

# 基片与不同方位多形态缺陷粒子的 复合光散射特性分析

巩 蕾<sup>1</sup> 吴振森<sup>2</sup> 高 明<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 西安工业大学光电工程学院, 陕西 西安 710032)

(<sup>2</sup> 西安电子科技大学理学院, 陕西 西安 710071)

**摘要** 结合光学表面无损检测工艺实际情况, 给出基片与镶嵌及掩埋的球体/回转椭球体缺陷粒子的散射特性分析。针对基片与缺陷粒子的半空间问题, 结合时域有限差分方法使用广义完全匹配吸收层(GPML), 结合三波技术引入激励源, 给出了相应的连接边界条件, 并将互易性定理应用到近远场外推中, 使过程简化。数值计算给出了镶嵌及掩埋的球体/回转椭球体缺陷粒子的散射场的角分布。结果显示: 镶嵌比掩埋的缺陷粒子受粒子尺寸的影响更明显。在大散射角下, 缺陷粒子的位置因素带来的贡献较大。粒子分别掩埋或镶嵌于基片时, 在 $-10^\circ$ 、 $30^\circ$ 、 $70^\circ$ 附近的球体粒子和回转椭球体粒子的微分散射截面(DSCS)差别较大。在基片无损检测工程中可以通过对特定角度散射场的测量定标诊断出缺陷的方位和形态。

**关键词** 散射; 复合散射; 基片; 时域有限差分方法; 半空间问题; 缺陷

**中图分类号** TN256; O436.2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201232.0629003

## Analysis of Composite Light Scattering Properties Between Wafers and Many Shapes of Particles with Different Positions

Gong Lei<sup>1</sup> Wu Zhensen<sup>2</sup> Gao Ming<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> School of Photoelectric Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an, Shaanxi 710032, China)

(<sup>2</sup> School of Science, Xidian University, Xi'an, Shaanxi 710071, China)

**Abstract** Combing the practical situation of nondestructive examination, the analysis of composite light scattering properties between wafers and many shapes of particles with different positions is shown. Against the half-space problem about wafer and defect particles, the generalized perfectly matched layer (GPML) can work very well. The boundary consistency conditions are given by three waves method. The reciprocity theorem is applied to near-far field extrapolation. The angle distribution of sphere or ellipsoidal defect particles are given. The results show that the influence of inlaid particles on size is more obvious than inside ones. In the large scattering angle, the contribution of the position factor is much more. In the angle of  $-10^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $70^\circ$ , the differential scattering cross section (DSCS) difference about sphere and ellipsoidal particles is more obvious. In the wafer's nondestructive examination project, the defect position and shape are diagnosed by the scattering field of specific angles.

**Key words** scattering; composite light scattering; wafer; finite-difference time-domain; half-space; defect

**OCIS codes** 290.5825; 290.5850; 290.5855

## 1 引 言

缺陷粒子是影响基片功能的主要原因, 对于半导体表面缺陷形态和方位的诊断是提高无损检测能

力的主要因素。基片中缺陷的存在将严重影响基片的光场强分布, 通过理论计算反演出缺陷粒子的方位及形态等性质, 将大大提高检测效率<sup>[1,2]</sup>。因此

收稿日期: 2011-12-28; 收到修改稿日期: 2012-01-17

基金项目: 国家自然科学基金(61172031)资助课题。

作者简介: 巩 蕾(1981—), 女, 博士, 讲师, 主要从事基片及缺陷间的复合偏振光散射及辐射力等方面的研究。

E-mail: zzgonglei@126.com

对基片与不同方位多形态缺陷粒子的复合光散射的研究具有重要意义。

随着超大规模集成电路的迅速发展,基片无损检测工作在国内外学者中已备受关注。Kim 等<sup>[3,4]</sup>利用双向椭偏技术对基片的各种缺陷情况作了大量的实验研究,使用测角光学散射仪(GOSI)和表面扫描检测系统(SSIS)搭建实验室检测基片系统,反演了瑞利近似下的 Si 玻璃材质的基片粗糙度,阐述了激光的偏振特性在检测基片存在各种缺陷情况下的应用。Lindström 等<sup>[5]</sup>利用总积分散射中的反射散射和透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,给出了上下表面的均方根粗糙度的表达式。国内潘永强等<sup>[6]</sup>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;曹楷等<sup>[7]</sup>使用米氏理论建立杨氏模型,讨论了硅片表面上方球形粒子的散射。之前本课题组利用解析 Bobbert-Vileger(BV)理论和一阶微扰理论做了一些基片上方缺陷粒子和涂层的散射研究<sup>[1,2,8]</sup>。以上工作主要把重点放在基片涂层和上方缺陷的无损检测中,均未把重点放在缺陷粒子的形态和方位的特性分析中。

本文结合基片无损检测工艺的实际情况,给出镶嵌和掩埋球体及回转椭球体缺陷粒子散射模型。针对基片及缺陷粒子的半空间问题,使用时域有限

差分(FDTD)方法,其中吸收边界使用了广义完全匹配吸收层(GPML),结合三波技术给出相应的连接边界条件。将互易性定理应用到近远场外推中,使这个关键技术大大简化。数值仿真了基片中不同方位的不同形态缺陷粒子的散射场角分布。

## 2 散射模型及半空间 FDTD 方法关键技术处理

### 2.1 散射模型

在基片制造中,需要经历沉积、研磨和印刷等工序,都可能机械地或人为地引入缺陷或沾污,经检测,缺陷形状繁多,方位各异。本文主要计算了镶嵌及掩埋基片中的球体、椭球体缺陷粒子的不同模型。可以用 $(a/b) < 1$ 的扁平回转椭球体表示圆盘或薄片冗余粒子,用 $(a/b) > 1$ 的扁长回转椭球体表示针状冗余粒子, $(a/b) = 1$ 时表示球体缺陷粒子。

具体的散射模型如图 1 所示。其中图 1(a)是半径为  $r_1$  的镶嵌球体粒子, $h_1$  为镶嵌高度。图 1(b)是长半径为  $a_1$ ,短半径为  $b_1$  的镶嵌回转椭球粒子, $h_2$  为镶嵌高度。图 1(c)是半径为  $r_2$  的掩埋球体粒子, $H_1$  为掩埋深度。图 1(d)是长半径为  $a_2$ ,短半径为  $b_2$  的掩埋回转椭球粒子, $H_2$  为掩埋深度。

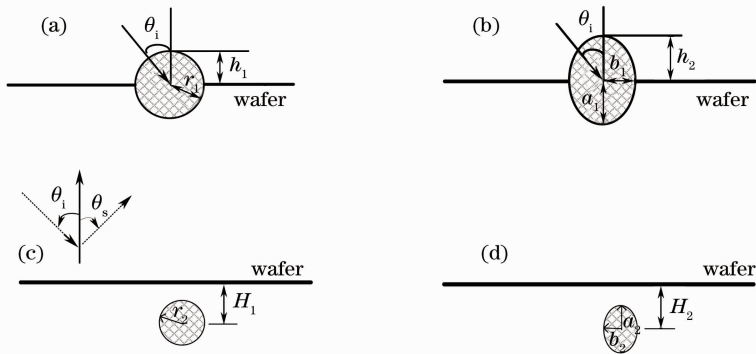


图 1 位于基片中不同位置的多形态缺陷粒子示意图

Fig. 1 Schematic views of defect particles with many shapes in different positions

### 2.2 半空间 FDTD 方法中关键技术处理

#### 2.2.1 三波技术在半空间问题边界条件中的应用

半空间问题是具有半无限上、下空间的两种不同媒质的问题。光学和电磁学的实际应用中有许多种类属于半空间问题。在光学中,对表面有微缺陷的基片及光学元件的分析属于半空间问题的一种,其上、下半空间分别由空气和光学材料所构成。

在半空间问题中,入射波在基片表面产生反射

和透射,上半空间存在入射场和反射场,下半空间存在透射场,即三波技术<sup>[9]</sup>。图 2 给出了入射角及方位角几何示意图。设入射波沿  $\theta_i, \phi$  方向入射,定义入射面所在的坐标面为  $xoz$  面,即假定  $\phi = 0$ 。入射波电场矢量分解为垂直于入射面和平行于入射面分量,分别对应为 s 波和 p 波。

图 3 给出了 s 偏振光半空间问题的散射区域示意图。设入射场强为  $\mathbf{E}_{inc}, \mathbf{H}_{inc}$ ; 反射场强为  $\mathbf{E}_{ref}, \mathbf{H}_{ref}$ , 透射场强为  $\mathbf{E}_t, \mathbf{H}_t$ , 散射场强为  $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$ 。则上

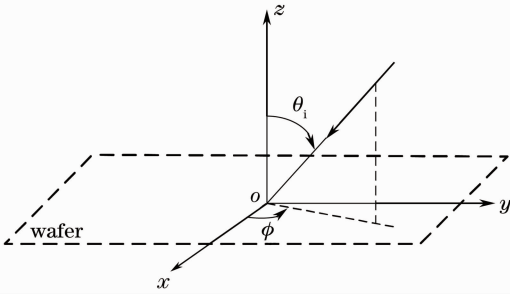


图 2 入射角及方位角几何示意图

Fig. 2 Schematic of incident angle and azimuth angle geometry

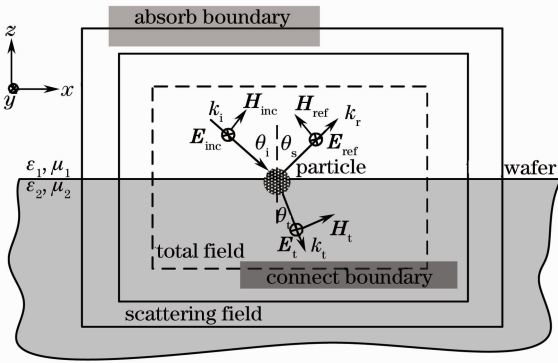


图 3 s 偏振光半空间问题的散射区域及场示意图

Fig. 3 Schematic of half-space scattering zone and field about s polarization light

半空间场强可表示为

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}_{\text{ref}} + \mathbf{E}_s, \quad (1)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{inc}} + \mathbf{H}_{\text{ref}} + \mathbf{H}_s. \quad (2)$$

下半空间场要表示为

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_t + \mathbf{E}_s, \quad (3)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_t + \mathbf{H}_s. \quad (4)$$

考虑时谐场的散射特性, 时谐因子采用  $\exp(-i\omega t)$ , 设入射场为

$$\mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) = [E_{\perp}(\mathbf{r})\hat{s} + E_{\parallel}(\mathbf{r})\hat{p}], \quad (5)$$

式中  $E_{\perp}$  为垂直于入射面分量,  $E_{\parallel}$  为平行于入射面分量, 则

$$E_{\perp}(\mathbf{r}) = E_{\perp} \exp[i(k_{xi}x + k_{zi}z - \omega t)], \quad (6)$$

$$E_{\parallel}(\mathbf{r}) = E_{\parallel} \exp[i(k_{xi}x + k_{zi}z - \omega t)]. \quad (7)$$

以 s 偏振光为例进行分析(如图 3 所示)。将电场和磁场偏振方向在  $x, y, z$  轴上进行分解, 上标 i 表示入射波分量, r 和 t 分别表示反射波和透射波分量。电场分解量为

$$E_y^{(p)}(\mathbf{r}) = E_{\perp} \exp[i(k_{xi}x + k_{zi}z - \omega t)], \quad (8)$$

$$E_y^{(p)}(\mathbf{r}) = R^p E_{\perp} \exp[i(k_{xr}x + k_{zr}z - \omega t)], \quad (9)$$

$$E_y^{(p)}(\mathbf{r}) = T^p E_{\perp} \exp[i(k_{xt}x + k_{zt}z - \omega t)]. \quad (10)$$

磁场分解量为

$$H_x^{(p)}(\mathbf{r}) = \frac{E_{\perp} \cos \theta}{Z_0} \exp[i(k_{xi}x + k_{zi}z - \omega t)], \quad (11)$$

$$H_z^{(p)}(\mathbf{r}) = \frac{E_{\perp} \sin \theta}{Z_0} \exp[i(k_{xi}x + k_{zi}z - \omega t)], \quad (12)$$

$$H_x^{(p)}(\mathbf{r}) = -R^p \frac{E_{\perp} \cos \theta}{Z_0} \exp[i(k_{xr}x + k_{zr}z - \omega t)], \quad (13)$$

$$H_z^{(p)}(\mathbf{r}) = R^p \frac{E_{\perp} \sin \theta}{Z_0} \exp[i(k_{xr}x + k_{zr}z - \omega t)], \quad (14)$$

$$H_x^{(p)}(\mathbf{r}) = -T^p \frac{E_{\perp} \left(\frac{k_{zt}}{k}\right)}{Z_0} \exp[i(k_{xt}x + k_{zt}z - \omega t)], \quad (15)$$

$$H_z^{(p)}(\mathbf{r}) = T^p \frac{E_{\perp} \sin \theta}{Z_0} \exp[i(k_{xt}x + k_{zt}z - \omega t)], \quad (16)$$

式中  $R^p$  和  $T^p$  分别为 p 偏振菲涅耳反射系数和透射系数。其余未列出的分量均为 0。p 偏振光可用同样方法得出。

### 2.2.2 有耗介质层的完全匹配层

由于半空间 FDTD 方法计算区域有限, 为模拟无限大空间, 因此需在计算区域的外层设置完全匹配层(PML)来保证波被完全吸收。传统的 PML 层是建立在自由空间上的, 而本文是针对半空间问题, 因此采用基于分裂场的 GPML 进行边界截断<sup>[10]</sup>。GPML 区内, 分裂场量  $E_{xy}$  和  $H_{xy}$  分别满足方程:

$$\epsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + (\sigma + \sigma_y) E_{xy} + \frac{\sigma \sigma_y}{\epsilon_r} E_{xy(I)} = \frac{\partial H_z}{s_{y0}(y) \partial y}, \quad (17)$$

$$\mu \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} + (\sigma^* + \sigma_y^*) H_{xy} + \frac{\sigma^* \sigma_y^*}{\mu_r} H_{xy(I)} = -\frac{\partial E_z}{s_{y0}(y) \partial y}, \quad (18)$$

式中  $\epsilon, \mu, \sigma, \sigma^*$  为基片电磁参数, 对无磁耗的非磁性媒质, (18) 式可简化为

$$\mu_0 \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{xy} = -\frac{\partial E_z}{s_{y0}(y) \partial y}, \quad (19)$$

式中其他参数定义为

$$\begin{cases} s_{y0}(y) = 1 + s_m \left(\frac{y}{d}\right)^2 \\ \sigma_y(y) = \sigma_m \sin^2\left(\frac{\pi y}{2d}\right) \\ \sigma_y^*(y) = \frac{\mu_0}{\epsilon} \sigma_y(y) \end{cases}, \quad (20)$$

式中  $d$  为 GPML 的厚度, 参数  $s_m$  和  $\sigma_m$  可按下式选择:

$$\frac{\lambda}{(1 + s_m)} > (2 \sim 3) \Delta y, \quad (21)$$

$$\sigma_m = -\frac{\epsilon c / d}{1 + s_m (1/3 + 2/\pi^2)} \ln R_{\text{th}}. \quad (22)$$

$R_{th}$ 为入射波垂直入射 GPML 的理论反射系数,从理论上说, $R_{th}$ 越小越好,但如果该值过小有可能导致每层电导差别过大,进而导致反射系数增加。通常选择  $R_{th} = 10^{-8} \sim 10^{-10}$  为佳<sup>[10]</sup>。

### 2.2.3 半空间 FDTD 方法的近远场变换

计算出近场数据后,为能得到微分散射截面(DSCS),需将近场数据外推到远区场。在半空间问题中,基片的反射、透射及折射过程较为复杂,为避免半空间复杂格林函数的计算,本文利用互易原理进行近远场外推。

由于近远场外推中两点距离无限远,因此在外推过程中对电场做简单变换即<sup>[11]</sup>

$$E_{\theta}(J, \hat{q}, r_a; r_{\infty}) = E_q(J, \hat{\theta}, r_{\infty}; r_a), \quad q = x, y, z \quad (23)$$

由(23)式可知:在  $a$  处  $q$  方向的电流  $J$  在远区  $\infty$  处的辐射电场  $E_{\theta}(J, \hat{q}, r_a; r_{\infty})$  分量等于放置在远区  $\infty$  处  $\theta$  方向的相同电流  $J$  在近区  $r_a$  处的辐射电场  $q$  方向分量  $E_q(J, \hat{\theta}, r_{\infty}; r_a)$ 。

## 3 数值计算和结果分析

图 4 给出了镶嵌球体粒子的 DSCS 随散射角变化图,并且与矩量法(MOM)做了比较。图中计算参数入射波长为  $0.633 \mu\text{m}$ ,入射角  $\theta_i = 0^\circ$  即垂直入射, K9 玻璃基底, Cu 粒子的折射率为  $n_{K9} = 1.52$ ,

$n_{Cu} = 0.25 + 3.41i$ 。  $r_1 = h_1 = 0.4 \mu\text{m}$ 。由图 4 可以看出,利用半空间方法与 MOM 法计算出的结果吻合地很好,说明了半空间方法的有效性。同时给出了 p 偏振和 s 偏振两种情况下镶嵌球体缺陷粒子 DSCS 随散射角变化关系。由图可知,DSCS 计算结果均呈现对称性,这是因为本算例为垂直入射的情况,而且缺陷粒子为对称球体。

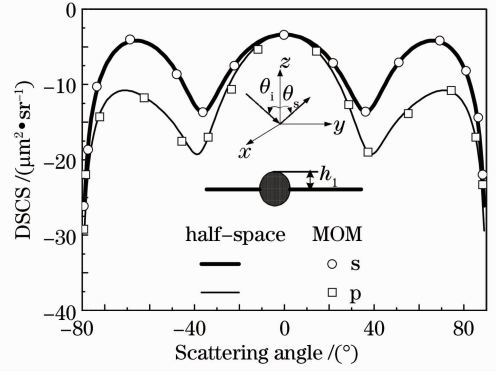


图 4 镶嵌球体粒子 DSCS 随散射角变化图  
Fig. 4 Relation between DSCS and scattering angle of inlaid sphere particle

图 5(a)和(b)分别给出了 p 偏振和 s 偏振镶嵌冗余缺陷 Cu 球体粒子的电场分布,其他参数同图 4。图中粒子电场黑白马赛克图中的横纵坐标单位为步长  $\delta$ ,本算例中选择的步长  $\delta$  为  $\lambda/30$ 。右侧和上侧图分别为粒子在  $x$  方向和  $y$  方向的电场值。

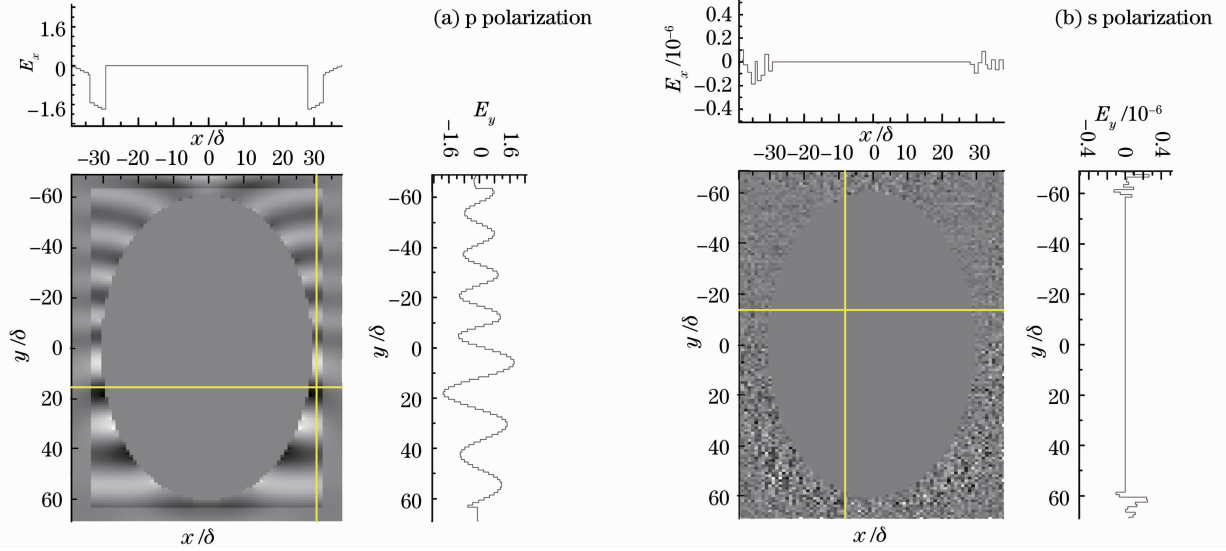


图 5 镶嵌回转椭球体的电场分布  
Fig. 5 Electric field distribution of inlaid ellipsoidal particle

由图 5 可以看出,在 s 偏振下,电场强度很小,分布差值也很小,数量级在  $10^{-7}$ 。不利于通过分析场值分布特点反演缺陷的形态、尺寸等特征信息。

而 p 偏振下的电场分布更清晰,数量级在  $10^{-1}$ ,远大于 s 偏振的情况。因此,在工程上建议使用 p 偏振光对基片进行无损检测。以下重点分析 p 偏振光

的散射场角分布特点。

图 6 给出了基片下方缺陷粒子与镶嵌 Cu 缺陷粒子的 DSCS 比较。其中入射波长  $0.633 \mu\text{m}$ , p 偏振入射光, 入射角  $\theta_i = 45^\circ$ , K9 玻璃基底, 折射率参数与图 4 相同; 基片下方粒子的尺寸参数  $r_2$  分别为  $0.3 \mu\text{m}$  和  $0.5 \mu\text{m}$ , 对应的  $H_1$  分别为  $0.3 \mu\text{m}$  和  $0.5 \mu\text{m}$ 。镶嵌粒子的尺寸参数  $r_1$  分别为  $0.3 \mu\text{m}$  和  $0.5 \mu\text{m}$ ; 对应的  $h_1$  为  $0.3 \mu\text{m}$  和  $0.5 \mu\text{m}$ 。由图 6 可以看出, 粒子尺寸越大, DSCS 越大。在大散射角时, 粒子尺寸对散射场的影响较小。镶嵌的缺陷粒子比掩埋的缺陷粒子受粒子尺寸的影响更明显。点点和对应的点线之间的差距为缺陷粒子因为所在位置不同而带来的贡献。在大散射角下, 差距较大, 即位置不同带来的贡献较大。因此在工程上, 可以通过大散射角区域散射场的测定来判断缺陷粒子所在的位置。

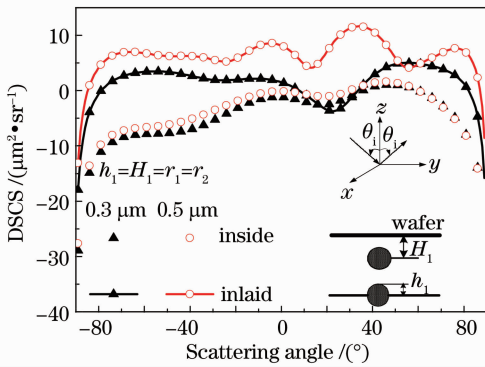


图 6 球体粒子分别掩埋及镶嵌于基片中 DSCS 比较

Fig. 6 DSCS composition between inlaid and inside sphere particles

图 7 给出了球体/回转椭球体 Cu 缺陷粒子分别在基片镶嵌/掩埋下方时 DSCS 比较。其中入射光及折射率参数与图 6 相同, 镶嵌球体粒子的参数为  $r_1 = h_1 = 0.4 \mu\text{m}$ ; 镶嵌回转椭球粒子的参数为  $a_1 = 0.4 \mu\text{m}$ ,  $b_1 = 0.2 \mu\text{m}$ ,  $h_2 = 0.4 \mu\text{m}$ 。基片下方球体粒子的参数为  $r_2 = H_1 = 0.4 \mu\text{m}$ ; 基片下方回转椭球体粒子的参数为  $a_2 = 0.4 \mu\text{m}$ ,  $b_2 = 0.2 \mu\text{m}$ ,  $H_2 = 0.4 \mu\text{m}$ 。由图可以看出点和点线之间的差别是粒子位置的贡献。三角和圆圈之间的差别是粒子形状的贡献。粒子分别位于基片下方和镶嵌时, 在  $-10^\circ$ 、 $30^\circ$ 、 $70^\circ$  附近的球体粒子和回转椭球体粒子的 DSCS 差别较大。因此在无损检测工程上, 可以通过对特定角度散射场的测量诊断出粒子的方位和形态。

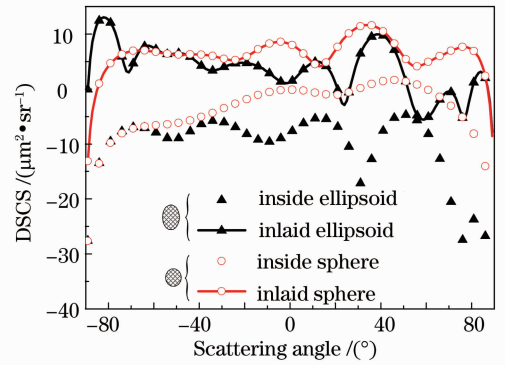


图 7 不同形态不同方位缺陷的微分散射截面比较

Fig. 7 DSCS composition between inlaid and inside particles

## 4 结 论

结合基片无损检测工艺的实际情况, 首先给出球体和回转椭球体缺陷粒子分别镶嵌和掩埋与基片内的散射模型。针对基片与缺陷粒子的半空间问题, 吸收边界使用了 GPML, 结合三波技术引入激励源给出了相应的连接边界条件并将互易性定理应用到近远场外推中, 使以上几个关键性技术大大简化。数值计算给出了镶嵌或掩埋于基片中的球体及回转椭球体缺陷粒子的散射场的角分布。比较了利用半空间方法和经典的 MOM 方法计算球体缺陷粒子的结果, 两者吻合较好, 说明了半空间方法的有效性。重点分别分析了缺陷形态、位置对散射场分布的影响, 可以看出镶嵌比掩埋的缺陷粒子受粒子尺寸的影响更明显。在大散射角下, 缺陷粒子的位置所带来的贡献较大。从粒子形状的贡献方面, 粒子分别位于基片下方和镶嵌时, 在  $-10^\circ$ 、 $30^\circ$ 、 $70^\circ$  附近的球体粒子和回转椭球体粒子的 DSCS 差别较大。因此在无损检测工程上, 可以通过对特定角度散射场的测量诊断出粒子的大致方位和形态。

## 参 考 文 献

- 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
- Gong Lei, Wu Zhensen. Polarized light scattering from a spheroid particle on or near a wafer [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2010, **22**(6): 1393~1398  
巩 蕾, 吴振森. 基片及其上方回转椭球粒子极化光散射[J]. *强激光与粒子束*, 2010, **22**(6): 1393~1398
- J. Kim, S. Ehrman, G. Mulholland *et al.*. Polarized light scattering by dielectric and metallic spheres on silicon wafers [J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(25): 5405~5412

- 4 J. Kim, S. Ehrman, G. Mulholland *et al.*. Polarized light scattering by dielectric and metallic spheres on oxidized silicon surfaces[J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(3): 585~591
- 5 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
- 6 Pan Yongqiang, Hang Lingxia, Wu Zhensen *et al.*. Influence of ion beam post-treatment on surface roughness of TiO<sub>2</sub> 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 TiO<sub>2</sub> 薄膜表面粗糙度的影响[J]. *中国激光*, 2010, **37**(4): 1108~1113
- 7 Cao Kai, Cheng Zhaogu, Gao Haijun. Calculation of light scattering from a spherical particle on a silicon wafer[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(4): 517~520  
曹 楷, 程兆谷, 高海军. 硅片表面球形粒子散射研究[J]. *光子学报*, 2006, **35**(4): 517~520
- 8 Gong Lei, Wu Zhensen. Different films influence on polarized light scattering of slightly rough substrate [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(10): 1029001  
巩 蕾, 吴振森. 不同涂层对微粗糙基底的极化光散射影响[J]. *光学学报*, 2011, **31**(10): 1029001
- 9 P. B. Wong, G. L. Tyler, J. E. Baron *et al.*. A three-wave FDTD approach to surface scattering with applications to remote sensing of geophysical surfaces [J]. *IEEE Trans. AP.*, 1996, **44**(4): 504~514
- 10 J. Y. Fang, Z. H. Wu. Generalized perfectly matched layer for the absorption of propagating and evanescent waves in lossless and lossy media [J]. *IEEE Trans. AP.*, 1996, **44**(12): 2216~2222
- 11 K. Demarest, Z. B. Huang, R. Plumb. An FDTD near- to far-zone transformation for scatterers buried in stratified grounds [J]. *IEEE Trans. AP.*, 1996, **44**(8): 1150~1157

栏目编辑: 李文誌