

DIN 50989-2**DIN**

ICS 19.100

**Ellipsometrie –
Teil 2: Modell Volumenmaterial;
Text Deutsch und Englisch**

Ellipsometry –
Part 2: Bulk material model;
Text in German and English

Ellipsométrie –
Partie 2: Modèle matériel volumique;
Texte en allemand et anglais

Gesamtumfang 51 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>Volumenmaterial</i>	12
4.1 Strahlengang	12
4.2 Annahmen	14
4.2.1 Allgemeines	14
4.2.2 Abweichungen von Modell-Annahme M1	18
4.2.3 Abweichungen von Modell-Annahme M2	18
4.2.4 Abweichungen von Modell-Annahme M3	18
4.2.5 Abweichungen von Modell-Annahme M4	18
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 S1	18
4.2.9 Abweichungen von Modell-Annahme S2	20
4.3 Besonderheiten des Modells <i>Volumenmaterial</i>	20
4.4 Validierung	22
4.5 Messunsicherheit	24
4.5.1 Messunsicherheit der ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ	24
4.5.2 Messunsicherheit der optischen (n , k) bzw. dielektrischen Konstanten (ϵ_1 , ϵ_2)	26
5 Prüfbericht	28
Anhang A (informativ) Ergänzungen zum Modell <i>Volumenmaterial</i>	32
A.1 Quarzglas als dielektrisches Volumen-Referenzmaterial	32
A.2 Silizium als halbleitendes Volumen-Referenzmaterial	34
A.3 Bestimmung der Messunsicherheiten	38
A.4 Hinweise für die Messpraxis	48
Literaturhinweise	50

Contents

	Page
Foreword	5
Introduction	7
1 Scope	9
2 Normative references	9
3 Terms, definitions, symbols and abbreviations.....	9
3.1 Terms and definitions.....	9
3.2 Symbols and abbreviations.....	9
4 <i>Bulk material</i> model	13
4.1 Optical path	13
4.2 Assumptions.....	15
4.2.1 General.....	15
4.2.2 Deviations from model assumption M1	19
4.2.3 Deviations from model assumption M2	19
4.2.4 Deviations from model assumption M3	19
4.2.5 Deviations from model assumption M4	19
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 S1.....	19
4.2.9 Deviations from model assumption S2.....	21
4.3 Special characteristics of the <i>bulk material</i> model	21
4.4 Validation	23
4.5 Measurement uncertainty	25
4.5.1 Measurement uncertainty of the ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ	25
4.5.2 Measurement uncertainty of the optical (n, k) and dielectric ($\varepsilon_1, \varepsilon_2$) constants	27
5 Test report	29
Annex A (informative) Additions to the <i>bulk material</i> model.....	33
A.1 Fused silica used as dielectric volume reference material	33
A.2 Silicon used as semiconducting volume reference material	35
A.3 Determination of measurement uncertainties.....	39
A.4 Recommendations for measuring practice.....	49
Bibliography.....	51

Vorwort

Dieses Dokument wurde vom Arbeitsausschuss NA 062-01-61 AA „Mess- und Prüfverfahren für Schichten und Schichtsysteme“ im 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 Einfachschichten¹*
- *Teil 4: Modell semi-transparente Einfachschicht¹*
- *Teil 5: Modell Mehrfachschichten und periodische Schichten¹*
- *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.

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 model¹*
- *Part 4: Semi-transparent single layer model¹*
- *Part 5: Multiple layers and periodic layers model¹*
- *Part 6: Effective materials model¹*

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 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 *Volumenmaterial* ist eine Fitprozedur optional, da je Messung (je Wellenlänge und bei einem Einfallswinkel) aus dem Gleichungssystem bestehend aus den Gleichungen für p- und s-Polarisation genau zwei unabhängige Größen bestimmt werden können und dies zudem der einzige Fall ist, bei dem sich eine Bestimmung der Zielgrößen (optische bzw. dielektrische Konstanten) analytisch durchführen lässt.

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), 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 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 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.

For the *bulk material* model, a fitting procedure is optional since exactly two independent parameters can be determined per measurement (per wavelength and at one angle of incidence) using the equation system consisting of equations for p- and s-polarization; this, moreover, is the only case where a determination of target figures (optical or dielectric constants) can be carried out analytically.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt das Verfahren zur Bestimmung der optischen bzw. dielektrischen Konstanten mittels ellipsometrischer Messungen und deren Auswertung auf Basis des Modells *Volumenmaterial* fest.

Sind die Annahmen des Modells *Volumenmaterial* streng erfüllt, können die optischen (Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient k) bzw. dielektrischen (Realteil ε_1 und Imaginärteil ε_2) Konstanten des Materials direkt bestimmt werden. Anderenfalls werden die optischen ($\langle n \rangle$ und $\langle k \rangle$) bzw. dielektrischen ($\langle \varepsilon_1 \rangle$ und $\langle \varepsilon_2 \rangle$) Pseudo-Konstanten, die vom Einfallswinkel φ der Messung abhängen, ermittelt. Der Grad der Übereinstimmung der Pseudokonstanten im betreffenden Spektralbereich, bestimmt aus Messungen bei verschiedenen Einfallswinkeln, ist dann eine *notwendige* Voraussetzung für die Gültigkeit bzw. Güte des Modells *Volumenmaterial*.

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

ISO/IEC Guide 98-3:2008-09, *Uncertainty of measurement — Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995)*

3 Begriffe, Symbole und Abkürzungen

3.1 Begriffe

In diesem Dokument werden keine Begriffe aufgeführt.

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 die in diesem Dokument bzw. in Ergänzung zu den in DIN 50989-1 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 specifies the process for determining the optical or dielectric constants by means of ellipsometric measurements and their analysis based on the *bulk material* model.

If the assumptions of the *bulk material* model are strictly met, it is possible to determine the optical constants (refractive index n and extinction coefficient k) or the dielectric constants (real part ε_1 and imaginary part ε_2) of the material directly. Alternatively, optical ($\langle n \rangle$ and $\langle k \rangle$) or dielectric ($\langle \varepsilon_1 \rangle$ and $\langle \varepsilon_2 \rangle$) pseudo constants will be determined, which depend on the measurement angle of incidence φ . The degree of consistency of the pseudo constants in the relevant spectral range, determined from measurements at different angles of incidence, represents a necessary prerequisite for the validity or quality of the *bulk material* 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; Text in German and English*

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

ISO/IEC Guide 98-3:2008-09, *Uncertainty of measurement — Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995)*

3 Terms, definitions, symbols and abbreviations

3.1 Terms and definitions

No terms and definitions are listed in this document.

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>

3.2 Symbols and abbreviations

Table 1 shows the symbols and abbreviations used throughout this document and in addition to those of DIN 50989-1, 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
R_a	arithmetischer Mittenrauwert (Profilrauheit)
S_a	arithmetischer Mittenrauwert (Flächenrauheit)
N_a	komplexer Brechungsindex des umgebenden Mediums (a, en: ambient)
N_s	komplexer Brechungsindex des Substrats
n_a	Brechungsindex des umgebenden Mediums (Realteil des komplexen Brechungsindex N_a)
n_o	ordentlicher Brechungsindex (o, en: ordinary)
n_e	außerordentlicher Brechungsindex (e, en: extra-ordinary)
n_s	Brechungsindex des Substrats (Realteil des komplexen Brechungsindex N_s)
k_a	Extinktionskoeffizient des umgebenden Mediums (Imaginärteil des komplexen Brechungsindex N_a)
k_s	Extinktionskoeffizient des Substrats (Imaginärteil des komplexen Brechungsindex N_s)
k_o	ordentlicher Extinktionskoeffizient (o, en: ordinary)
k_e	außerordentlicher Extinktionskoeffizient (e, en: extra-ordinary)
d_p	Eindringtiefe
φ	Einfallswinkel (AOI, en: angle of incidence) der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot
φ_B	Brewster-Winkel, Einfallswinkel bei dem die p-Polarisation im reflektierten Strahl für Dielektrika verschwindet (Materialeigenschaft)
ρ	Verhältnis der komplexen Amplitudenreflexionskoeffizienten von p- zu s-polarisiertem Licht
$u_{\text{sys},\psi}$	Unsicherheit von ψ des verwendeten Messsystems (als systematischer Anteil der Messunsicherheit; sys, en: systematic)
$u_{\text{rnd},\psi}$	Standardunsicherheit von ψ aus m Wiederholungsmessungen (als statistischer Anteil der Messunsicherheit; rnd, en: random)
$u_{\text{sys},\Delta}$	Unsicherheit von Δ des verwendeten Messsystems (als systematischer Anteil der Messunsicherheit; sys, en: systematic)
$u_{\text{rnd},\Delta}$	Standardunsicherheit von Δ aus m Wiederholungsmessungen (als statistischer Anteil der Messunsicherheit; rnd, en: random)
u_ψ	kombinierte Unsicherheit von ψ
u_Δ	kombinierte Unsicherheit von Δ
s_ψ	empirische Standardabweichung von ψ
s_Δ	empirische Standardabweichung von Δ
R_s	Intensitätsreflektionskoeffizient/Reflektionsgrad für s-polarisiertes Licht
R_p	Intensitätsreflektionskoeffizient/Reflektionsgrad für p-polarisiertes Licht

Table 1 — Symbols and abbreviations

Symbol and abbreviation	Description
R_a	arithmetic roughness average (profile roughness)
S_a	arithmetic roughness average (surface roughness)
N_a	complex refractive index of the ambient space
N_s	complex refractive index of the substrate
n_a	refractive index of the ambient space (real part of the complex refractive index N_a)
n_o	ordinary refractive index
n_e	extra-ordinary refractive index
n_s	refractive index of the substrate (real part of the complex refractive index N_s)
k_a	extinction coefficient of the ambient space (imaginary part of the complex refractive index N_a)
k_s	extinction coefficient of the substrate (imaginary part of the complex refractive index N_s)
k_o	ordinary extinction coefficient
k_e	extra-ordinary extinction coefficient
d_p	penetration depth
φ	angle of incidence (AOI) between the incident light wave and the normal to the surface
φ_B	Brewster angle; angle of incidence at which the p -polarization for dielectric materials will disappear in the reflected beam (material property)
ρ	ratio of complex amplitude reflection coefficients of p - to s -polarized light
$u_{\text{sys},\Psi}$	uncertainty of Ψ in the applied measuring system (being the systematic component of the measurement uncertainty)
$u_{\text{rnd},\Psi}$	standard uncertainty of Ψ from m repeated measurements (being the random component of the measurement uncertainty)
$u_{\text{sys},\Delta}$	uncertainty of Δ in the applied measuring system (being the systematic component of the measurement uncertainty)
$u_{\text{rnd},\Delta}$	standard uncertainty of Δ from m repeated measurements (being the random component of the measurement uncertainty)
u_Ψ	combined uncertainty of Ψ
u_Δ	combined uncertainty of Δ
s_Ψ	experimental standard deviation of Ψ
s_Δ	experimental standard deviation of Δ
R_s	intensity reflection factor/intensity reflectance for s -polarized light
R_p	intensity reflection factor/intensity reflectance for p -polarized light

Symbol und Abkürzung	Erläuterung
m	Anzahl der Wiederholungsmessungen/verwendeten Mittelwerte
u_n	kombinierte Unsicherheit von n
u_k	kombinierte Unsicherheit von k
u_{ε_1}	kombinierte Unsicherheit von ε_1
u_{ε_2}	kombinierte Unsicherheit von ε_2
$\bar{n}$	arithmetischer Mittelwert von n
$\bar{k}$	arithmetischer Mittelwert von k
$\bar{\varepsilon}_1$	arithmetischer Mittelwert von ε_1
$\bar{\varepsilon}_2$	arithmetischer Mittelwert von ε_2
$u_{\varepsilon_1, \psi}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe ψ in die Unsicherheit von ε_1
$u_{\varepsilon_1, \Delta}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe Δ in die Unsicherheit von ε_1
$u_{\varepsilon_2, \psi}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe ψ in die Unsicherheit von ε_2
$u_{\varepsilon_2, \Delta}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe Δ in die Unsicherheit von ε_2
$u_{n, \psi}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe ψ in die Unsicherheit von n
$u_{n, \Delta}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe Δ in die Unsicherheit von n
$u_{k, \psi}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe ψ in die Unsicherheit von k
$u_{k, \Delta}$	Unsicherheitsbeitrag der Größe Δ in die Unsicherheit von k
c_{samp}	Erweiterungsfaktor (en: coverage factor) ^a der Probe (samp, en: sample) zur Angabe der Messunsicherheit (erweiterte kombinierte Unsicherheit)
^a Im ISO/IEC Guide 98-3 wird der Erweiterungsfaktor mit „ k “ bezeichnet.	

4 Modell *Volumenmaterial*

4.1 Strahlengang

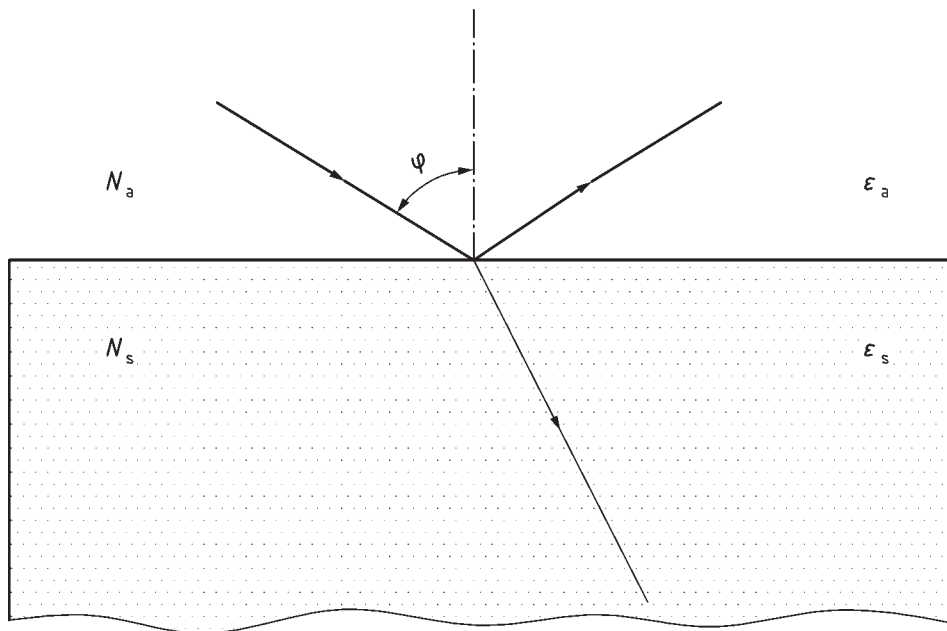
Der Strahlengang unter dem Einfallswinkel φ im Modell *Volumenmaterial* ist in Bild 1 dargestellt. Dabei wird von zwei Halbräumen ausgegangen. Der erste Halbraum ist die Umgebung (Index „a“, en: ambient) mit dem zugeordneten, komplexen Brechungsindex N_a . Üblicherweise wird Luft als Umgebung fungieren, der Brechungsindex ist reell in sehr guter Näherung mit $n_a = 1,000$ und $k_a = 0,000$. Der zweite Halbraum ist das Substrat, das mit dem Modell *Volumenmaterial* beschrieben wird und dem der komplexe Brechungsindex N_s zugeordnet ist. In Abschnitt A.1 sind die optischen Konstanten für Quarzglas, das in sehr guter Näherung die Annahmen des Modells *Volumenmaterial* erfüllt, dargestellt.

Symbol and abbreviation	Description
m	number of repeated measurements/number of mean values used
u_n	combined uncertainty of n
u_k	combined uncertainty of k
u_{ε_1}	combined uncertainty of ε_1
u_{ε_2}	combined uncertainty of ε_2
$\bar{n}$	arithmetic mean value of n
$\bar{k}$	arithmetic mean value of k
$\bar{\varepsilon}_1$	arithmetic mean value of ε_1
$\bar{\varepsilon}_2$	arithmetic mean value of ε_2
$u_{\varepsilon_1,\psi}$	uncertainty contribution of ψ to the uncertainty of ε_1
$u_{\varepsilon_1,\Delta}$	uncertainty contribution of Δ to the uncertainty of ε_1
$u_{\varepsilon_2,\psi}$	uncertainty contribution of ψ to the uncertainty of ε_2
$u_{\varepsilon_2,\Delta}$	uncertainty contribution of Δ to the uncertainty of ε_2
$u_{n,\psi}$	uncertainty contribution of ψ to the uncertainty of n
$u_{n,\Delta}$	uncertainty contribution of Δ to the uncertainty of n
$u_{k,\psi}$	uncertainty contribution of ψ to the uncertainty of k
$u_{k,\Delta}$	uncertainty contribution of Δ to the uncertainty of k
c_{samp}	coverage factor ^a of sample (index: samp) for expression of measurement uncertainty (expanded combined uncertainty)
^a In ISO/IEC Guide 98-3 the coverage factor is designated by "k".	

4 Bulk material model

4.1 Optical path

Figure 1 shows the optical path at a certain angle of incidence φ in the *bulk material* model. Two half-spaces are assumed. One half-space is represented by the ambient space (index "a") that is assigned with the complex refractive index N_a . Usually, air will serve as the ambient space and the actual refractive index will be in close approximation with $n_a = 1,000$ and $k_a = 0,000$. The other half-space is represented by the substrate, which will be described by the *bulk material* model and assigned with the complex refractive index N_s . Clause A.1 describes the optical constants for fused silica, which closely meets the assumptions of the *bulk material* model.



Legende

- φ Einfallswinkel der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot
 N_a komplexer Brechungsindex des umgebenden Mediums (für Luft reell $N_a = n_a = 1,000$)
 ε_a komplexe dielektrische Funktion der Umgebung (für Luft reell $\varepsilon_a = \varepsilon_{1a} = 1,000$)
 N_s komplexer Brechungsindex des Substrats ($N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$)
 ε_s komplexe dielektrische Funktion des Substrats ($\varepsilon_s = \varepsilon_{1s}(\omega) + i \cdot \varepsilon_{2s}(\omega)$)

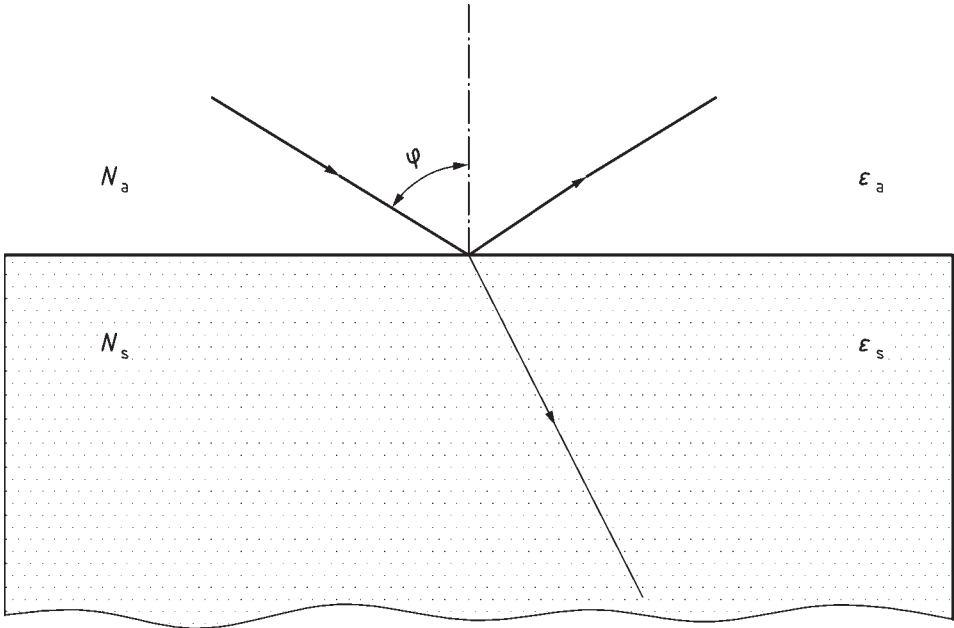
Bild 1 — Strahlengang beim Modell *Volumenmaterial*

Beim Modell *Volumenmaterial* wird davon ausgegangen, dass neben dem Einfallswinkel φ und der Messwellenlänge λ allein die optischen bzw. dielektrischen Konstanten der Grenzfläche Umgebung/ Substrat die gemessenen ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ bestimmen.

4.2 Annahmen

4.2.1 Allgemeines

Beim Modell *Volumenmaterial* werden nach Tabelle 2 folgende Modellannahmen gemacht.



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, $N_a = n_a = 1,000$)
- ϵ_a complex dielectric function of the ambient space (for air real, $\epsilon_a = \epsilon_{1a} = 1,000$)
- N_s complex refractive index of the substrate ($N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$)
- ϵ_s complex dielectric function of the substrate ($\epsilon_s = \epsilon_{1s}(\omega) + i \cdot \epsilon_{2s}(\omega)$)

Figure 1 — Optical path in the *bulk material* model

As a result, it is assumed in the *bulk material* model that apart from the angle of incidence φ and the measurement wavelength λ , only the optical or dielectric constants of the ambient/substrate interface will determine the measured ellipsometric transfer quantities Ψ and Δ .

4.2 Assumptions

4.2.1 General

The following model assumptions given in Table 2 will be made for the *bulk material* model.

Tabelle 2 — Annahmen beim Modell *Volumenmaterial*

Annahme	Erläuterung
M1	keine Schichten auf der Oberfläche des Substrats (keine natürlichen Oxidschichten, keine Feuchtigkeitsfilme, keine Schmutzfilme)
M2	vernachlässigbare Rauheit des Substrats im Vergleich zur Messwellenlänge λ (als Richtwert sollte mindestens R_a bzw. $S_a \leq \lambda/250$ erfüllt sein)
M3	Homogenität des Substrats im Analysegebiet (FOA, en: field of analysis), d. h. keine laterale (x-y) oder vertikale (z) Ortsabhängigkeit (Gradienten) der optischen bzw. dielektrischen Konstanten
M4	Isotropie oder bekannte Anisotropie des Substrats, d. h. keine unbekannte Richtungsabhängigkeit (bspw. resultierend aus der Kristallstruktur oder infolge Spannungsdoppelbrechung) der optischen bzw. dielektrischen Konstanten.
M5	chemische Reinheit (ein Element oder definierte Stöchiometrie einer Verbindung) und einphasige Mikrostruktur (keine Mischphasen wie z. B. bei Legierungen) des Substrats mit hoher Langzeitstabilität
M6	vernachlässigbare Rückseitenreflexe bei transparenten Substraten, d. h. Verwendung hinreichend dicker Substrate, typischerweise mehr als 5 mm.
S1	Planarität der Oberfläche des Substrats bezüglich der Ausrichtung bei der Messung, d. h. Übereinstimmung der Oberfläche des Substrats mit der Ellipsometer-Referenzebene für symmetrischen Strahlengang
S2	Übereinstimmung zwischen bei der Messung auftretendem und im Modell verwendeten Einfallswinkel φ

Die Annahmen M1 bis M6 beschreiben auf das Substratmaterial bezogene und die Annahmen S1 und S2 messtechnische Einflussgrößen, die für die Gültigkeit bzw. Güte des Modells *Volumenmaterial* relevant sind. Quarzglas, dessen optische Konstanten in Abschnitt A.1 dargestellt sind, erfüllt die Modellannahmen M1 bis M6 in sehr guter Näherung. Für andere Materialien wie zum Beispiel Metalle oder Halbleiter müssen üblicherweise natürliche Oxidschichten berücksichtigt werden. Für Silizium mit natürlicher SiO_2 -Schicht, das wie Quarzglas oft als Referenzmaterial verwendet wird, ist dies in Abschnitt A.2 dargestellt. Zudem hängen die optischen bzw. dielektrischen Konstanten oft von den Herstellungsbedingungen und dem Alterungszustand der Materialien ab, so dass sich Literatur- und Datenbankwerte für ein und desselben Materials signifikant unterscheiden können. Es wird deshalb empfohlen, die optischen/dielektrischen Konstanten der verwendeten Materialien und die Gültigkeit bzw. Güte des Modells *Volumenmaterial* vorab durch eine Mehrwinkelmessung zu validieren. Dabei handelt es sich aber im Einzelfall nur um eine notwendige und keine hinreichende Bedingung, wie das Beispiel natürliche Oxidschicht auf Silizium (siehe Bild A.3) zeigt.

Bei der Messung von realen Materialien und Oberflächen werden möglicherweise mehrere der Annahmen des Modells *Volumenmaterial* nicht erfüllt. Die dabei auftretenden Modellabweichungen werden in 4.2.2 bis 4.2.9 erläutert.