

DIN 50989-5



ICS 19.100

Einsprüche bis 2023-03-27

Entwurf**Ellipsometrie –
Teil 5: Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten;
Text Deutsch und Englisch**

Ellipsometry –
Part 5: Multiple layers and periodic layers model;
Text in German and English

Ellipsométrie –
Partie 5: Modèle multicouche et modèle des couches périodiques;
Texte en allemand et anglais

Anwendungswarnvermerk

Dieser Norm-Entwurf mit Erscheinungsdatum 2023-01-27 wird der Öffentlichkeit zur Prüfung und Stellungnahme vorgelegt.

Weil die beabsichtigte Norm von der vorliegenden Fassung abweichen kann, ist die Anwendung dieses Entwurfs besonders zu vereinbaren.

Stellungnahmen werden erbeten

- vorzugsweise online im Norm-Entwurfs-Portal von DIN unter www.din.de/go/entwuerfe bzw. für Norm-Entwürfe der DKE auch im Norm-Entwurfs-Portal der DKE unter www.entwuerfe.normenbibliothek.de, sofern dort wiedergegeben;
- oder als Datei per E-Mail an nmp@din.de möglichst in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/go/stellungnahmen-norm-entwuerfe oder für Stellungnahmen zu Norm-Entwürfen der DKE unter www.dke.de/stellungnahme abgerufen werden;
- oder in Papierform an den DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP), 10772 Berlin oder Am DIN-Platz, Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin.

Die Empfänger dieses Norm-Entwurfs werden gebeten, mit ihren Kommentaren jegliche relevanten Patentrechte, die sie kennen, mitzuteilen und unterstützende Dokumentationen zur Verfügung zu stellen.

Gesamtumfang 44 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)

Inhalt

	Seite
Vorwort	4
Einleitung	5
1 Anwendungsbereich	6
2 Normative Verweisungen	6
3 Begriffe, Symbole und Abkürzungen	6
3.1 Begriffe	6
3.2 Symbole und Abkürzungen	6
4 Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten	7
4.1 Strahlengang und Klassifizierung von Mehrfachsichten und periodischen Schichten	7
4.1.1 Strahlengang	7
4.1.2 Klassifizierung von Mehrfachsichten und periodischen Schichten	9
4.2 Annahmen	11
4.3 Besonderheiten des Modells Mehrfachsichten und periodische Schichten	13
4.4 Validierung	13
4.5 Messunsicherheit	15
4.5.1 Messunsicherheit der ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ	15
4.5.2 Messunsicherheit u_d der Schichtdicke d	16
5 Prüfbericht	17
Anhang A (informativ) Ergänzungen zum Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten	18
A.1 Messbeispiel einer periodischen $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ Mehrfachsicht auf BK-7 Glas mit zusätzlicher SiO_2 -Schicht	18
A.2 Hinweise für die Messpraxis	20
Literaturhinweise	21

Bilder

Bild 1 — Strahlengang beim Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten exemplarisch für hoch- und niedrigbrechende periodische Schichten	8
Bild 2 — Mess- und Visualisierbarkeit der Monolagen-Stufen von Graphen	10
Bild 3 — <i>In-situ</i> Monitoring der Atomic Layer Deposition (ALD) von Al_2O_3 auf Silizium	10
Bild 4 — Validierung des Modells Mehrfach- und periodische Schichten bei der Bestimmung von Einzelschichtdicken d_i unterscheidbarer Einzelschichtmaterialien	14
Bild 5 — Messung einer periodischen $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ Mehrfachsicht auf BK-7 Glassubstrat mit zusätzlicher SiO_2 -Schicht — mittlere quadratische Abweichung des Fits der Einzelschichtdicken d_i im Wellenlängenbereich 192 nm bis 1 700 nm aus Fits bei verschiedenen Einfallswinkeln	15
Bild A.1 — Periodische Mehrfachsicht $5 \times (\text{TiO}_2/\text{SiO}_2)$ auf einem BK-7 Glassubstrat mit zusätzlicher SiO_2 -Schicht	18
Bild A.2 — Messung einer periodischen Mehrfachsicht $5 \times (\text{TiO}_2/\text{SiO}_2)$ auf einem BK-7 Glassubstrat mit zusätzlicher SiO_2 -Schicht: ellipsometrische Transfergröße Ψ bei AOI 55° , 65° und 75°	19

Tabellen

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen	6
Tabelle 2 — Annahmen beim Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten	12

Tabelle A.1 — Ergebnis des Schichtdickenfits $d_{i,\text{fit}}$ einer periodischen Mehrfachschicht $5 \times (\text{TiO}_2/\text{SiO}_2)$ auf einem BK 7 Glassubstrat mit zusätzlicher SiO_2-Schicht im Spektralbereich 192 nm bis 1 700 nm	19
--	-----------

Vorwort

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

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

- Teil 1: Grundlagen
- Teil 2: Modell Volumenmaterial
- Teil 3: Modell Transparente Einfachsicht
- Teil 4: Modell Semi-transparente Einfachsicht
- Teil 5: Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten
- Teil 6: Modell Effektive Materialien¹

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

¹ In Vorbereitung.

Einleitung

Bei der Messmethode 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.

Beim Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* wird eine Fitprozedur zur Bestimmung der Schichtdicken d und der optischen Konstanten n und k der Schichten bei bekannten optischen Konstanten des Substrats angewandt. Mehrfachschichten und periodische Schichten können aus chemisch gleichen oder unterschiedlichen Materialien bestehen. Werden chemisch gleiche Schichten mit demselben Beschichtungsverfahren hergestellt, ist davon auszugehen, dass deren optische Konstanten identisch sind und die betreffenden Einzelschichten ellipsometrisch nicht mehr aufgelöst werden können. Der Fit bezieht dann üblicherweise nur auf die Gesamtschichtdicke d_t anderenfalls auf die Schichtdicke der einzelnen Schichten d_i . Für periodische Schichten aus zwei Materialien sind somit nur zwei Sätze optischer Konstanten und bei identischen Beschichtungszeiten pro Schichtmaterial auch nur zwei Einzelschichtdicken zu fitten. Gesamt- und Einzelschichtdicken von Mehrfachschichten und periodischen Schichten sind *a priori* unabhängig von der Wellenlänge und dem Einfallswinkel, während der wellenlängenabhängige Brechungsindex n und der ebenfalls wellenlängenabhängigen Extinktionskoeffizienten k der Einzelschichten nur vom Einfallswinkel unabhängig sind. Mit dem Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* wird die Bestimmung der Gesamt- bzw. Einzelschichtdicken und der komplexen Brechungsindizes der Schichten möglich.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt mittels ellipsometrischer Messungen und deren Auswertung das Verfahren zur Bestimmung der Gesamtschichtdicke d_t des Schichtsystems und der Schichtdicken d_i von Einzelschichten in Mehrfachsicht- bzw. periodischen Schichtsystemen sowie deren optischen (Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient k) bzw. dielektrischen (Realteil ε_1 und Imaginärteil ε_2) Konstanten/Funktionen auf Basis des Modells *Mehrfachsichten und periodische Schichten* 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 50989-1:2018-03, *Ellipsometrie — Teil 1: Grundlagen*

DIN 50989-2:2021-04, *Ellipsometrie — Teil 2: Modell Volumenmaterial*

DIN 50989-3:2022-04, *Ellipsometrie — Teil 3: Modell transparente Einfachschicht*

DIN 50989-4:2022-09, *Ellipsometrie — Teil 4: Modell Semi-transparente Einfachschicht*

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 Begriffe, Symbole und Abkürzungen

3.1 Begriffe

Es werden keine Begriffe in diesem Dokument angegeben.

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>

3.2 Symbole und Abkürzungen

In Tabelle 1 werden alle in diesem Dokument bzw. zusätzlich zu DIN 50989-1, DIN 50989-2, DIN 50989-3 und DIN 50989-4 verwendeten Symbole und Abkürzungen dargestellt, wobei die Anforderungen von ISO/IEC Guide 98-3 und DIN EN ISO/IEC 17025 zu berücksichtigen sind.

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen

Symbol und Abkürzung	Erläuterung
n	Brechungsindex (Realteil des komplexen Brechungsindex N)
k	Extinktionskoeffizient (Imaginärteil des komplexen Brechungsindex N)
N	komplexer Brechungsindex
n_H	Brechungsindex der hochbrechenden Einzelschicht (H, en: high)

Tabelle 1 (fortgesetzt)

Symbol und Abkürzung	Erläuterung
n_L	Brechungsindex der niedrigbrechenden Einzelschicht (L, en: low)
ε_1	Realteil der komplexen dielektrischen Funktion
ε_2	Imaginärteil der komplexen dielektrischen Funktion
ε	komplexe dielektrische Funktion
φ	Einfallswinkel der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot
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
d_i	Schichtdicke einer Einzelschicht des Mehrfach- oder periodischen Schichtsystems (i, en: individual)
d_t	Schichtdicke der Gesamtschicht des Mehrfach- oder periodischen Schichtsystems (t, en: total)
d_p	Eindringtiefe (p, en: penetration)
D_{RMS}	mittlere quadratische Abweichung (en: root-mean-square deviation, in DIN 50989-1 und einigen Auswerteprogrammen noch <i>RMSE</i> , root-mean-square error) genannt)
$D_{RMS, \min}$	Minimum der mittleren quadratische Abweichung
d_{fit}	Fitergebnis für die Schichtdicke der Gesamt- bzw. Einzelschicht
z	Anzahl der Einzelschichten oder Monolagen
u_d	kombinierte Unsicherheit der Schichtdicke d unter Berücksichtigung aller Unsicherheitsanteile
c_{samp}	Erweiterungsfaktor (en: coverage factor) ^a der Probe (samp en: sample) zur Angabe der Messunsicherheit (erweiterten kombinierten Unsicherheit)
^a Im ISO/IEC Guide 98-3 wird der Erweiterungsfaktor mit „ k “ bezeichnet.	

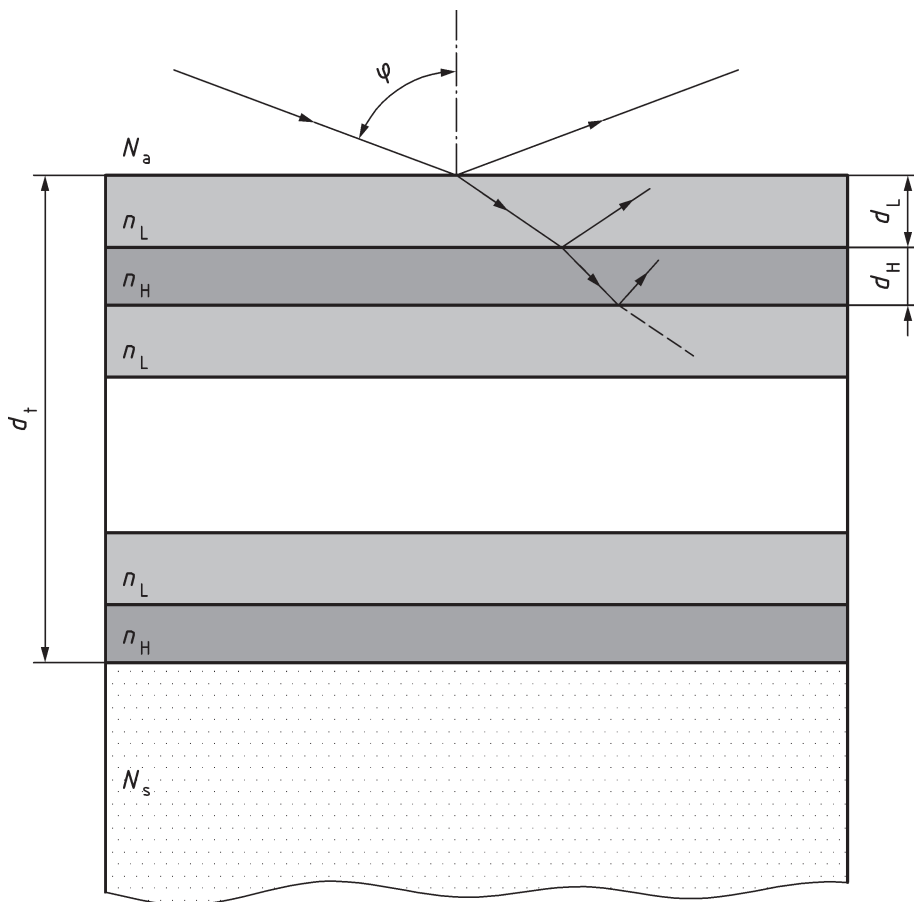
4 Modell Mehrfachschichten und periodische Schichten

4.1 Strahlengang und Klassifizierung von Mehrfachschichten und periodischen Schichten

4.1.1 Strahlengang

Der Strahlengang unter dem Einfallswinkel φ im Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* ist in Bild 1 exemplarisch für periodische hoch- und niedrigbrechende Einzelschichten dargestellt, für die im betrachteten Spektralbereich das Modell *transparente Einfachschicht* also $k = 0$ angenommen wird.

Der Umgebung (Index a, en: ambient) wird der komplexe Brechungsindex N_a zugeordnet. Üblicherweise wird Luft als Umgebung fungieren, der Brechungsindex ist dann reell mit $n_a = 1,000$ und $k_a = 0,000$ in sehr guter Näherung. Den transparenten Einzelschichten werden die Schichtdicken d_H (Index H – hochbrechend, en: high) und d_L (Index L – niedrigbrechend, en: low) und die Brechungsindizes n_H und n_L zugeordnet und somit angenommen, dass die optischen Konstanten aller H- bzw. L-Schichten jeweils identisch sind. Dem Substrat wird der komplexe Brechungsindex N_s zugeordnet.



Legende

- φ Einfallswinkel der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot
- N_a komplexer Brechungsindex des umgebenden Mediums (für Luft reell, $N_a = n_a = 1,000$)
- d_H Schichtdicke der hochbrechenden Einzelschicht
- d_L Schichtdicke der niedrigbrechenden Einzelschicht
- d_t Schichtdicke der Gesamtschicht
- n_H Brechungsindex der hochbrechenden Einzelschicht (für transparente Schichten $N_H = n_H(\lambda)$, $k_H(\lambda) = 0$)
- n_L Brechungsindex der niedrigbrechenden Einzelschicht (für transparente Schichten $N_L = n_L(\lambda)$, $k_L(\lambda) = 0$)
- N_s komplexer Brechungsindex des Substrats ($N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$)

Bild 1 — Strahlengang beim Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* exemplarisch für hoch- und niedrigbrechende periodische Schichten

Beim Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* wird davon ausgegangen, dass neben dem Einfallswinkel φ die Schichtdicken d_i jeder Schicht und ihre komplexen Brechungsindizes N_i (Index i , en: layer) bzw. die komplexen dielektrischen Funktionen ϵ_i der Schichten sowie die optischen (n_s, k_s) bzw. dielektrischen ($\epsilon_{1s}, \epsilon_{2s}$) Konstanten des Substrats die gemessenen ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ bestimmen.

Dabei ist zu beachten, dass es für Mehrfachschichten und periodische Schichten zwei Fälle gibt: Schichtsysteme aus ellipsometrisch nicht unterscheidbaren bzw. ellipsometrisch unterscheidbaren Einzelschichtmaterialien.

4.1.2 Klassifizierung von Mehrfachschichten und periodischen Schichten

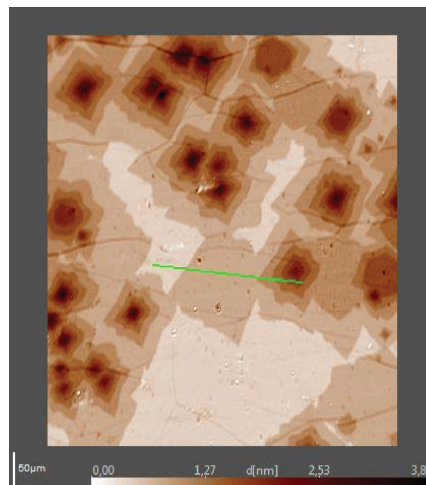
4.1.2.1 Mehrfachschichten nicht unterscheidbarer Einzelschichtmaterialien

Mehrfachschichten aus intermittierender Beschichtung:

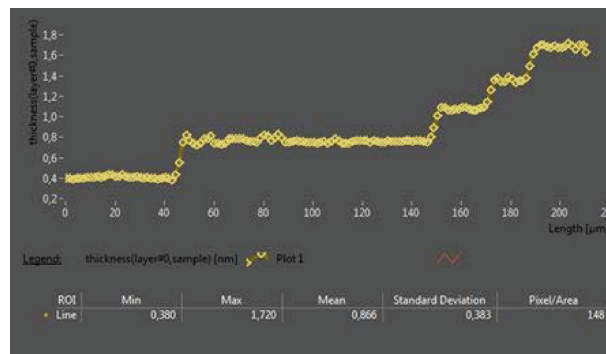
Mehrfachschichten aus intermittierender Beschichtung entstehen bei unterbrochen wiederholter Deposition des Schichtmaterials zum Beispiel zur Erhöhung der Schichtdickenuniformität und/oder Absenkung der Temperaturbelastung des Substrats. Die so aufgetragenen Einzelschichten sind ellipsometrisch nicht auflösbar, da kein hinreichender Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten vorhanden ist. Das Gesamtsystem ist somit nicht als Mehrschichtsystem modellierbar. Die Gesamtschicht kann gegebenenfalls als transparente/semi-transparente Einfachschicht nach DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 behandelt werden und die Gesamtschichtdicke d_t nebst Messunsicherheit u_d dann nach diesen Normen bestimmt werden.

Mehrfachschichten aus 2D-Materialien:

Mehrfachschichten aus 2D-Materialien entstehen bei Präparation atomarer Monolagen als 2D-Materialien (z. B. Graphen). Die in diesem Fall entstehenden Einzelschichten (Monolagen) sind ellipsometrisch nicht auflösbar, da kein hinreichender Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten vorhanden ist. Das Gesamtsystem ist somit nicht als Mehrschichtsystem modellierbar. Monolagen-Stufen von Graphen sind aber mess- und visualisierbar (Bild 2). Die Gesamtschicht kann gegebenenfalls als transparente /semi-transparente Einfachschicht nach DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 behandelt werden und die Gesamtschichtdicke d_t nebst Messunsicherheit u_d dann nach diesen Normen bestimmt werden.



a) Graphen-Flakes mit gestuften Graphenlagen

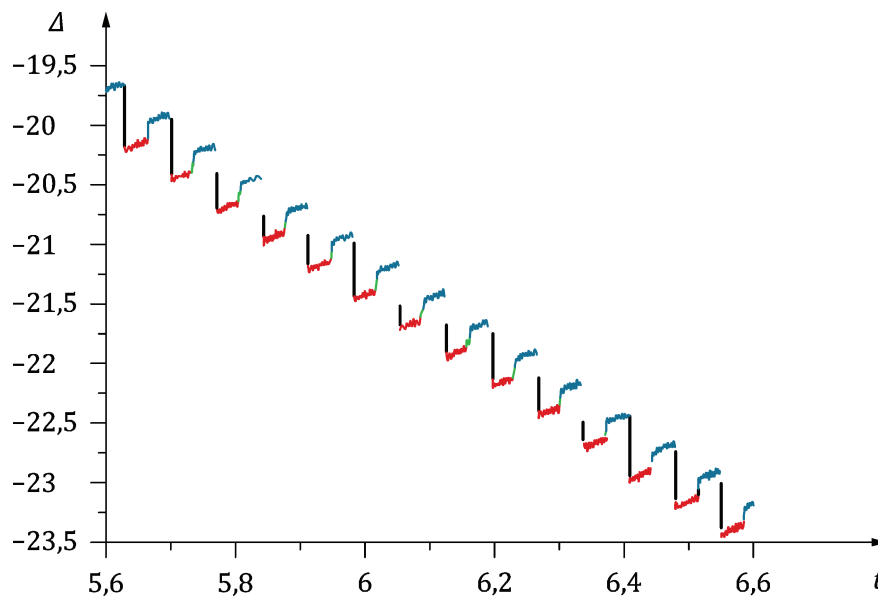


b) Stufenhöhen der Graphenlagen

Bild 2 — Mess- und Visualisierbarkeit der Monolagen-Stufen von Graphen

Mehrfachschichten aus ALD-Beschichtung:

Mehrfachschichten aus ALD-Beschichtungen basieren auf der Deposition molekularer Monolagen (z. B. Al_2O_3) in mehreren Prozessschritten. Die in diesem Fall entstehenden Einzelschichten (Monolagen) sind ellipsometrisch nicht auflösbar, da kein Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten vorhanden ist. Das Gesamtsystem ist nicht als Mehrschichtsystem modellierbar. Das Monolagen-Wachstum und die Prozessschrittabfolge sind aber ellipsometrisch *in-situ* erfassbar (Bild 3). Die Gesamtschicht wird als transparente/semi-transparente Einfachschicht nach DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 behandelt und die Gesamtschichtdicke d_t nebst Messunsicherheit u_d kann dann nach diesen Normen bestimmt werden.



Legende

- Gaseinlass Reaktand
- Spülung der Gasphase
- Plasmapul
- Spülung nach Plasmapul

Bild 3 — *In-situ* Monitoring der Atomic Layer Deposition (ALD) von Al_2O_3 auf Silizium

4.1.2.2 Mehrfachschichten unterscheidbarer Einzelschichtmaterialien

Mehrfachschichten aus alternierender Beschichtung chemisch gleichen Schichtmaterials:

Mehrfachschichten des chemisch gleichen Materials werden in einigen Fällen zur Reduzierung von Schichtdefekten unter Verwendung unterschiedlicher Depositionsprozesse wie z. B. reaktives Elektronenstrahlverdampfen und reaktives RF-Magnetronspütern abgeschieden. Die entstehenden Einzelschichten vom Typ A und vom Typ B können ellipsometrisch auflösbar sein, wenn ein hinreichender Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten, zum Beispiel auf Grund von Packungsdichteunterschieden, vorhanden ist. Das Gesamtsystem ist dann als Mehrschichtsystem (ABABAB ...) modellierbar, wobei die optischen Konstanten aller A- bzw. B-Schichtmaterialien jeweils identisch sind. Die Einzelschichten werden als transparente/semi-transparente Einfachschichten nach DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 behandelt. Die Einzelschichtdicken d_i sowie die Gesamtschichtdicke d_t sind aus der Modellierung bestimmbar.

Kombination transparent/transparent:

Diese Mehrfachschichten entstehen z. B. bei der Deposition optischer Vielschichtsysteme vom HL-Typ (H – hochbrechendes und L – niedrigbrechendes Schichtmaterial). Die entstehenden Einzelschichten vom Typ H und vom Typ L sind ellipsometrisch auflösbar, da ein hinreichender Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten vorhanden ist.

Das Gesamtsystem (HLHLHL ...) ist als Mehrschichtsystem modellierbar, wobei die optischen Konstanten aller H- bzw. L-Schichtmaterialien jeweils identisch sind. Die Einzelschichten werden als transparente Einfachschichten nach DIN 50989-3 behandelt. Die Einzelschichtdicken d_i sowie die Gesamtschichtdicke d_t sind aus der Modellierung bestimmbar. Weit verbreitet sind Schichtsysteme auf Basis von $\lambda/4$ – Designs (identische Schichtdicken aller H- bzw. L-Schichten) und *needle* – Designs (stochastische Schichtdicken aller H- bzw. L-Schichten).

Kombination transparent/semi-transparent:

Für diese Mehrfachschichten gibt es sehr unterschiedliche Beispiele. Die verwendeten Einzelschichten sind ellipsometrisch auflösbar, da ein hinreichender Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten vorhanden ist. Das Gesamtsystem ist als Mehrschichtsystem modellierbar. Die Einzelschichten werden als transparente/semi-transparente Einfachschichten nach DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 behandelt. Die Einzelschichtdicken d_i sowie die Gesamtschichtdicke d_t sind aus der Modellierung bestimmbar. Als Beispiel sei das Schichtsystem von 5 nm Cr/300 nm SiO₂ auf Si genannt, das auch zur genaueren Bestimmung der Schichtdicke dünner Metallschichten verwendet werden kann.

Kombination semi-transparent/semi-transparent: Diese Mehrfachschichten entstehen bei der Deposition von Quasi-2D-Materialien. Die verwendeten Einzelschichten sind ellipsometrisch auflösbar, da ein hinreichender Kontrast in den Brechungsindizes der Einzelschichten vorhanden ist. Das Gesamtsystem ist als Mehrschichtsystem modellierbar. Die Einzelschichten werden als semi-transparente Einfachschichten nach DIN 50989-4 behandelt. Die Einzelschichtdicken d_i sowie die Gesamtschichtdicke d_t sind aus der Modellierung bestimmbar. Als Beispiele seien Schichtsysteme für Röntgenspiegel (Mo/Si/Mo/Si ...) oder Quantentöpfe (AlGaAs /GaAs/AlGaAs) genannt.

4.2 Annahmen

Beim Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* werden die Modellannahmen für jede Einzelschicht gemacht. Für periodische Schichten vom Typ ABABAB ... bzw. HLHLHL ... beziehen sich diese Modellannahmen auf die zwei Schichtmaterialien A und B bzw. H und L. Die optischen Materialkonstanten und bei gleicher Beschichtungszeit auch die Schichtdicken gleicher Schichtmaterialien sind dann jeweils identisch und werden im Fit gekoppelt betrachtet.

Die Modellannahmen für jede Einzelschicht sind für transparente/semi-transparente Einfachschichten in DIN 50989-3 und DIN 50989-4 aufgeführt. Für stark absorbierende semi-transparente Einzelschichten muss die Bedingung $d \lesssim d_p(\lambda)$ (Messfall 3 nach DIN 50989-4) erfüllt werden, ansonsten wirkt die Schicht wie ein

Volumenmaterial nach DIN 50989-2. In Tabelle 2 sind die Annahmen nach DIN 50989-3 für transparente Einzelschichten bzw. nach DIN 50989-4 für semi-transparente Einzelschichten zusammengefasst und aufgeführt. Für mögliche Ursachen zu Abweichungen von Modellannahmen wird auf diese Normen verwiesen.

Tabelle 2 — Annahmen beim Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten*

Annahme	Erläuterung
M1	Transparente Schichten: vernachlässigbare Extinktion (d. h. weder Absorptions- noch Streuverluste) mit $k_l(\lambda) = 0$ im betrachteten Spektralbereich Semi-transparente Schichten: Extinktionskoeffizient $k_l(\lambda) > 0$ im betrachteten Spektralbereich
M2	keine zusätzlichen Schichten zur Einzelschichten der Mehrschichtsystem weder auf der oberen Schicht (z. B. Feuchtigkeits- oder Schmutzfilme) noch zwischen den Einzelschichten oder zwischen der untersten Schicht und dem Substrat (z. B. Grenzflächenschichten)
M3	vernachlässigbare Rauheit jeder Schicht (und des Substrats) im Vergleich zur Messwellenlänge λ : üblicherweise R_a bzw. $S_a \leq \lambda/250$ vernachlässigbare maximale Rautiefe im Vergleich zur Schichtdicke d : üblicherweise $R_t \leq 1 \text{ nm} + d/1\,000$
M4	Homogenität des Substrats und der Schichten insbesondere der Schichtdicke d im Analysengebiet (FOA, en. field of analysis), d. h. keine laterale (x-y) oder vertikale (z) Ortsabhängigkeit (Gradienten) der optischen bzw. dielektrischen Konstanten
M5	Isotropie oder bekannte Anisotropie der Schichten (und des Substrats), d. h. keine unbekannte Richtungsabhängigkeit der optischen bzw. dielektrischen Konstanten
M6	definierte chemische Zusammensetzung, kristallographische Mikrostruktur und Packungsdichte der Schicht (und des Substrats) mit hinreichender Stabilität (bezogen auf die Messzeit)
M7	Nur die Oberfläche der obersten ^a Schicht, die Grenzflächen zwischen den Schichten sowie die Grenzfläche zwischen der untersten ^a Schicht und dem Substrat tragen zum reflektierten Signal bei und nicht die Rückseitenreflexe transparenter Substrate, d. h. Verwendung hinreichend dicker Substrate, typischerweise mehr als 5 mm
S1	Planarität der Probenoberfläche bezüglich der Ausrichtung bei der Messung, d. h. Übereinstimmung der Oberfläche der Schicht mit der Ellipsometer-Referenzebene für symmetrischen Strahlengang
S2	Übereinstimmung zwischen bei der Messung auftretendem und im Modell verwendeten Einfallswinkel φ
^a	Für die Zählweise von Schichten gibt es zwei Varianten, einerseits die mit Bezug auf die Beschichtungsreihenfolge, bei der der untersten Schicht auf dem Substrat der Index 1 zugewiesen wird, andererseits die mit Bezug auf den auftreffenden Lichtstrahl, bei der der obersten Schicht der Index 1 zugewiesen wird.

Die Annahmen M1 bis M7 beschreiben auf das Schicht- und Substratmaterial bezogene und die Annahmen S1 und S2 messtechnische Einflussgrößen, die für die Gültigkeit bzw. Güte des Modells *Mehrfachschichten und periodische Schichten* relevant sind.

Bei der Messung von realen Materialien und Oberflächen werden möglicherweise mehrere der Annahmen des Modells *Mehrfachschichten und periodische Schichten* nicht erfüllt. Mögliche Abweichungen von den Annahmen M2 bis M7 sowie S1 bis S2 sind für die Modelle *Volumenmaterial*, *Transparente Einzelschicht* und *Semi-transparente Einzelschicht* schon in DIN 50989-2, DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 beschrieben und hier sinnvoll auf das Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* anzuwenden.

4.3 Besonderheiten des Modells Mehrfachschichten und periodische Schichten

Das Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* enthält mit den Schichtdicken d_i bzw. d_t Größen, die unabhängig von der Wellenlänge und vom Einfallswinkel sind. Damit ist ein Mehrwellenlängen- und Mehreinfallswinkel-Fit auf die Schichtdicken möglich, wobei die mittlere quadratische Abweichung D_{RMS} zwischen experimentell bestimmten und modellmäßig simulierten ellipsometrischen Transfergrößen nach Gleichung (1) 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 zu erreichen ist. In Softwareprodukten unterschiedlicher Hersteller können außerdem für die Beschreibung der Fitqualität und für die D_{RMS} -Berechnung (und somit auch für den Fit) andere Parameter herangezogen werden: zum Beispiel N, C, S-Parameter (siehe DIN 50989-1) oder das Verhältnis der komplexen Amplitudenreflexionskoeffizienten von p - zu s -polarisiertem Licht ρ . Die Normierung dieser Messgrößen (für Ψ und Δ 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_{RMS} -Werte nur bei gleichen Randbedingungen der Messung und des Fits vergleichbar.

Sind die Einzelschichten gleichen Schichtmaterials wegen fehlendem Kontrast ellipsometrisch nicht auflösbar, kann nur die Gesamtschichtdicke d_t und deren optischen/dielektrischen Konstanten nach DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 bestimmt werden.

Beim ausreichenden Kontrast zwischen den Brechungsindizes der Einzelschichten können die Einzelschichtdicken d_i aus dem Fit bestimmt werden. Für AB-Mehrschichtsysteme gleichen Schichtmaterials mit hinreichendem optischem Kontrast und HL-Mehrschichtsysteme unterschiedlicher Schichtmaterialien wird angenommen, dass die optischen Konstanten von Schichten gleicher Materialien identisch sind. Sind Startwerte nicht in Datenbanken verfügbar, müssen diese zuvor aus den Messungen an Einfachschichten bestimmt werden. Erst dann ist ein gleichzeitiger Fit auf die Schichtdicken d_i und die Materialkonstanten sinnvoll.

4.4 Validierung

Bei der Bestimmung von ellipsometrisch auflösbaren Einzelschichtdicken d_i von Mehrfachschichten und periodischen Schichten nach 4.3 erfolgt bereits eine erste Validierung bezüglich der verwendeten optischen/dielektrischen Konstanten. Bei Vielschichtsystemen kann auch eine Validierung der Schichtarchitektur (z. B. Anzahl der Schichten) notwendig werden. Neben dem D_{RMS} -Wert ist deshalb auch die Plausibilität des Ergebnisses zu hinterfragen. Die Validierung der Einzelschichtdicken unterscheidbarer Einzelschichtmaterialien erfolgt nach der Prinzipdarstellung in Bild 4. Für nicht unterscheidbare Einzelschichtmaterialien erfolgt die Validierung der Gesamtschichtdicke nach DIN 50989-3 (transparente Einfachschichten) bzw. DIN 50989-4 (semi-transparente Einfachschichten).

Insbesondere für Einwellenlängen-Messungen von Mehrfachschichten aus transparenten Materialien müssen die Startschichtdicken für den Fit in der richtigen Interferenzordnung liegen, da sich die ellipsometrischen Transfergrößen unterschiedlicher Interferenzordnungen nicht unterscheiden. Dabei kann bei

Einwellenlängen-Messungen ein Fit nur dann erfolgen, wenn Messungen bei mehreren Winkeln vorliegen. Der absolute Betrag der D_{RMS} -Minima darf dabei immer nur unter identischen Bedingungen (Probe, Modell, Messung) verglichen werden.

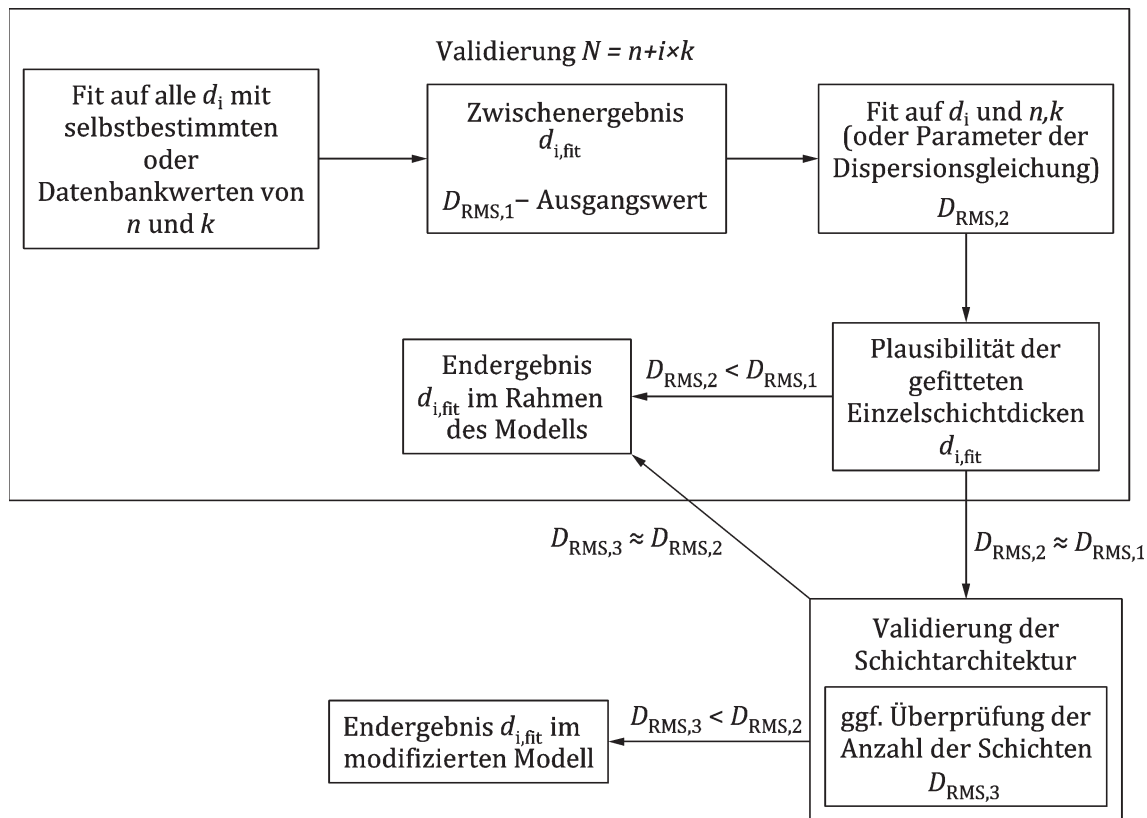


Bild 4 — Validierung des Modells Mehrfach- und periodische Schichten bei der Bestimmung von Einzelschichtdicken d_i unterscheidbarer Einzelschichtmaterialien

Durch die in Bild 4 dargestellte Validierung wird sichergestellt, dass der erhaltene D_{RMS} -Wert der kleinste mögliche unter den gegebenen Bedingungen ist, und damit eine gute Übereinstimmung zwischen den modellmäßig simulierten und experimentell bestimmten ellipsometrischen Transfergrößen gewährleistet wird.

Die Anfangswerte der Fit-Parameter Einzelschichtdicken d_i und die zunächst verwendeten optischen bzw. dielektrischen Konstanten für die Einzelschichten, entweder bestimmt aus einer Messung oder unter Verwendung von Datenbankwerten, müssen nah genug an der durch den Fit zu bestimmenden Einzelschichtdicken d_i bzw. den tatsächlichen optischen/dielektrischen Konstanten der Einzelschichten liegen. Anderenfalls besteht die Gefahr, dass das D_{RMS} -Minimum ein lokales Minimum ist und das Fitergebnis nicht die Realität abbildet.

Ist das Modell *Mehrfachschichten und periodische Schichten* sehr gut erfüllt, ergibt sich für den Fit bei verschiedenen Einfallswinkeln für die gleichen Schichtdicken jeweils ein ausgeprägtes Minimum in der D_{RMS} -Funktion nach Gleichung (1). Bild 5 zeigt die D_{RMS} -Funktion beim Schichtdickenfit einer periodischen $5 \times (\text{TiO}_2/\text{SiO}_2)$ Mehrfachschicht auf einem BK-7 Glassubstrat mit zusätzlicher SiO_2 -Schicht, insgesamt also von 11 Schichten am Beispiel der Schicht Nr. 10 (vom Substrat beginnend gezählt) aus TiO_2 (Bild A.1). Aus den Fits im Spektralbereich 192 nm bis 1 700 nm ergeben sich für verschiedene Einfallswinkel trotz unterschiedlichem Betrag des D_{RMS} -Minimums kaum unterscheidbare Fitergebnisse für die Einzelschichtdicken bei den Einfallswinkeln von 65° und 70° und bei 75° . Das Fitergebnis für die Einzelschichtdicken aus der Fitprozedur bei allen drei Winkeln gleichzeitig ist in der Tabelle A.1 im Anhang A dargestellt.