

基片表面微球体纳米级缺陷的光散射分析

巩 蕾 吴振森

(西安电子科技大学理学院, 陕西 西安 710071)

摘要 为了进一步诊断反演出基片及光学元件中杂质缺陷的形态和尺寸,应用 Bobbert-Vileger(BV)理论建立两种缺陷粒子的复合光散射模型,通过对场进行矢量球谐函数展开,对基片上缺陷粒子的光散射问题展开讨论,对散射场及微分散射截面进行推导求解。同时将数值计算结果退化为球形粒子与采用扩展 Mie 理论方法所得结果做了比较,二者吻合较好。通过数值计算考察了不同材质下,形变对微分散射截面的影响。结果表明,金属缺陷的散射更易受形变的影响,而介质缺陷受形变的影响很小。当球缺靠近基底的情况下,微分散射截面受散射角的影响较大;球缺背离基底时,几乎和球形粒子散射曲线重合,因此通过对微分散射截面的计算可以定位反演出球缺的位置和材质。

关键词 光散射;微球体缺陷;BV 理论;微分散射截面

中图分类号 TN256; O436.2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201138.0110001

Analysis of Light Scattering about Slightly Non-Spherical Nanoparticles on Wafers

Gong Lei Wu Zhensen

(College of Sciences, Xidian University, Xi'an, Shaanxi 710071, China)

Abstract In order to accurately identify the size and material of contaminants about the wafers and optical elements, the scattering model about two kinds of slightly non-spherical particles on wafer is established by the Bobbert and Vileger (BV) theorem. The scattering process is analyzed and the scattering coefficients are derived through expansion vector spherical harmonic function. The figure about the differential scattering cross section (DSCS) of a non-spherical particle is calculated, which is compared with that from extended Mie. The results are coincidence, which proves the validity of the method. The effect of different material non-spherical particle deformations is reviewed by the calculation. The result shows that the effect of the dielectric is smaller than that of the metal. Therefore, the material of the defect and the shape can be extracted by calculating the DSCS.

Key words light scattering; slightly non-spherical defect; Bobbert and Vileger theorem; differential scattering cross section

OCIS codes 290.5850; 290.5880

1 引 言

在超大规模集成电路飞速发展的今天,电路芯片的图形已经达到纳米级,因此对基片及光学元件要求越来越高,成品率及缺陷密度的影响越显突出^[1]。激光散射扫描法是一种非接触测量的高效易行的检测光学元件的方法,因此经常被用在半导体工艺中来检测元件缺陷^[2~5],其中最大的挑战是提

取缺陷的材质和形态。

散射理论作为研制各激光缺陷检测系统的理论基础,也备受关注。D. Torricin 等^[6]通过分别研究透明基底上下表面的散射特性,给出了透明基底上下两个表面的表面粗糙度谱函数并提出了透明基底中的辐射散射和嵌入散射之间的关系。T. Lindström 等^[7]利用总积分散射中的反射散射和透

收稿日期: 2010-03-18; **收到修改稿日期**: 2010-06-10

基金项目: 国家自然科学基金(60771038)资助课题。

作者简介: 巩 蕾(1981—),女,博士研究生,主要从事基片及杂质间的复合极化光散射方面的研究。

E-mail: zzgonglei@126.com

导师简介: 吴振森(1946—),男,教授,博士生导师,主要从事光散射等方面的研究。E-mail: wuzhs@mail.xidian.edu.cn

射散射相结合的方法,研究了薄硅基片在红外区域的散射特性,给出了两个表面的均方根粗糙度的表达式。J. H. Kim 等^[4,5,8,9]对基片的各种缺陷情况下各种极化散射做了大量的实验研究。在国内,潘永强等^[10]利用光学薄膜的散射理论和模型研究了光学薄膜截面的互相关特性及光散射特性。邵理堂等^[11]从数值模拟和实验研究了颗粒物 Mie 散射对差分吸收光谱法的影响。

本文应用 Bobbert-Vileger (BV) 理论^[12]建立了两种形态缺陷粒子的复合光散射模型,对基片上的缺陷粒子的光散射问题展开讨论,并通过计算机模拟计算,考察了不同材质下形变对微分散射截面

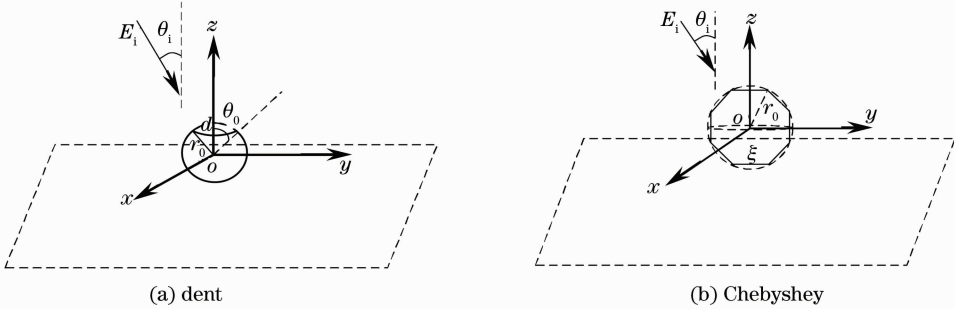


图 1 基片上方的微球形粒子形态示意图

Fig. 1 Schematic of the shapes about slightly non-spherical nanoparticles above wafer

第一类微球体粒子 (dent 球缺粒子), 用 $\tilde{r}(\theta, \phi)$ 表示粒子形态半径, 极角 θ 是粒子上任意一点与 z 轴正方向的夹角。 r_0 为粒子的全半径即没有球缺处的球形粒子半径, d 为球缺 (dent) 深度, 考虑到此球体为轴对称粒子, 因此可以简化^[15]为

$$\tilde{r}(\theta, \phi) = r(\theta) = \begin{cases} r_0 & (\theta \geq \theta_0) \\ (r_0 - d) / \cos \theta & (\theta < \theta_0) \end{cases} \quad (1)$$

式中 $\theta_0 = \arccos[(r_0 - d) / r_0]$ 。 第二类微球体粒子 (Chebyshey 粒子), 用 Chebyshey 多项式表示粒子形态, 即

$$\tilde{r}'(\theta) = r_0 [1 + \xi \cos(m\theta)], \quad (2)$$

式中 r_0, ξ, m 均为表征粒子形态的参数。 r_0 为外接球半径, ξ 为向量边长, m 为边长数。

2.2 BV 理论

如图 2 所示, 用 \mathbf{E}_{inc} 表示整个系统的入射场 (包括基片 \mathbf{E}_{i2} 和粒子 \mathbf{E}_{i1}), \mathbf{E}^{IR} 表示被基底表面反射的部分。 \mathbf{E}_s 表示粒子内部感应电流而产生的场。 对于粒子有效尺寸需与入射波波长在同一数量级, 场存在 3 部分之和^[12]:

- 1) 入射场 \mathbf{E}_{inc} ;
- 2) 被基底表面反射的反射场 \mathbf{E}^{IR} ;
- 3) 由于粒子本身内部感应电流而产生的相互作用

(DSCS) 的影响。 为基片质量检测实验提供了理论依据。

2 微球体缺陷的形态及散射场建模分析

2.1 微球体缺陷形态

尽管平面上的柱体和椭球体的散射特性研究已经相对成熟^[13,14], 但由于它们的散射特性与同体积球大相径庭, 且不符合实际半导体工艺的情况, 因此这里选择两种类球体 (如图 1 所示) 作为考察对象, 通过跟同体积球体粒子的比较, 反演出缺陷粒子的形态和材质。

场 \mathbf{E}_{s1} 和 \mathbf{E}_{SR} , 其中 \mathbf{E}_{SR} 经过基片反射产生 \mathbf{E}_{s2} 。

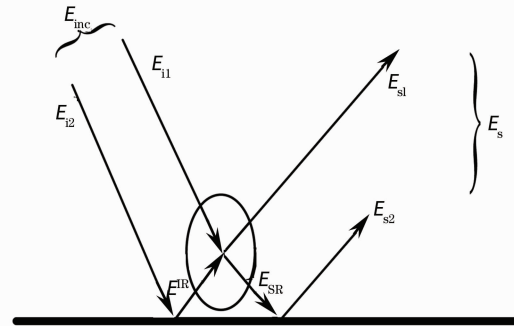


图 2 基片上方的粒子散射示意图

Fig. 2 Schematic of scattering about the particle above wafer

根据 \mathbf{T} 矩阵理论引入矩阵 \mathbf{A} , 即引入一散射传输矩阵, 其计算结果只与粒子的大小、形状、介电常数及空间取向有关, 而与入射场及散射场无关。 因此, 只要粒子给定, 无论入射场及散射场如何变化, 粒子的散射传输矩阵只需被计算一次。 根据经典 Mie 理论, 引入矩阵 \mathbf{B} 。 其中 \mathbf{A} 反映的是基片的物理特性, \mathbf{B} 反映的是粒子的物理特性,

$$\mathbf{E}_{SR} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{E}_s, \quad (3)$$

$$\mathbf{E}_s = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{IR}} + \mathbf{E}_{SR}), \quad (4)$$

将 (3) 和 (4) 式结合, 可以解得

$$\mathbf{E}_s = (1 - \mathbf{B} \cdot \mathbf{A})^{-1} \cdot \mathbf{B} \cdot (\mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{IR}}), \quad (5) \quad \text{和 } N_{nm}^1(k_0 r) \text{ 对入射场进行展开为}$$

2.3 散射场及微分散射截面求解

设入射波是平面波,用球矢量波函数 $M_{nm}^1(k_0 r)$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{inc}} = \mathbf{E}_{i1} + \mathbf{E}_{i2} &= \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{m=-n_1}^{n_1} [a_{nm_1} M_{nm_1}^1(k_0 r) + b_{nm_1} N_{nm_1}^1(k_0 r)] = \\ &= \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{m=-n_1}^{n_1} [(a_{nm_1}^0 + a_{nm_1}^R) M_{nm_1}^1(k_0 r) + (b_{nm_1}^0 + b_{nm_1}^R) N_{nm_1}^1(k_0 r)], \end{aligned} \quad (6)$$

式中 $a_{nm_1}^0$ 和 $b_{nm_1}^0$ 表示直接入射场 \mathbf{E}_{inc} 系数。 $a_{nm_1}^R$ 和 $b_{nm_1}^R$ 表示被表面反射的入射场 \mathbf{E}^{IR} 的系数。假定,平面波在 y - z 平面内传播,且与 z 轴夹角为 θ_i ,由文献[16]得

$$\begin{cases} a_{nm}^0 = -4j^n [jm\pi_n^m(\theta_i)E_{//} + \tau_n^m(\theta_i)E_{\perp}] \\ b_{nm}^0 = -4j^{n+1} [\tau_n^m(\theta_i)E_{//} - jm\pi_n^m(\theta_i)E_{\perp}] \end{cases}, \quad (7)$$

式中 $E_{//}$ 表示平行入射面的入射场分量, E_{\perp} 表示垂直入射面的入射场分量, $\pi_n^m(\theta) = P_{n_1}^m(\cos \theta) / \sin \theta$, $\tau_n^m(\theta) = dP_{n_1}^m(\cos \theta) / d\theta$. $P_{n_1}^m(\cos \theta)$ 为连带勒让德多项式。入射波经过菲涅耳反射后,将引起大小为 $\exp(2jkz_0 \cos \theta_i)$ 的相位变化,其中 z_0 为相位变化的纵坐标。则 $a_{nm_1}^R$ 和 $b_{nm_1}^R$ 分别表示为

$$\begin{cases} a_{nm}^R = -4j^n [jm\pi_n^m(\pi - \theta_i)r_{//}(\theta_i)E_{//} + \tau_n^m(\pi - \theta_i)r_{\perp}(\theta_i)E_{\perp}] \exp(2jkz_0 \cos \theta_i) \\ b_{nm}^R = -4j^{n+1} [\tau_n^m(\pi - \theta_i)r_{//}(\theta_i)E_{//} - jm\pi_n^m(\pi - \theta_i)r_{\perp}(\theta_i)E_{\perp}] \exp(2jkz_0 \cos \theta_i) \end{cases}, \quad (8)$$

式中 $r_{//}(\theta_i)$ 和 $r_{\perp}(\theta_i)$ 分别表示平行和垂直极化的菲涅耳反射系数。

将散射场 $E_s(r)$ 展开为第三类球矢量波函数 $M_{nm}^3(k_0 r)$ 和 $N_{nm}^3(k_0 r)$ 的线性组合

$$E_s(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [e_{nm} M_{nm}^3(k_0 r) + f_{nm} N_{nm}^3(k_0 r)], \quad (9)$$

式中

$$\begin{aligned} e_{nm} &= \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} [T_{nmn'm'}^{11} a_{m'n'} + T_{nmn'm'}^{12} b_{m'n'}], \\ f_{nm} &= \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} [T_{nmn'm'}^{21} a_{m'n'} + T_{nmn'm'}^{22} b_{m'n'}], \end{aligned}$$

4 个矩阵元素见文献[17]。

由振幅散射矩阵

$$\begin{bmatrix} E_p^{\text{sca}} \\ E_s^{\text{sca}} \end{bmatrix} = \frac{\exp(jkr)}{-jkr} \begin{bmatrix} S_{pp} & S_{sp} \\ S_{ps} & S_{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_p^{\text{inc}} \\ E_s^{\text{inc}} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

通过对入射场(6)式和散射场(9)式进行矢量波函数展开,并对比系数可得散射强度矩阵元素表达式为

$$\begin{aligned} S_{ss} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (-j)^n \exp(jm\phi) \times [1 + r_{//}(\pi - \theta_i) (-1)^{n+m} \exp(-2jkd \cos \theta_i)] \times \\ & \quad \left[\frac{f_{nm}^//m}{\sin \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) + e_{nm}^// \frac{\partial}{\partial \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) \right], \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} S_{pp} &= -j \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (-j)^n \exp(jm\phi) \times [1 + r_{\perp}(\pi - \theta_i) (-1)^{n+m} \exp(-2jkd \cos \theta_i)] \times \\ & \quad \left[\frac{e_{nm}^{\perp}m}{\sin \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) + f_{nm}^// \frac{\partial}{\partial \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) \right], \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} S_{sp} &= -j \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (-j)^n \exp(jm\phi) \times [1 + r_{\perp}(\pi - \theta_i) (-1)^{n+m} \exp(-2jkd \cos \theta_i)] \times \\ & \quad \left[\frac{e_{nm}^//m}{\sin \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) + f_{nm}^// \frac{\partial}{\partial \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) \right], \end{aligned} \quad (13)$$

$$S_{ps} = -j \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (-j)^n \exp(jm\phi) \times [1 + r_{//}(\pi - \theta_i)(-1)^{n+m} \exp(-2jkd \cos \theta_i)] \times \left[\frac{f_{nm}^{\perp} m}{\sin \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) + e_{nm}^{\perp} \frac{\partial}{\partial \theta_i} P_n^m(\cos \theta_i) \right], \quad (14)$$

微分散射截面的表达式为

$$\sigma_d = |F|^2 = \frac{1}{k^2} (|S_{ss}|^2 + |S_{pp}|^2 + |S_{sp}|^2 + |S_{ps}|^2). \quad (15)$$

在本文计算中,主要考察了水平极化,并且计算了归一化微分散射截面。归一化微分散射截面表示单位面积上光的散射能力,通过考察微分散射截面,反映光的散射特性,从而反馈出缺陷粒子的形状,结构,尺寸和性质。即

$$\sigma_{pp} = |F|^2 = \frac{1}{k^2} |S_{pp}|^2, \quad (16)$$

$$\frac{\sigma_{pp}}{\pi a^2} = \frac{|kF|^2}{\pi(ka)^2}. \quad (17)$$

3 数值计算和结果分析

在基片制造中,常因加工精度不足,空气的氧化等原因导致杂质粒子的存在。图 3~6 的计算参数为入射波为 p 极化平面波,入射波长 $\lambda=488 \text{ nm}$,入射角为 75° ,Si 基底,SiO 粒子,聚苯乙烯(PSL)粒子和 Fe 粒子的介电常数分别为 $n_{\text{Si}}=4.37+0.08i$, $n_{\text{SiO}}=1.67$, $n_{\text{psl}}=1.615$, $n_{\text{Fe}}=1.35+1.97i$ 。由于现阶段可以检测到的基片上的缺陷粒子直径一般为百纳米级,因此在计算机模拟仿真时,主要是针对百纳米级的粒子在倾斜入射激光照射下的散射。

在基片生产过程中经常因封装等原因产生 PSL 杂质粒子,图 3 给出了退化为半径为 $0.3 \mu\text{m}$ 的 PSL 球形粒子与扩展 Mie 理论比对的结果,即在 Si 基片上微分散射截面随散射角的变化。由图可知,二者吻合较好。

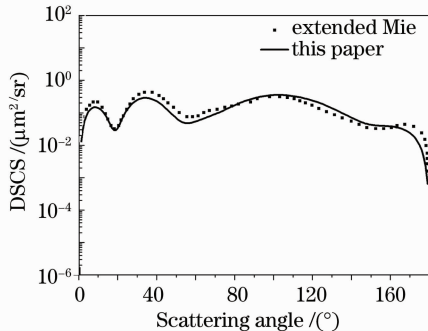


图 3 退化为球形粒子的采用扩展 Mie 理论所得结果对比图
Fig. 3 Results of sphere compared with extended Mie method

图 4 给出了 Fe 和 SiO 两种球缺粒子球缺 d 分别为背离和朝向基底的情况下 $r_0=0.1 \mu\text{m}$, $d=0.01 \mu\text{m}$ 的微分散射截面受散射角的影响。由图 4 得出 Fe 粒子球缺朝向基底的情况下,微分散射截面明显受散射角的影响较大,球缺背离基底时,几乎和球形粒子重合。而 SiO 粒子受球缺位置的影响很小,因此通过对粒子的微分散射截面的计算和测定可以定位反演出球缺的位置和粒子的材质。

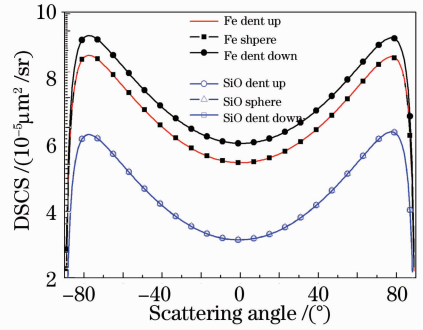


图 4 Fe 和 SiO 球缺粒子在 dent 不同方位处的微分散射截面随散射角的关系

Fig. 4 Relationship between the DSCS and scattering angle of dent particle with different dent positions of Fe and SiO

图 5 给出了 Fe 和 SiO 两种半径为 $0.1 \mu\text{m}$ 的球缺粒子,不同球缺大小并球缺朝向基底(dent down)时,散射角与微分散射截面间的关系。由图可以看出,粒子球缺越大,微分散射截面越小。对于 Fe 和 SiO 两

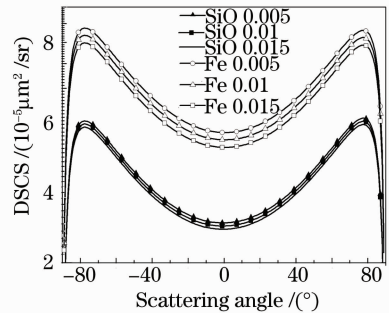


图 5 Fe 和 SiO 球缺粒子不同 dent 大小下散射角与微分散射截面的关系

Fig. 5 Relationship between the DSCS and scattering angle of dent particle with different dent scales Fe and SiO

种材质而言,金属受形变的影响更大,而介质缺陷受形变的影响小很多。相同条件下,介质缺陷的微分散射截面要小于金属材质的缺陷的微分散射截面,是因为介质缺陷会自身吸收一部分光线,而金属材质的吸收能力比介质要小得多。

图 6 给出了 Chebyshey 粒子向量边长 ξ 不同时微分散射截面受散射角的影响。由图可以看出,Fe 粒子的向量边长 ξ 越大,微分散射截面越大。而 SiO 粒子受向量边长的影响不大。同样可得出,金属材质受粒子形变的影响更大,与球缺粒子的结论吻合,因此为实验提供了依据。

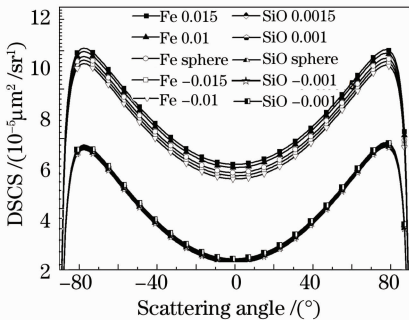


图 6 Fe 和 SiO Chebyshey 粒子不同 ξ 下散射角与微分散射截面的关系

Fig. 6 Relationship between the DSCS and scattering angle of Chebyshey particle with different ξ of Fe and SiO

4 结 论

分析了两种微球体纳米级缺陷粒子的形态,应用 BV 理论建立缺陷粒子的复合光散射模型,通过对场进行矢量球谐函数展开,对基片上的缺陷粒子的光散射问题展开讨论,对散射场及微分散射截面进行推导求解。同时,通过数值计算考察了不同材质下,形变对微分散射截面的影响。可以看出,金属的微分散射截面更容易受形变的影响,而介质材质受形变的影响很小。从而通过对粒子的微分散射截面的计算和测定可以定位并反演出缺陷的位置和材质。球缺 Fe 粒子中球缺靠近基底的情况下,微分散射截面明显受散射角的影响较大,球缺背离基底时,几乎和球形粒子重合,因此通过对微分散射截面的计算可以定位出球缺的位置。同时将数值计算结果退化为球形粒子与采用扩展 Mie 理论方法所得结果做了比较,二者吻合较好。在基片质检和缺陷检测过程中,应用以上模型和结论将对实验有一定的校准意义。

参 考 文 献

- Hou Haihong, Shen Jian, Zhang Dawei *et al.*. Study on surface roughness of substrates under different cleaning techniques by total integrated scatter[J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(6): 1559~1562
- 侯海虹, 沈 健, 张大伟 等. 利用总积分散射仪研究不同清洗技术下的基片表面粗糙度[J]. *中国激光*, 2009, **36**(6): 1559~1562
- Zhang Rongjun, Chen Yiming, Zheng Yuxiang *et al.*. Research and progress of silicon luminescence[J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(2), 269~275
- 张荣君, 陈一鸣, 郑玉祥 等. 硅发光研究与进展[J]. *中国激光*, 2009, **36**(2): 269~275
- Hu Haiyang, Fan Zhengxiu, Liu Ye *et al.*. Effect of impurities on laser induced damage to 1.06 μm optical coatings[J]. *Chinese J. Lasers*, 1999, **A26**(6), 489~492
- 胡海洋, 范正修, 刘晔 等. 杂质对光学薄膜激光损伤阈值的影响[J]. *中国激光*, 1999, **A26**(6): 489~492
- J. H. Kim, S. H. Ehrman, G. W. Mulholland *et al.*. Polarized light scattering by dielectric and metallic spheres on oxidized silicon surfaces[J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(3): 585~591
- J. H. Kim, S. H. Ehrman, T. A. Germer. Influence of particle oxide coating on light scattering by submicron metal particles on silicon wafers[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **84**(8): 1278~1280
- D. Torricin, C. Amra. Light scattering to characterize both faces of transparent substrates: radiative and embedded light [C]. *SPIE*, 1994, **2253**: 1117~1120
- T. Lindström, D. Rönnow. Total integrated scattering from transparent substrates in the infrared region: validity of scalar theory[J]. *Opt. Eng.*, 2000, **39**(2): 478~487
- T. A. Germer. 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
- J. H. Kim, S. H. Ehrman, G. W. Mulholland *et al.*. Polarized light scattering by dielectric and metallic spheres on silicon wafers [J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(25): 5405~5412
- Pan Yongqiang, Wu Zhensen, Hang Lingxia. Optical thin films interfaces roughness cross-correlated properties and light scattering[J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(6): 916~920
- 潘永强, 吴振森, 杭凌侠. 光学薄膜界面粗糙度互相关特性与光散射[J]. *中国激光*, 2008, **35**(6): 916~920
- Shao Litang, Wang Shimin, Tang Guanghua *et al.*. Influence of particle Mie scattering on differential optical absorption spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(3), 594~601
- 邵理堂, 王式民, 汤光华 等. 颗粒物 Mie 散射对差分吸收光谱技术的影响[J]. *光学学报*, 2009, **29**(3): 594~601
- P. A. Bobbert, J. Vileger. Light scattering by a sphere on a substrate[J]. *Physica A*, 1986, **137**(1-2): 209~242
- A. Doicu, Y. Eremin, T. Wriedt. Non-axisymmetric models for light scattering from a particle on or near a plane surface[J]. *Opt. Commun.*, 2000, **182**(4-6): 281~288
- Y. A. Eremin, J. C. Stover, N. V. Grishina. Discrete sources method for light scattering analysis from 3D asymmetrical features on a substrate[J]. *J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2001, **70**(4-6): 421~431
- T. A. Germer. Light scattering by slightly non-spherical particles on surfaces[J]. *Opt. Lett.*, 2002, **27**(13): 1159~1161
- P. W. Barber, S. C. Hill. Light Scattering by Particles: Computational Methods [M]. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 1990. 151~154
- D. Petrov, Y. Shkuratov, G. Videen. Analytical light-scattering solution for Chebyshey particles[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 2007, **24**(4): 1103~1119