

表面粗糙样品吸收系数的测量研究

I. 理 论

吴华生 吴仲墀 钱佑华

(复旦大学物理系)

摘要——本文提出用透射和反射结合测量表面粗糙样品吸收系数的基本思想,引入了反映表面粗糙程度的漫射因子和特征粗糙度,从统计的角度给出了表面粗糙样品的反射率和透射率与特征粗糙度和吸收系数的本质联系,在理论上处理了表面粗糙样品吸收系数测量中的问题。

一、引 言

透射法只能测量两面抛光样品的吸收系数,而一般工厂使用的硅片绝大多数是一面抛光的;从应用观点看,发展一种测量表面粗糙样品的吸收系数的新方法是非常需要的。我们注意到,对于表面粗糙的样品,透射信号中包括了体吸收和表面漫射两种信息,而反射信号中也包含了这两种信息;如果把透射测量和反射测量结合起来,就有可能同时确定出表面粗糙程度和吸收系数。关键是要找出透射率、反射率与表面粗糙程度以及吸收系数的函数关系。在相对光的穿透深度为无限厚的样品的粗糙表面上的反射行为,已有不少研究。例如, P. Beckmann 等人^[1]用统计方法给出了所谓的双方向反射函数(BDRF)与表面粗糙程度的关系; J. Eastman 等人^[2]则在轻微粗糙的表面上用实验证实了 P. Beckmann 的理论。透射信号涉及光在样品内的多次反射,情况比较复杂,只有某些作者仿照反射情形定义了双方向透射函数(如 F. O. Bartell 等^[3]),但未给出具体的表达式。

本文吸收了 P. Beckmann 在处理反射时的统计思想,并推广到折射情形,引进了描述表面粗糙程度的漫射因子和特征粗糙度,给出了透射率、反射率与特征粗糙度以及吸收系数的本质联系,在理论上处理了表面粗糙样品吸收系数测量中的问题。

二、漫射因子及用漫射因子表示的反射率和透射率

当一光束照射到一个由两种介质组成的粗糙界面 A 时,由于漫射,在界面的镜面方向*

本文 1984 年 11 月 30 日收到,修改稿 1985 年 3 月 11 日收到。

* 镜面方向指由界面的主方向决定的反射或折射方向。

上接收到的反射或折射光强 I_i 要小于界面为镜面时的对应值 I_{i0} 。定义漫射因子 A_i 为

$$A_i = I_i / I_{i0}, \quad (1)$$

下标 i 描述光的传播情形, 规定: 当光从空气向介质入射时, 对于反射和折射, i 分别取 r 和 t ; 当光从介质向空气出射时, 对于反射和折射, i 分别取 r' 和 t' 。这样, 与 A 面相联系的有四个漫射因子: A_r 、 $A_{r'}$ 、 A_t 和 $A_{t'}$ 。各漫射因子显然小于或等于 1, 当界面为镜面时, $A_i = 1$; 界面越粗糙, A_i 值就越小。引进漫射因子后, 对于光在粗糙界面上的反射、折射可以像镜面情形一样处理。

当一光强为 1 的平行粗光束入射于一个具有两个平行粗糙表面 A 和 B 的样品的 A 面时, 各主要反射、透射光束的光强如图 1 所示。其中

$$x = e^{-\alpha d'}, \quad (2a)$$

$$d' = d / \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_0}{N^2}}, \quad (2b)$$

α 、 N 、 d 和 R 分别为样品的吸收系数、折射率、厚度和表面反射率, θ_0 为光在 A 面处空气中的入射角, B_r 、 $B_{r'}$ 为与 B 面相联系的漫射因子。对于粗光束入射, 由于整个光束内含有许多不同的位相, 故图 1 所示的各反射光束或透射光束不产生干涉。分别将各反射光束和透射光束的光强直接相加, 即得 A 面迎光时样品的反射率 G_A 和透射率 T_A :

$$G_A = A_r R + \frac{A_t A_{r'} B_{r'} R (1-R)^2 x^2}{1 - A_{r'} B_{r'} R^2 x^2}, \quad (3)$$

$$T_A = \frac{A_t B_{t'} (1-R)^2 x}{1 - A_{r'} B_{r'} R^2 x^2}. \quad (4)$$

完全类似地可得样品 B 面迎光时的反射率 G_B 和透射率 T_B :

$$G_B = B_r R + \frac{B_t B_{t'} A_{t'} R (1-R)^2 x^2}{1 - A_{r'} B_{r'} R^2 x^2}, \quad (5)$$

$$T_B = \frac{B_t A_{t'} (1-R)^2 x}{1 - A_{r'} B_{r'} R^2 x^2}. \quad (6)$$

三、特征粗糙度和用特征粗糙度表示的漫射因子

式 (3)~(6) 中包含 G_A 、 T_A 、 G_B 、 T_B 四个可测量和 A_i 、 B_i 及 α 九个未知量, α 不能由此求得。但既然与同一个面相联系的四个漫射因子都反映该面的粗糙程度, 则这四个漫射因子间并不相互独立。事实上, 这四个漫射因子可以用一个只与该面的粗糙程度有关的统计量——特征粗糙度表示出来。这样, 式 (3)~(6) 中的未知量就会减少, 以致最后可以从中求出 α 。

图 2 左方所示为一平行粗光束在前述样品的表面 A 上反射和折射的细致情形。无起伏的实线是表面 A, 可用方程 $z = z(x, y)$ 表示; 水平点划线表示平均平面 $z = 0$ 的位置;

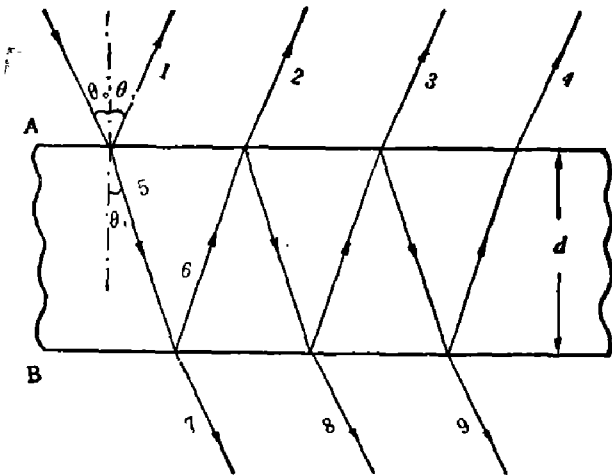


图 1 光在两面粗糙样品上的反射和透射

Fig. 1 Reflection and transmission of light on a sample with rough surfaces on both sides.

- 1— $A_r R$; 2— $A_t A_{r'} B_{r'} R (1-R)^2 x^2$; 3— $A_t A_{r'} B_{r'} R (1-R)^2 x^2 (A_{r'} B_{r'} R^2 x^2)$; 4— $A_t A_{r'} B_{r'} R (1-R)^2 x^2 (A_{r'} B_{r'} R^2 x^2)^2$; 5— $A_t (1-R)$; 6— $A_t B_{r'} R (1-R) x$; 7— $A_t B_{r'} (1-R)^2 x$; 8— $A_t B_{r'} (1-R)^2 x (A_{r'} B_{r'} R^2 x^2)$; 9— $A_t B_{r'} (1-R)^2 x (A_{r'} B_{r'} R^2 x^2)^2$

θ_0 、 θ_r 和 θ_t 是以平均平面为参照面的光的入射角、反射角和折射角； Q 是 A 面上的一点， \mathbf{n} 是 Q 点法线方向上的单位矢量； \mathbf{k}_0 、 \mathbf{k}_r 和 \mathbf{k}_t 分别是入射、反射和折射光的波矢，方向和光的传播方向一致。 P_r 是反射空间离 A 面很远的点。真实的折射空间局限在样品的 A、B 面之间，但现在讨论的是 A 面的粗糙程度对折射光的影响，可以也应该把折射空间看成无穷大， P_t 就是在这样的折射空间中离 A 面很远的点。若记 $OQ = \mathbf{R}'$ 、 $OP_i = \mathbf{R}_{i0}$ 、 $QP_i = \mathbf{R}_i$ ，则

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R}_i &= \mathbf{R}_{i0} - \mathbf{R}' \\ R_i &\doteq R_{i0}, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

其中 i 取 r 或 t 值

设入射光的电矢量沿 z 方向偏振（垂直于纸面），其标量形式为

$$E_0 = E_{00} e^{-j2\pi \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}}, \quad (8)$$

其中 $j = \sqrt{-1}$ 。在 P_i 点的电矢量 $E_i(P_i)$ 值由 Helmholtz-Kirchhoff 积分定理给出^[1]：

$$E_i(P_i) = \frac{1}{4\pi} \iint_s [E_i(\mathbf{R}') \nabla \psi(\mathbf{R}_i) - \psi(\mathbf{R}_i) \nabla E_i(\mathbf{R}')] \cdot \mathbf{n} ds, \quad (9)$$

其中

$$E_i(\mathbf{R}') = f_i(i) E_{00} e^{-j2\pi \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}'}; \quad (10)$$

$$\psi(\mathbf{R}_i) = e^{-j2\pi \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}_i} / R_i; \quad (11)$$

$f_i(i)$ 为 A 面在 \mathbf{R}' 处的反射系数 r 或透射系数 t 的某一函数。

当表面起伏的曲率半径不很小时，可用由平均平面决定的 r_0 、 t_0 和 \mathbf{n}^0 (\mathbf{n}^0 为 z 方向的单位矢量) 代替 r 、 t 和 \mathbf{n} ，也即取平均值。作这样的近似，由式(10)、(11)及式(7)，可将式(9)化为：

$$E_i(P_i) = D_i(P_i) \iint_s e^{-j2\pi(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{R}'} ds, \quad (12)$$

其中

$$D_i(P_i) = -j f_i(i) E_{00} (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{n}^0 e^{-j2\pi \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}_{i0}} / 4\pi R_{i0}. \quad (13)$$

在由平均平面决定的反射、折射方向上有：

$$2\pi(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{R}' = -a_i k z, \quad (14)$$

其中

$$a_r = 4\pi \cos \theta_0, \quad (15)$$

$$a_t = 2\pi(\cos \theta_0 - N \cos \theta_t), \quad (16)$$

$$k = 1/\lambda_0, \quad (17)$$

N 和 λ_0 分别为样品的折射率和光在真空中的波长。将式(14)代入式(12)后有：

$$E_i(P_i) = D_i(P_i) \iint_s e^{j a_i k z} ds. \quad (18)$$

光从样品内向空气方向出射于 A 面时的情形如图 2 右方所示。此时入射角和反射角等于 θ_r ，折射角等于 θ_0 ，反射空间和折射空间的折射率分别为 N 和 1。当 i 取 r' 、 t' 值时，用

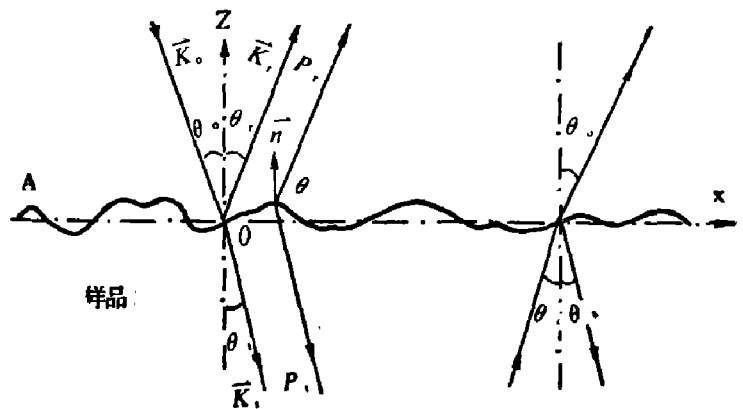


图 2 光在粗糙表面 A 上反射和折射的细致情形
Fig. 2 Details of light reflection and deflection on a rough surface A.

完全类似于上述的推导, 可得与式(18)同样的结果, 而其中

$$a_{r'} = 4\pi N \cos \theta_i, \quad (19)$$

$$a_{t'} = 2\pi (N \cos \theta_i - \cos \theta_0). \quad (20)$$

若 A 面为镜面, 则 $z=0$, 由式(18), 这时在 P_i 点的电矢量 $E_{i0}(P_i)$ 为:

$$E_{i0}(P_i) = D_i(P_i) \iint_s ds = D_i(P_i) \cdot s, \quad (21)$$

其中 i 取 r, r', t, t' 值, s 为表面光照面积。

由于 $E_i(P_i)$ 值由 $z=z(x, y)$ 的分布决定, 则光强 $I_i(P_i) \equiv [E_i(P_i)]^2$ 也由 z 的分布决定, 即从粗糙表面反射或折射的光强应是一统计平均值。由漫射因子和定义式(1), 有:

$$A_i = \left\langle \left[\frac{E_i(P_i)}{E_{i0}(P_i)} \right]^2 \right\rangle, \quad (22)$$

$\langle \rangle$ 符号表示统计平均。当表面粗糙状况完全无规时, 式(22)变为:

$$A_i = \left[\left\langle \frac{E_i(P_i)}{E_{i0}(P_i)} \right\rangle \right]^2, \quad (23)$$

将式(18)和(21)代入式(23), 有:

$$A_i = \left[\frac{1}{s} \iint_s \langle e^{ja_i k z} \rangle ds \right]^2 = [\langle e^{ja_i k z} \rangle]^2. \quad (24)$$

表面起伏 $z=z(x, y)$ 无规, 但必具有某种实的统计分布, 记这种分布为 $f(z)$, 称为表面粗糙分布函数。有理由认为: (1) $f(z)$ 应是 z 的偶函数; (2) 对一个确定的粗糙面, $f(z)$ 应随 $|z|$ 值反向变化, 当 $|z|$ 趋于无穷大时, $f(z)$ 趋于零; (3) 对相同的 $|z|$ 值, 不同的粗糙表面应给出不同的 $f(z)$ 值, 粗糙程度较大的表面对应的 $f(z)$ 值应较大, 即 $f(z)$ 应随表面粗糙程度正向变化。

为了使表面粗糙分布函数满足上述要求, 必须在 $f(z)$ 中加进一个表征表面粗糙程度的统计量 a , 并将表面粗糙分布函数的形式最后写成 $f(z/a)$ 。我们把 a 叫做特征粗糙度, 表面为镜面时 $a=0$, 表面越粗糙, a 值就越大。这样, 式(24)可变成反映漫射因子与特征粗糙度本质联系的下式:

$$\begin{aligned} A_i &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ja_i k z} f(z/a) dz / \int_{-\infty}^{+\infty} f(z/a) dz \right]^2 \\ &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{j(a_i k a)(z/a)} f(z/a) d(z/a) / \int_{-\infty}^{+\infty} f(z/a) d(z/a) \right]^2 \\ &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{jY_i Z} f(Z) dZ / \int_{-\infty}^{+\infty} f(Z) dZ \right]^2 = [g(Y_i)]^2, \end{aligned} \quad (25)$$

其中

$$Z \equiv z/a, \quad (26a)$$

$$Y_i \equiv a_i k a. \quad (26b)$$

由式(25)和 a_i 的表示式(15)、(16)、(19)、(20)可知, 漫射因子是特征粗糙度、波长、样品折射率及光的入射角的函数。

式(25)显示了有关漫射因子的几条重要性质: (1) A_i 是 $Y_i \equiv a_i k a$ 的函数, 即漫射因子不是单纯与表面粗糙程度有关, 而是直接与特征粗糙度和波长之比 a/λ_0 相联系。固定波长 λ_0 、增大特征粗糙度 a , 与固定 a 、减小 λ_0 , 两者对 A_i 的影响相同; (2) 四个漫射因子具有相同的函数形式, 只是 a_i 不同而已; (3) 由于 $f(z)$ 为实的偶函数, 则积分后的 $g(Y_i) \equiv A_i^{1/2}(Y_i)$

也一定是实的偶函数, 即有:

$$A_i^*(Y_i) = A_i(Y_i), \quad (27a)$$

$$A_i(-Y_i) = A_i(Y_i); \quad (27b)$$

(4) 若 $Y_i=0$, 则 $g(Y_i)$ 的分子与分母相同, 若 $Y_i \rightarrow \infty$, 则 $e^{iY_i z}$ 的振荡特性导致 $g(Y_i)$ 分子中的被积函数值相互抵消, 即

$$A_i(0) = 1, \quad (28a)$$

$$A_i(\infty) = 0, \quad (28b)$$

这两式与 A_i 的原始定义式 (1) 的性质一致; (5) $g(Y_i) \equiv A_i^{\frac{1}{2}}(Y_i)$ 与 $f(Z) / \int_{-\infty}^{+\infty} f(Z) dZ$ 构成傅里叶变换对, 即

$$f(Z) / \int_{-\infty}^{+\infty} f(Z) dZ = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iY_i Z} A_i^{\frac{1}{2}}(Y_i) dY_i. \quad (29)$$

由以上 A_i 的性质可以引出两个重要结论: (1) 由式 (16) 和 (20) 知, $a_r = -a_t$, 再由式 (26b) 和 (27b) 便得

$$A_r = A_t, \quad (30)$$

代入式 (4) 和 (6) 便有

$$T_A = T_B = T; \quad (31)$$

(2) 若取一个 B 面抛光、A 面粗糙、且 $ad \gg 1$ 的样品, 由实验测出其反射谱 $G_A(k)$ 和 $G_B(k)$, 由式 (3) 和 (5) 可知两谱相比的结果正好是 $A_r(k)$, 即

$$A_r(k) = G_A(k) / G_B(k), \quad (32)$$

或取两个 ad 值相同且适中的样品, 其中一个 A 面粗糙、B 面抛光, 另一个双面抛光, 分别作透射谱 $T(k)$ 和 $T_0(k)$, 由式 (4) 知, 两谱相比的结果基本上等于 $A_t(k)$, 即

$$A_t(k) = T(k) / T_0(k), \quad (33)$$

由式 (26b) 和上述性质 (1) 知, 由得到的 $A_r(k)$ 和 $A_t(k)$ 就有了 $A_r(Y_r)$ 和 $A_t(Y_t)$, 选择符合上述性质 (3) 和 (4) 的适当函数拟合 $A_r(Y_r)$ 和 $A_t(Y_t)$, 再由上述性质 (2) 就事实上有了漫射因子的普遍表达式, 而且 $A_r(Y_r)$ 和 $A_t(Y_t)$ 的函数形式应该相同。

由上述性质 (5) 立即可求得归一化的实空间的表面粗糙分布函数 $f(z/a)$, 并可由此求得特征粗糙度 a 与均方根粗糙度 $\sqrt{z^2}$ 的当量关系。

四、吸收系数的计算

由式 (31) 知, 式 (3) ~ (6) 中只有三个方程是独立的, 设为式 (3)、(4)、(5)。而按上述结论 (2) 求得 $A_t(Y_t)$ 后, 在某特定波长下, 所有与 A 面相联系的漫射因子都可用 A 面的特征粗糙度 a 表示; 同理, 所有与 B 面相联系的漫射因子可用 B 面的特征粗糙度 b 来表示。这样, 对两面粗糙样品, 由于厚度 d 、入射角 θ_0 、折射率 N 和表面反射率 R 都可知, 所以一旦测量出样品的反射率 G_A 、 G_B 和透射率 T 三个量, 便可由式 (3)、(4)、(5) 并结合式 (2) 和 $A_t(Y_t)$ 的具体表达式解出 a 、 b 和 α 三个未知量。

当样品 A、B 面粗糙程度相同时, 式 (3)、(4)、(5) 可简化为:

$$\left\{ T^2 - \frac{A_r^2}{A_r'} (G_A - A_r R) \left[\frac{A_r'}{A_r^2} (G_A - A_r R) + \frac{(1-R)^2}{R} \right] = 0, \right. \quad (34)$$

$$\left. e^{-\alpha d'} = \frac{(G_A - A_r R)}{A_r' R T}, \right. \quad (35)$$

其中 d' 由式(2b)给出。由测量值 T 和 G_A , 从式(34)数值求解出 α , 代入式(35)便可求得 α 。

当样品 A 面粗糙、B 面抛光时, 式(3)、(4)、(5)可简化为:

$$\left\{ T^2 - (G_A - A_r R) \left[\frac{A_r'}{A_r^2} (G_A - A_r R) + \frac{(1-R)^2}{R} \right] = 0, \right. \quad (36)$$

$$\left. e^{-\alpha d'} = \frac{(G_A - A_r R)}{A_r' R T}, \right. \quad (37)$$

由 T 和 G_A 从式(36)中数值求解出 α 后, 再由式(37)可求出 α 。

当样品两面抛光时, 由式(4)立即有:

$$e^{-\alpha} = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{(1-R)^2}{R^2 T} + \sqrt{\left[\frac{(1-R)^2}{R^2 T} \right]^2 + \frac{4}{R^2}} \right\}, \quad (38)$$

这就是纯透射法测 α 的计算公式。

参 考 文 献

- [1] Beckmann P. and Spizzichino A., *The Scattering of Electromagnetic Wave from Rough Surfaces*, ed. V. A. Fork and J. R. Wait, Oxford, Pergamon press, 1963, 19.
- [2] Eastman J. and Baumeister P., *Opt. Commun.* **12** (1974), 418~420.
- [3] Bartell F. O. et al., *Radiation Scattering in Optical Systems*, *Proceedings of SPIE*, vol. 257, ed. Gary H. Hunt, 1980, 154.

A STUDY ON DETERMINATION OF OPTICAL ABSORPTION COEFFICIENT OF SAMPLE WITH ROUGH SURFACE

I. THEORY

WU HUASHENG, WU ZHONGCHI, QIAN YOUHUA

(Department of Physics, Fudan University)

ABSTRACT

An idea of measuring the optical absorption coefficient for semiconductor wafers with rough surface, using a method of combining transmittance and reflectance measurement is presented. Factors related to diffusive light reflection diffraction, along with a parameter termed as characteristic roughness, are introduced to describe the surface roughness of samples. The dependence of reflectivity and transmittance on the characteristic roughness and absorption is given from a statistical point of view. The problem of data analysis in absorption coefficient measurement on rough-surface samples is theoretically solved in the end.