

表面粗糙样品吸收系数的测量研究

II. 硅片的实验结果

吴华生 吴仲墀 钱佑华

(复旦大学物理系)

摘要——本工作依据文献[1]的理论,从实验上最后得出了表面粗糙样品的透射率、反射率与特征粗糙度、吸收系数及波长的具体函数关系,并验证了文献[1]提出的某些关键性的结论,及用透、反射结合方法测量表面粗糙样品参数的可行性。在实际应用中,透、反射结合法所测吸收系数与其他方法所测结果符合较好。

一、引言

有关表面粗糙样品吸收系数测量中的理论问题已在文献[1]中阐述。依据它的结论,本文从实验上由反射谱和透射谱得出了漫射因子与特征粗糙度及波长的具体函数关系,并由此得到了实空间的表面粗糙分布函数。然后从变波长和变表面粗糙程度两个角度验证了文献[1]得到的几个关键性结论以及透、反射结合法测表面粗糙样品参数的可行性。作为实验应用,测量了一批单面粗糙硅片的吸收系数,所得结果与由四探针测量电阻率后换算得到的结果符合较好。为节省篇幅,文献[1]中的公式不再在此列出。本文中公式编号系文献[1]的延续。

二、测 算

反射光谱在 PE-599D 型红外光栅光谱仪上测量,透射光谱在 Nicolet 公司 5DX 型红外傅里叶光谱仪上测量。

其他反射率和透射率在自装的设备上测量。测量时,样品的放置情况如图 1 所示。从波长为 $10.6 \mu\text{m}$ 的二氧化碳激光器出来的光束被扩至直径为 15 mm 左右后投射于样品表面,激光偏振方向垂直于入射面(即垂直于纸面),入射角 $\theta_0 = 17.3^\circ$ 。入射光强为 I_0 ,反射光强 I_R 和透射光强 I_T 分别由反射探头和透射探头检测。反射率 G 和透射率 T 为

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

$$G = \frac{I_G}{I_{G_0}} \cdot G_0, \quad (39)$$

$$T = \frac{I_T}{I_0}, \quad (40)$$

其中 G_0 为标准样品的反射率, I_{G_0} 为在不改变其他条件下待测样品换为标准样品后的反射光强。标准样品选用金镜, $G_0 = 99.0\%$ 。

硅片厚度 d 用百分表测量。作比较用的样品的电阻率 ρ 用四探针测量。

计算用计算机进行。计算中取 $10.6 \mu\text{m}$ 波长处的表面反射率 $R_0 = 0.29^{[2]}$ 。相应的折射率 $N = \frac{1 + \sqrt{R_0}}{1 - \sqrt{R_0}} = 3.33$, 在上述入射角和偏振态下的表面反射率 $R = \left[\frac{\cos \theta_0 - N \cos \theta_t}{\cos \theta_0 + N \cos \theta_t} \right]^2 = 0.305$, 其中 $\cos \theta_t = \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_0}{N^2}}$ 。

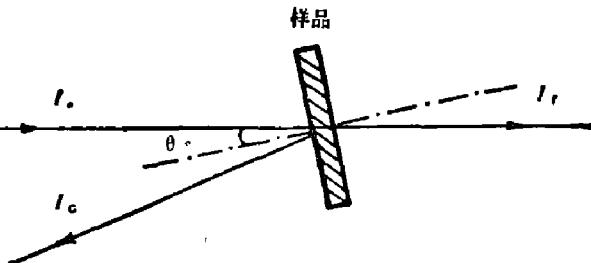


图 1 样品放置状况

Fig. 1 Configuration of the sample with respect to light beams.

三、结 果

1. 漫射因子和表面粗糙分布函数的表达式

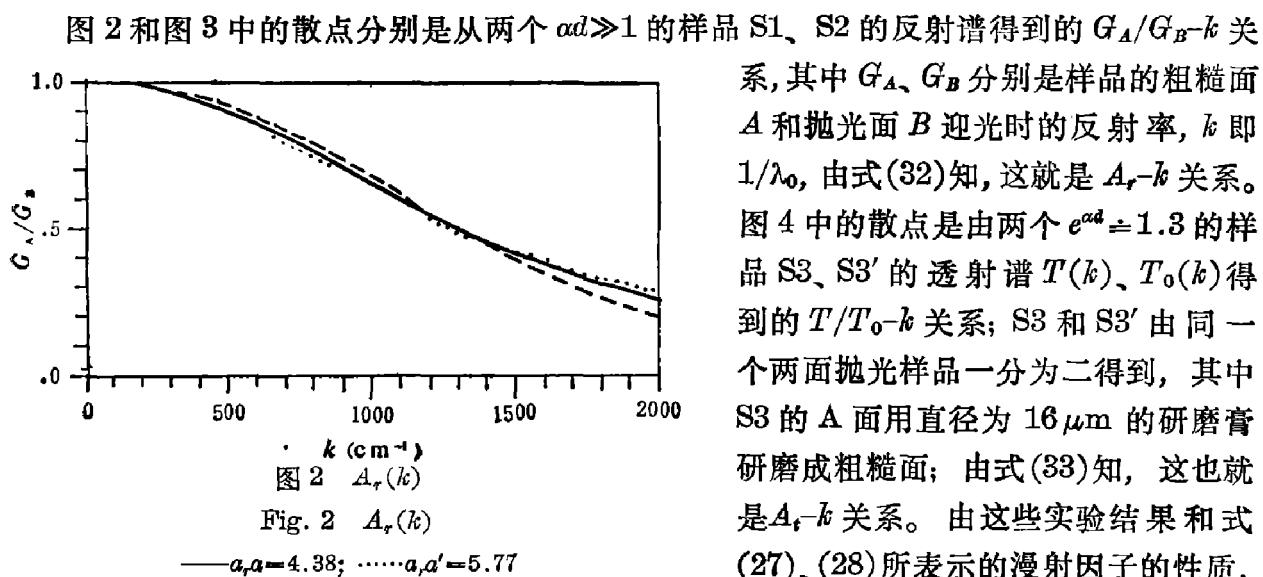


图 2 和图 3 中的散点分别是从两个 $ad \gg 1$ 的样品 S1、S2 的反射谱得到的 G_A/G_B-k 关系, 其中 G_A 、 G_B 分别是样品的粗糙面 A 和抛光面 B 迎光时的反射率, k 即 $1/\lambda_0$, 由式(32)知, 这就是 A_r-k 关系。图 4 中的散点是由两个 $e^{ad} = 1.3$ 的样品 S3、S3' 的透射谱 $T(k)$ 、 $T_0(k)$ 得到的 T/T_0-k 关系; S3 和 S3' 由同一个两面抛光样品一分为二得到, 其中 S3 的 A 面用直径为 $16 \mu\text{m}$ 的研磨膏研磨成粗糙面; 由式(33)知, 这也就是 A_t-k 关系。由这些实验结果和式(27)、(28)所表示的漫射因子的性质,

拟合得到了漫射因子 A_r 与特征粗糙度 a 及波长 k 的函数关系:

$$A_r(Y_i) \equiv A_r(a_*ak) = \left[\frac{1}{1 + (a_*ak)^2} \right]^2, \quad (41)$$

其中 a_* 由式(15)、(16)、(19)和(20)表示。三张图中以实线示出了式(41)与实验结果的吻合程度, 其中 a_*a 值在图 2、图 3 和图 4 中分别为 4.38、4.96 和 7.91。

由式(41), 按照式(29)作 $A_r^{1/2}$ 的傅里叶逆变换, 可以求得实空间的表面粗糙分布函数为指数分布, 其归一化后的形式为

$$f(z/a) = \frac{1}{2a} e^{-|z|/a}. \quad (42)$$

上式显然满足文献[1]提出的对表面粗糙分布函数的三个要求。

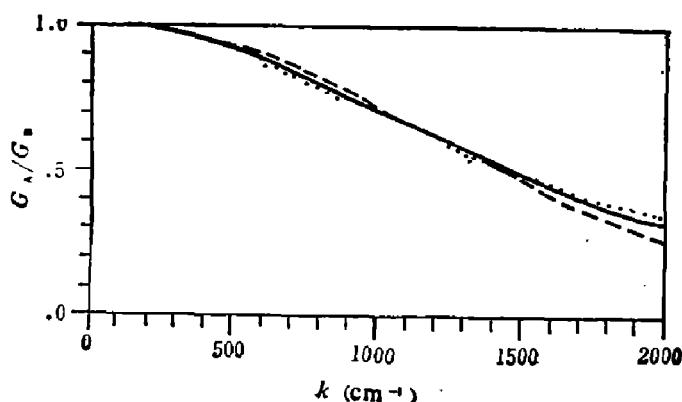


图 3 $A_r(k)$

Fig. 3 $A_r(k)$

— $a, a=4.96$; ······ $a, a'=6.42$

片 S4 在 B 面保持抛光, A 面顺次用从细到粗的研磨膏研磨后在 $10.6 \mu\text{m}$ 波长下测得的透射率 T_A 、 T_B 以及 $A_t/A_{t'}$ 。可见在各种表面情况下, 前述结论(1)的式(30), 即 $A_t=A_{t'}$ 都满足。

图 5 是前述样品 S3 当粗糙面 A 迎光和抛光面 B 迎光时的透射谱 T_A 和 T_B 。为了能分辨清楚, T_A 、 T_B 的数值分别由左右纵坐标表示。可见, 在各种波长下都有 $T_A=T_B$, 或 $A_t=A_{t'}$ 。

(2) 两面抛光样品的表面漫射因子

将两面抛光样品看成“两面同样粗糙样品”, 由“两面同样粗糙公式”*求出漫射因子。表 2 的最后栏罗列了几块样品的 A_r 值。可见, A_r 值基本等于 1, 即式(28-1)成立。

(3) 漫射因子和特征粗糙度随表面粗糙度的变化

图 2 至图 4 实际上反映了样品表面粗糙情况一定时漫射因子随波数的增加而减少。

图 6 是一块 B 面保持抛光、A 面顺次用从细到粗的研磨膏充分研磨的样品 S5 在 $10.6 \mu\text{m}$ 波长时用“单面粗糙公式”算得的漫射因子 A_r 和特征粗糙度 a 与研磨膏直径 ϕ 的关系。图中空心圆对应 A_r , 实心圆对应 a , ϕ 和 a 的单位为

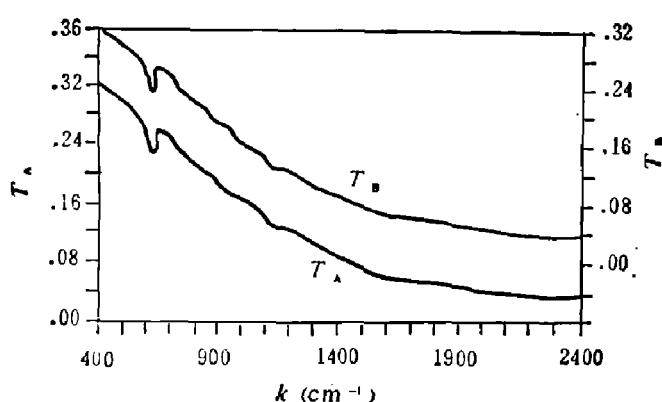


图 5 粗糙面、光面迎光时的 T_A 、 T_B

Fig. 5 The wavelength dependence of transmittance T_A and T_B , corresponding to the light beam incidence on rough surface A and perfectly polished surface B, respectively.

由式(42)易得:

$$\sqrt{z^2} = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} z^2 f(z/a) dz} = \sqrt{2} a. \quad (43)$$

上式表明, 特征粗糙度 a 等于均方根粗糙度的 0.707 倍。

2. 漫射因子及特征粗糙度的特性

(1) A_t 与 $A_{t'}$ 的关系

由式(4)和(6), 若样品 B 面抛光, A 面粗糙, 则 $A_t/A_{t'}=T_A/T_B$ 。表 1 列出了厚度为 2 mm 的区熔单晶硅

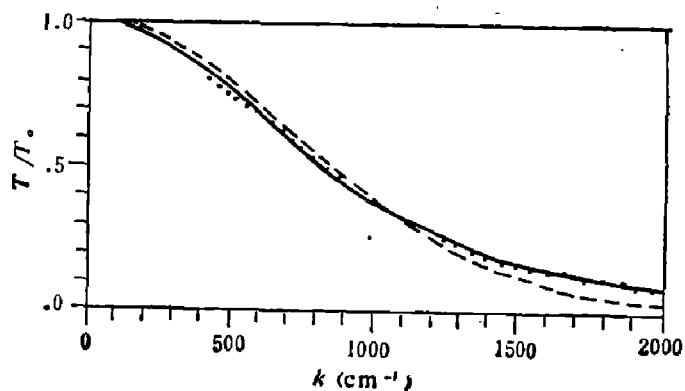


图 4 $A_t(k)$

Fig. 4 $A_t(k)$

— $a, a=7.91$; ······ $a, a'=9.72$

* 指式(34)、(35)、(41) 联立方程, 下面将出现“单面粗糙公式”, 指式(36)、(37)、(41) 联立方程。

表1 不同表面情况下的 A_t/A_r Table 1 The values of A_t/A_r corresponding to different degree of surface roughness.

研磨膏直径(μm)	T_A	T_B	A_t/A_r
7	0.283	0.281	1.01
10	0.238	0.237	1.00
16	0.161	0.163	0.988
40	0.126	0.125	1.01

表2 两面抛光硅片的漫射因子

Table 2 Diffuse-factor of silicon wafers with two perfectly polished surfaces.

样品编号	导电类型	T	G_A	A_r
A1	P	0.0982	0.317	1.02
A2	P	0.0997	0.316	1.02
A3	N	0.107	0.323	1.03
A4	N	0.193	0.309	0.959
A5	N	0.0482	0.323	1.05
A6	N	0.263	0.345	0.996

微米。由图可见，漫射因子 A_r 随 ϕ 的增大而单调地减小 (A_r 和 A_t 当然也有类似的趋势)，这与 A_t 的原始定义式(1)相一致。特征粗糙度 a 与 ϕ 成正比，且有关系：

$$a = \phi/28. \quad (44)$$

这一规律的实质与文献 [1] 中 a 的原始定义相一致。

3. 透、反射结合法测量表面粗糙样品参数的可行性

图 7 上面一条谱线和下面实线附近散点分别是前述样品 S3' 和 S3 的透射谱 $T_0(k)$ 和 $T(k)$ 。先由上条谱线用式(38)算出各个波数处的 $\alpha = e^{-ak}$ ，再由这 α 及表面反射率 R 、折射率 N 、特征粗糙度

a ，用式(4)和(41)计算出 S3 的透射谱，其中 R 和 N 取 10.6 μm 处的值(因在图 7 所示波数范围， R 和 N 值变化很小)，而 a 值由最佳拟合确定。当取 $a = 0.525 \mu\text{m}$ 时，算得的 S3 的透射谱由图 7 下面实线示出。

可见，用本方法所算结果与实验谱符合很好。而且按式(44)算得的 $\phi = 28a \approx 15 \mu\text{m}$ 与实际研磨 S3 时的研磨膏直径 16 μm 也较符合。

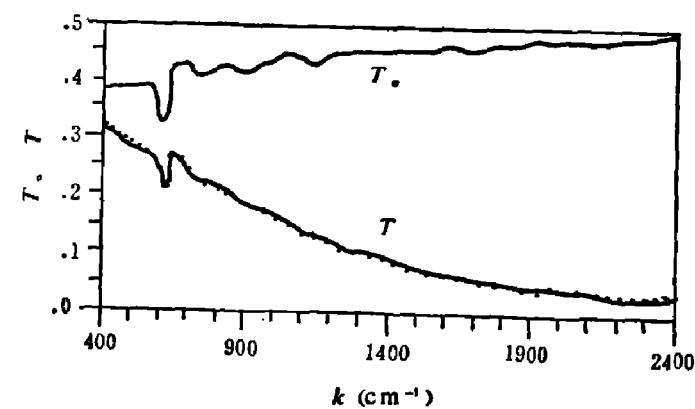


图 7 实验和计算的透射谱

Fig. 7 The measured and calculated dependences of transmittance on the wavelength.

• 350 •

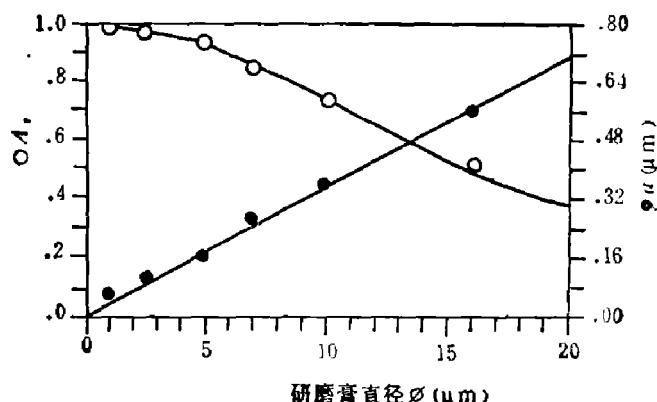
图 6 A_r 、 a 与表面粗糙程度的关系

Fig. 6 Dependences of A_r and a on the degree of surface roughness.

图 8 分别用实心圆和空心圆示出了前述样品 S5 由“单面粗糙公式”算得的 e^{ak} 和由双面抛光公式(38)算得的 e^{ak} 与研磨 A 面时所用研磨膏的直径 ϕ 的关

系。由图可见,用纯透射法计算的 $e^{\alpha_1 d}$ 值随 ϕ 的增大而急剧增加,这说明纯透射法对表面粗糙样品参数的测量是无能为力的。而用透、反射结合法所得 $e^{\alpha_1 d}$ 值直至 $\phi=16 \mu\text{m}$,在实验精度范围内保持常数。

图 7 和图 8 都说明了透、反射结合法是能够解决表面粗糙样品参数的测量问题的。

4. 实际应用

表 3 列出了一批单面抛光硅样品的测量值、按“单面粗糙公式”计算的值和与四探针测量结果的比较。表中 α^* 是先由电阻率 ρ 查 $\rho-n$ 曲线^[3] 得载流子浓度 n , 再由从 L. Jastrzebaski 等人在两面抛光硅片测得的 $10.6 \mu\text{m}$ 时的 $n-\alpha$ 曲

线^[2] 上查得。由表可见,除 B10 外,其他样品的 α 相对误差都在 15% 以内。顺便可以看出,从工厂来的绝大多数硅片中的 α 值都在 $0.35 \sim 0.50 \mu\text{m}$ 范围,若用式(44)折算成 ϕ , 大约相当于用直径 $10 \sim 14 \mu\text{m}$ 范围的研磨膏研磨的结果。

表 3 单面粗糙硅片测算结果

Table 3 The measured and calculated values of parameters of silicon wafers with one rough surface.

样品编号	导电类型	$d(\text{cm})$	$\rho(\Omega\text{cm})$	T	G_A	$a(\mu\text{m})$	$\alpha(1/\text{cm})$	$\alpha^*(1/\text{cm})$	$\frac{(\alpha-\alpha^*)}{\alpha^*} (\%)$
B1	N	0.0352	0.0307	0.0455	0.191	0.458	47.5	46	3.3
B2	N	0.0380	0.0435	0.124	0.197	0.465	17.3	20	13.5
B3	N	0.0385	0.0437	0.130	0.205	0.445	17.1	19.5	12.3
B4	N	0.0360	0.0652	0.205	0.233	0.408	8.71	10	12.9
B5	N	0.0365	0.0666	0.202	0.232	0.410	8.40	9.6	12.5
B6	N	0.0362	0.0666	0.205	0.235	0.404	8.39	9.6	12.6
B7	N	0.0350	0.0712	0.215	0.247	0.378	9.18	9.0	2.0
B8	N	0.0370	0.0719	0.205	0.233	0.410	7.93	8.8	9.9
B9	N	0.0367	0.0749	0.236	0.262	0.354	7.70	8.0	3.8
B10	N	0.0378	0.0378	0.208	0.199	0.509	0.700	1.1	36.4

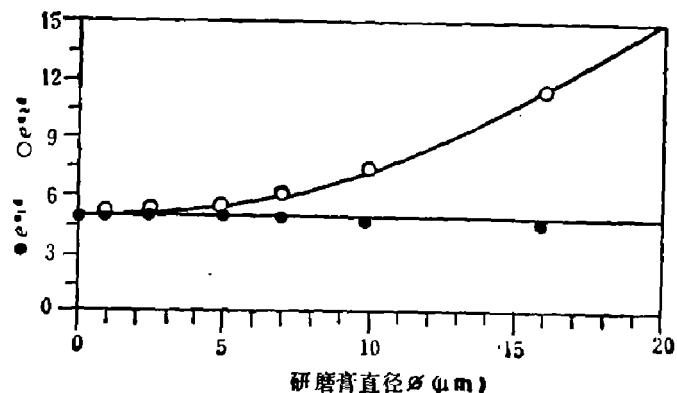


图 8 本法和透射法所算 $e^{\alpha_1 d}$ 和 $e^{\alpha_2 d}$

Fig. 8 $\exp(\alpha_1 d)$ and $\exp(\alpha_2 d)$, obtained respectively by this method and by considering transmission only.

四、讨 论

1. 本工作得出的漫射因子表达式是式(41),由此得出的实空间表面粗糙分布函数为式(42)所表示的指数分布。P. Beckmann 曾从假设的呈高斯分布的表面粗糙分布函数出发,推出了镜面方向的双方向反射函数 BDRF(相当于本文的 A_s)呈高斯型^[4],即

$$G = G_0 e^{-(4\pi \cos \theta_0 a'^2)^2}, \quad (45)$$

其中 G 和 G_0 分别为表面粗糙和表面平滑时所对应的反射率; $(4\pi \cos \theta_0)$ 因子与式(15)表示的 a_r 相同; a' 称表面粗糙度,与本文的特征粗糙度 a 对应。J. Eastman 等人在 $a'=170 \text{ Å}$

的微粗糙表面和可见光范围证实了 P. Beckmann 的理论^[4]。作为对照，在图 2 至图 4 中用虚线示出了式(45)所表示的高斯分布，各图中的 a_ia' 值依次为 5.77、6.42 和 9.72。由图可见，当 k 值(相当于 Y 值)较小时，式(45)和(41)表示的分布非常接近，这也很容易从两式对 Y 的一级泰勒展式清楚地知道。但当 k (相应于 Y)较大时，式(45)与实验的符合程度显然不如式(41)。

2. A_r 值只能小于等于 1，表 2 中几块样品的 A_r 值略大于 1 是由实验误差(包括 T 、 G_A 的测量误差)引起的。表 3 中样品 B10 的 α 相对误差较大，是由于 B10 的 αd 值很小而 α 的相对误差正比于 $1/\alpha d$ 所致。对 αd 值很小的样品，即使是两面抛光，也很难用透射法测准。

3. 本工作在实际应用部分测量了最典型的单面抛光样品。对这样的样品，只需测 T 和 G_A (A 为粗糙面) 即可。若要测两面粗糙程度不同的样品，则需测出 G_A 、 G_B 和 T ，由式(3)、(4)、(5) 和 (41) 联合求解出 a 、 b 和 α 。但在样品反面测量时，务须保证光束仍照射在样品原来的区域内。

4. 透、反射结合法测表面粗糙样品吸收系数的适用条件是：(1) $ak \equiv a/\lambda_0$ 值不太大，若过大，作为理论前提的式(12)所包含的近似不再允许。若由式(44)用相当的研磨膏直径 ϕ 代替 a ，计算表明，要使误差较小，需有 $\phi/\lambda_0 \leq 2$ 。(2) 表面粗糙状况足够无规和光照面积足够大，否则式(23)不成立。对一般工厂来的无规粗糙表面样品，光照区直径有 10 mm 左右已经足够。

五、结语

1. 由反射谱和透射谱得到了漫射因子 A_i 与特征粗糙度 a 及波数 k 的具体函数关系：

$$A_i(a_iak) = \left[\frac{1}{1 + (a_iak)^2} \right]^2 \quad (i=r, r', t),$$

当 a_iak 较小时， A_i 的结果与 Beckmann 的结果一致。由 A_i 得到了表面粗糙分布函数为

$$f(z/a) = \frac{1}{2a} e^{-|z|/a}.$$

由 $f(z/a)$ 得特征粗糙度 a 是均方根粗糙度的 0.707 倍。

2. 从变波长或变粗糙程度两个角度证实了文献[1]提出的两面抛光样品的 $A_i=1$ 两面粗糙程度不同样品的 $T_A=T_B$ 的结论；得出了特征粗糙度 a 与研磨表面的研磨膏直径 ϕ 的线性关系： $a=\phi/28$ ；验证了透、反射结合法测量表面粗糙样品参数的可行性。

3. 测量了一批单面粗糙硅片的吸收系数，所得结果与由四探针法测量样品电阻率后再换算得到的结果符合较好。

致谢——感谢上海电子材料一厂鲁松年同志为本工作提供了部分硅片样品。

参考文献

- [1] 吴华生、吴仲墀、钱佑华，红外研究，4(1985)，4:249~254
- [2] Jastrzebski L. et al., *J. Electrochem. Soc.*, 126 (1979), 260;
- [3] Irvin J. C., *Bell System Tech.*, 41 (1962), 387.
- [4] Beckmann P. and Spizzichino A., *The Scattering of Electromagnetic Wave from Rough Surfaces*, ed. V. A. Fock and J. R. Wait, Oxford, Pergamon Press, 1963, p. 93.

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

II. EXPERIMENTAL RESULTS ON SILICON WAFER

WU HUASHENG, WU ZHONGCHI, QIAN YOUNGUA

(*Department of Physics, Fudan University*)

ABSTRACT

According to the theoretical lines of a previous paper by the author, optical transmittance and reflectance of silicon sample with rough surface as the function of characteristic roughness, absorption coefficient and wavelength are derived experimentally. The major theoretical conclusions and possibility of determination of optical parameters by use of transmission combined with reflection measurements are verified. The values of absorption coefficient obtained from present method are compared with those of existing procedure, and the coincidence is presented.