

	DIN 50989-6	
ICS 19.100 Ellipsometrie – Teil 6: Modell Effektive Materialien; Text Deutsch und Englisch Ellipsometry – Part 6: Effective Materials model; Text in German and English Ellipsométrie – Partie 6: Modèle de matériaux efficaces; Texte en allemand et anglais Gesamtumfang 39 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 Effektive Materialien	7
4.1 Strahlengang und Effektiv-Medium-Theorie	7
4.1.1 Strahlengang	7
4.1.2 Effektiv-Medium-Theorie	8
4.2 Annahmen	11
4.3 Besonderheiten des Modells Effektive Materialien	12
4.4 Validierung	13
4.5 Messunsicherheit	14
4.5.1 Messunsicherheit der ellipsometrischen Transfergrößen ψ und Δ	14
4.5.2 Messunsicherheit u_d der Schichtdicke d	14
5 Prüfbericht	14
Anhang A (informativ) Ergänzungen zum Modell Effektive Materialien	15
A.1 Effektiv-Medium-Näherung nach Maxwell-Garnett zur Berechnung der dielektrischen Funktion von porösem Gold	15
A.2 Effektiv-Medium-Näherung nach Bruggeman zur Simulation der ellipsometrischen Transfergrößen in Anwesenheit einer Grenzflächenrauheit SiO ₂ /Si	16
A.3 Effektiv-Medium-Näherung nach Bruggeman zur Auswertung der Messung einer porösen TiO ₂ -Schicht auf Silizium	17
A.4 Hinweise für die Messpraxis	18
Literaturhinweise	19

Bilder

Bild 1 — Strahlengang beim Modell Effektive Materialien	8
Bild 2 — Schematische Darstellung der Grundgleichung beim Modell Effektive Materialien	9
Bild 3 — Schematische Darstellung der linearen Näherung beim Modell Effektive Materialien	9
Bild 4 — Schematische Darstellung der Maxwell-Garnett-Näherung	10
Bild 5 — Schematische Darstellung der Bruggeman-Näherung	11
Bild 6 — Validierung des Modells Effektive Materialien	13
Bild A.1 — Real- und Imaginärteile der komplexen dielektrischen Funktion von Gold sowie des effektiven Materials poröses Gold (90% Gold und 10 % Luft)	15
Bild A.2 — Real- und Imaginärteile der komplexen dielektrischen Funktion eines effektiven Materials (90% Gold und 10 % Luft) bei falscher Zuweisung der Materialien A und B	16
Bild A.3 — Simulierte ellipsometrische Transfergrößen ψ und Δ von 10 nm SiO ₂ auf Silizium-Substrat bei einem Einfallswinkel (AOI) von 70° mit und ohne Rauheitsgrenzschicht	17
Bild A.4 — Messung porenfreier und poröser TiO ₂ -Schichten auf Si-Substrat: Real- und Imaginärteile der komplexen dielektrischen Funktion	18

Tabellen

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen 7

Tabelle 2 — Annahmen beim Modell Effektive Materialien 11

Vorwort

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

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

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

- Teil 1: Grundlagen¹
- Teil 2: Modell Volumenmaterial
- Teil 3: Modell Transparente Einfachschicht
- Teil 4: Modell Semi-transparente Einfachschicht
- Teil 5: Modell Mehrfachsichten und periodische Schichten
- Teil 6: Modell Effektive Materialien (dieses Dokument)

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

¹ Zurückgezogen und vollständig ersetzt durch DIN EN ISO 23131.

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 Einwellenlängen, dann als Mehrwellen- und später als spektroskopisches Messverfahren etabliert.

Mittels Ellipsometrie können optische bzw. dielektrische Konstanten beliebiger Materialien sowie Schichtdicken wenigstens semi-transparenter Schichten bzw. Schichtsysteme bestimmt werden. Die Ellipsometrie ist ein indirektes Messverfahren, dessen Auswertung auf einer Modelloptimierung basiert. Die je nach Verfahrensprinzip unterschiedlichen Messgrößen werden in die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ (Psi, Amplitudeninformation) und Δ (Delta, Phaseninformation) umgewandelt, aus denen die relevanten 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. Dies 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 Effektive Materialien wird eine Fitprozedur zur Bestimmung der Schichtdicke d und der optischen/dielektrischen Konstanten N bzw. ε des Schichtmaterials, das als effektives Material beschrieben werden kann, angewandt. Die Volumenanteile der Schichtmaterialkomponenten können dabei in den Fit einbezogen werden, während deren optischen/dielektrischen Konstanten und die des Substrats bekannt sein müssen. Der Fit erstreckt sich deshalb auf die Größe Schichtdicke d , die *a priori* unabhängig von der Wellenlänge und dem Einfallswinkel ist, sowie den wellenlängenabhängigen Brechungsindex N /die dielektrische Funktion ε des effektiven Schichtmaterials, die vom Einfallswinkel (AOI, en: angle of incidence) unabhängig sind. Mit dem Modell Effektive Materialien wird die Bestimmung der Schichtdicke und des komplexen Brechungsindex/der komplexen dielektrischen Funktion des Schichtmaterials möglich.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt mittels ellipsometrischer Messungen und deren Auswertung das Verfahren zur Bestimmung der Schichtdicke d von Schichten effektiver Materialien sowie deren optischen Konstanten (N) bzw. dielektrischen Funktionen (ϵ) auf Basis des Modells Effektive Materialien 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 50989-2:2021-04, *Ellipsometrie — Teil 2: Modell Volumenmaterial; Text Deutsch und Englisch*

DIN 50989-3:2022-04, *Ellipsometrie — Teil 3: Modell transparente Einfeldschicht; Text Deutsch und Englisch*

DIN 50989-4:2022-09, *Ellipsometrie — Teil 4: Modell Semi-transparente Einfeldschicht; Text Deutsch und Englisch*

DIN 50989-5, *Ellipsometrie — Teil 5: Modell Mehrfeldschichten und periodische Schichten; Text Deutsch und Englisch*

DIN EN ISO 23131, *Ellipsometrie — Grundlagen*

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

effektives Material

mindestens zweikomponentiges Material, dessen einzelne Komponenten noch ihre ursprünglichen optischen Eigenschaften besitzen

3.2 Symbole und Abkürzungen

In Tabelle 1 werden die in diesem Dokument bzw. zusätzlich zu DIN EN ISO 23131, DIN 50989-2, DIN 50989-3, DIN 50989-4 und DIN 50989-5 verwendeten Symbole und Abkürzungen dargestellt, wobei die Anforderungen von ISO/IEC Guide 98-3 und DIN EN ISO/IEC 17025 berücksichtigt werden müssen.

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
ε_1	Realteil der komplexen dielektrischen Funktion
ε_A	Realteil der komplexen dielektrischen Funktion der Schichtmaterialkomponente A
ε_B	Realteil der komplexen dielektrischen Funktion der Schichtmaterialkomponente B
f_A	Volumenanteil der Schichtmaterialkomponente A
f_B	Volumenanteil der Schichtmaterialkomponente B
q	Depolarisationsfaktor
ε_2	Imaginärteil der komplexen dielektrischen Funktion
ε	komplexe dielektrische Funktion
φ	Einfallswinkel (AOI, en: angle of incidence) der einfallenden Lichtwelle zum Einfallslot
N_a	komplexer Brechungsindex des umgebenden Mediums (a, en: ambient)
N_{eff}	komplexer Brechungsindex des effektiven Schichtmaterials
ε_a	komplexe dielektrischen Funktion des umgebenden Mediums (a, en: ambient)
ε_{eff}	komplexe dielektrischen Funktion des effektiven Schichtmaterials
N_s	komplexer Brechungsindex des Substrats
ε_s	komplexe dielektrischen Funktion des Substrats
d	Schichtdicke des effektiven Schichtmaterials
D_{RMS}	mittlere quadratische Abweichung (en: root-mean-square deviation, in DIN EN ISO 23131 und einigen Auswerteprogrammen noch <i>RMSE</i> [en: root-mean-square error] genannt)
$D_{\text{RMS,min}}$	Minimum der mittleren quadratische Abweichung
d_{fit}	Fitergebnis für die Schichtdicke
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 In ISO/IEC Guide 98-3 wird der Erweiterungsfaktor mit „ k “ bezeichnet.	

4 Modell Effektive Materialien

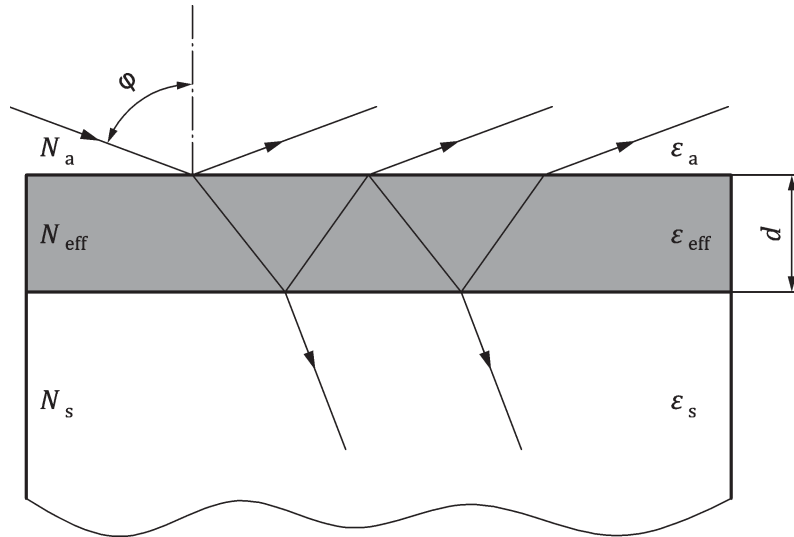
4.1 Strahlengang und Effektiv-Medium-Theorie

4.1.1 Strahlengang

Der Strahlengang unter dem Einfallswinkel (AOI) φ im Modell Effektive Materialien ist in Bild 1 dargestellt.

Obwohl die Einzelschicht als effektives Material aus mindestens zwei Materialkomponenten besteht, die jede für sich ihre optische Wirkung entfalten, wird dem effektiven Schichtmaterial der Schichtdicke d unter Verwendung der Effektiv-Medium-Theorie (4.1.2) nur ein effektiver komplexer Brechungsindex N_{eff} bzw. eine effektive

dielektrische Funktion ε_{eff} zugewiesen. Der Umgebung (Index a, en: ambient) wird der komplexe Brechungsindex N_a und die komplexe dielektrische Funktion ε_a zugeordnet. Üblicherweise wird Luft als Umgebung fungieren, der Brechungsindex und dielektrische Funktion sind dann reell mit $n_a = 1,000$, $k_a = 0,000$ und $\varepsilon_{a1} = 1$, $\varepsilon_{a2} = 0$ in sehr guter Näherung. Dem Substrat wird der komplexe Brechungsindex N_s zugeordnet.



Legende

- φ Einfallswinkel (AOI) 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 des umgebenden Mediums (für Luft reell, $\varepsilon_a = \varepsilon_{1a} = 1$)
- d Schichtdicke des effektiven Schichtmaterials
- N_{eff} komplexer Brechungsindex des effektiven Schichtmaterials ($N_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}(\lambda) + i \cdot k_{\text{eff}}(\lambda)$)
- ε_{eff} komplexe dielektrischen Funktion des effektiven Schichtmaterials ($\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_{1\text{eff}} + i \cdot \varepsilon_{2\text{eff}}$)
- N_s komplexer Brechungsindex des Substrats ($N_s = n_s(\lambda) + i \cdot k_s(\lambda)$)
- ε_s komplexe dielektrische Funktion des Substrats ($\varepsilon_s = \varepsilon_{1s} + i \cdot \varepsilon_{2s}$)

Bild 1 — Strahlengang beim Modell Effektive Materialien

Beim Modell Effektive Materialien wird davon ausgegangen, dass neben dem Einfallswinkel φ die Schichtdicke d des effektiven Schichtmaterials, die Brechungsindizes N bzw. die dielektrischen Funktionen ε der Schichtmaterialkomponenten mit deren Volumenanteilen sowie die optischen (n_s , k_s) bzw. dielektrischen (ε_{1s} , ε_{2s}) Konstanten des Substrats die gemessenen ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ bestimmen.

4.1.2 Effektiv-Medium-Theorie

4.1.2.1 Grundlagen

Die Effektiv-Medium-Theorie, oft auch als Effektiv-Medium Näherung bezeichnet (en: Effective Medium Approximation, EMA) erlaubt es, einen effektiven Brechungsindex bzw. eine effektive dielektrische Funktion des Schichtmaterials aus den jeweiligen Größen der zwei oder mehr Materialkomponenten zu berechnen.

Grundlage der Effektiv-Medium-Theorie ist die dielektrische Polarisierungstheorie, so dass streng genommen nur Dielektrika als Materialkomponenten des effektiven Materials in Frage kommen, was zu reellen effektiven optischen Konstanten ($k_{\text{eff}} = 0$) bzw. dielektrischen Funktionen ($\varepsilon_{2\text{eff}} = 0$) führt. Werden nun zwei Schichtkomponenten A und B mit ihren Volumenanteilen f_A und f_B betrachtet, gilt Gleichung (1).

$$f_A + f_B = 1 \quad (1)$$

Für die Effektiv-Medium-Theorie sind drei grundlegende Näherungen bekannt, die lineare, rein mathematische Näherung, und die physikalischen Näherungen nach Maxwell-Garnett bzw. Bruggeman. Da die dielektrische Polarisierungstheorie auf der dielektrischen Funktion basiert, werden alle Effektiv-Medium-Näherungen für den Realteil der effektiven dielektrischen Funktion ε_{eff} abgeleitet.

Die zwei grundlegenden Modelle der Effektiv-Medium-Theorie basieren auf der Clausius-Mossotti-Relation, die den Zusammenhang zwischen der Polarisierbarkeit der Moleküle und der dielektrischen Konstante des Materials herstellt. Zur physikalischen Beschreibung von Zwei- oder Mehrkomponenten-Materialien, auch als effektives Material bezeichnet, sind dann die dielektrischen Konstanten aller Materialien zu berücksichtigen. Die resultierende dielektrische Konstante des effektiven Materials wird mit ε_{eff} bezeichnet.

Für sphärische Partikel eines Zwei-Komponentensystems der Materialien A und B in einem Umgebungsmedium der dielektrischen Konstante ε ergibt sich Gleichung (2), die in Bild 2 schematisch visualisiert ist.

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon}{\varepsilon_{\text{eff}} + 2\varepsilon} = f_A \frac{\varepsilon_A - \varepsilon}{\varepsilon_A + 2\varepsilon} + f_B \frac{\varepsilon_B - \varepsilon}{\varepsilon_B + 2\varepsilon} \quad (2)$$

Bei der Herleitung der Gleichung (2) wurde der Depolarisationsfaktor $q = 1/3$ für sphärische Körper berücksichtigt. Das resultiert im Koeffizienten 2 in den Nennern der drei Terme.

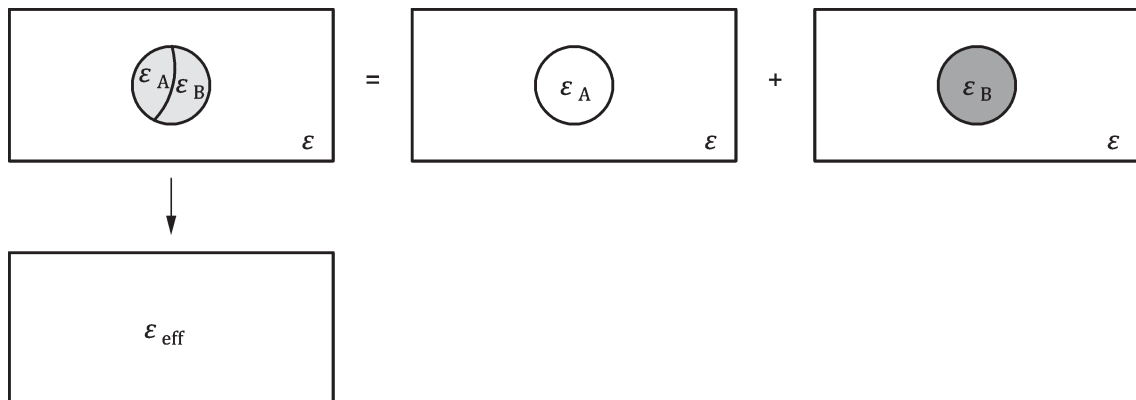


Bild 2 — Schematische Darstellung der Grundgleichung beim Modell Effektive Materialien

Aus Gleichung (2) können zwei grundlegende physikalisch basierte Näherungen abgeleitet werden, die als Maxwell-Garnett-, siehe 4.1.2.3, bzw. Bruggeman-Näherung, siehe 4.1.2.4, bezeichnet werden.

4.1.2.2 Lineare Näherung

Im Fall der linearen rein mathematischen Näherung ergibt sich Gleichung (3) für das effektive Schichtmaterial:

$$\varepsilon_{\text{eff}} = f_A \varepsilon_A + f_B \varepsilon_B \quad (3)$$

Dies ist in Bild 3, Bild 4 und Bild 5 schematisch veranschaulicht.

Bild 3 — Schematische Darstellung der linearen Näherung beim Modell Effektive Materialien

4.1.2.3 Maxwell-Garnett-Näherung

Wird in Gleichung (2) $\varepsilon = \varepsilon_A$ gesetzt, ergibt sich die dielektrische Konstante effektiven Schichtmaterials nach Gleichung (4):

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_A}{\varepsilon_{\text{eff}} + 2\varepsilon_A} = f_B \frac{\varepsilon_B - \varepsilon_A}{\varepsilon_B + 2\varepsilon_A} \quad (4)$$

Physikalisch bedeutet das, dass das Schichtmaterial A als Umgebung des Schichtmaterials B fungiert und üblicherweise dominant ist, oft wird deshalb auch die Bezeichnung Wirtsmedium (Material A, en: host) und Gastmedium (Material B, en: guest) verwendet, was in Bild 4 veranschaulicht ist. Für die Volumenanteile der Materialien A und B wird bei der Maxwell-Garnett Näherung $f_A > f_B$ vorausgesetzt.

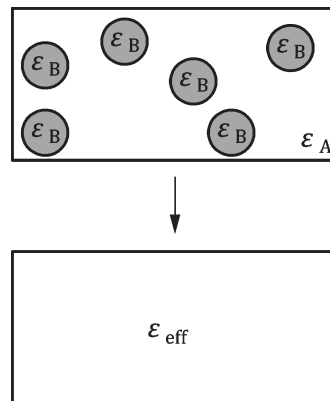


Bild 4 — Schematische Darstellung der Maxwell-Garnett-Näherung

Wird Gleichung (4) nach ε_{eff} aufgelöst, ergibt sich nach Gleichung (5) genau eine Lösung.

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_A \cdot \frac{\varepsilon_B (1 + 2f_B) + 2\varepsilon_A (1 - f_B)}{\varepsilon_B (1 - f_B) + \varepsilon_A (2 + f_B)} \quad (5)$$

Zur Berechnung der dielektrischen Funktion von porösem Gold wird in Abschnitt A.1 die Effektiv-Medium-Näherung nach Maxwell-Garnett verwendet.

4.1.2.4 Bruggeman-Näherung

Wird in Gleichung (2) $\varepsilon = \varepsilon_{\text{eff}}$ gesetzt, ergibt sich die dielektrische Konstante effektiven Schichtmaterials nach Gleichung (6):

$$0 = f_A \frac{\varepsilon_A - \varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_A + 2\varepsilon_{\text{eff}}} + f_B \frac{\varepsilon_B - \varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_B + 2\varepsilon_{\text{eff}}} \quad (6)$$

Physikalisch bedeutet das, dass die Schichtmaterialien A und B gemeinsam als effektives Medium wirken, was in Bild 5 veranschaulicht ist. Für die Zuweisung der Volumenanteile f_A und f_B der Materialien A und B wird bei der Bruggeman-Näherung keine Voraussetzung gemacht.

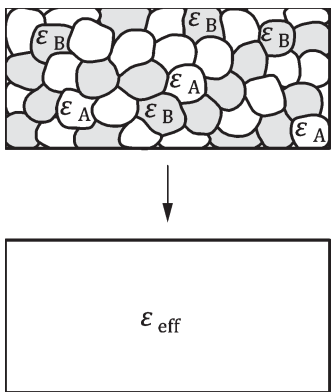


Bild 5 — Schematische Darstellung der Bruggeman-Näherung

Wird Gleichung (6) nach ϵ_{eff} aufgelöst, ergeben sich nach Gleichung (7) zunächst zwei Lösungen

$$\epsilon_{\text{eff}} = \frac{1}{4} \left(-b \pm \sqrt{b^2 + 8\epsilon_A\epsilon_B} \right) \tag{7}$$

mit

$$b = \epsilon_A (1 - 3f_A) + \epsilon_B (3f_A - 2), \tag{8}$$

wobei für Mischungen reiner Dielektrika ϵ_{eff} reell ist und sich mit der Bedingung $\epsilon_{\text{eff}} > 0$ nach Gleichung (7) als einzige Lösung

$$\epsilon_{\text{eff}} = \frac{1}{4} \left(-b + \sqrt{b^2 + 8\epsilon_A\epsilon_B} \right) \tag{9}$$

ergibt. Zur Simulation der ellipsometrischen Transfergrößen wird in Abschnitt A.2 eine Grenzflächenrauheit SiO₂/Si als Effektiv-Medium-Näherung nach Bruggeman verwendet, während im Abschnitt A.3 die Effektiv-Medium-Näherung nach Bruggemann zur Auswertung von Messungen einer porösen TiO₂-Schicht herangezogen wird.

4.2 Annahmen

Beim Modell Effektive Materialien werden die Modellannahmen nach Tabelle 2 gemacht.

Tabelle 2 — Annahmen beim Modell Effektive Materialien

Annahme	Erläuterung
M1	Es werden homogen verteilte sphärische dielektrische Partikel in der dielektrischen Umgebung (Maxwell Garnett) oder homogene Mischungen dielektrischer Partikel (Bruggeman) angenommen.
M2	Die minimale Partikelgröße jeder Materialkomponente des effektiven Materials muss mindestens eine Größenordnung über der Atom- bzw. Molekülgröße der betreffenden Komponente liegen, damit die Komponente optisch noch einzeln wirksam wird, d. h. Brechungsindex und Dielektrizitätskonstante überhaupt als Materialeigenschaft definiert sind. Gleichzeitig sollte die maximale Partikelgröße kleiner als $\lambda/10$ sein, damit keine zusätzlichen Effekte, wie Interferenzen, auftreten.
M3	Generell wird vorausgesetzt, dass die verwendeten dielektrischen Konstanten/Funktionen der Materialkomponenten unabhängig von den Partikelgröße und Partikelform sind.

Tabelle 2 (fortgesetzt)

Annahme	Erläuterung
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

Die Annahmen M1 bis M3 beschreiben auf das effektive Schichtmaterial bezogene und die Annahmen S1 und S2 messtechnische Einflussgrößen, die für die Gültigkeit bzw. Güte des Modells Effektive Materialien relevant sind.

Bei der Messung von effektiven Materialien werden möglicherweise mehrere der Annahmen des Modells Effektive Materialien nicht erfüllt. Auswirkungen, die sich aus Abweichungen in den Modellabweichungen M1 bis M3 ergeben, werden in Abschnitt A.4 als Hinweise für die Messpraxis aufgezeigt. Mögliche Abweichungen von den Annahmen S1 und S2 sind für die Modelle Volumenmaterial, Transparente Einzelschicht und Semi-transparente Einzelschicht in DIN 50989-2, DIN 50989-3 bzw. DIN 50989-4 beschrieben und müssen hier sinngemäß auf das Modell Effektive Materialien angewendet werden.

In einigen Auswerteprogrammen kann zudem die Abhängigkeit der effektiven dielektrischen Konstante ϵ_{eff} von der Partikelform der Materialkomponenten durch Depolarisationsfaktor q berücksichtigt werden.

4.3 Besonderheiten des Modells Effektive Materialien

Das Modell Effektive Materialien enthält mit der Schichtdicke d eine Größe, die unabhängig von der Wellenlänge und vom Einfallswinkel ist. Damit ist ein Mehrwellenlängen- und Mehreinfallswinkel-Fit auf die Schichtdicke möglich, wobei die mittlere quadratische Abweichung D_{RMS} zwischen experimentell bestimmten und modellmäßig simulierten ellipsometrischen Transfergrößen nach Gleichung (10) minimiert wird.

$$D_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{2U - V + 1} \sum_{i=1}^U \left[\left(\frac{\psi_i^{\text{mod.}} - \psi_i^{\text{exp.}}}{u_{\text{sys}, \psi_i}} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_i^{\text{mod.}} - \Delta_i^{\text{exp.}}}{u_{\text{sys}, \Delta_i}} \right)^2 \right]} = \sqrt{\frac{1}{2U - V + 1} \chi^2} \quad (10)$$

Dabei ist

U die Anzahl der Messpunkte;

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

ANMERKUNG Gleichung (10) 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 (10) 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 EN ISO 23131) oder das Verhältnis der komplexen Amplitudenreflexionskoeffizienten von p- zu s-polarisiertem Licht ρ . Die Normierung dieser Messgrößen [für Ψ und Δ in Gleichung (10) 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.