

不同涂层对微粗糙基底的极化光散射影响

巩 蕾 吴振森

(西安电子科技大学理学院, 陕西 西安 710071)

摘要 为了研究涂层与基底间的极化光散射,应用一阶矢量衍射理论推导出基底极化双向反射分布函数(PBRDF)。将理论分析结果与实验数据比较并数值模拟分析了在相关和非相关模型下, SiO_2 和 TiO_2 涂层厚度对PBRDF的影响。考察了不同折射率对基底PBRDF的影响。结果表明随着 SiO_2 涂层厚度的增加,相关和非相关模型下的PBRDF逐渐靠近同时逐渐和裸基底重合,即能逐渐复现基底的粗糙度轮廓;随着 TiO_2 涂层厚度的增加,PBRDF逐渐变大,即 TiO_2 涂层对基底有较好的平滑作用。折射率的实部和虚部对PBRDF的影响相反。因此通过对不同涂层PBRDF进行测量和计算可以反演出基底的光学信息。

关键词 光散射;极化;极化双向反射分布函数;一阶矢量衍射理论

中图分类号 TN256; O436.2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.1029001

Different Films Influence on Polarized Light Scattering of Slightly Rough Substrate

Gong Lei Wu Zhensen

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

Abstract In order to investigate the polarized light scattering between films and substrates, first-order vector diffraction theory is applied to derive the polarized bidirectional reflectance distribution function (PBRDF) of substrate. The analysis results are compared with the experimental ones, and the influence of the thickness of SiO_2 and TiO_2 films on the PBRDF is numerically simulated, at interfaces roughness perfectly correlated and completely uncorrelated models, respectively. And the relation between dielectric constant and the PBRDF is discussed. The results show that with the increment of thickness of SiO_2 films the PBRDF is coincident little by little at interfaces roughness perfectly correlated and completely uncorrelated models. And film can perfectly replicate surface profile of substrate at this time. With the increment of thickness of TiO_2 films, the PBRDF becomes larger and larger, which illustrates that TiO_2 film has smoothing effect on the roughness of the substrate. The real part and imaginary part of dielectric constant have opposite influences on the PBRDF. The optical information of the substrate can be measured and calculated by the PBRDF of different films.

Key words scattering; polarization; polarized bidirectional reflectance distribution function; first-order vector diffraction theory

OCIS codes 290.4210; 290.5880; 310.5448; 310.6628

1 引 言

随着超大规模集成电路的高速发展,对基底及涂层薄膜的制备工艺要求越来越高^[1~3]。基底不仅要具有较好的平面度,而且要有极低的表面粗糙度,

光学涂层的表面散射对获取基底微观信息、提高及评价晶片质量等方面具有重要意义。极化光散射理论作为研制晶片检测系统的理论基础,在半导体工业中得到广泛应用,也备受国内外关注。Germer

收稿日期: 2011-03-01; **收到修改稿日期**: 2011-04-26

基金项目: 国家自然科学基金(61172031,60971065)资助课题。

作者简介: 巩蕾(1981—),女,博士研究生,主要从事晶片及杂质间的复合极化光散射等方面的研究。

E-mail: zzgonglei@126.com

导师简介: 吴振森(1946—),男,教授,博士生导师,主要从事目标与环境光电特性、随机介质中的电磁波传播与散射等方面的研究。E-mail: wuzhs@mail.xidian.edu.cn

等^[4,5]通过对极化光散射场的测量,提取和识别基片中缺陷粒子的大小和材质,并对基底中缺陷粒子进行定位。Liu 等^[6]通过对基片中的极化双向反射分布函数(PBRDF)以及角分布测定来反演基片中纳米级缺陷的光学特性。潘永强等^[7]将极化光散射理论应用到实验中,分别对基底及样片的表面粗糙度进行研究。Shen 等^[8]采用 Jones 散射矩阵推导出了光滑表面下方亚表面缺陷的 PBRDF,用 p 极化入射光研究了亚表面缺陷的 PBRDF。马帅等^[9]把双参数柯西分布代替高斯分布引入微面元理论的双向反射分布函数(BRDF)模型中,将极化领域拓宽到红外波段。

本文根据一阶矢量衍射理论,建立了一阶极化光散射模型,导出 PBRDF。建立了硅基底上 SiO₂ 薄膜和 TiO₂ 薄膜的完全相关模型和完全非相关模型,通过与中国科学院安徽光学精密机械研究所的实验数据对比证明其有效性。数值分析了不同厚度膜层 PBRDF 与散射角之间的关系,并将上述结果与光学裸基底情况进行了比较,最后讨论了折射率的实部和虚部变化分别对极化光散射的影响。

2 PBRDF

2.1 坐标定义

PBRDF 不仅可以描述表面的光辐射特性,而且还可描述方向散射和极化特性。对于一定的入射场,照射在确定的形状和介电特性的物体上所产生的反射场信息是确定的,因此可以反演出被照射物体的光学信息。图 1 给出了 PBRDF 的几何关系示意图。波长为 λ 的正交线极化光,以入射角为 θ_i 照射到基底上,其散射角为 θ_r ,方位角为 ϕ_r 。 $\{k, s, p\}$ 为引入的右手坐标系的正交基组,表示极化方向坐标,其中 k_i 和 k_r 分别表示入射方向和散射方向的单位矢量, s 和 p 分别表示垂直和平行入射面或散射面的单

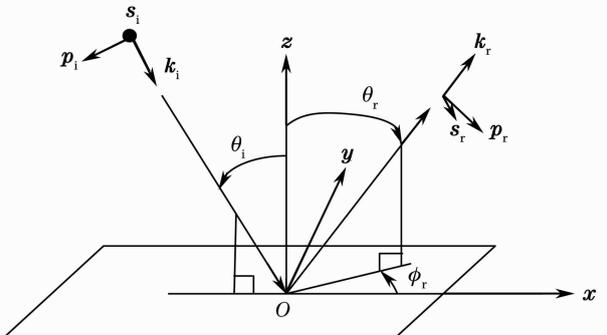


图 1 PBRDF 的几何关系示意图

Fig. 1 Schematic of PBRDF geometry

位矢量。满足以下矢量关系:

$$p_i = k_i \times s_i, p_r = k_r \times s_r.$$

2.2 基片及涂层间 PBRDF 模型

如图 2 所示,基底和涂层折射率分别为 n_{sub} 和 n_r ,涂层平均厚度为 d ,高度起伏函数分别为 h_1 和 h_2 。入射光以入射角为 θ'_i 入射,经涂层折射后入射到基底上的入射角为 θ_i ,经基底反射后的反射角为 θ_r ,经涂层折射后散射角为 θ'_r 。为适用于本文理论,目标表面高度起伏函数 $h_m(x, y)$ 必须小于入射光波长 λ , 此时表面可视为由一系列微小面元组成,因此可将基底分解为一系列微小面元进行处理^[10]。由参考文献[2]可知基底粗糙度比涂层表面粗糙度大一个数量级以上,故为将问题简化,将涂层表面视为光滑表面即 $h_2 = 0$, 并且假设入射光仅与基底散射作用一次。

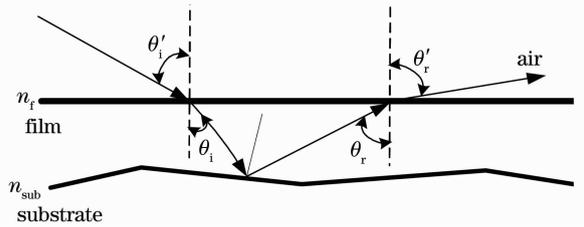


图 2 基底及涂层间分层介质散射示意图

Fig. 2 Schematic of the scattering between substrate and coat film

根据一阶矢量衍射理论,微粗糙表面的双向反射分布函数可以定义为^[5]

$$F_{\text{BRDF}} = \frac{16\pi^2}{\lambda^4} \cos \theta_i \cos \theta_r P |s_{sv} \cdot e|^2, \quad (1)$$

式中 λ 为入射波波长, θ_i 为入射角, θ_r 为散射角, e 为入射电场的单位矢量, s_{sv} 为散射矩阵元, $s_{sv} =$

$$\begin{bmatrix} s_{ss} & s_{ps} \\ s_{sp} & s_{pp} \end{bmatrix}, \text{极化相位函数}^{[11]}$$

$$P(\theta_r) = \frac{(1 - g^2)}{4\pi(1 + 2g \cos \theta_r + g^2)^{3/2}}, \quad (2)$$

表示入射光经过菲涅耳反射后,将引起大小为 P 的相位变化。式中 g 为功率谱密度函数,它是函数 $G_{ij}(\tau) = [h_i(r)h_j(r+\tau)]$ 的汉克尔变换,其中 h_i 表示第 i 个粗糙面的高度起伏函数。 $G_{ij}(\tau)$ 表征两个粗糙面之间的相互关系。考虑两个极端情况,假设基片为高斯分布,如果膜层界面的粗糙度完全复现基底的表面粗糙度,则为完全相关:

$$G_{ij}(\tau) = h^2 \exp(-R^2/l^2),$$

则

$$g = \frac{h^2 l}{2\sqrt{\pi}} \exp(-l^2/4);$$

如果膜层与基底为完全非相关则 $G_{ij}(\tau) = 0$ 。引入散射矩阵：

$$s_{uv} = (4/\pi)(n_{\text{sub}} - n_f) \exp[i(q_{\text{isub}} + q_{\text{rsub}} - q_{\text{rf}} - q_{\text{if}})\tau] q_{\text{rf}} q_{\text{if}} A^{1/2} h_i s_{uv} \quad (u, v = s, p), \quad (3)$$

式中散射矩阵元 s_{uv} 的四种极化形式分别为^[11]

$$\begin{cases} s_{pp} = -n_f q_{\text{if}} q_{\text{rf}} (n_{\text{sub}} k_i k_r - n_f q_{\text{isub}} q_{\text{rsub}} \cos \phi_r) / (\Gamma_{\text{pi}} \Gamma_{\text{pr}}) \\ s_{ps} = n_f k q_{\text{if}} q_{\text{rsub}} \sin \phi_r / (\Gamma_{\text{pi}} \Gamma_{\text{sr}}) \\ s_{sp} = n_f k q_{\text{if}} q_{\text{rf}} q_{\text{rsub}} \sin \phi_r / (\Gamma_{\text{si}} \Gamma_{\text{pr}}) \\ s_{ss} = -k^2 q_{\text{if}} q_{\text{rf}} \cos \phi_r / (\Gamma_{\text{si}} \Gamma_{\text{sr}}) \end{cases}, \quad (4)$$

式中

$$\begin{cases} \Gamma_{\text{p}\beta} = n_{\text{sub}} F_{\text{p}\beta}^{(+)} q_{\beta\text{f}} - F_{\text{p}\beta}^{(-)} q_{\beta\text{sub}} \\ \Gamma_{\text{s}\beta} = F_{\text{s}\beta}^{(+)} q_{\beta\text{f}} - F_{\text{s}\beta}^{(-)} q_{\beta\text{sub}} \end{cases}, \quad (5)$$

以及

$$\begin{cases} F_{\text{p}\beta}^{(\pm)} = n_f K_{\beta}^{(\mp)} q_{\beta\text{sub}} - n_{\text{sub}} K_{\beta}^{(\pm)} q_{\beta\text{f}} \\ F_{\text{s}\beta}^{(\pm)} = K_{\beta}^{(\mp)} q_{\beta\text{sub}} - K_{\beta}^{(\pm)} q_{\beta\text{f}} \end{cases}, \quad (6)$$

式中 $K_{\beta}^{(\pm)} = \exp(2iq_{\beta}\tau) \pm 1$ 是相位变化关系，表示激光到基底后产生的相位延迟； $q_{\beta} = k(n_j - \sin^2 \theta_{\beta})^{1/2}$ 是极化系数，表示相应 β 方向上的极化强度 ($\beta = i, r; j = f, \text{sub}$)，(1) ~ (6) 式中下标 i 和 r 分别代表入射和反射， f 和 sub 分别代表涂层和基底， s 和 p 分别代表 s 偏振和 p 偏振。(5)，(6) 式中的 Γ 和 F 分别表示两种中间变量，没有实际物理意义。(3) 式中 A 为照射面积，考察单位面积照射下的情况。在实际应用中，通过散射矩阵可将标量的 BRDF 推广到极化情况^[12]。将 (2) ~ (6) 式代入 (1) 式，并将 $|s_{uv} \cdot e|^2$ 标量项用 s_{uv} 散射矩阵代替，即得出 PBRDF。

3 数值计算结果及分析

图 3 为某样片不同入射角下标量 PBRDF 值 V_{PBRDF00} 计算结果和实验结果的对比图，其中点处为

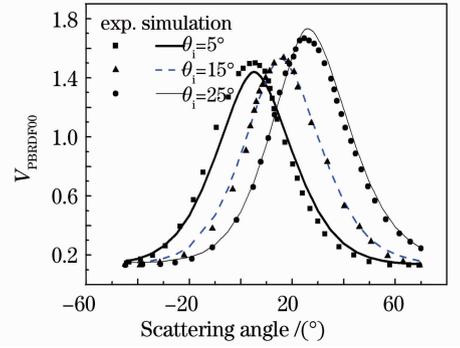


图 3 不同入射角下 V_{PBRDF00} 模拟结果和实验结果的对比
Fig. 3 Comparison of V_{PBRDF00} with different incident angles between the simulated and the experimental results

实验数据，直线处为理论模型计算数据，两者吻合良好。实验数据是由中国科学院安徽光学精密机械研究所提供的，使用其自行研制的 BRDF 测量仪^[13]，测量获取的光源波长为 $1.06 \mu\text{m}$ 。

图 4, 5 入射波为 s 极化平面波，入射波长 $\lambda = 633 \text{ nm}$ ， Si 基底， SiO_2 和 TiO_2 涂层，折射率分别为 $n_{\text{Si}} = 3.88 + 0.02i$ ， $n_{\text{SiO}_2} = 1.457$ ， $n_{\text{TiO}_2} = 2.15$ 。入射角 $\theta_i = 60^\circ$ 。其中相关长度 $l = 5 \mu\text{m}$ ，均方根高度 $h = 0.05 \mu\text{m}$ 。

图 4 给出了 SiO_2 涂层厚度分别为 20, 60 和 100 nm 时完全相关模型和完全非相关模型以及裸基底的总的 PBRDF 随散射角的变化曲线。由图 4 可知，随着 SiO_2 涂层厚度的增加，PBRDF 比裸基底的情况下要小。当 SiO_2 薄膜厚度为 20 nm 时，完全相关模型的 PBRDF 和完全非相关模型下的 PBRDF 相差较大。随着涂层厚度的增加，相关和非相关模型的 PBRDF 逐渐靠近同时逐渐和裸基底重合。从物理意义上讲，随着 SiO_2 涂层厚度的增加，能逐渐复现基底的粗糙度轮廓，这为半导体检测工程提供了一种有效方法。

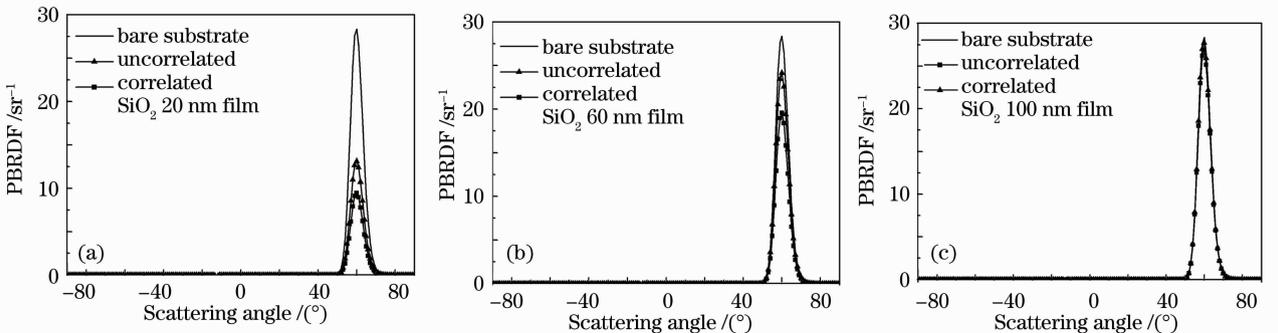


图 4 不同 SiO_2 涂层厚度下 PBRDF 与散射角之间的关系

Fig. 4 Relation between PBRDF and scattering angle with different thicknesses of SiO_2 films

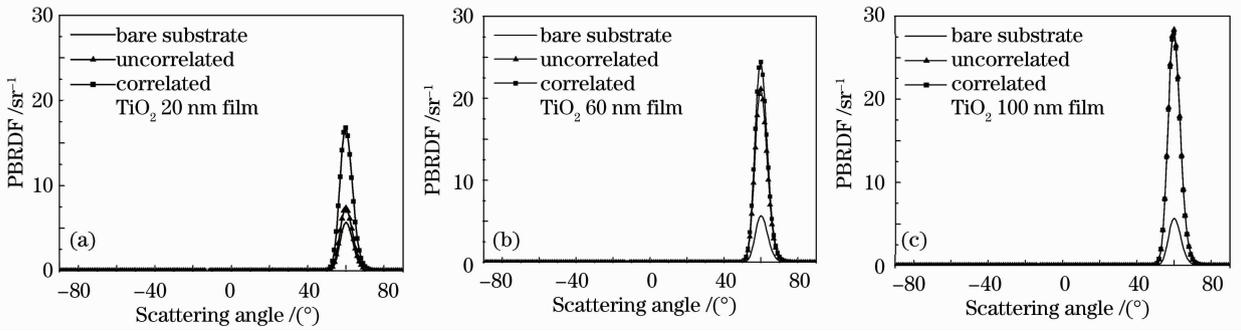
图 5 不同 TiO₂ 薄膜厚度下 PBRDF 与散射角之间的关系Fig. 5 Relation between PBRDF and scattering angle with different thicknesses of TiO₂ films

图 5 是 TiO₂ 薄膜的厚度为 20, 60 和 100 nm 时, 完全相关模型和完全非相关模型以及裸基底的总的 PBRDF 随散射角的变化曲线。由图 5 可知, 随着 TiO₂ 涂层厚度的增加, PBRDF 比裸基底的情况下逐渐变大, 与图 4 情况相反。从物理意义上可知 TiO₂ 涂层对基底有较好的平滑作用, 由于涂层的存在, 增大了镜面反射方向上的反射量。SiO₂ 涂层的存在使得界面粗糙度增加, 减小了镜面反射方向上的反射量, 因此 PBRDF 随 SiO₂ 涂层厚度的增加而渐小。由图 4, 5 可以看出随着薄膜厚度的增加, 其涂层互相关特性逐渐减弱, 完全非相关模型和完全相关模型的 PBRDF 逐渐重合。其结论与参考

文献[7]中实验数据得出的结论一致。

图 6 给出了 s 极化平面波, 入射波长 $\lambda=633$ nm, Si 基底, 入射角 $\theta_i=60^\circ$, 相关长度 $l=5$ μm , 均方根高度 $h=0.05$ μm 情况下涂层厚度为 20 nm 时 PBRDF 随折射率参量的变化曲线。图 6(a) 为折射率实部 n 一定, 虚部 k 逐渐变大情况下 PBRDF 与散射角之间的关系。图 6(b) 为折射率虚部 k 一定, 实部 n 逐渐变大情况下 PBRDF 与散射角之间的关系。由模拟结果可以看出, 当 n 一定时, k 越大, PBRDF 越大。当 k 一定时, n 越大, PBRDF 越小。因此在工程上, 通过对不同涂层 PBRDF 的测量和计算可以反演出基底的信息。

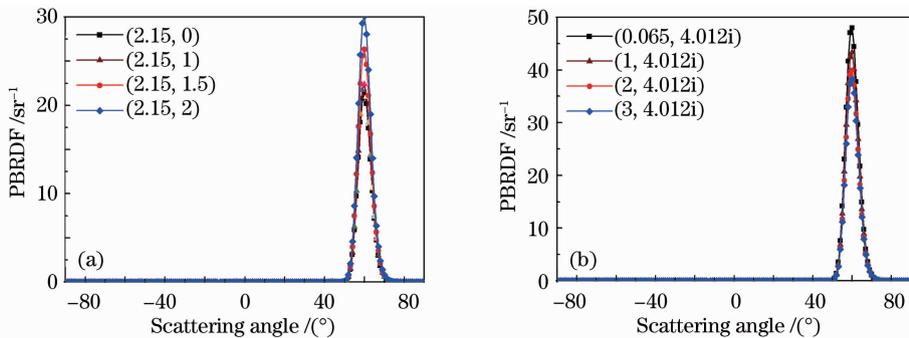


图 6 PBRDF 与折射率参量之间的关系

Fig. 6 Relation between PBRDF and index of refraction

4 结 论

应用一阶矢量衍射理论, 建立基底及涂层间分层介质散射模型, 并推导出基底 PBRDF。数值模拟分析了不同 SiO₂ 涂层和 TiO₂ 涂层厚度下完全相关模型和完全非相关模型及光学裸基底下的 PBRDF 与散射角之间的关系。发现随着 SiO₂ 涂层厚度的增加, 相关与非相关模型下 PBRDF 与裸基底的情况下的 PBRDF 差距逐渐变小; 相关和非相关模型的 PBRDF 逐渐靠近同时逐渐和裸基底结果重合, 因此能逐渐复现出基底的粗糙度轮廓。而随着

TiO₂ 涂层厚度的增加, PBRDF 与裸基底下对应的 PBRDF 差距逐渐增大。因此可知 TiO₂ 涂层对基底有较好的平滑作用, 由于涂层的存在, 增大了镜面反射方向上的反射量。最后分别考察了折射率虚实部的变化对极化光散射的影响, 得知 n 和 k 对 PBRDF 的影响相反。综上所述, 应用涂层厚度和涂层材料对 PBRDF 的不同影响可以反演出基底的光学特性, 为半导体及光学工程领域中对基底的检测和测试提供理论参考。

致谢 特别感谢中国科学院安徽光学精密机械研究所魏庆农等向作者提供所在项目组的实验数据。

参 考 文 献

- 1 Gong Lei, Wu Zhensen. Analysis of light scattering about slightly non-spherical nanoparticles on wafers [J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(1): 0110001
- 巩 蕾, 吴振森. 基片表面微球体纳米级缺陷的光散射分析[J]. *中国激光*, 2011, **38**(1): 0110001
- 2 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. 光学薄膜截面粗糙度互相关特性与光散射[J]. *中国激光*, 2008, **35**(6): 916~920
- 3 Hou Haihong, Shen Jian, Shen Zicai *et al.*. Stratified-interface scattering model for multilayer optical coatings[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(7): 1102~1106
- 侯海虹, 沈 健, 沈自才等. 光学薄膜的分层界面散射模型[J]. *光学学报*, 2006, **26**(7): 1102~1106
- 4 T. A. Germer, G. W. Mulholland, J. H. Kim *et al.*. Measurement of the 100 nm NIST SRM 1963 by laser surface light scattering[C]. *SPIE*, 2002, **4779**: 60~71
- 5 T. A. Germer, C. C. Asmail. Polarization of light scattered by microrough surfaces and subsurface defects[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1999, **16**(6): 1326~1332
- 6 C.-Y. Liu, W.-F. Fu. Polarized angular dependence of out-of-plane light-scattering measurements for nanoparticles on wafer [J]. *Opt. Commun.*, 2009, **282**(11): 2097~2103
- 7 Pan Yongqiang, Hang Lingxia, Wu Zhensen *et al.*. Influence of ion beam post-treatment on surface roughness of TiO₂ thin films [J]. *Chinese J. Lasers*, 2010, **37**(4): 1108~1113
- 潘永强, 杭凌侠, 吴振森等. 离子束后处理对 TiO₂ 薄膜表面粗糙度的影响[J]. *中国激光*, 2010, **37**(4): 1108~1113
- 8 Shen Jian, Deng Degang, Kong Weijin *et al.*. Extended bidirectional reflectance distribution function for polarized light scattering from subsurface defects under a smooth surface[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 2006, **23**(11): 2810~2816
- 9 Ma Shuai, Bai Tingzhu, Cao Fengmei *et al.*. Infrared polarimetric scene simulation based on bidirectional reflectance distribution function model [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(12): 3357~3361
- 马 帅, 白廷柱, 曹峰梅等. 基于双向反射分布函数模型的红外偏振仿真[J]. *光学学报*, 2009, **29**(12): 3357~3361
- 10 T. A. Germer. Polarized light scattering by microroughness and small defects in dielectric layers[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 2001, **18**(6): 1279~1288
- 11 T. A. Germer. Polarized light diffusely scattered under smooth and rough interfaces[C]. *SPIE*, 2003, **5158**: 193~204
- 12 R. G. Priest, T. A. Germer. Polarimetric BRDF in the microfacet model: theory and measurements[C]. Proceedings of the 2000 Meeting of the Military Sensing Symposia Specialty Group on Passive Sensors, 2000, **1**: 169~181
- 13 Feng Weiwei, Wei Qingnong, Wang Shimei *et al.*. Study of polarized bidirectional reflectance distribution function model for painted surfaces[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(2): 290~294
- 冯巍巍, 魏庆农, 汪世美等. 涂层表面偏振双向反射分布函数的模型研究[J]. *光学学报*, 2008, **28**(2): 290~294