

文章编号: 1001-3806(2006)06-0561-03

硅片表面球形粒子散射及微分散射截面的研究

崔品静^{1,2}, 程兆谷^{1*}

(1. 中国科学院 上海光学精密机械研究所, 上海 201800; 2. 中国科学院 研究生院, 北京 100039)

摘要: 为了研究硅片表面球形粒子的光散射情况, 根据 Mie 理论, 采用相差模型, 得到了球形粒子在任意线偏振光照射下的散射光光强空间分布的计算方法, 给出了球形粒子在 *s* 偏振和 *p* 偏振光分别以 0° 和 70° 角照射下散射光微分散射截面的模拟计算结果, 并与相关的实验结果进行了比较, 对硅片缺陷自动检测仪的研制具有指导意义。

关键词: 散射; 光强空间分布; 米氏理论; 相差模型; 微分散射截面

中图分类号: 0436.2 文献标识码: A

Calculation and analysis of light scattering and differential scattering cross section from a spherical particle on silicon wafer

CUI Pin-jing^{1,2}, CHENG Zhao-gu¹

(1. Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, the Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China; 2. Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract Based on Mie theory, the phase difference model for calculating and analyzing the spatial distribution of scattering intensity from a spherical particle on a smooth surface radiated by a linearly polarized light beam is obtained. The differential scattering cross section is calculated when the *s* and *p* polarized light irradiates the particles at 0° and 70° respectively. The calculation results are compared with experimental results.

Key words scattering; spatial distributing of intensity; Mie theory; phase difference model; differential scattering cross section

引 言

目前, 超大规模集成电路芯片上电路图形的最小线宽已达到 0.1 μm 左右, 甚至在短期内将跨入至数十纳米量级。随着 IC 图形特征尺寸的急剧缩小, 缺陷密度对成品率的影响显得越来越突出, 因此在半导体行业中, 自动检测并控制缺陷是一项非常重要的工作。散射理论作为研制激光自动缺陷检测仪的理论基础, 也越来越受到重视。

YOUNG 等人的理论计算^[1~4]多集中在入射平面范围内, 未就整个上半平面空间的光强分布作细致地计算分析。实际检测中, 为了更具体地反映缺陷的信息, 探测器应在各个不同散射平面 (即不同的 φ) 接收散射光, 同时感光平面具有一定大小, 反映在模拟计算中为对空间角的积分, 这些要求都同样需要计算任意

空间点的散射光强。

作者即针对激光扫描散射硅片检测技术中的硅片表面玷污检测, 根据 Mie 理论, 应用相差模型 (phase difference model PDM)^[5], 给出了模拟硅片表面球形粒子对扫描光散射的空间光强分布的计算方法, 并对计算机模拟结果与实验结果进行了比较和分析。PDM 考虑了散射光振动方向的不同, 按振幅叠加的方式计算散射光强, 而杨氏模型^[5]没有考虑散射光振动方向的不同, 只是简单的散射光光强的叠加。

1 相差模型

NAHM 等人^[5]提到 PDM, 如图 1 所示, 该模型假设粒子离开表面一段距离, 入射光照射到球形粒子的表面, 产生两部分散射光为 E_1 和 E_2 , 直接进入接收器, 由于 E_1, E_2 振动方向并不相同, 因此需要按振幅叠加的方式处理。同时考虑到 Fresnel 反射计算的方便, 故分为 *s* 偏振和 *p* 偏振叠加。则:

$$\begin{cases} E_s = E_{1s} + E_{2s} \\ E_p = E_{1p} + E_{2p} \end{cases} \quad (1)$$

总的散射光强为:

$$I = |E_s|^2 + |E_p|^2 \quad (2)$$

基金项目: 上海市光科技专项行动计划“硅片缺陷自动检测仪研制”资助项目 (036105026)

作者简介: 崔品静 (1980-), 女, 硕士研究生, 主要从事硅片缺陷自动检测仪的研究。

* 通讯联系人。E-mail: zgcheng@163.com

收稿日期: 2005-10-12 收到修改稿日期: 2005-12-12

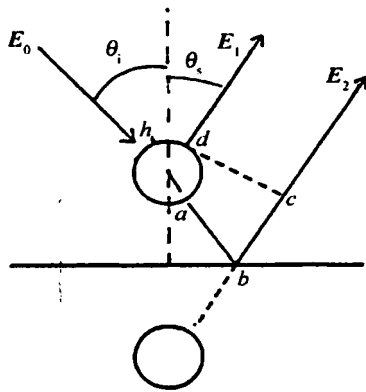


Fig 1 Phase difference model

2 理论基础

假定表面污染物为各向同性、均匀的球形粒子，平面线偏振单色光沿 Z 轴方向入射，电场分量平行于 X 轴，在 P 点收集散射光，如图 2 所示，称 O-X-Z 为入射

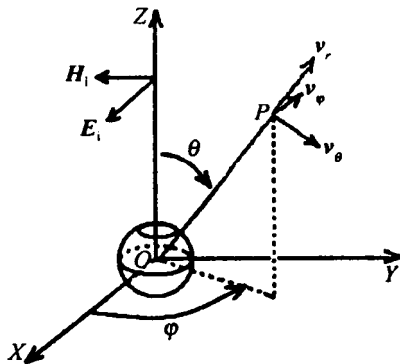


Fig 2 Mie theory

平面，O-P-Z 为散射平面。根据 Mie 理论^[8]的严格推导有：

$$\begin{cases} I_\varphi = \frac{\lambda^2 I_0}{4\pi^2 r^2} |s_1(\theta)|^2 \sin^2 \varphi \\ I_\theta = \frac{\lambda^2 I_0}{4\pi^2 r^2} |s_2(\theta)|^2 \cos^2 \varphi \end{cases} \quad (3)$$

式中， I_0 为入射光强， λ 为入射光波长， $r = OP$ ， s_1 和 s_2 为米氏函数， I_θ 和 I_φ 是总的散射光强在 θ 和 φ 两个方向上的分量，其详细计算方法可参见文献 [7] ~ 文献 [9] 等。

3 相差模型的计算

如图 3 所示，以散射球球心 O 为坐标原点建立坐标。 $(O; X_0, Y_0, Z_0)$ 为散射光收集坐标系，模拟结果在该坐标系中表示： OZ_0 为硅片表面法线方向， OX_0 为入射光的投影； $(O; X_2, Y_2, Z_2)$ 为 Mie 坐标系，该坐标系符合 Mie 计算的坐标系要求： I_0 为平面单色线偏振光，入射方向为 OZ_2 ，偏振方向为 OX_2 ， OZ_2 与 OZ_0 的夹角为入射角 θ_i ； OX_2 与 $-OY_0$ 所成的夹角为偏振角 θ_p 。

探测器位于直角坐标系 $(O; x_m, y_m, z_m)$ 中的任意

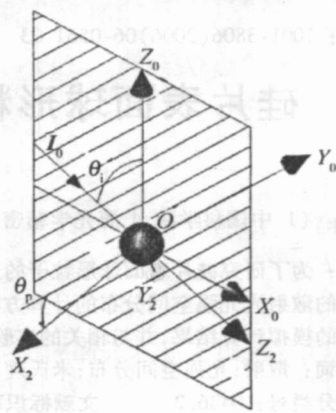


Fig 3 Calculation of DM

一点 P，以 OP 为 R_m 方向，见图 2 即可定义相应的球极坐标系 $(O; R_m, \Theta_m, \Phi_m)$ ($m = 0, 1, 2$)。

仿照 MATLAB 中任意坐标点在直角坐标系、球极坐标系间的转换函数，定义函数 cart2sph 和 sph2cart 如下：

$$(r_m, \theta_m, \varphi_m) = \text{cart2sph}(x_m, y_m, z_m) \quad (4)$$

$$(x_m, y_m, z_m) = \text{sph2cart}(r_m, \theta_m, \varphi_m) \quad (5)$$

设直角坐标系基之间的变换矩阵为 $M_{c_m c_n}$ ：

$$(\hat{x}_n, \hat{y}_n, \hat{z}_n) = (\hat{x}_m, \hat{y}_m, \hat{z}_m) M_{c_m c_n} \quad (6)$$

式中，c 代表直角坐标系； $m, n = 0, 1, 2$

$M_{c_m c_n}$ 可用 3 个欧拉角来定义，则：

$$M_{c_0 c_2} = \begin{bmatrix} -\cos\theta_i \sin\theta_p & -\cos\theta_i \cos\theta_p & \sin\theta_i \\ -\cos\theta_p & \sin\theta_p & 0 \\ -\sin\theta_i \sin\theta_p & -\sin\theta_i \cos\theta_p & -\cos\theta_i \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$M_{c_2 c_0} = M_{c_0 c_2}^{-1} \quad (8)$$

任一矢量 A 从笛卡尔坐标系变换到球极坐标系可按以下规则，令：

$$(\hat{r}_m, \theta_m, \varphi_m) = (\hat{x}_m, \hat{y}_m, \hat{z}_m) M_{c_m c_m} \quad (9)$$

$$(\hat{x}_m, \hat{y}_m, \hat{z}_m) = (\hat{r}_m, \theta_m, \varphi_m) M_{c_m c_m} \quad (10)$$

则：

$$M_{c_m c_qm} = \begin{bmatrix} \sin\theta_m \cos\varphi_m & \cos\theta_m \cos\varphi_m & -\sin\varphi_m \\ \sin\theta_m \sin\varphi_m & \cos\theta_m \sin\varphi_m & \cos\varphi_m \\ \cos\theta_m & -\sin\theta_m & 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$M_{c_m c_qm} = M_{c_m c_qm}^{-1} \quad (12)$$

式中，c 代表直角坐标系，q 代表球极坐标系； $m, n = 0, 1, 2$

有了以上坐标变换和 Mie 理论做基础，现在可以讨论上半平面空间任意一点 P (r_0, θ_0, φ_0) 处的光强了。首先可求得点 P 在球极坐标系 $(O; R_2, \Theta_2, \Phi_2)$ 中的坐标为：

$$(r_0, \theta_2, \varphi_2) = \text{cart2sph}[\text{sph2cart}(r_0, \theta_0, \varphi_0) \times M_{c_0 c_2}] \quad (13)$$

根据 Mie 理论，在坐标系 $(O; R_2, \Theta_2, \Phi_2)$ 中，散射光强

可表示为:

$$\begin{cases} I_{1\varphi_2} = |E_{1\varphi_2}|^2 = \frac{\lambda^2 I_0}{4\pi^2 r_2^2} |s_1(\theta_2)|^2 \sin^2 \varphi_2 \\ I_{10_2} = |E_{10_2}|^2 = \frac{\lambda^2 I_0}{4\pi^2 r_2^2} |s_2(\theta_2)|^2 \cos^2 \varphi_2 \end{cases} \quad (14)$$

将 (8) 式, (11) 式, (12) 式代入可得:

$$(E_{1r_0}, E_{10_0}, E_{1\varphi_0}) = (E_{1r_2}, E_{10_2}, E_{1\varphi_2}) \mathbf{M}_{q_2 c_2} \mathbf{M}_{c_2 \varphi_0} \mathbf{M}_{\varphi_0} \quad (15)$$

如图 1 所示, E_2 是经过了硅片表面的反射进入接收器的光线, 与直接进入接收器的光线 E_1 之间存在因光程差 abc 所引起的相差, D 为球形粒子的直径:

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} D \cos \theta \quad (16)$$

E_2 考虑硅片表面的折射率和光程差 abc 导致的位相差后可得:

$$(E_{2r_0}, E_{20_0}, E_{2\varphi_0}) = (E_{2r_0}, E_{20_0}, E_{2\varphi_0}) \exp(-i\delta), (E_{2\varphi_0}, E_{20_0}, E_{2r_0}) \exp(-i\delta) \quad (17)$$

式中, $\varphi_0' = \varphi_0, \theta_0' = \pi - \theta_0, \delta$ 可由 (16) 式计算得出。

r_s 和 r_p 分别为 s, p 偏振的振幅反射率, 当入射角为 θ_0 时:

$$\begin{cases} r_s(\theta_0) = \frac{\cos \theta_0 - [(n/n_0)^2 - \sin^2 \theta_0]^{1/2}}{\cos \theta_0 + [(n/n_0)^2 - \sin^2 \theta_0]^{1/2}} \\ r_p(\theta_0) = \frac{(n/n_0)^2 \cos \theta_0 - [(n/n_0)^2 - \sin^2 \theta_0]^{1/2}}{(n/n_0)^2 \cos \theta_0 + [(n/n_0)^2 - \sin^2 \theta_0]^{1/2}} \end{cases} \quad (18)$$

式中, n, n_0 分别为空气和硅片的折射率。则 P 点光强为:

$$I = |E_s|^2 + |E_p|^2 = |E_{1\varphi_0} + E_{2\varphi_0}' r_s \exp(-i\delta)|^2 + |E_{10_0} + E_{20_0}' r_p \exp(-i\delta)|^2 = \left\{ I_{1\varphi_0} + I_{2\varphi_0}' R_s + 2 \sqrt{I_{1\varphi_0} \cdot I_{2\varphi_0}' R_s} \cos \delta \right\} + \left\{ I_{10_0} + I_{20_0}' R_p + 2 \sqrt{I_{10_0} \cdot I_{20_0}' R_p} \cos \delta \right\} = (I_{1\varphi_0} + I_{10_0}) + (I_{2\varphi_0}' R_s + I_{20_0}' R_p) + 2 \cos \delta \left(\sqrt{I_{1\varphi_0} \cdot I_{2\varphi_0}' R_s} + \sqrt{I_{10_0} \cdot I_{20_0}' R_p} \right) \quad (19)$$

式中, R_s, R_p 为镜面的光强反射率, $R_s = |r_s|^2, R_p = |r_p|^2$ 。

4 模拟计算结果及与实验结果的比较

按照习惯, 定义微分散射截面 (differential scattering cross section, DSCS)^[10] 为:

$$dC_s/d\Omega = r^2 I_s / I_i \quad (20)$$

图 4 中给出了“硅片缺陷自动检测仪研制”项目的实验条件下散射光光强的空间分布展开图。其中波长为 $0.532 \mu\text{m}$ 的入射光分别在 s 偏振和 p 偏振的情况下分别以 0° 和 70° 角入射到硅片表面, 硅片表面的折射率为 4.15, 球形粒子的直径为 $0.204 \mu\text{m}$, 折射率为 1.598。从图上可以清楚地看出散射光强随 θ, φ 的变化情况。其中图 4a 和图 4b 或图 4c 和图 4d 比较可以看出, 球形粒子在相同偏振入射光照射下产生的微分散射截面的大小受到入射光角度的影响, 当以 70° 角

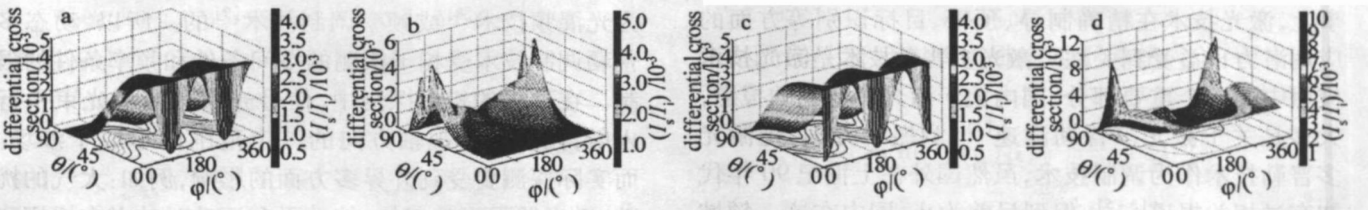


Fig 4 DSCS vs θ, φ at $\lambda = 0.532 \mu\text{m}$, the particle diameter is $0.204 \mu\text{m}$

a— p polarization, incident at 0° b— p polarization, incident at 70° c— s polarization, incident at 0° d— s polarization, incident at 70°

入射时, 微分散射截面远大于入射光以 0° 角入射时的情况; 入射角不同时微分散射截面取得最大值的位置也不相同, 入射角为 70° 时, 微分散射截面的最大值出现在 $\varphi = 0^\circ$ 和 $\theta = 70^\circ$ 附近, 而入射角为 0° 时, 微分散射截面的最大值出现在 $\varphi = 90^\circ$ 或 0° 和 $\theta = 0^\circ$ 附近。通过对比图 4b 和图 4d 可知, 当入射角相同时, s 偏振产生的微分散射截面优于 p 偏振情况。所以通过计算和分析, 就可以正确地选择入射光的角度、偏振态和摆放散射光收集器及探测器的位置。

光垂直入射到硅片表面, 硅片表面的折射率为 3.8, 球形粒子的折射率为 1.59, $\varphi_0 = 0^\circ$ 。通过比较可知, 模拟结果与前人实验结果比较一致。

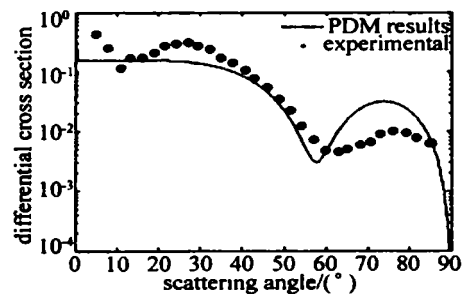


Fig 5 Comparison of the PDM and experimental measurements for light scattering from a $0.54 \mu\text{m}$ diameter polystyrene sphere on silicon

(下转第 580 页)

Table 3 The relationship between second harmonic intensity and phase-matching temperature

$T_{pm}/^{\circ}\text{C}$	95.8	96	96.2	96.4	96.5	96.6	96.8	97	97.2
E_{2w}/mJ	8	11	15	17	20	18	14	10	7

强与晶体温度的关系, 倍频过程中未观测到 Zn Mg:L N b O_3 晶体有光折变引起的光束发散现象。

5 结论

通过对 Zn Mg:L N b O_3 晶体的生长和性能的研究, 得到了合适的配方, 生长出了抗光折变、尺寸达 $140\text{mm} \times 70\text{mm}$ 、双折射率梯度优于 $10^{-4}/\text{cm}$ 量级的 Zn Mg:L N b O_3 晶体, 并利用它进行 $1.064\mu\text{m}$ 激光倍频, 得到了 20mJ 的 $0.532\mu\text{m}$ 的绿光输出, 倍频转换效率达到 45% 。目前, Zn Mg:L N b O_3 晶体已被用作电光开关元件、倍频元件、光波导基片, 因此, Zn Mg:L N b O_3 晶体是一种新的有应用前景的电光和非线性光学材料。

感谢四川大学王琇教授在晶体测试方面的积极帮助和支持。

参考文献

[1] VOLK T R, PRYALKIN V I, RUBIN A N M. Optical-damage-resistant Zn:L N b O_3 crystal [J]. Opt Lett 1990, 15(18): 996~998

[2] VOLK T R, KRASNOKOV V V, PRYALKIN V *et al*. Nonlinear optical properties of zinc-doped lithium niobate crystals [J]. Soviet Journal Quantum Electron 1990, 20(3): 204~205

[3] GRABMAIER B C, OTTO F. Growth and investigation of MgO-doped L N b O_3 [J]. Journal of Crystal Growth 1986, 79(1~3): 682~688

[4] XU G F, ZHANG H R, LI B *et al*. Growth and property of ZnO-doped L N b O_3 crystal [J]. Journal of Synthetic Crystals 2000, 29(5): 58 (in Chinese).

[5] XU G F, GUO Y J, LI B *et al*. Study on growth and property of Zn Mg: L N b O_3 crystals [J]. Journal of Synthetic Crystals 1994, 23(S0): 122 (in Chinese).

[6] YANG X L, XU G F, LI H P *et al*. Optical absorption edge of Mg+Zn: L N b O_3 [J]. Journal of Sichuan University of Science and Technology, 2000, 19(2): 136~140 (in Chinese).

[7] ZHU Zh B, XU Y H, WANG R. Investigation on photorefractive resistance property and mechanism of Zn Mg: L N b O_3 crystal [J]. Journal of Synthetic Crystals 2000, 29(5): 170 (in Chinese).

[8] MA C X, XU Y L. Study of Mg Zn: L N b O_3 crystal of optics function [J]. Natural Sciences Journal of Harbin Normal University 2001, 17(1): 30~33 (in Chinese).

[9] BRYAN D A, GERSON R, TOMASCHKE H E. Increased optical-damage resistance in lithium niobate [J]. A P L, 1984, 44(9): 847~849

[10] XU G F, GUO Y J, CHEN J R *et al*. The property, refractive index and frequency doubling investigation at room-temperature of heavily MgO-doped L N b O_3 crystal [J]. Laser Technology 1992, 16(4): 197~201 (in Chinese).

(上接第 563 页)

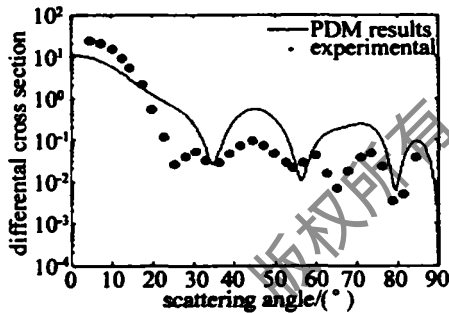


Fig 6 Same as Fig 5 except that the particle diameter is $1.6\mu\text{m}$

5 小结

用 PDM 推导了硅片表面球形粒子在任意线偏振入射光照射下的散射光光强的空间分布, 并给出了实验结果和计算机模拟结果的比较, 模拟计算的结果和实验结果很符合, 这对实际的实验具有一定的指导意义。但是可以看见计算机模拟结果比实验结果偏高, 这主要是因为本文中只考虑了光滑表面球形粒子的光散射情况, 即理想状况, 而实际中硅片表面不可能是光滑的, 会存在由于傅里叶衍射及周围环境对结果的影响, 这些影响因素正在研究中。

参考文献

[1] YOUNG R P. Low-scatter mirror degradation by particle contamination

[J]. Opt Engng 1976, 15(6): 516~520

[2] VIDEEN G, TURNER M G, IAFELICE V J *et al*. Scattering from a small sphere near a surface [J]. J O S A, 1993, 10(1): 118~126

[3] EREM N Y, ORLOV N. Simulation of light scattering from a particle upon a wafer surface [J]. Appl Opt 1996, 35(33): 6599~6603

[4] GERMER T A. Angular dependence and polarization of out-of-plane optical scattering from particulate contamination, subsurface defects and surface microroughness [J]. Appl Opt 1997, 36(33): 8798~8805

[5] NAHM K B, WOLFE W L. Light-scattering models for spheres on a conducting plane: comparison with experiment [J]. Appl Opt 1987, 26(15): 2995~2999

[6] BORN M, WOLFE E. Principles of optics [M]. 7th ed, Cambridge Cambridge University Press 1999, 759~789

[7] WISCOMBE W J. Improved Mie scattering algorithms [J]. Appl Opt 1980, 19(9): 1505~1509

[8] YANG Y, ZHANG Zh X, JIANG D Z. Numerical calculation of Mie scattering [J]. Journal of Applied Optics 1997, 18(4): 17~19 (in Chinese).

[9] ZHENG G, CAI X Sh, WANG N N. Numerical calculation of Mie scattering [J]. Applied Laser 1992, 12(5): 220~222 (in Chinese).

[10] SCHMEHL R, NEBEKER B M, HRLEMAN E D. Discrete-dipole approximation for scattering by features on surfaces by means of a two-dimensional fast Fourier transform technique [J]. J O S A, 1997, 14(11): 3026~3036

[11] JOHNSON R. Calculation of light scattering from a spherical particle on a surface by the multipole expansion method [J]. J O S A, 1996, 13(2): 326~337