

DIN 50989-4

ICS 19.100

**Ellipsometrie –
Teil 4: Modell Semi-transparente Einfachschicht;
Text Deutsch und Englisch**

Ellipsometry –
Part 4: Semi-transparent single layer model;
Text in German and English

Ellipsométrie –
Partie 4: Modèle seule couche semi-transparente;
Texte en allemand et anglais

Gesamtumfang 63 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 <i>Semi-transparente Einfachsicht</i>	12
4.1 Strahlengang und Klassifizierung von Messfällen	12
4.1.1 Strahlengang	12
4.1.2 Klassifizierung von Messfällen.....	14
4.2 Annahmen.....	20
4.2.1 Allgemeines	20
4.2.2 Abweichungen von Modell-Annahme M1.....	22
4.2.3 Abweichungen von Modell-Annahme M2.....	22
4.2.4 Abweichungen von Modell-Annahme M3.....	22
4.2.5 Abweichungen von Modell-Annahme M4.....	22
4.2.6 Abweichungen von Modell-Annahme M5.....	22
4.2.7 Abweichungen von Modell-Annahme M6.....	24
4.2.8 Abweichungen von Modell-Annahme M7.....	24
4.2.9 Abweichungen von Modell-Annahme S1	24
4.2.10 Abweichungen von Modell-Annahme S2	24
4.3 Besonderheiten des Modells <i>Semi-transparente Einfachsicht</i>	24
4.4 Validierung.....	30
4.5 Messunsicherheit.....	36
4.5.1 Messunsicherheit der ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ	36
4.5.2 Messunsicherheit u_d der Schichtdicke d	36
5 Prüfbericht	44
Anhang A (informativ) Ergänzungen zum Modell <i>Semi-transparente Einfachsicht</i>	46
A.1 Eindringtiefe in Abhängigkeit von Wellenlänge und Extinktionskoeffizient	46
A.2 Beispiele semi-transparenter Schichtmaterialien.....	48
A.3 DLC-Schichten auf BK-7 Glas- und Silicium-Substraten.....	50
A.4 Einfluss der verwendeten Dispersionsfunktion auf den Schichtdickenfit.....	52
A.5 Mehr-Proben-Analyse semi-transparenter Schichten stark absorbierender Schichtmaterialien am Beispiel von Cr-Schichten auf BK-7 Glassubstraten.....	54
A.6 Ellipsometrische Reflexions- und Intensitätstransmissionsmessung semi-transparenter Schichten mit stark absorbierenden Schichtmaterialien am Beispiel von Cr-Schichten auf BK-7 Glassubstraten.....	56
A.7 Empirische Standardabweichung von Ψ und Δ von DLC-Schichten auf Silicium	58
A.8 Hinweise für die Messpraxis	60
Literaturhinweise	62

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 <i>Semi-transparent single layer model</i>	13
4.1 Optical path and classification of measurement cases	13
4.1.1 Optical path	13
4.1.2 Classification of measurement cases.....	15
4.2 Assumptions.....	21
4.2.1 General.....	21
4.2.2 Deviations from model assumption M1	23
4.2.3 Deviations from model assumption M2	23
4.2.4 Deviations from model assumption M3	23
4.2.5 Deviations from model assumption M4	23
4.2.6 Deviations from model assumption M5	23
4.2.7 Deviations from model assumption M6	25
4.2.8 Deviations from model assumption M7	25
4.2.9 Deviations from model assumption S1.....	25
4.2.10 Deviations from model assumption S2.....	25
4.3 Special characteristics of the <i>semi-transparent single layer model</i>	25
4.4 Validation	31
4.5 Measurement uncertainty	37
4.5.1 Measurement uncertainty of the ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ	37
4.5.2 Measurement uncertainty u_d of the layer thickness d	37
5 Test report	45
Annex A (informative) Additions to the <i>semi-transparent single layer model</i>	47
A.1 Penetration depth as a function of the wavelength and extinction coefficient	47
A.2 Examples of semi-transparent layer materials	49
A.3 DLC layers on BK7 glass and silicon substrates	51
A.4 Influence of the applied dispersion function on the layer thickness fit.....	53
A.5 Multi-sample analysis of semi-transparent layers of strongly absorbing layer materials using the example of chromium (Cr) layers on BK7 glass substrates.....	55
A.6 Ellipsometric reflection and intensity transmittance measurement of semi-transparent layers of strongly absorbing layer materials using the example of chromium (Cr) layers on BK7 glass substrates.....	57
A.7 Empirical standard deviation of Ψ and Δ of DLC layers on silicon	59
A.8 Notes for measuring practice	61
Bibliography.....	63

Vorwort

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

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

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

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

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.

Foreword

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

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

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

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

For current information on this standard, please go to DIN’s website (www.din.de) and search for the document number in question.

¹ In preparation.

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 mindestens 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 [2], 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 *Semi-transparente Einfachschicht* wird eine Fitprozedur zur Bestimmung der Schichtdicke d und der optischen Konstanten n und k der Schicht bei bekannten optischen Konstanten des Substrats angewandt. Bei semi-transparenten Materialien ist $k > 0$. Der Fit erstreckt sich deshalb auf die Größe Schichtdicke d , die *grundsätzlich* unabhängig von der Wellenlänge und dem Einfallswinkel (AOI, en: angle of incidence) ist, sowie den wellenlängenabhängigen Brechungsindex n und den ebenfalls wellenlängenabhängigen Extinktionskoeffizienten k , die beide vom Einfallswinkel unabhängig sind, solange keine semi-transparenten Inzellschichten stark absorbierender Schichtmaterialien vorliegen. Mit dem Modell *Semi-transparente Einfachschicht* wird die Bestimmung der Schichtdicke und des komplexen Brechungsindex möglich [13].

Introduction

The ellipsometry measuring method is a phase-sensitive reflection technique using polarized light in the optical far-field. Over a long time, ellipsometry has been established as a non-invasive measuring method in the field of semiconductor technology — especially 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 Ψ (Psi, amplitude information) and Δ (Delta, phase information) [2], based on which the physical target figures of interest (optical or dielectric constants, layer thicknesses) will then be determined by means of a parameterized fit.

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

In the *semi-transparent single layer* model, a fitting procedure is used to determine the layer thickness d and the optical constants n and k of the layer while the optical constants of the substrate are known. For semi-transparent materials, $k > 0$. Therefore, fitting refers to the layer thickness d , which is by definition independent of the wavelength and of the angle of incidence (AOI), and the wavelength-dependent refractive index n as well as the wavelength-dependent extinction coefficient k , which are both independent of the angle of incidence, at least as long as no semi-transparent island layers of strongly absorbing layer materials are present. The *semi-transparent single layer* model allows the determination of the layer thickness and of the complex refractive index [13].

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt mittels ellipsometrischer Messungen und deren Auswertung das Verfahren zur Bestimmung der Schichtdicke d einer semi-transparenten Schicht sowie der optischen (Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient k) bzw. dielektrischen (Realteil ε_1 und Imaginärteil ε_2) Konstanten/Funktionen auf Basis des Modells *Semi-transparente Einfeldschicht* 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*

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

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

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

Für die Anwendung dieses Dokuments gilt der folgende Begriff.

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 <https://www.dke.de/DKE-IEV>

3.1.1

semi-transparente Einfeldschicht

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

3.2 Symbole und Abkürzungen

In Tabelle 1 werden alle in diesem Dokument zusätzlich zu DIN 50989-1, DIN 50989-2 und DIN 50989-3 verwendeten Symbole und Abkürzungen dargestellt, 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 semi-transparent layer and for the determination of the optical (refractive index n and extinction coefficient k) or dielectric (real part ε_1 and imaginary part ε_2) constants/functions based on the *semi-transparent single layer* model.

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*

DIN 50989-2, *Ellipsometry — Part 2: Bulk material model*

DIN 50989-3:2022-04, *Ellipsometry — Part 3: Transparent single layer model*

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

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

3 Terms and definitions, symbols and abbreviations

3.1 Terms and definitions

For the purposes of this document, the following term and definition 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 <https://www.dke.de/DKE-IEV>

3.1.1

semi-transparent single layer

layer where the light extinction of the layer material cannot be neglected within the considered spectral region

3.2 Symbols and abbreviations

Table 1 shows all the symbols and abbreviations used throughout this standard in addition to those of DIN 50989-1, DIN 50989-2 and DIN 50989-3, taking into account the requirements of ISO/IEC Guide 98-3 and DIN EN ISO/IEC 17025.

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen

Symbole und Abkürzungen	Erläuterung
n	Brechungsindex (Realteil des komplexen Brechungsindex N)
k	Extinktionskoeffizient (Imaginärteil des komplexen Brechungsindex N)
N	komplexer Brechungsindex
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 der Oberfläche
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_p	Eindringtiefe (p, en: penetration)
R_t	maximale Rautiefe
R_a	arithmetischer Mittenrauwert (Profilrauheit)
D_{RMS}	mittlere quadratische Abweichung (en: root-mean-square deviation, in DIN 50989-1 und einigen Auswerteprogrammen noch RMSE (en: root-mean-square error) genannt)
$D_{\text{RMS, min}}$	Minimum der mittleren quadratischen Abweichung
d_{fit}	Fitergebnis für die Schichtdicke der semi-transparenten Einzelschicht (Probe)
u_{fit}	Unsicherheit des Fits auf den Modellparameter Schichtdicke (Probe)
a	halbe Spannbreite der Rechteckverteilung
u_{mod}	Unsicherheit der Modellierung im Modell <i>Semi-transparente Einzelschicht</i> bezüglich der Schichtdicke (Probe)
$u_{\text{fit,ref}}$	Unsicherheit des Fits auf den Modellparameter Schichtdicke (Schichtdickenstandard/Referenzschicht)
U_{ref}	erweiterte kombinierte Unsicherheit (Messunsicherheit) der Referenzmaterialien (Schichtdickenstandard/Referenzschicht) wie in der Dokumentation zum Referenzmaterial angegeben
c_{ref}	Erweiterungsfaktor (en: coverage factor) ^a , der zur Angabe der Messunsicherheit (erweiterten kombinierten Unsicherheit) der Referenzmaterialien verwendet wurde (Schichtdickenstandard/Referenzschicht)
u_{ref}	kombinierte Unsicherheit der Schichtdicke (Schichtdickenstandard/Referenzschicht)
u_d	kombinierte Unsicherheit der Schichtdicke d unter Berücksichtigung aller Unsicherheitsanteile (Probe)
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.	

Table 1 — Symbols and abbreviations

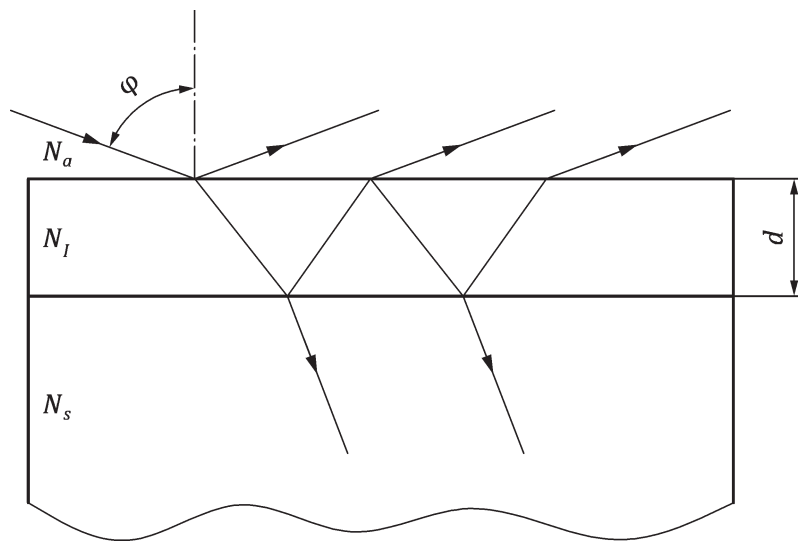
Symbols and abbreviations	Description
n	refractive index (real part of the complex refractive index N)
k	extinction coefficient (imaginary part of the complex refractive index N)
N	complex refractive index
ε_1	real part of the complex dielectric function
ε_2	imaginary part of the complex dielectric function
ε	complex dielectric function
φ	angle of incidence between the incident light wave and the normal to the surface
N_a	complex refractive index of the ambient space
N_l	complex refractive index of the layer
N_s	complex refractive index of the substrate
d_p	penetration depth
R_t	maximum roughness depth
R_a	arithmetic roughness average (profile roughness)
D_{RMS}	root-mean-square deviation (in DIN 50989-1 and some evaluation software, RMSE (root-mean-square error) is still used)
$D_{\text{RMS,min}}$	minimum of the root-mean-square deviation
d_{fit}	fitting result for the layer thickness of the semi-transparent single layer (sample)
u_{fit}	uncertainty of the fit on the layer thickness model parameter (sample)
a	half width of the rectangular distribution
u_{mod}	uncertainty of modelling in the <i>semi-transparent single layer</i> model regarding the layer thickness (sample)
$u_{\text{fit,ref}}$	uncertainty of the fit on the layer thickness model parameter (layer thickness standard/reference layer)
U_{ref}	expanded combined uncertainty (measurement uncertainty) of the reference materials (layer thickness standard/reference layer) as specified in the respective documentation
c_{ref}	coverage factor ^a that has been used to indicate the measurement uncertainty (expanded combined uncertainty) of the reference materials (layer thickness standard/reference layer)
u_{ref}	combined uncertainty of the layer thickness (layer thickness standard/reference layer)
u_d	combined uncertainty of the layer thickness d considering all uncertainty components (sample)
c_{samp}	coverage factor ^a for expression of measurement uncertainty (expanded combined uncertainty) of sample
^a The coverage factor is denoted “ k ” in ISO/IEC Guide 98-3.	

4 Modell *Semi-transparente Einfeldschicht*

4.1 Strahlengang und Klassifizierung von Messfällen

4.1.1 Strahlengang

Der Strahlengang unter dem Einfallswinkel φ im Modell *Semi-transparente Einfeldschicht* ist in Bild 1 dargestellt. Der Umgebung (Index a, en: ambient) wird der komplexe Brechungsindex N_a zugeordnet. In den meisten Fällen wird das Umgebungsmedium Luft sein. Der Brechungsindex ist dann reell mit $n_a = 1,000$ und $k_a = 0,000$ in sehr guter Näherung. Der semi-transparenten Einfeldschicht wird die Schichtdicke d und der komplexe Brechungsindex N_l (Index l, en: layer) zugeordnet. Im Modell *Semi-transparente Einfeldschicht* ist $k_l > 0$ in einem definierten Spektralbereich. 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 Schichtdicke der semi-transparenten Einfeldschicht
- N_l komplexer Brechungsindex der Schicht ($N_l = n_l(\lambda) + i \cdot k_l(\lambda)$)
- N_s komplexer Brechungsindex des Substrats ($N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$)

Bild 1 — Strahlengang beim Modell *Semi-transparente Einfeldschicht*

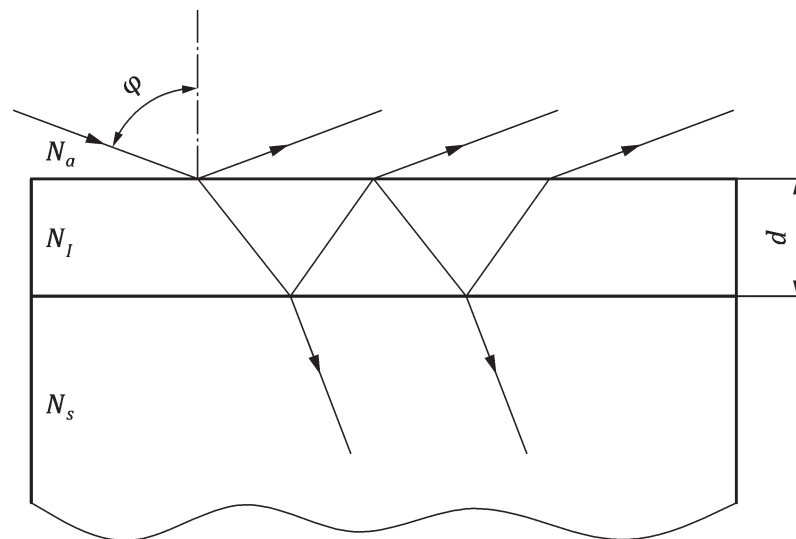
Beim Modell *Semi-transparente Einfeldschicht* wird davon ausgegangen, dass neben dem Einfallswinkel φ nur die Schichtdicke d und der komplexe Brechungsindex N_l bzw. die komplexe dielektrischen Funktion ε_l der Schicht sowie die optischen (n_s, k_s) bzw. dielektrischen ($\varepsilon_{1s}, \varepsilon_{2s}$) Konstanten des Substrats die gemessenen ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ bestimmen.

4 Semi-transparent single layer model

4.1 Optical path and classification of measurement cases

4.1.1 Optical path

Figure 1 shows the optical path at a certain angle of incidence φ in the *semi-transparent single layer* model. The ambient space (index "a") will be assigned with the complex refractive index N_a . In most cases, air will be the ambient space medium and the refractive index will be close to $n_a = 1,000$ and $k_a = 0,000$. The semi-transparent single layer will be assigned the layer thickness d and the complex refractive index N_l (index "l" for layer). In the *semi-transparent single layer* model, it is assumed that $k_l > 0$ in a defined spectral region. The substrate will be assigned with the complex refractive index N_s .



Key

- φ 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 semi-transparent single layer
- N_l complex refractive index of the layer ($N_l = n_l(\lambda) + i \cdot k_l(\lambda)$)
- N_s complex refractive index of the substrate ($N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$)

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

In the *semi-transparent single layer* model, it is assumed that in addition to the angle of incidence φ only the layer thickness d and the complex refractive index N_l or the complex dielectric function ϵ_l 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 Ψ and Δ .

Dabei muss beachtet werden, dass es für die Semi-Transparenz der Schicht zwei grundlegend verschiedene Möglichkeiten gibt, zum einen Schichtmaterialien, die im betrachteten (z. B. sichtbaren) Spektralbereich relativ schwach absorbieren (z. B. DLC – Diamond-like Carbon) bzw. zum anderen solche, die stark absorbieren (z. B. Metalle). Schwach absorbierende semi-transparente Schichten sind üblicherweise geschlossene Schichten mit Schichtdicken von wenigen Nanometern bis in den Mikrometerbereich hinein mit homogen verteilten Absorptionszentren. Für stark absorbierende Schichtmaterialien können die Schichten nur als semi-transparent betrachtet werden, wenn die Schichtdicke wenige Nanometer bis einige 10 Nanometer beträgt. Bei sehr dünnen Schichten von ≤ 10 nm ist es möglich, dass sich nicht geschlossene Schichten bilden, abhängig vom Beschichtungsprozess. Das Modell *Semi-transparente Einfeldschicht* ist dann nicht mehr gültig.

4.1.2 Klassifizierung von Messfällen

Aus den beiden grundlegenden Möglichkeiten für die Arten des Schichtmaterials (schwach bzw. stark absorbierend) ergeben sich in Abhängigkeit von der tatsächlichen Größe des Extinktionskoeffizienten (siehe Abschnitt A.1) nach Gleichung (1) unterschiedliche Eindringtiefen d_p des Lichts in das Schichtmaterial.

$$d_p = \frac{\lambda}{4\pi k} \quad (1)$$

Daraus lässt sich in Abhängigkeit von der Schichtdicke, die in Tabelle 2 dargestellte Klassifizierung verschiedener Messfälle ableiten, wobei es für beide Materialklassen jeweils gleitende Übergangsbereiche gibt.

Therefore, it shall be noted that the semi-transparency of the layer is based on two fundamentally different conditions: on the one hand, there are layer materials that show a relatively weak absorbance in the considered (e.g. visible) spectral region (such as diamond-like carbon (DLC)), on the other hand, there are layer materials showing a relatively strong absorbance (such as metals). Weakly absorbing semi-transparent layers are usually closed layers with a layer thickness of a few nanometres up to the micron scale with homogeneously distributed absorption centres. In the case of strongly absorbing layer materials, the layers can only be semi-transparent at all if the layer thickness is only a few nanometres to several tens of nanometres. When thin layers of ≤ 10 nm are involved, there is the possibility that non-closed layers are formed depending on the coating process. In this case, the *semi-transparent layer* model is not valid any more.

4.1.2 Classification of measurement cases

The two fundamentally different types of the layer materials (weak or strong absorbance) result in different penetration depths d_p of the light into the layer material according to Equation (1), depending on the actual value of the extinction coefficient (see Clause A.1):

$$d_p = \frac{\lambda}{4\pi k} \quad (1)$$

based on which the classification of the different measurement cases shown in Table 2 can be derived with regard to the layer thickness, showing smooth transitional zones for each of the two material classes.

Tabelle 2 — Klassifizierung von Messfällen semi-transparenter Schichten in Abhängigkeit von der Schichtdicke und der Eindringtiefe (am Beispiel DLC auf Si bzw. Ag auf Si bei AOI von 70°)

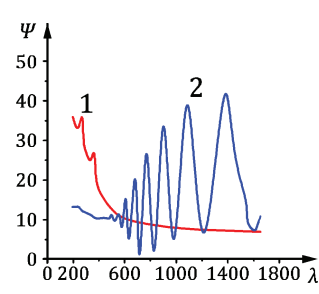
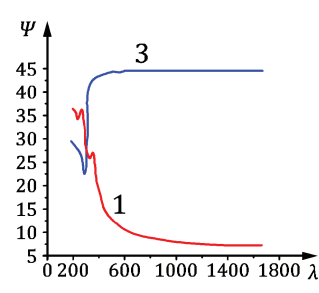
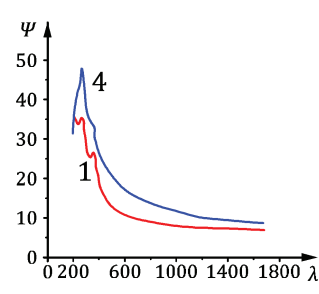
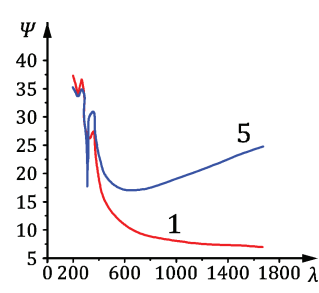
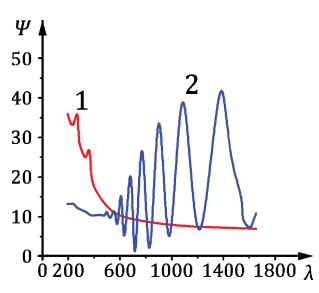
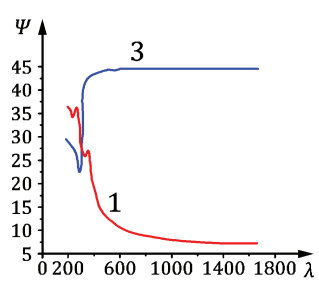
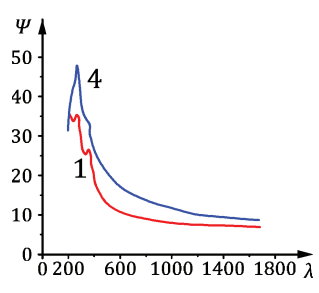
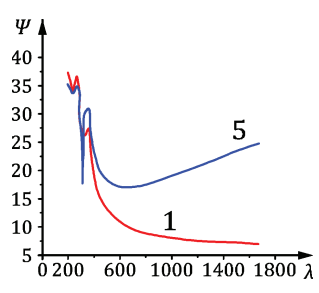
Schwach absorbierende Schichtmaterialien		Messfall 1: semi-transparente Schichten größerer Schichtdicke d Schicht dominiert: Schicht als Volumenmaterial für $d \gtrsim 5 d_p(\lambda)$, Schicht mit Interferenzmerkmalen für $d < 5 d_p(\lambda)$ Beispiel: 1 500 nm DLC auf Si								
		Messfall 2: semi-transparente Schichten kleinerer Schichtdicke d Substrat dominiert: Schicht ohne Interferenzmerkmale für $d \lesssim d_p(\lambda)$ Beispiel: 30 nm DLC on Si								
Stark absorbierende Schichtmaterialien		Messfall 4: nichttransparente Schichten Schicht als Volumenmaterial für $d \gtrsim 5 d_p(\lambda)$ Beispiel: 100 nm Ag auf Si								
		Messfall 3: semi-transparente Schichten kleinerer Schichtdicke d Schicht- und Substratmerkmale $d \lesssim d_p(\lambda)$ Beispiel: 5 nm Ag auf Si								
Legende <table><tr><td>ψ in °</td><td>λ in nm</td></tr><tr><td>1 Si</td><td>2 1 500 nm DLC auf Si</td></tr><tr><td>3 100 nm Ag auf Si</td><td>4 30 nm DLC auf Si</td></tr><tr><td>5 5 nm Ag auf Si</td><td></td></tr></table>			ψ in °	λ in nm	1 Si	2 1 500 nm DLC auf Si	3 100 nm Ag auf Si	4 30 nm DLC auf Si	5 5 nm Ag auf Si	
ψ in °	λ in nm									
1 Si	2 1 500 nm DLC auf Si									
3 100 nm Ag auf Si	4 30 nm DLC auf Si									
5 5 nm Ag auf Si										

Table 2 — Classification of measurement cases for semi-transparent layers based on layer thickness and penetration depth (using DLC on Si and Ag on Si as an example at AOI of 70°)

Weakly absorbing layer material		Measurement case 1: semi-transparent layers of larger layer thickness d layer dominated: layer acting as bulk material for $d \gtrsim 5 d_p(\lambda)$, layer with interference characteristics for $d < 5 d_p(\lambda)$ Example: 1 500 nm DLC on Si
		Measurement case 2: semi-transparent layers of smaller layer thickness d Substrate dominated: layer not showing any interference characteristics for $d \lesssim d_p(\lambda)$ Example: 30 nm DLC on Si
Strongly absorbing layer materials		Measurement case 4: non-transparent layers layer acting as bulk material for $d \gtrsim 5 d_p(\lambda)$ Example: 100 nm Ag on Si
		Measurement case 3: semi-transparent layers of smaller thickness d Layer and substrate characteristics for $d \lesssim d_p(\lambda)$ Example: 5 nm Ag on Si
Key ψ in ° λ in nm 1 Si 2 1 500 nm DLC on Si 3 100 nm Ag on Si 4 30 nm DLC on Si 5 5 nm Ag on Si		

Die Klassifizierung der Messfälle kann nach Tabelle 2 wie folgt vorgenommen werden:

Messfall 1:

Semi-transparente Schicht mit schwach absorbierendem Schichtmaterial und großer Schichtdicke

Die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ beinhalten Maxima und Minima als Interferenzmerkmale (im gezeigten Beispiel für $\lambda > 500$ nm). Bei Schichtdicken größer als ein Mehrfaches der Eindringtiefe ($d \gtrsim 5 \cdot d_p$) kann auch eine schwach absorbierende semi-transparente Einzelschicht in einem bestimmten Wellenlängenbereich wie ein Volumenmaterial wirken (im gezeigten Beispiel für $\lambda < 500$ nm). In beiden Bereichen ist der Einfluss der Schicht dominant.

Messfall 2:

Semi-transparente Schicht mit schwach absorbierendem Schichtmaterial und geringer Schichtdicke

Die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ weisen keine Interferenzmerkmale auf. Der Substrateinfluss ist dominant.

Messfall 3:

Semi-transparente Schicht mit stark absorbierendem Schichtmaterial und geringer Schichtdicke

Die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ werden im Vergleich zu den Größen des Substrats zumindest in einem bestimmten Spektralbereich durch die Schicht deutlich verändert. Sowohl Substrat- als auch Schichteinfluss sind deutlich erkennbar.

Messfall 4:

Schicht als Volumenmaterial bei stark absorbierendem Schichtmaterial und großer Schichtdicke

Die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ sind ausschließlich durch das Schichtmaterial bestimmt. Dies ist analog zu Messfall 1 für Schichtdicken $d \gtrsim 5 \cdot d_p$ der Fall. Die Schicht kann in diesem Fall als Volumenmaterial angesehen und nach DIN 50989-2 beschrieben werden.

Typische semi-transparente Schichtmaterialien sind in Abhängigkeit vom Extinktionskoeffizienten und von der Schichtdicke in Abschnitt A.2 aufgeführt.

BEISPIEL 1 Die zur Klassifizierung der Messfälle nach Tabelle 2 ausgewählten Schichtmaterialien weisen bei $\lambda = 632,8$ nm etwa folgende Extinktionskoeffizienten bzw. daraus nach Abschnitt A.1 abgeleitete Eindringtiefen auf:

- DLC (DLC2 nach Abschnitt A.2) als schwach absorbierendes Schichtmaterial: $k(632,8 \text{ nm}) = 0,05$, $d_p = 1\,000$ nm;
- Ag (Silber nach Abschnitt A.2) als stark absorbierendes Schichtmaterial: $k(632,8 \text{ nm}) = 4$, $d_p = 13$ nm.

BEISPIEL 2 Ein Beispiel für den Substrateinfluss auf die Ausprägung der Interferenzmerkmale bei DLC-Schichten (Silicium vs. BK7-Glas als Substrat) einer Schichtdicke von 1 500 nm (Tabelle 2, Messfall 1) ist in Abschnitt A.3 dargestellt.

The measurement cases can be classified according to Table 2 as follows:

Measurement case 1:

Semi-transparent layer of weakly absorbing layer material and large layer thickness

The ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ comprise maximum/minimum values being the interference characteristics (in the example for $\lambda > 500$ nm). For layer thicknesses larger than a multiple of the penetration depth ($d \gtrsim 5 \cdot d_p$), even a weakly absorbing semi-transparent single layer can act as a bulk material within a certain wavelength range (in the example for $\lambda < 500$ nm). In both ranges, the influence of the layer is dominant.

Measurement case 2:

Semi-transparent layer of weakly absorbing layer material and small layer thickness

The ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ do not show any interference characteristics. The influence of the substrate is dominant.

Measurement case 3:

Semi-transparent layer of strongly absorbing layer material and small layer thickness

The ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ are significantly affected by the layer characteristics in contrast to the characteristics concerned with the substrate, at least within a certain spectral region. Both the influence through the substrate and through the layer is clearly evident.

Measurement case 4:

Layer acting as bulk material of strongly absorbing layer material and large layer thickness

The ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ are exclusively defined by the layer material. Similar to measurement case 1, this applies to a layer thickness $d \gtrsim 5 \cdot d_p$. In this case, the layer can be considered as bulk material and therefore be described according to DIN 50989-2.

Typical semi-transparent layer materials are listed in Clause A.2 according to their extinction coefficient and layer thickness.

EXAMPLE 1 The layer materials selected to classify the measurement cases in Table 2 show the following approximate extinction coefficients at $\lambda = 632,8$ nm and the penetration depths derived from them according to Clause A.1:

- DLC (DLC2 according to Clause A.2) as a weakly absorbing layer material: $k(632,8 \text{ nm}) = 0,05$,
 $d_p = 1\,000 \text{ nm}$;
- Ag (silver according to Clause A.2) as a strongly absorbing layer material: $k(632,8 \text{ nm}) = 4$,
 $d_p = 13 \text{ nm}$.

EXAMPLE 2 For DLC layers with a layer thickness of 1 500 nm (Table 2, measurement case 1), the influence of the substrate (silicon substrate compared to BK7 glass substrate) on the progress of interference characteristics is given as an example in Clause A.3.