komplexer Brechungsindex des Substrats                                                                                                                                                                              |
| $n$                                                                                    | Brechungsindex (Realteil des komplexen Brechungsindex $N$ )                                                                                                                                                         |
| $R_t$                                                                                  | maximale Rautiefe                                                                                                                                                                                                   |
| $R_a$                                                                                  | arithmetischer Mittenrauwert (Profilrauheit)                                                                                                                                                                        |
| $U_{\text{ref}}$                                                                       | erweiterte kombinierte Unsicherheit (Messunsicherheit) der Referenzmaterialien (Schichtdickenstandard/Referenzschicht)                                                                                              |
| $u_d$                                                                                  | kombinierte Unsicherheit der Schichtdicke $d$ unter Berücksichtigung aller Unsicherheitsanteile (Probe)                                                                                                             |
| $u_{\text{fit}}$                                                                       | Unsicherheit des Fits auf den Modellparameter Schichtdicke (Probe)                                                                                                                                                  |
| $u_{\text{fit,ref}}$                                                                   | Unsicherheit des Fits auf den Modellparameter Schichtdicke (Schichtdickenstandard/Referenzschicht)                                                                                                                  |
| $u_{\text{mod}}$                                                                       | Unsicherheit der Modellierung im Modell <i>Transparente Einfachschicht</i> bezüglich der Schichtdicke (Probe)                                                                                                       |
| $u_{\text{ref}}$                                                                       | kombinierte Unsicherheit der Schichtdicke (Schichtdickenstandard/Referenzschicht)                                                                                                                                   |
| $\varepsilon$                                                                          | komplexe dielektrische Funktion                                                                                                                                                                                     |
| $\varepsilon_1$                                                                        | Realteil der komplexen dielektrischen Funktion                                                                                                                                                                      |
| $\varepsilon_2$                                                                        | Imaginärteil der komplexen dielektrischen Funktion                                                                                                                                                                  |
| $\varphi$                                                                              | Einfallswinkel der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot (AOI, en: angle of incidence)                                                                                                                            |
| $\chi$                                                                                 | Summe der quadratischen Differenzen zwischen gemessenen und modellierten ellipsometrischen Daten                                                                                                                    |
| <sup>a</sup> Im ISO/IEC Guide 98-3 wird der Erweiterungsfaktor mit „ $k$ “ bezeichnet. |                                                                                                                                                                                                                     |

Table 1 — Symbols and abbreviations

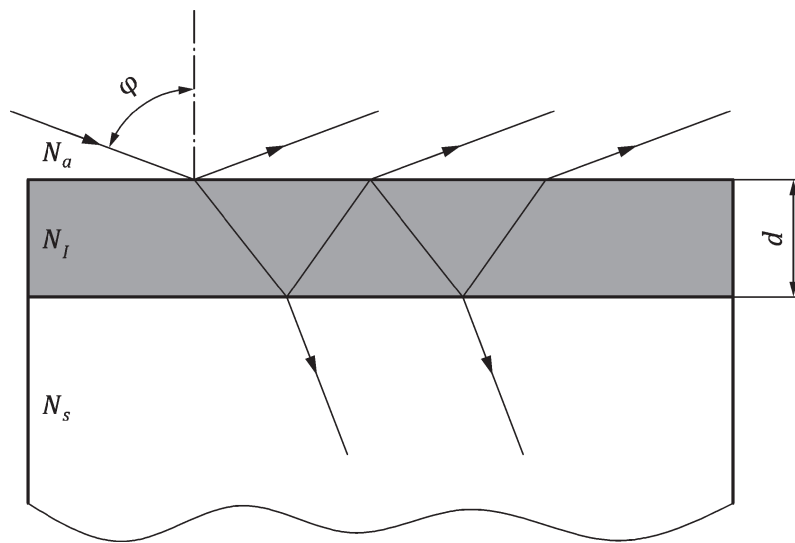
| Symbols and abbreviations                                                  | Description                                                                                                                                                                                   |
|----------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $a$                                                                        | half width of the rectangular distribution                                                                                                                                                    |
| $c_{\text{ref}}$                                                           | coverage factor <sup>a</sup> that has been used to indicate the measurement uncertainty (expanded combined uncertainty) of the reference materials (layer thickness standard/reference layer) |
| $c_{\text{samp}}$                                                          | coverage factor <sup>a</sup> for expression of measurement uncertainty (expanded combined uncertainty) of sample                                                                              |
| $D_{\text{RMS}}$                                                           | root-mean-square deviation (in DIN 50989-1 and some evaluation software, <i>RMSE</i> (root-mean-square error) is still used)                                                                  |
| $D_{\text{RMS,min}}$                                                       | minimum of the root-mean-square deviation                                                                                                                                                     |
| $d_{\text{fit}}$                                                           | fitting result for the layer thickness of the transparent single layer (sample)                                                                                                               |
| $d_{\text{calc}}$                                                          | calculated layer thickness of the transparent single layer for single-wavelength ellipsometry and a single angle of incidence (sample)                                                        |
| $i$                                                                        | imaginary unit                                                                                                                                                                                |
| $k$                                                                        | extinction coefficient (imaginary part of the complex refractive index $N$ )                                                                                                                  |
| $N$                                                                        | complex refractive index                                                                                                                                                                      |
| $N_{\text{a}}$                                                             | complex refractive index of the ambient space                                                                                                                                                 |
| $N_{\text{l}}$                                                             | complex refractive index of the layer                                                                                                                                                         |
| $N_{\text{s}}$                                                             | complex refractive index of the substrate                                                                                                                                                     |
| $n$                                                                        | refractive index (real part of the complex refractive index $N$ )                                                                                                                             |
| $R_{\text{t}}$                                                             | maximum roughness depth                                                                                                                                                                       |
| $R_{\text{a}}$                                                             | arithmetic roughness average (profile roughness)                                                                                                                                              |
| $U_{\text{ref}}$                                                           | expanded combined uncertainty (measurement uncertainty) of the reference materials (layer thickness standard/reference layer)                                                                 |
| $u_{\text{d}}$                                                             | combined uncertainty of the layer thickness $d$ considering all uncertainty components (sample)                                                                                               |
| $u_{\text{fit}}$                                                           | uncertainty of the fit on the layer thickness model parameter (sample)                                                                                                                        |
| $u_{\text{fit,ref}}$                                                       | uncertainty of the fit on the layer thickness model parameter (layer thickness standard/reference layer)                                                                                      |
| $u_{\text{mod}}$                                                           | uncertainty of modelling in the <i>transparent single layer</i> model regarding the layer thickness (sample)                                                                                  |
| $u_{\text{ref}}$                                                           | combined uncertainty of the layer thickness (layer thickness standard/reference layer)                                                                                                        |
| $\varepsilon$                                                              | complex dielectric function                                                                                                                                                                   |
| $\varepsilon_1$                                                            | real part of the complex dielectric function                                                                                                                                                  |
| $\varepsilon_2$                                                            | imaginary part of the complex dielectric function                                                                                                                                             |
| $\varphi$                                                                  | angle of incidence between the incident light wave and the normal to the surface (AOI)                                                                                                        |
| $\chi$                                                                     | sum of squared differences between measured and modelled ellipsometric data                                                                                                                   |
| <sup>a</sup> The coverage factor is denoted “ $k$ ” in ISO/IEC Guide 98-3. |                                                                                                                                                                                               |

## 4 Modell Transparente Einfeldschicht

### 4.1 Strahlengang

Der Strahlengang unter dem Einfallswinkel  $\varphi$  im Modell *Transparente Einfeldschicht* ist in Bild 1 dargestellt. Der Umgebung (Index a, en: ambient) wird der komplexe Brechungsindex  $N_a$  zugeordnet. Üblicherweise wird Luft als Umgebung fungieren und der Brechungsindex ist dann reell mit  $n_a = 1,000$  und  $k_a = 0,000$  in sehr guter Näherung. Der transparenten Einfeldschicht wird die Schichtdicke  $d$  und der komplexe Brechungsindex  $N_l$  (Index l, en: layer) zugeordnet. Im Modell *Transparente Einfeldschicht* wird  $k_l = 0$  angenommen. Dem Substrat wird der komplexe Brechungsindex  $N_s$  zugeordnet.

Das Licht trifft aus der Umgebung kommend auf die Grenzfläche Umgebung/transparente Einfeldschicht, ein Teil davon wird reflektiert. Ein anderer Teil wird gebrochen und erfährt in der transparenten Einfeldschicht Vielfachreflexionen an den Grenzflächen Schicht/Substrat und Schicht/Umgebung. Das gemessene Signal stellt somit die Superposition der Vielfachreflexionen (Interferenz) in der transparenten Einfeldschicht dar.



#### Legende

- $\varphi$  Einfallswinkel der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot
- $N_a$  komplexer Brechungsindex des umgebenden Mediums (für Luft reell,  $N_a = n_a = 1,000$ )
- $d$  Schichtdicke der transparenten Einfeldschicht
- $N_l$  komplexer Brechungsindex der Schicht (für transparente Schichten reell,  $N_l = n_l(\lambda)$ ,  $k_l(\lambda) = 0$ )
- $N_s$  komplexer Brechungsindex des Substrats ( $N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$ )

**Bild 1 — Strahlengang beim Modell *Transparente Einfeldschicht***

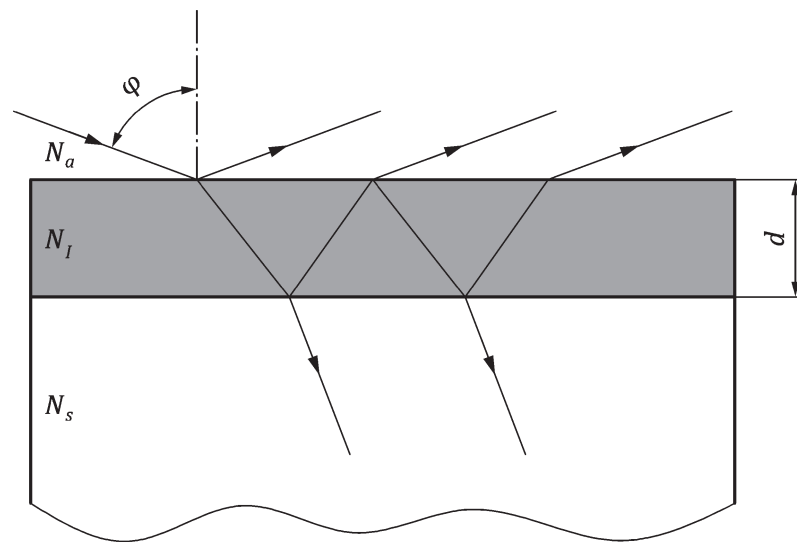
Beim Modell *Transparente Einfeldschicht* wird davon ausgegangen, dass neben dem Einfallswinkel  $\varphi$  nur die Schichtdicke  $d$  und der Brechungsindex  $n_l$  bzw. der Realteil der dielektrischen Funktion  $\varepsilon_{11}$  der Schicht sowie die optischen ( $n_s$ ,  $k_s$ ) bzw. dielektrischen ( $\varepsilon_{1s}$ ,  $\varepsilon_{2s}$ ) Konstanten des Substrats die gemessenen ellipsometrischen Transfergrößen  $\Psi$  und  $\Delta$  bestimmen.

## 4 Transparent single layer model

### 4.1 Optical path

Figure 1 shows the optical path at a certain angle of incidence  $\varphi$  in the *transparent single layer* model. The ambient space (index “a”) will be assigned with the complex refractive index  $N_a$ . Usually, air will serve as the ambient space and the refractive index will actually be in close approximation with  $n_a = 1,000$  and  $k_a = 0,000$ . The transparent single layer will be assigned with the layer thickness  $d$  and the complex refractive index  $N_l$  (index “l” for layer). In the *transparent single layer* model, it is assumed that  $k_l = 0$ . The substrate will be assigned with the complex refractive index  $N_s$ .

Incident light from the ambient space will strike the interface between the ambient space and the transparent single layer; part of it will be reflected. Another part will be refracted and experiences multiple reflections in the transparent single layer at the layer/substrate and the layer/ambient interfaces. The measured signal thus represents the superposition of the multiple reflections (interference) in the transparent single layer.



#### Key

- $\varphi$  angle of incidence between the incident light wave and the normal to the surface
- $N_a$  complex refractive index of the ambient space (for air real,  $N_a = n_a = 1,000$ )
- $d$  layer thickness of the transparent single layer
- $N_l$  complex refractive index of the layer (for transparent layers real,  $N_l = n_l(\lambda)$ ,  $k_l(\lambda) = 0$ )
- $N_s$  complex refractive index of the substrate ( $N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$ )

**Figure 1 — Optical path in the *transparent single layer* model**

In the *transparent single layer* model it is assumed that in addition to the angle of incidence  $\varphi$  only the layer thickness  $d$  and the refractive index  $n_l$  or the real part of the dielectric function  $\epsilon_{11}$  of the layer as well as the optical ( $n_s$ ,  $k_s$ ) or dielectric ( $\epsilon_{1s}$ ,  $\epsilon_{2s}$ ) constants of the substrate will determine the measured ellipsometric transfer quantities  $\Psi$  and  $\Delta$ .

Im Abschnitt A.1 werden Brechungsindizes ausgewählter transparenter Schichtmaterialien angegeben. Im Abschnitt A.2 und Abschnitt A.3 werden Referenzschichten für transparente Einfachschichten auf opaken bzw. transparenten Substraten vorgestellt.

## 4.2 Annahmen

### 4.2.1 Allgemeines

Für das Modell *Transparente Einfachschicht* werden die in Tabelle 2 aufgeführten Modellannahmen zugrunde gelegt.

**Tabelle 2 — Annahmen beim Modell *Transparente Einfachschicht***

| Annahme   | Erläuterung                                                                                                                                                                                                                                                                |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>M1</b> | vernachlässigbare Extinktion (d. h. weder Absorptions- noch Streuverluste) der Schicht ( $k_1(\lambda) = 0$ ) im betrachteten Spektralbereich                                                                                                                              |
| <b>M2</b> | keine zusätzlichen Schichten zur transparenten Einfachschicht weder auf der Einfachschicht (z. B. Feuchtigkeits- oder Schmutzfilme) noch zwischen Schicht und Substrat (z. B. Grenzflächenschichten)                                                                       |
| <b>M3</b> | vernachlässigbare Rauheit der Schicht (und des Substrats) im Vergleich zur Messwellenlänge $\lambda$ üblicherweise $R_a$ bzw. $S_a \leq \lambda/250$<br>vernachlässigbare maximale Rautiefe im Vergleich zur Schichtdicke $d$ in nm: üblicherweise $R_t \leq 1 + d/1\,000$ |
| <b>M4</b> | Homogenität des Substrats und der Schicht insbesondere der Schichtdicke $d$ im Analysegebiet (FOA, en. field of analysis), d. h. keine laterale (x-y) oder vertikale (z) Ortsabhängigkeit (Gradienten) der optischen bzw. dielektrischen Konstanten                        |
| <b>M5</b> | Isotropie oder bekannte Anisotropie der Schicht (und des Substrats), d. h. keine unbekannte Richtungsabhängigkeit der optischen bzw. dielektrischen Konstanten                                                                                                             |
| <b>M6</b> | definierte chemische Zusammensetzung, kristallographische Mikrostruktur und Packungsdichte der Schicht (und des Substrats) mit hinreichender Stabilität (bezogen auf die Messzeit)                                                                                         |
| <b>M7</b> | Nur die Schichtoberfläche und die Schicht-/Substratgrenzfläche tragen zum reflektierten Signal bei und nicht die Rückseitenreflexe transparenter Substrate, d. h. Verwendung hinreichend dicker Substrate, typischerweise mehr als 5 mm                                    |
| <b>S1</b> | Planarität der Probenoberfläche bezüglich der Ausrichtung bei der Messung, d. h. Übereinstimmung der Oberfläche der Schicht mit der Ellipsometer-Referenzebene für symmetrischen Strahlengang                                                                              |
| <b>S2</b> | Übereinstimmung zwischen bei der Messung auftretendem und im Modell verwendeten Einfallswinkel $\varphi$                                                                                                                                                                   |

Die Annahmen M1 bis M7 legen auf das Schicht- und Substratmaterial bezogene und die Annahmen S1 und S2 messtechnische Einflussgrößen fest, die für die Gültigkeit bzw. Güte des Modells *Transparente Einfachschicht* relevant sind.

Clause A.1 gives the refractive indices of specified transparent layer materials. Clause A.2 and Clause A.3 describe the reference layers for transparent single layers on opaque or transparent substrates.

## 4.2 Assumptions

### 4.2.1 General

The following model assumptions given in Table 2 will be made for the *transparent single layer* model.

**Table 2 — Assumptions for the *transparent single layer* model**

| Assumption | Description                                                                                                                                                                                                                                                               |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>M1</b>  | negligible extinction (i.e. neither absorption nor scattering losses) of the layer ( $k_l(\lambda) = 0$ ) in the considered spectral region                                                                                                                               |
| <b>M2</b>  | no layers in addition to the transparent single layer, neither on the single layer (e.g. moisture or dirt films) nor between the layer and the substrate (e.g. interfacial layers)                                                                                        |
| <b>M3</b>  | negligible roughness of the layer (and of the substrate) relative to the measurement wavelength $\lambda$ : typically, $R_a$ or $S_a \leq \lambda/250$<br>negligible maximum roughness depth relative to the layer thickness $d$ in nm: typically $R_t \leq 1 + d/1\,000$ |
| <b>M4</b>  | homogeneity of the substrate and the layer, especially of the layer thickness $d$ in the field of analysis (FOA), i.e. no lateral (x-y) or vertical (z) local dependence (gradients) of the optical or dielectric constants                                               |
| <b>M5</b>  | isotropy or known anisotropy of the layer (and of the substrate), i.e. no unknown directional dependence of the optical or dielectric constants                                                                                                                           |
| <b>M6</b>  | defined chemical composition, crystallographic microstructure and atomic packing factor of the layer (and of the substrate) with sufficient stability (relative to the measuring time)                                                                                    |
| <b>M7</b>  | only the layer surface and the layer/substrate interface but not the backside reflections of transparent substrates will contribute to the reflected signal, i.e. the use of substrates of sufficient thickness, typically of more than 5 mm                              |
| <b>S1</b>  | planarity of the sample's surface in relation to the orientation during measurement, i.e. conformity of the layer's surface with the ellipsometer reference plane to obtain a symmetric optical path                                                                      |
| <b>S2</b>  | consistency between the angle of incidence $\varphi$ applied during measurement and the one used in the model                                                                                                                                                             |

Assumptions M1 to M7 specify the influencing parameters related to the layer and substrate material and assumptions S1 and S2 specify measurement-related influencing parameters which are relevant for the validity and quality of the *transparent single layer* model.

Die in Abschnitt A.2 vorgestellten transparenten Referenzschichten erfüllen die Modellannahmen M1 bis M7 in sehr guter Näherung. Bei der Messung von realen Materialien und Oberflächen werden möglicherweise mehrere der Annahmen des Modells *Transparente Einfeldschicht* nicht erfüllt. Die wesentliche Modellspezifische Voraussetzung stellt die Annahme M1 dar.

#### 4.2.2 Abweichungen von Modell-Annahme M1

Das Auftreten von Absorptions- oder Streuverlusten im betrachteten Spektralbereich führt zur Verletzung der Annahme M1. Hierbei muss beachtet werden, dass mittels Ellipsometrie als einer in Reflexion messenden Methode Extinktionskoeffizienten  $k_1(\lambda) \leq 0,1$  kaum erfasst werden können.

#### 4.2.3 Abweichungen von Modell-Annahme M2

Infolge des Herstellungsprozesses der transparenten Einfeldschicht können Grenzschichten entstehen, die dann zusätzlich im Modell zu berücksichtigen sind.

#### 4.2.4 Abweichungen von Modell-Annahme M3

Technische Substratoberflächen weisen Rauheiten auf, die Streuverluste und Depolarisationseffekte zur Folge haben. Ist die Modell-Annahme M3 nicht erfüllt, kann die Rauheit als Grenzschicht zwischen Substrat und transparenter Einfeldschicht (sowie transparenter Einfeldschicht und Umgebung bei Rauheit der Schichtoberfläche) mit der Effektiv-Medium Theorie [1] beschrieben werden. Als Dicke dieser Rauheitsgrenzschicht wird üblicherweise die maximale Rautiefe  $R_t$  herangezogen, die ein Mehrfaches des arithmetischen Mittenrauwertes  $R_a$  beträgt (siehe Bild 2).

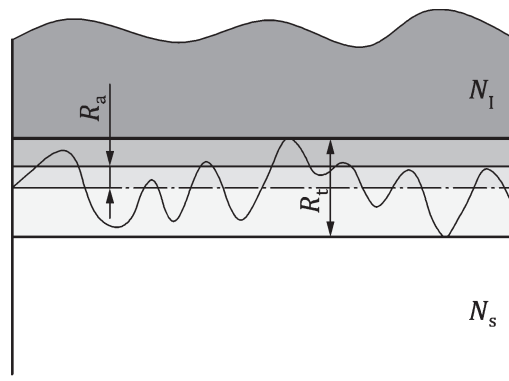


**Bild 2 — Arithmetischer Mittenrauwert  $R_a$  und maximale Rautiefe  $R_t$  einer Rauheitsgrenzschicht am Beispiel der Schicht-/Substratgrenzfläche**

#### 4.2.5 Abweichungen von Modell-Annahme M4

Materialien können lateral und vertikal inhomogen sein. Laterale Inhomogenitäten der Schichtdicke können durch Messungen an verschiedenen Messpunkten (Mapping mit hinreichend kleinem FOA oder hochauflösendes Imaging) erfasst werden. Vertikale Gradienten der optischen/dielektrischen Konstanten müssen im Modell berücksichtigt werden.  $\text{SiO}_2$ -Referenzschichten auf Silizium und Borosilikatglas, siehe Abschnitt A.2 und Abschnitt A.3, weisen eine hohe laterale Homogenität auf.

The transparent reference layers described in Clause A.2 comply with model assumptions M1 to M7 in very close approximation. When measuring actual materials and surfaces, several assumptions of the *transparent single layer* model may not be met.

#### 4.2.2 Deviations from model assumption M1

Absorption or scattering losses occurring in the considered spectral region will cause non-conformance with assumption M1. It shall be noted that it is nearly impossible to capture extinction coefficients  $k_1(\lambda) \leq 0,1$  by using ellipsometry as a method which measures in reflexion.

#### 4.2.3 Deviations from model assumption M2

As a result of the manufacturing process of the transparent single layer, interfacial layers can develop, which then also need to be taken into account in the model.

#### 4.2.4 Deviations from model assumption M3

Physical substrate surfaces show some type of roughness that will cause losses due to scattering as well as depolarization effects. If model assumption M3 is not met, the roughness can be described as the interfacial layer between the substrate and the transparent single layer (as well as between the transparent single layer and the ambient space in case of roughness of the layer surface) using the effective medium theory [1]. The maximum roughness depth  $R_t$ , which is a multiple of the arithmetic mean roughness value  $R_a$ , is usually applied as the thickness of this interfacial roughness layer (see Figure 2).

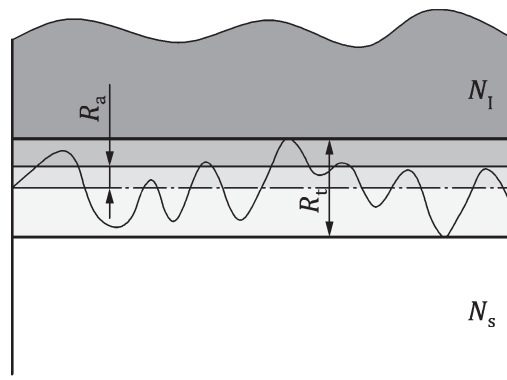


**Figure 2 — Arithmetic mean roughness value  $R_a$  and maximum roughness depth  $R_t$  of an interfacial roughness layer using the example of the layer/substrate interface**

#### 4.2.5 Deviations from model assumption M4

Materials can show lateral and vertical inhomogeneities. Lateral inhomogeneities of the layer thickness can be identified by measurements carried out on different measuring points (mapping with a sufficiently small FOA or high-resolution imaging). Vertical gradients of the optical/dielectric constants shall be taken into account in the model. SiO<sub>2</sub> reference layers on silicon and borosilicate glass, see Clause A.2 and Clause A.3, show a high degree of lateral homogeneity.

#### 4.2.6 Abweichungen von Modell Annahme M5

Schicht und Substrat können anisotrop sein, z. B. als Folge des Beschichtungsprozesses oder als Folge von Grenzflächenspannungen zwischen Schicht und Substrat. Das hat zur Folge, dass der Brechungsindex von der Richtung abhängig ist. Schichtmaterialien können auch doppelbrechend sein und werden dann analog zu Volumenmaterialien mit zwei Brechungsindizes für die ordentliche bzw. außerordentliche Brechung beschrieben. Anisotropien der Schichten (und des Substrats) müssen im Modell berücksichtigt werden. Für SiO<sub>2</sub>-Referenzschichten auf Silizium und Borosilikatglas, siehe Abschnitt A.2 und Anhang A.3, können Anisotropie und Doppelbrechung weitestgehend ausgeschlossen werden.

#### 4.2.7 Abweichungen von Modell-Annahme M6

Änderungen in der chemischen Zusammensetzung, kristallographischen Mikrostruktur oder Packungsdichte stellen Abweichungen der Modell-Annahme dar. Für SiO<sub>2</sub>-Referenzschichten auf Silizium und Borosilikatglas, siehe Abschnitt A.2 und Abschnitt A.3, sind diese Größen definiert und langzeitstabil.

#### 4.2.8 Abweichungen von Modell-Annahme M7

Für transparente Schichten auf zu dünnen transparenten Substraten treten an der Substratrückseite Reflexionen auf, die sich mit dem an der Schichtoberfläche reflektierten Lichtstrahl überlagern und damit die ellipsometrischen Transfergrößen  $\Psi$  und  $\Delta$  beeinflussen. Der Rückseitenreflex kann abhängig vom betrachteten Spektralbereich experimentell durch Aufrauen, Abkleben mit Klebeband, Bestreichen mit schwarzer Farbe oder durch die Verwendung geeigneter, gerätespezifischer Vorrichtungen soweit reduziert werden, dass er vernachlässigt werden darf.

#### 4.2.9 Abweichungen von Modell-Annahme S1

Die korrekte Ausrichtung der zu messenden Oberfläche zur Ellipsometer-Referenzebene ist erst nach Probenjustierung des Fokus in z-Richtung und der Ausrichtung der x-y Probenoberfläche zur Ellipsometer-Referenzebene gegeben. Für Oberflächen mit Welligkeiten oder makroskopisch gekrümmte Oberflächen kann dies aufwändig oder unmöglich sein.

#### 4.2.10 Abweichungen von Modell-Annahme S2

Der tatsächlich bei der Messung verwendete Einfallswinkel kann insbesondere im Zusammenhang mit Modell-Annahme S1 zur Planarität vom Sollwinkel abweichen. Ggf. muss hier ein Winkelfit durchgeführt werden, um den tatsächlich verwendeten Einfallswinkel zu bestimmen, der dann im Modell verwendet werden muss. Auch bei ideal planparallelen Proben muss die Genauigkeit der Winkeleinstellung, die bei der Messunsicherheitsbetrachtung nach 4.5 zu berücksichtigen ist, bekannt sein.

### 4.3 Besonderheiten des Modells *Transparente Einfachsicht*

Infolge der Interferenz der von den Grenzflächen Umgebung/Schicht und Schicht/Substrat reflektierten Lichtwellen, können die Spektren der ellipsometrischen Transfergrößen  $\Psi$  und  $\Delta$  für transparente Schichten Oszillationen aufweisen, deren Vorhandensein und Ausprägung bzw. Anzahl von der Schichtdicke  $d$ , den Brechungsindizes der Schicht, des Substrats und der Umgebung sowie dem Bereich der Messwellenlänge abhängen. Entsprechende Spektren von SiO<sub>2</sub>-Referenzschichten unterschiedlicher Schichtdicke  $d$  sind in Abschnitt A.2 (auf Silizium als opakem Substrat) und Abschnitt A.3 (auf Borosilikatglas als transparentem Substrat) dargestellt. Die Amplitude der Oszillation (Bild A.4 und Bild A.7) ist insbesondere für  $\Psi$  abhängig vom Brechungsindexkontrast der Grenzflächen Umgebung/Schicht und Schicht/Substrat. Die Anzahl der Oszillationen in  $\Psi$  und  $\Delta$  nimmt bei gegebenem Kontrast der Schicht zur Umgebung bzw. zum Substrat mit zunehmender Schichtdicke  $d$  zu. Für eine feste Wellenlänge reproduzieren sich die Maxima/Minima für Vielfache der Zyklusdicke nach Gleichung (A.1) und Bild A.5 bzw. Bild A.9.

#### 4.2.6 Deviations from model assumption M5

The layer and the substrate can be anisotropic, e.g. as a result of the coating process or as a result of interfacial surface tension between the layer and the substrate. As a consequence, the refractive index will be directionally dependent. Layer materials can also be birefringent and will therefore be described similar to bulk materials using two refractive indices for the ordinary and the extraordinary refraction. Anisotropies of the layers (and of the substrate) shall be taken into account in the model. For SiO<sub>2</sub> reference layers on silicon and borosilicate glass, see Clause A.2 and Clause A.3, anisotropy and birefringence can be mostly excluded.

#### 4.2.7 Deviations from model assumption M6

Modifications of the chemical composition, crystallographic microstructure or atomic packing factor are deviations from the model assumptions. For SiO<sub>2</sub> reference layers on silicon and borosilicate glass, see Clause A.2 and Clause A.3, these parameters are well-defined and have long-term stability.

#### 4.2.8 Deviations from model assumption M7

For transparent layers on ultra-thin transparent substrates, reflections will occur on the backside of the substrate, which overlap with the light beam reflected on the layer surface and thus compromise the ellipsometric transfer quantities  $\Psi$  and  $\Delta$ . Depending on the spectral region that is considered, backside reflections can be reduced experimentally to a value that may be neglected by roughening, taping, coating with black paint or by using suitable device-specific fixtures.

#### 4.2.9 Deviations from model assumption S1

The correct alignment of the surface to be measured with respect to the ellipsometer reference plane is only given after sample adjustment of the focus in the z direction and the alignment of the x-y sample surface to the ellipsometer reference plane. For corrugated or macroscopically curved surfaces, this can be complicated or even impossible.

#### 4.2.10 Deviations from model assumption S2

The angle of incidence actually used during measurement can deviate from the specified angle, especially in conjunction with model assumption S1 regarding planarity. If necessary, an angle fit procedure shall be carried out in order to determine the actually used angle of incidence, which shall then be applied in the model. Even with ideally plane-parallel samples, the accuracy of the angle setting, which shall be taken into account in the measurement uncertainty analysis according to 4.5, needs to be known.

### 4.3 Special characteristics of the *transparent single layer model*

Due to the interference of the light waves reflected by the ambient/layer interface and the layer/substrate interface, the spectra of the ellipsometric transfer quantities  $\Psi$  and  $\Delta$  for transparent layers can show oscillations whose occurrence and magnitude or number will depend on the layer thickness  $d$ , the refractive indices of the layer, the substrate and the ambient space as well as on the range of the measurement wavelength. Corresponding spectra of SiO<sub>2</sub> reference layers of different layer thicknesses  $d$  are described in Clause A.2 (on silicon being the opaque substrate) and in A.3 (on borosilicate glass being the transparent substrate). The amplitude of the oscillation (Figure A.4 and Figure A.7) depends on the refractive index contrast of the interfaces ambient/layer and the layer/substrate, in particular for  $\Psi$ . The number of oscillations in  $\Psi$  and  $\Delta$  increases with the given contrast of the layer to the ambient space or to the substrate with increasing layer thickness  $d$ . At a fixed wavelength, the maxima/minima will be reproduced for multiples of the so-called thickness period according to Equation (A.1) and Figure A.5 and Figure A.9.

Das Modell *Transparente Einfachschicht* enthält mit der Schichtdicke  $d$  eine Größe, die unabhängig von der Wellenlänge und vom Einfallswinkel ist. Damit ist ein Mehrwellenlängen- und Mehreinfallswinkel-Fit auf die Schichtdicke möglich, wobei die mittlere quadratische Abweichung ( $D_{\text{RMS}}$ ) nach Gleichung (1) zwischen experimentell bestimmten (Index „exp.“) und modellmäßig simulierten (Index „mod.“) ellipsometrischen Transfergrößen minimiert wird.

$$D_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{2U - V + 1} \sum_{i=1}^U \left[ \left( \frac{\psi_i^{\text{mod.}} - \psi_i^{\text{exp.}}}{u_{\text{sys},\psi_i}} \right)^2 + \left( \frac{\Delta_i^{\text{mod.}} - \Delta_i^{\text{exp.}}}{u_{\text{sys},\Delta_i}} \right)^2 \right]} = \sqrt{\frac{1}{2U - V + 1} \chi^2} \quad (1)$$

Dabei ist

$U$  die Anzahl der Messpunkte;

$V$  die Anzahl der freien Parameter ( $2U \geq V$ ).

**ANMERKUNG** Gleichung (1) ist DIN 50989-1:2018-03 entnommen. Dort und in einigen Auswerteprogrammen werden  $u_{\text{sys},\psi}$  und  $u_{\text{sys},\Delta}$  noch als  $\sigma_{\psi_i}^{\text{exp.}}$  bzw.  $\sigma_{\Delta_i}^{\text{exp.}}$  bezeichnet. Auch die Benennung von  $\sigma_{\psi_i}^{\text{exp.}}$  bzw.  $\sigma_{\Delta_i}^{\text{exp.}}$  als empirische Standardabweichung ist irreführend. Es handelt sich tatsächlich um systematische Unsicherheiten des ellipsometrischen Messsystems, die üblicherweise auf statistische Weise gewonnen werden.

Gleichung (1) beschreibt die Fitqualität bei der Bestimmung der Fitparameter, die auf Basis des gewählten Modells erreicht werden kann. In Softwareprodukten unterschiedlicher Hersteller können außerdem für die Beschreibung der Fitqualität und für die  $D_{\text{RMS}}$ -Berechnung (und somit auch für den Fit) andere Parameter herangezogen werden: zum Beispiel  $N$ ,  $C$ ,  $S$ -Parameter (siehe DIN 50989-1) oder  $\rho$ , das Verhältnis der komplexen Amplitudenreflexionskoeffizienten von  $p$ - zu  $s$ -polarisiertem Licht. Die Normierung dieser Messgrößen (für  $\Psi$  und  $\Delta$  in Gleichung (1) die Division durch  $u_{\text{sys},\psi}$  und  $u_{\text{sys},\Delta}$ ) kann auch auf unterschiedliche Weise erfolgen, sodass die Wichtung verschiedener Messpunkte unterschiedlich ist. Deswegen sind die  $D_{\text{RMS}}$ -Werte nur bei gleichen Randbedingungen der Messung und des Fits vergleichbar.

Sind die optischen/dielektrischen Konstanten des Schichtmaterials bekannt, kann auf Basis des Modells *Transparente Einfachschicht* die Schichtdicke als dann einziger Parameter direkt aus dem Fit bestimmt werden. Dabei werden für das Substrat- bzw. das Schichtmaterial entweder die nach DIN 50989-2 experimentell bestimmten optischen/dielektrischen Konstanten oder aber Datenbankwerte verwendet.

Sind die optischen/dielektrischen Konstanten der Schicht nicht bekannt oder für den Fall, dass die Übereinstimmung zwischen den modellmäßig simulierten und experimentell bestimmten ellipsometrischen Transfergrößen nicht ausreichend gut (hoher Betrag des  $D_{\text{RMS}}$ -Minimums) ist, kann zusätzlich ein Fit auf die Parameter der ausgewählten Dispersionsgleichung der Materialkonstanten  $n$  bzw.  $\varepsilon_1$  durchgeführt und so die Schichtdicke  $d$  und die genannten Materialkonstanten gleichzeitig bestimmt werden.

Bei dünnen Schichten ( $n \cdot d < 30 \text{ nm}$ ) kann die gleichzeitige Bestimmung der Schichtdicke  $d$  und des Brechungsindex  $n$  wegen einer möglichen Korrelation von  $d$  und  $n$  erschwert sein.

#### 4.4 Validierung

Bei der Bestimmung der Schichtdicke  $d$  nach 4.3 erfolgt bereits eine erste Validierung bezüglich der verwendeten optischen/dielektrischen Konstanten. Diese Validierung und die ggf. notwendig werdende Validierung der Schichtarchitektur erfolgt nach der Prinzipdarstellung in Bild 3. Neben dem  $D_{\text{RMS}}$ -Wert muss dabei auch die Plausibilität des Ergebnisses hinterfragt werden. Insbesondere für Einwellenlängen-Messungen muss die Startschichtdicke für den Fit in der richtigen Interferenzordnung (Abschnitt A.8) liegen, da sich die ellipsometrischen Transfergrößen unterschiedlicher Interferenzordnungen nicht unterscheiden (Bild A.5 und Bild A.9).

The layer thickness  $d$  in the *transparent single layer* model is a parameter, which is independent of the wavelength and the angle of incidence. This allows a multi-wavelength and a multi-angle of incidence fit to the layer thickness, where the root-mean-square deviation ( $D_{\text{RMS}}$ ) between the ellipsometric transfer quantities that have been determined by experiment and those that have been determined by model simulation is minimised by using Equation (1).

$$D_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{2U - V + 1} \sum_{i=1}^U \left[ \left( \frac{\psi_i^{\text{mod.}} - \psi_i^{\text{exp.}}}{u_{\text{sys},\psi_i}} \right)^2 + \left( \frac{\Delta_i^{\text{mod.}} - \Delta_i^{\text{exp.}}}{u_{\text{sys},\Delta_i}} \right)^2 \right]} = \sqrt{\frac{1}{2U - V + 1} \chi^2} \quad (1)$$

where

$U$  is the number of measuring points;

$V$  is the number of free parameters ( $2U \geq V$ ).

**NOTE** Equation (1) can be found in DIN 50989-1:2018-03. In that document and in some evaluation programs,  $u_{\text{sys},\psi}$  and  $u_{\text{sys},\Delta}$  are still designated  $\sigma_{\psi_i}^{\text{exp.}}$  and  $\sigma_{\Delta_i}^{\text{exp.}}$ . In addition, the designation of  $\sigma_{\psi_i}^{\text{exp.}}$  and  $\sigma_{\Delta_i}^{\text{exp.}}$  as the experimental standard deviation will lead to confusion. They actually designate the systematic uncertainties of the ellipsometric measuring system that are usually determined by means of statistics.

Equation (1) describes the fit quality for the determination of the fit parameters, which can be achieved based on the specified model. In software products of different software developers, other parameters can also be used for the description of the fit quality and for the  $D_{\text{RMS}}$  calculation (and thus also for the fit): for example  $N$ ,  $C$ ,  $S$  parameters (see DIN 50989-1) or  $\rho$ , the ratio of complex amplitude reflection coefficients of  $p$ - to  $s$ -polarized light. Normalization of these measurands (for  $\Psi$  and  $\Delta$  in Equation (1) it is the division by  $u_{\text{sys},\psi}$  and  $u_{\text{sys},\Delta}$ ) can also be achieved by other means, leading to a different weighting of several measuring points. For this reason, the  $D_{\text{RMS}}$  values are only comparable under identical measurement conditions.

If the optical/dielectric constants of the layer material are known, the layer thickness will be the only parameter that can be determined directly from the fit based on the *transparent single layer* model. In that case either the optical/dielectric constants that have been experimentally determined according to DIN 50989-2 or database values are used for the substrate or layer material.

If the optical/dielectric constants of the layer are unknown or if the model-based simulated ellipsometric transfer quantities do not sufficiently match the experimentally determined ellipsometric transfer quantities (high value of the  $D_{\text{RMS}}$  minimum), an additional fit to the parameters of the specified dispersion equation for the material constants  $n$  and  $\varepsilon_1$  can be made, and the layer thickness  $d$  and the material constants mentioned can be determined simultaneously.

For thin layers ( $n \cdot d < 30$  nm), the simultaneous determination of the layer thickness  $d$  and the refractive index  $n$  can be difficult due to a possible correlation of  $d$  and  $n$ .

#### 4.4 Validation

For the determination of the layer thickness  $d$  according to 4.3, a first validation of the applied optical/dielectric constants will already be carried out. This validation and, if necessary, the validation of the layer architecture will be carried out according to the principles shown in Figure 3. In addition to the  $D_{\text{RMS}}$  value, plausibility of the results shall also be analysed. Especially for measurements at a single wavelength, the initial layer thickness for the fit shall be in the correct interference order (Clause A.8), since the ellipsometric transfer quantities of different interference orders are identical (Figure A.5 and Figure A.9).

Dabei kann bei Einwellenlängen-Messungen ein Fit nur dann erfolgen, wenn Messungen bei mehreren Winkeln vorliegen. Der absolute Betrag der  $D_{\text{RMS}}$ -Minima darf dabei immer nur unter identischen Bedingungen (Probe, Modell, Messung) verglichen werden, wie auch Tabelle A.1 bis Tabelle A.4 für Standards bzw. Referenzschichten nachweisen.

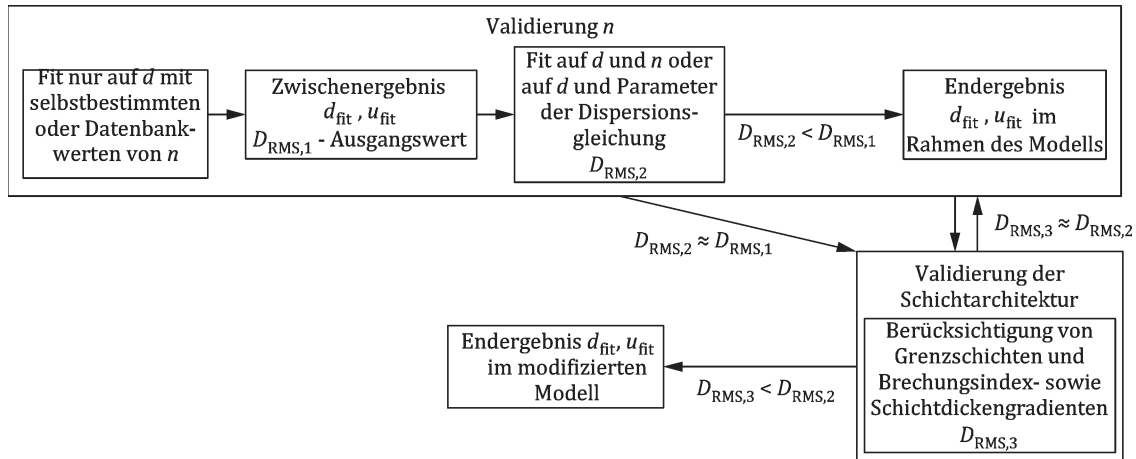


**Bild 3 — Validierung des Modells *Transparente Einzelschicht***

Durch die in Bild 3 dargestellte Validierung wird sichergestellt, dass der erhaltene  $D_{\text{RMS}}$ -Wert der kleinste mögliche unter den gegebenen Bedingungen ist, und damit bestmögliche Übereinstimmung zwischen den modellmäßig simulierten und experimentell bestimmten ellipsometrischen Transfergrößen erzielt wird.

Die Anfangswerte des Fit-Parameters Schichtdicke  $d$  und die zunächst verwendeten optischen bzw. dielektrischen Konstanten (für das Substrat und die transparente Einzelschicht), entweder bestimmt aus einer Messung oder unter Verwendung von Datenbankwerten, müssen nah genug an der durch den Fit zu bestimmenden Schichtdicke  $d$  bzw. den tatsächlichen optischen/dielektrischen Konstanten der Schicht/des Substrats liegen. Anderenfalls besteht die Gefahr, dass das  $D_{\text{RMS}}$ -Minimum ein lokales Minimum ist und das Fitergebnis nicht die Realität abbildet. Bei nichtidealen Proben kann zudem z. B. die Berücksichtigung der Rauheit und von Schichtdicken- oder Brechungsindexgradienten notwendig sein. Dies muss dann im Modell implementiert werden, um die Schichtdicke  $d$  bestmöglich zu fitten.

Ist das Modell *Transparente Einzelschicht* sehr gut erfüllt, ergibt sich für den Fit bei verschiedenen Einfallswinkeln für die gleiche Schichtdicke jeweils ein ausgeprägtes Minimum in der  $D_{\text{RMS}}$ -Funktion nach Gleichung (1). Bild 4 zeigt die  $D_{\text{RMS}}$ -Funktion beim Schichtdickenfit eines  $\text{SiO}_2$ -Schichtdickenstandards mit  $d = (388,4 \pm 2,1)$  nm wie spezifiziert. Aus den Fits im Spektralbereich 192 nm bis 1 700 nm ergeben sich für verschiedene Einfallswinkel trotz unterschiedlichem Betrag des  $D_{\text{RMS}}$ -Minimums kaum unterscheidbare Fitergebnisse für die Schichtdicke von 389,63 nm bei den Einfallswinkeln von 65° und 70° und 389,68 nm bei 75°. Das Fitergebnis für die Schichtdicke aus der Fitprozedur bei allen drei Winkeln gleichzeitig beträgt 389,65 nm. In Tabelle A.1 bis Tabelle A.4 sind zudem die Ergebnisse von spektralen Fits bei verschiedenen Einfallswinkeln mit den Messungen aus Einwellenlängen-Messungen verglichen.

A fit for measurements at a single-wavelength is only possible if measurements at different angles are available. Therefore, the absolute value of the  $D_{\text{RMS}}$  minima may only be compared under identical conditions (sample, model, measurement), as demonstrated in Table A.1 to Table A.4 for standard or reference layers.

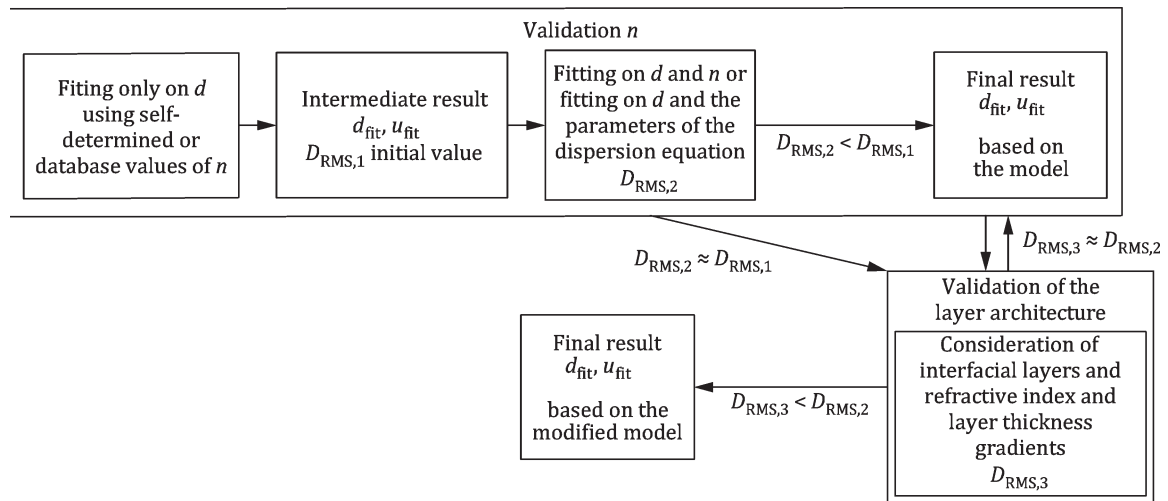
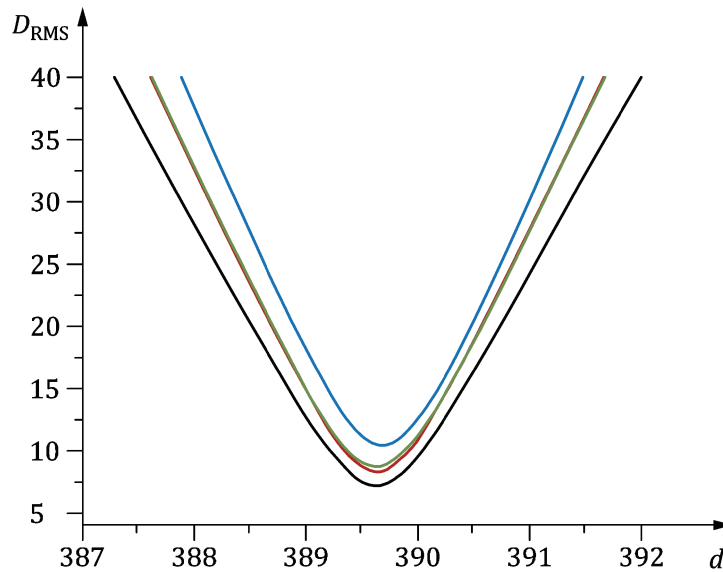


**Figure 3 — Validation of the *transparent single layer* model**

Based on the validation according to Figure 3 it is ensured that the obtained  $D_{\text{RMS}}$  value is the smallest possible value under the given conditions and that the model-simulated ellipsometric transfer quantities match the experimentally determined ellipsometric transfer quantities in the best possible way.

The initial values of the fit parameter for the layer thickness  $d$  and the initially used optical/dielectric constants (for the substrate and the transparent single layer), either determined from measurement or by using database values, shall be sufficiently close to the layer thickness  $d$  that is to be determined by fitting, or sufficiently close to the actual optical/dielectric constants of the layer/substrate. Otherwise, there is a risk that the  $D_{\text{RMS}}$  minimum is a locally defined minimum value and that the fitting result does not represent reality. For non-ideal samples it can be necessary to take into account the roughness and the gradients of the layer thickness or refractive indices. This shall be implemented in the model in order to obtain the best fit for the layer thickness  $d$ .

If the *transparent single layer* model is strictly met, a pronounced minimum in the  $D_{\text{RMS}}$  function according to Equation (1) is achieved for each fit at different angles of incidence for the same layer thickness. Figure 4 illustrates the  $D_{\text{RMS}}$  function for the layer thickness fit of an  $\text{SiO}_2$  layer thickness standard with  $d = (388,4 \pm 2,1)$  nm as specified. Despite the different  $D_{\text{RMS}}$  minimum values at different angles of incidence, the fits in the spectral region from 192 nm to 1 700 nm will lead to nearly identical fitting results for the layer thickness of 389,63 nm at the angles of incidence of 65° and 70°, and for the layer thickness of 389,68 nm at an angle of incidence of 75°. The fitting result for the layer thickness resulting from the fitting procedure at all three angles simultaneously is 389,65 nm. In addition, the results of spectral fits at different angles of incidence are compared to the results from single-wavelength measurements in Table A.1 to Table A.4.



### Legende

- $D_{\text{RMS}}$  mittlere quadratische Abweichung  
 $d$  Schichtdicke in nm  
 — Schichtdickenfit bei AOI von 65°  
 — Schichtdickenfit bei AOI von 70°  
 — Schichtdickenfit bei AOI von 75°  
 — Schichtdickenfit bei AOI von 65°, 70° und 75°

**Bild 4 — Mittlere quadratische Abweichung der Schichtdicke bei einem Schichtdickenstandard mit  $d = (388,4 \pm 2,1)$  nm, wie spezifiziert, von SiO<sub>2</sub> auf Silizium im Wellenlängenbereich 192 nm bis 1 700 nm aus Fits bei verschiedenen Einfallswinkeln**

Die mittlere quadratische Abweichung ( $D_{\text{RMS}}$ ) ist ein Maß für die Güte des Fits, wobei kleinere Beträge des  $D_{\text{RMS}}$ -Minimums eine bessere Übereinstimmung zwischen den auf Basis des Modells simulierten ( $\Psi_{\text{mod}}, \Delta_{\text{mod}}$ ) und den aus der Messung experimentell bestimmten ellipsometrischen Größen ( $\Psi_{\text{exp}}, \Delta_{\text{exp}}$ ) unter sonst identischen Randbedingungen (Probe, Spektralbereich, Einfallswinkel, Fitparameter, Anzahl Stützstellen) bedeuten. Das Minimum in der  $D_{\text{RMS}}$ -Funktion entspricht somit dem bestmöglichen Fit für die Schichtdicke  $d$  bzw. den Brechungsindex  $n$  oder die Parameter einer Dispersionsfunktion unter den gegebenen Randbedingungen (siehe Beispiele in Abschnitt A.5).

## 4.5 Messunsicherheit

### 4.5.1 Messunsicherheit der ellipsometrischen Transfergrößen $\Psi$ und $\Delta$

Die Berechnung der Messunsicherheiten der ellipsometrischen Transfergrößen  $\Psi$  und  $\Delta$  erfolgt vollständig identisch zu DIN 50989-2:2021-04, 4.5.1.