

激光散射理论及其在计量测试中的应用

陈军 尤政 周兆英
(清华大学精密仪器系, 北京, 100084)

摘要: 本文系统地介绍了一门新近发展起来的学科——光散射及其应用技术。文中概述了散射理论的发展历史, 详细介绍了瑞利散射定律及米氏理论, 分析了散射与粒度、表面轮廓形貌统计特性及晶体内部微缺陷之间的数学关系, 给出了激光散射在粒度、表面粗糙度测试及微缺陷检测中的应用实例。

关键词: 散射 瑞利散射理论 米氏理论 测量 应用

Light scattering theory and its application in measurement

Chen Jun, You Zheng, Zhou Zhaoying
(Department of Precision Instruments, Tsinghua University)

Abstract: In this paper, a newly developed science subject——light scattering and its application in measurement is introduced. The developmental history is reviewed. Based on Rayleigh scattering theory and Mie theory, the relationship between scattering and particle sizing, statistical characteristics of surface topography and micro defects in crystal are analyzed. At last, some typical application of scattering theory are presented.

Key words: scattering Rayleigh scattering theory Mie theory measurement application

一、引言

散射理论的研究开始于上一世纪的70年代。1871年, 瑞利(Lord Rayleigh)首先提出了著名的瑞利散射定律, 并用电子论的观点解释了光散射的本质^[1]。瑞利散射定律的适用条件是

五、结论

本装置的研制成功地解决了链条生产中一个关键问题。经过一年多实际运行证明, 用激光器和CCD作为光的发射接收系统, 来提取在线的链板塌角信号, 具有速度快, 选出率高, 工作稳定等特点。

参 考 文 献

- 1 王俊华, 崔砚生, 吴美娟编著. 激光原理及应用. 北京: 清华大学出版社, 1987: 117~123
- 2 Tenkins F A, White H E 著, 杨光熊, 郭永康译. 光学基础(下册). 北京: 高等教育出版社, 1994: 152~158
- 3 纪明. 长春光学精密机械学院学报, 1991; 14(2): 1~5

作者简介: 杨今才(附照片), 男, 1936年12月出生。副教授。从事电子技术教学及科研。
刘富, 男, 1968年7月出生。博士。从事信号检测及自动控制方面的研究。
金昌, 男, 1945年7月出生。副研究员。从事机械学的研究工作。
蓝宏, 男, 1955年8月出生。工程师。从事链传动研究与测试工作。

散射体的尺寸要比光波波长大。1908年,米氏(G. Mie)通过电磁波的麦克斯韦方程,解出了一个关于光散射的严格解,得出了任意直径、任意成分的均匀粒子的散射规律,这就是著名的米氏理论^[2]。1957年,H. C. Van de Hulst出版了关于微小粒子光散射现象的专著,总结了粒子散射的普遍规律,受到科技界人士的广泛注意,这本专著被认为是光散射理论领域的经典文献^[3]。1969年,M. Kerker系统论述了光及电磁波散射的一般规律,为散射理论的进一步发展做出了贡献^[4]。1983年,C. F. Bohren, O. R. Huffman综合前人的成果,又发表了关于微小粒子对光散射及吸收的一般规律,更全面地解释了光的各种散射现象^[5]。至此,散射理论的体系建立起来了。

1954年,美国科学家H. Davies在研究雷达波被海洋表面散射时发现,雷达波被海洋表面的散射是与海洋表面形貌的统计参数密切相关的^[6]。由于光波与雷达波本质上都是电磁波,因此Davies的研究成果很快受到了光学界的注意,并被立即引伸到了光学领域。利用光散射测量粗糙度迅速成为了一项新技术。

1976年,J. Swithenbank等人利用米氏理论在 $d \gg \lambda$ 时(d 为散射粒子的直径, λ 为光波波长)的近似式——夫琅和费(Franhofer)衍射理论发展了激光粒度测量仪^[7],开辟了散射理论在计量测试中的又一新领域。由于光散射测试法适用范围宽,测量时不受颗粒光学特性及电学特性参数的影响,因此在不到二十年的时间里已成为粒度计量中最为重要的方式之一。

微电子技术的发展,对Si, GaAs等半导体材料的性能提出了越来越高的要求。晶体内部微小缺陷的检测日益受到了半导体加工业的重视。由于缺陷是光在晶体内发生散射的根源,散射反映着缺陷的位置、大小、形状等特征,因此,目前,利用这一技术检测缺陷成了无损探伤的又一新途径。

二、瑞利散射定律、米氏理论

1871年,瑞利首先从理论上解释了光的散射现象,并通过对远小于光波波长的微粒散射进行的精密研究,得出了著名的瑞利散射定律,这就是散射光强度与入射光波长的四次方成反比,即:

$$I_{\text{sca}} \approx 1/\lambda^4 \quad (1)$$

式中, I_{sca} 为相应于某一观察方向(与入射光成 θ 角)的散射光强度, λ 为入射光的波长。

瑞利认为,一束光射入媒质后,将引起媒质中每个分子作强迫振动。这些作强迫振动的分子将成为新的点光源,向外辐射次级波。这些次级波与入射波迭加后的合成波就是在媒质中传播的折射波。对均匀媒质来说,这些次波是相干的,其干涉的结果,只有沿折射光方向的合成波才加强,其余方向皆因干涉而抵消,这就是光的折射。如果媒质出现不均匀性,破坏了散射体之间的位置关系,各次波不再是相干的,这时合成波折射方向因干涉而加强的效果也随之消失,也就是说其它方向也会有光传播,这就是散射^[1]。

1908年,米氏在电磁理论的基础上,从麦克斯韦方程出发,对于平面线偏振单色波被一个位于均匀媒质中具有任意直径和任意成分的均匀球衍射,得出了一个严格解,这就是著名的Mie氏理论。

Mie氏理论考虑一个平面线偏振光被球形粒子的衍射。建立如图1所示的空间坐标系,球形粒子位于坐标原点,入射光方向沿Z轴。设粒子半径为R,复折射率为 $m = n - j\eta$, n

Fig. 1 The coordinate system of a sphere particle's scattered light

为折射率, η 为吸收率, 入射光波长为 λ 引入粒子半径相对于波长 λ 的无量纲参数 q 来表示粒子大小, 即:

$$q = 2\pi R / \lambda \quad (2)$$

将 q 称为粒径参数, 并把入射光方向和散射光方向组成的平面称为观察面, 则粒子在 $P(r, \theta, \varphi)$ 处的散射光强是:

$$I(\theta, \varphi) = [I_0 F(\theta, \varphi, q)] / (2k^2 r^2) \quad (3)$$

式中, I_0 为照射到粒子上的入射光光强, k 为波数, $k = 2\pi / \lambda$, r 为粒子与 P 点的间距, $F(\theta, \varphi, q)$ 为散射函数, $F(\theta, \varphi, q)$ 的具体形式是:

$$F(\theta, \varphi, q) = i_1(q, \theta) \sin^2 \varphi + i_2(q, \theta) \cos^2 \varphi \quad (4)$$

i_1, i_2 称为米强度系数, 它们是散射角 θ , 复折射率 m 及粒径参数 q 的函数^[2]。

可见, 散射场中任意一点的散射光强与粒径参数 q , 复折射率 m 及散射角 θ 等都是有关的。对于特定的应用场合, 如 q, m 一定时, 散射光强就仅与散射角 θ 有关, 即在不同方向上接收到的散射光强不同。

三、米氏理论在计量测试中的应用

米氏理论形式繁琐、复杂, 应用时常会有许多不方便之处。如米氏系数与粒子的复折射率有关, 而在许多场合, 粒子的复折射率是预先不知道的, 并且也很难进行测试; 粒子尺寸较大时, 构成米氏系数的数列不收敛, 计算很困难等等。然而, 当粒子的粒径参数 $q \ll 1$ 时, 米氏解可近似为瑞利公式, 这种情况下的散射称为瑞利散射; 当球形粒子的粒径参数 $q \gg 1$ 时, 根据夫琅和费衍射理论所得的结果与米氏解相同, 这时的散射可称为衍射散射; 只有当粒径参数在瑞利散射和衍射散射之间时, 才必须要用到严格的米氏理论。这为

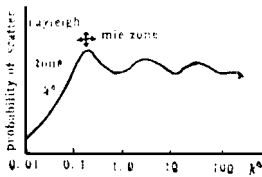


Fig. 2 Rayleigh and Mie scattering

具体应用提供了极大方便。

1. 散射理论在粒度测量中的应用

米氏理论中, 当粒子的直径 d 远大于入射光的波长 λ 时, 由上可知, 其散射是遵循衍射散射规律的, 此时可以把粒子散射等同于一个具有相同直径的圆斑散射。因为根据巴俾涅补偿原理, 圆斑的衍射效应与具有相同直径的圆孔相同, 因此粒子的散射可以用夫琅和费圆孔衍射来计算。如图 3 所示, 设粒子直径为 D , 半径为 R , $x_1 o_1 y_1$ 为粒子所处平面, $x o y$ 为光电探测器所处的平面, 它位于透镜 L 的焦平面上。根据巴俾涅原理, 在接收透镜的后焦面即光电探测器上, 由颗粒散射所产生的前向光强分布是^[8]:

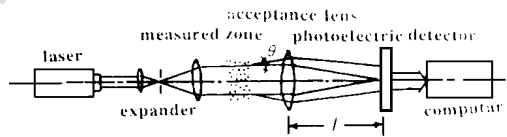


Fig. 3 Schematic diagram of diffractive particle analysis system

$$I(\theta) = I_0 [\pi^2 D^4 / (16f^2 \lambda^2)] [2J_1(x) / x] \quad (5)$$

式中, f 为接收透镜的焦距, J_1 为一阶贝塞尔函数, 参数 $x = \pi D \sin \theta / \lambda$ 。

上式中, 令 $\theta = 0$, 则有:

$$I(0) = I_0 [\pi^2 D^4 / (16f^2 \lambda^2)] \quad (6)$$

于是对于 $I(0)$ 的相对光强分布函数 $P(\theta)$ 为:

$$P(\theta) = I(\theta) / I(0) = [2J_1(x) / x]^2 \quad (7)$$

可见, 对于一定直径的颗粒, 由(7)式决定的衍射散射图样是一组同心明暗交替的光环形

式,其中心亮斑为爱里斑,它的半径的张角 θ_0 ,即散射图样的第一最小点对颗粒中心法线的夹角为:

$$\theta_0 = \arcsin(1.22 \lambda / D) \quad (8)$$

可见,对于一定入射波长 λ 的光,颗粒直径 D 越大,张角越小,衍射散射的光强越强。

散射光照射到光电探测器上,在光电探测器每个环上获得的光能量由下式确定:

$$E_n = \int_{s_n}^{s_{n+1}} I(\theta) 2\pi s ds \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (9)$$

s 为环半径。将(5)式代入(9)式:

$$E_n = \int_{s_n}^{s_{n+1}} I_0 \frac{\pi D^2 J_1^2(x)}{2f^2 \sin^2 \theta} s ds \quad (10)$$

由于接收透镜的焦距 f 远大于光电探测器的最大半径,即散射角很小,因此可作如下近似:

$$\sin \theta \approx \theta \approx s/f \quad (11)$$

则将(11)式代入(10)式后:

$$E_n = I_0 \frac{\pi D^2}{2} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{J_1^2(x)}{x} dx \quad n = 1, 2, \dots \quad (12)$$

式中, $x_n = \pi D \theta_n / \lambda$, $x_{n+1} = \pi D \theta_{n+1} / \lambda$ 。由于利用贝塞尔函数递推公式可得出:

$$[J_1^2(x)]/x = -(1/2) \{ (d[J_0^2(x) + J_1^2(x)]) / dx \} \quad (13)$$

于是(12)式:

$$E_n = I_0 (\pi D^2 / 4) [J_0^2(x_n) + J_1^2(x_n) - J_0^2(x_{n+1}) - J_1^2(x_{n+1})] \quad (14)$$

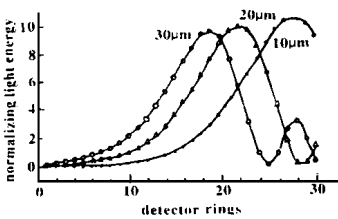


Fig. 4 Energy (light) distribution of varied diameter particles

可见,已知颗粒的直径和光电探测器各环的内外半径以及接收透镜的焦距,利用上式就可算出散射光在光电探测器各个环上的光能量。图4给出了颗粒直径为10 μm , 20 μm 和30 μm 三种情况的光能量分布,图中横坐标为光电探测器的环数,纵坐标为归一化能量。

从图中可以看出,对于不同直径的颗粒所产生的散射光,在光电探测器上的光能量分布有明显的不同,颗粒直径越大,光能分布曲线的第一峰值越向中心(即环数 n 较小)方向靠拢。因此,如果利用光电探测器实测到一个光能分布,那么从理论上就可以利用(14)式求出一个与其对应的颗粒直径,而且这个值是唯一的,这就是衍射散射测量粒度的基本理论。

1976年, J. Swithenbank 首先利用这一原理发展了激光微粒测量系统,进行了微粒尺寸的分佈测试,获得了令人满意的实验数据^[7],这一方法后来发展成为马尔文(Malvern)衍射粒度分析仪。马尔文粒度分析仪具有测量范围宽,适用范围广,测量时间短以及不受被测颗粒的光学特性参数影响的特性,因此日益受到了各界的广泛重视,被认为是一种先进的、具有广泛发展前途的粒度测量途径。

近年来,通过对散射理论的进一步研究,人们又发展了综合应用米氏理论和夫琅和费理论的粒度测量数学模型,即在小颗粒范围内采用米氏散射理论,在大颗粒范围内采用夫琅和费理论,同时明确给出了米氏理论与夫琅和费衍射理论在粒度测量中粒径参数的适用范围,从而在理论上保证了测粒仪在整个测量范围(特别是小颗粒)的测量准确度。

目前,根据这种数学模型建立起来的FAM(Franhofer And Mie)激光测粒仪已成功地对医用超声雾化器的雾化液滴、耐火材料粉末 Al_2O_3 以及玻璃小球、乳化脂肪油等进行了粒度分佈测试,结果皆与原始提供的数据相符合^[9]。

2. 光学表面的散射规律及其在粗糙度测量中的应用

电磁波在物体表面上发生散射,其规律是十分复杂的,它与诸多因素有关。但是,当物体表面的起伏高度远小于入射电磁波的波长,即满足光学表面的条件时,这一规律可获得极大简化。

首先考虑一维表面的情况。根据傅里叶变换理论,一维表面可看成是由许多按正弦规律变化的分量叠加构成的,每一分量具有不同的振幅 a , 空间频率 f (或空间周期 $d = 1/f$) 及相位 φ , 即每一正弦分量元素的面形方程为^[10]:

$$z(x) = a \sin(2\pi x f + \varphi) \quad (15)$$

则由此解得的该面形确定的散射光方向分布为:

$$\sin \theta_N = \sin \theta_i \pm N(\lambda d) \quad (16)$$

取 $N = 0$, $\theta_0 = \theta_i$, 它为反射光方向。取 $N = 1$,

$$\sin \theta_1 = \sin \theta_i \pm (\lambda d) \quad (17)$$

θ_i 即为散射光的空间分布方向。由散射光 I_s 相对于入射光 I_0 的光强分布函数是:

$$I_s/I_0 = [(2\pi/\lambda) a \cos \theta_i]^2 \quad (18)$$

可见,对于每一正弦面形的元素,其散射光强仅与其振幅 a 有关;而空间分布与空间周期 d 有关。

上述一维表面可进一步扩展到二维情况。此时,任一粗糙表面(图5)在满足光学表面的条件下,由傅里叶变换,可看成是由无数不同空间频率、不同振幅及不同取向的正弦单元面形叠加形成的。光线在这种表面上的散射就是光线被无数单元面形散射光场的叠加。于是任一粗糙表面散射光强分布函数是:

$$dP_s/(P_0 d\omega_s) = \cos \theta_i \cdot \cos^2 \theta_s \cdot Q(\theta_i, \theta_s, \phi_s) \cdot g(f_x, f_y) \quad (19)$$

式中, P_0 为入射光强, θ_s 为散射角, $dP_s/d\omega_s$ 为在某一方向单位立体角内散射的光强, Q 为偏振因子,取决于反射面的相对介电常数和入射及反射光的偏振态, $g(f_x, f_y)$ 为物体表面轮廓的功率谱密度, f_x, f_y 为 x 和 y 方向的空间频率。

可见,对于光滑表面 ($a \ll \lambda$), 散射光强分布函数(通常称为双向散射分布函数 Bidirectional Scattering Distribution Function, BSDF) 取决于表征物体微观轮廓的功率谱密度函数 $g(f_x, f_y)$, 而具有任一轮廓 $\zeta(x, y)$ 的光滑表面的功率谱密度函数(PSD) 是由下式确定的:

$$\begin{aligned} g(f_x, f_y) &= \left| \iint_A \xi(x, y) \exp[-i2\pi(f_x x + f_y y)] dx dy \right|^2 \\ &= \sigma^2 \iint_{(x,y)} c(u, v) \exp[-i2\pi(f_x u + f_y v)] du dv \end{aligned} \quad (20)$$

式中, σ 为散射表面的均方根值 RMS, $c(u, v)$ 为表面粗糙度的自相关函数:

$$c(u, v) = (1/\sigma^2) \xi(x, y) \xi(x-u, y-v) \quad (21)$$

于是: $\iint_{(x,y)} g(f_x, f_y) df_x df_y = \sigma^2 \iint_{(x,y)} \exp[-i2\pi(f_x u + f_y v)] df_x df_y \cdot \iint_{(x,y)} c(u, v) du dv$

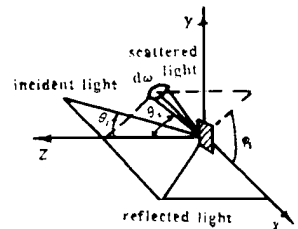


Fig. 5 The geometrical relationship of scattered light

$$= \sigma^2 \iint_{(x)} \delta(u, v) c(u, v) du dv = \sigma^2 c(0, 0) = \sigma^2 \tag{22}$$

则:

$$\sigma = \left[\iint_{(x)} g(f_x, f_y) df_x df_y \right]^{1/2} \tag{23}$$

可见,通过测量散射光强度分布函数 BSDF,就可求出散射表面的功率谱密度函数 $g(f_x, f_y)$, 并由此进一步求出散射表面的均方根粗糙度 σ , 从而知道散射表面微观形貌的统计特性。

上述原理在本世纪 70 年代得到了人们的重视, 并由此发展起来了测量表面粗糙度的可分辨角散射技术(Angle Resolve Scattering, ARS)。可分辨角散射技术的原理如图 6 所示^[11]。

Fig. 6 Schematic diagram of ARS measurement

激光束水平投射到被测样品表面上, 探测器在入射面内扫描, 测量入射面内散射光的分布图样; 将样品绕垂直轴 Y 旋转, 即可测量不同入射角 θ_i 时散射光的空间分布状况, 从而得到表面形貌的统计参数 σ 。

ARS 技术测量表面粗糙度具有许多独特的优点, 如它能直接给出表貌的统计特征参数, 速度快、结果可靠, 不需对表面进行预处理等等, 因此, 二十年来发展极快, 已成为表面粗糙度测量中最为重要的方法之一。目前, 可分辨角测量系统在纵向分辨率已达 $0.1\mu\text{m}$, 横向分辨率达 $1\mu\text{m}$ 。

1961 年, H. E. Bennett, J. O. Portrus 利用 H. Davies 研究雷达波受海洋表面散射得出的结论, 又提出了如果把物体表面向所对半球空间内散射的所有光线都收集起来, 即对 BSDF 函数在 π 空间内积分, 那么得到的总的积分散射光强与 σ 同样是有关的^[12], 即:

$$\text{TIS} = P_0/P_s = (4\pi\sigma/\lambda)^2 \tag{24}$$

则:

$$\sigma = \lambda \sqrt{\text{TIS}/(4\pi)} \tag{25}$$

式中, P_s 为积分散射光强, P_0 为反射光强, TIS 为全积分散射率。上述结论同样是在物体表面为光学表面的条件下得出的。

可见, 全积分散射率与表面粗糙度直接有关, 测出 P_s 及 P_0 值, 就能得到轮廓形貌的统计参数 σ 。图 7 是利用 TIS 原理测量粗糙度的典型系统原理图。

目前, 利用 TIS 测量表面粗糙度纵向分辨率也已达到了 $0.1\mu\text{m}$, 横向分辨率为 $1\mu\text{m}$ ^[13]。

3. 散射理论在晶体微缺陷检测中的应用

利用散射检测 Si, GaAs 等半导体晶体中的微缺陷, 如金属聚积物、微沉积物及微裂纹等是可行的。缺陷造成了晶体中的散射中心, 散射中心引发了散射光, 因此, 若记录晶体于各处对光的散射图样, 那么根据米氏理论, 就可以得到一幅缺陷的图象, 获得晶体内缺陷的分布状况, 完成缺陷检测的任务。

上述想法 1984 年 R. M. Sliva 进行了验证, 利用光子后向散射(Photon Back Scattering, PBS)对直径为 2in 的 GaAs 膜片进行了表面及内部缺陷的测试, 得到了膜片缺陷分布图样, 取

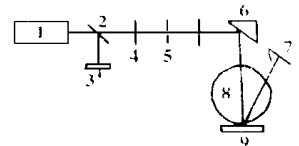


Fig. 7 Schematic diagram of TIS system

- 1- laser 2- spectroscop 3- detector 4- lens 5- spatial filter 6- reflector 7- light trap 8- integrating sphere 9- sample

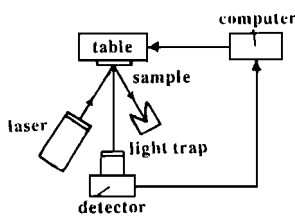


Fig. 8 Schematic diagram of PSB system

得了令人满意的实验数据。Silva 光学后向散射系统原理如图 8 所示^[14]。波长 6328Å、功率 5mW 的 He-Ne 激光束照射在样品上,反射光由光陷阱吸收,散射光被探测器转换接收,送入计算机进行存贮,以备后续处理。

图 9 为 R. M. Silva 对一块作大规模集成电路用的硅片进行的检测。



Fig. 9 The scattered light distribution of a silicon substrate with sub-surface defect

根据图中左上区域中散射光明显高于其余部分的特点,可以断定硅片内部近表层材料处有缺陷,而这种缺陷用 Talystep 轮廓仪及放大倍数为 200 倍的 Nomarski 显微镜是无法探测到的,可见,散射技术在无损探伤,尤其是在晶体缺陷检测中是有优势的。

四、结 束 语

光散射及其测量是近几十年来发展起来的一门新兴技术,随着高技术的发展和推动,已日益受到了各国学者、工业和军事部门的高度重视。目前这一技术的研究重点国外已从实验室的一般原理方法研究发展到工业应用研究,大量的工作已集中在表面的大面积自动快速检测及半导体工业中亚微米线条超大规模集成电路基片微缺陷的检测。相比之下,我国在这方面的工作开展得极少,还根本无法满足工业生产中提出的需要。为此,应对散射理论及其在计量测试中的应用给予高度重视,大力开展这方面的科研工作。

参 考 文 献

- 1 赵凯华, 钟锡华. 光学(下册). 北京: 北京大学出版社, 1984: 251~ 254
- 2 Mie G. Annalen der Physik. 1908; 4(25): 377
- 3 Van de Hulst H C. Light Scattering by Small Particles. New York: Wiley, 1957: 2~ 5
- 4 Kerker M. The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation. New York: Academic, 1969: 1~ 3
- 5 Bohren C F, Huffman D R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. New York: Wiley, 1983: 2~ 6
- 6 Davies H. J. of the institution of electrical engineers, 1954; 101(1): 3~ 4
- 7 Swithenbank J. A laser diagnostic technique for the measurement of droplet and particle size distribution. AIAA Paper, 1976; (76): 69
- 8 玻恩 M, 沃耳夫 E. 光学原理(上册). 上海: 科学出版社, 1981: 843~ 863
- 9 张宏建, 王乃宁. 粉末冶金技术, 1990; 8(4): 234~ 237
- 10 Jacobson R D, Wilson S R. Appl Opt, 1992; 31(10): 1426~ 1435
- 11 Wang H M. Opt & Laser Technol, 1994; 26(5): 333~ 340
- 12 Bennett H E, Porteous J O. J O S A, 1961; 51(2): 123~ 134
- 13 Kienzle O, Staub J, Tschudi T. Measure Science and Technol, 1994; (5): 747~ 752
- 14 Silva R M. SPIE, 1984; 511: 38~ 43

* * *

作者简介: 陈 军, 女, 1970 年 9 月出生。现在清华大学精密仪器与机械学系光电技术及系统实验室攻读博士学位。

收稿日期: 1995-07-05 收到修改稿日期: 1995-09-22