В.В.Лопушенко

МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕИВАЮЩИХ СВОЙСТВ ГРУППЫ ПЛОСКИХ ЧАСТИЦ В ПРИСУТСТВИИ ПОДЛОЖКИ

ВВЕДЕНИЕ

Важным классом дефектов, встречающихся при производстве различных электронных устройств, является множество малозаметных объектов в виде плоских протяженных частиц малой высоты. В то время как высота частиц обычно не превышает нескольких нанометров, их диаметр может быть значительным - до нескольких микрометров. При этом встречаются как одиночные дефекты, так и группы близкорасположенных дефектов данного класса. Использование оптических сканеров для надежного обнаружения и идентификации подобных дефектов требует наличия адекватных средств математического моделирования и изучения их рассеивающих свойств.

Одним из наиболее универсальных и мощных инструментов теории рассеяния является метод интегральных уравнений [1], который используется при анализе рассеивающих свойств различных объектов в течение многих десятилетий. Различные модификации метода были предложены недавно для построения математических моделей рассеяния на тонких протяженных частицах в свободном пространстве [2,3] с использованием интегральных уравнений в пространственной и спектральной областях. В работе [4] представлен метод объемных интегральных уравнений в спектральной области для объектов малой толщины, расположенных на подложке. Метод показал свою высокую эффективность в анализе рассеяния света плоскими цилиндрическими дефектами подложек [5], имеющими разную форму и степень вытянутости.

В настоящей работе метод объемных интегральных уравнений в спектральной области, предложенный в [4,5], обобщен на случай групп плоских поверхностных дефектов подложки. Как и в случае одиночных дефектов, рассматриваются группы сплюснутых цилиндров, расположенных на подложке или на некотором расстоянии от нее. Метод строится на основе тензора Грина полупространства [1] с последующим переходом в спектральную область. Показано, что полученное уравнение типа свертки в спектральной области обладает тем преимуществом, что решение может быть построено на равномерной сетке независимо от количества и расположения частиц в группе, что позволяет использовать высокопроизводительные алгоритмы, такие как Быстрое преобразование Фурье (БПФ). Кроме того, рассеянное поле в дальней зоне непосредственно вычисляется через полученное в спектральной области решение интегрального уравнения. С помощью построенной математической модели проведен анализ рассеивающих характеристик ряда структур различной геометрии. В частности, исследовано поведение диаграммы рассеяния в зависимости от поляризации падающей плоской волны, а также расстояния между объектами в структуре и показателя преломления частиц.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть плоская электромагнитная волна $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$ линейной поляризации $\mathbf{P}$ или $\mathbf{S}$, меняющаяся во времени по закону $\exp(i\omega t)$, падает под углом θ_0 относительно оси Oz на плоскую границу Ξ раздела воздух-подложка $D_0 - D_1$, как показано на рис. 1, а пара однородных частиц, занимающих области $D_{2,3}$, с гладкими границами $\partial D_{2,3}$, расположена на поверхности Ξ, совпадающей с плоскостью Oxy, при этом расстояние между их центрами равно d. Полагая, что $\{\mathbf{E}_m, \mathbf{H}_m\}$ - полное и $\{\mathbf{E}_m^s, \mathbf{H}_m^s\}$ - рассеянное поля в соответствующих областях D_m, $m = \overline{0,3}$, с диэлектрическими проницаемостями ε_m, волновое число $k = \omega / c$, а $\mathbf{n}_{2,3}$ - нормали к поверхностям $\partial D_{2,3}$,

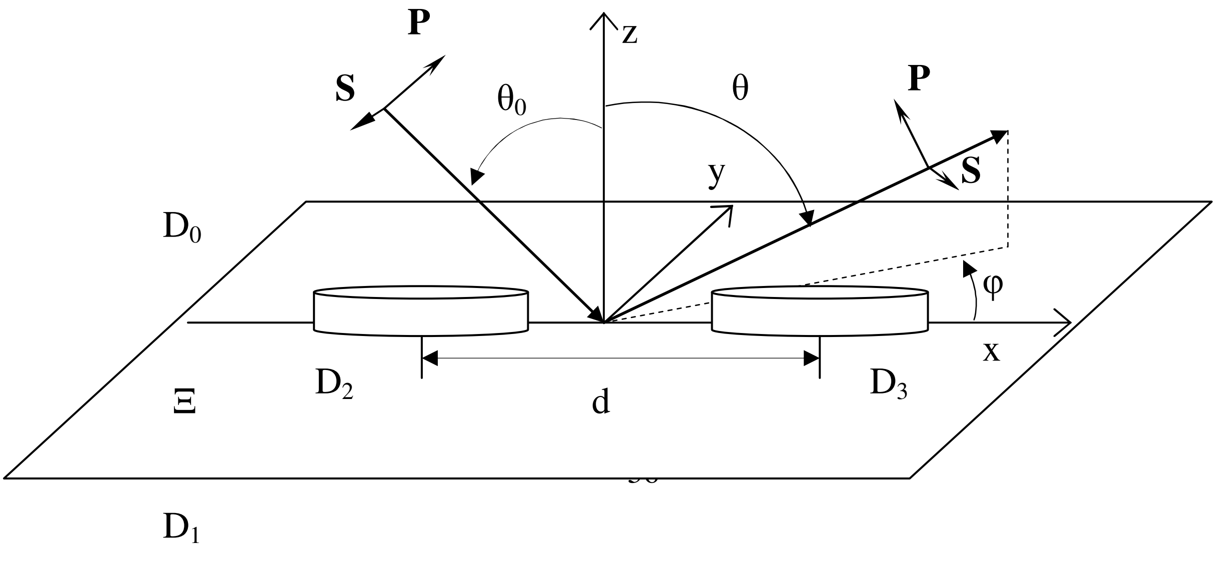

Рис. 1. Геометрия задачи.

сформулируем математическую постановку задачи рассеяния следующим образом:

$$rot\,\mathbf{H}_m = ik\varepsilon_m \mathbf{E}_m, \quad rot\,\mathbf{E}_m = -ik\mathbf{H}_m \ \text{ в } D_m, \ m=\overline{0,3}, \tag{1.1}$$

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{n}_{2,3}(P)\times\left(\mathbf{E}_{2,3}(P)-\mathbf{E}_0(P)\right)=0, \\ &\mathbf{n}_{2,3}(P)\times\left(\mathbf{H}_{2,3}(P)-\mathbf{H}_0(P)\right)=0, \end{aligned}\right. \quad P\in\partial D_{2,3},$$

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{e}_z\times\left(\mathbf{E}_0(P)-\mathbf{E}_1(P)\right)=0, \\ &\mathbf{e}_z\times\left(\mathbf{H}_0(P)-\mathbf{H}_1(P)\right)=0, \end{aligned}\right. \quad P\in\Xi,$$

$$\lim_{R\to\infty} R\cdot\left(\frac{\mathbf{R}}{R}\times\sqrt{\varepsilon_0}\mathbf{E}_0^s-\sqrt{\mu_0}\mathbf{H}_0^s\right)=0, \quad R=\left|M\left(x,y,z\right)\right|\to\infty, \ z>0,$$

$$(\left|\mathbf{E}_1^s\right|,\left|\mathbf{H}_1^s\right|\ ) = o\ (\exp\{-\left|\mathrm{Im}\,k\sqrt{\varepsilon_1}\right|R\}), \qquad z<0.$$

Учитывая, что рассеянное поле в D_m, $m=\overline{0,3}$ определяется как разность полного поля и поля плоской волны

$$\mathbf{E}_m^s = \mathbf{E}_m - \mathbf{E}_m^0, \ \mathbf{H}_m^s = \mathbf{H}_m - \mathbf{H}_m^0, \tag{1.2}$$

и освобождаясь от нижних индексов в обозначениях падающего, рассеянного и полного полей во всем верхнем полупространстве:

$$\mathbf{E}^0 \equiv \mathbf{E}_0^0, \ \mathbf{H}^0 \equiv \mathbf{H}_0^0,$$

$$\mathbf{E}^s,\mathbf{E}(P)\equiv\begin{cases}\mathbf{E}_0^s,\mathbf{E}_0(P) & P\in D_0\\ \mathbf{E}_2^s,\mathbf{E}_2(P) & P\in D_2\\ \mathbf{E}_3^s,\mathbf{E}_3(P) & P\in D_3\end{cases}, \quad \mathbf{H}^s,\mathbf{H}(P)\equiv\begin{cases}\mathbf{H}_0^s,\mathbf{H}_0(P) & P\in D_0\\ \mathbf{H}_2^s,\mathbf{H}_2(P) & P\in D_2\\ \mathbf{H}_3^s,\mathbf{H}_3(P) & P\in D_3\end{cases},$$

из (1.1) получим систему:

$$\begin{cases} rot\,\mathbf{E}^{s} = -ik\mathbf{H}^{s} \\ rot\,\mathbf{H}^{s} = ik\varepsilon_0\mathbf{E}^{s} + \mathbf{I}^{E} \end{cases} \tag{1.3}$$

где ток $\mathbf{I}^{E} = ik(\varepsilon - \varepsilon_0)\mathbf{E}$ (1.4)

принимает ненулевые значения в точках $P \in D = D_2 \cup D_3$, а функция диэлектрической проницаемости $\varepsilon(P) = \varepsilon_m$, $P \in D_m$.

Решение (1.3) будем искать с помощью тензора Грина полупространства [1], который используется для представления векторного потенциала тока $\mathbf{j}$ в области D в виде

$$\mathbf{A}(M) = \int_D \mathbf{G}(M,P)\mathbf{j}(P)d\mathrm{v}_P, \tag{1.5}$$

где $\mathbf{G}(M,P)$ имеет структуру

$$\mathbf{G}(M,P) = \begin{bmatrix} G_{11} & 0 & 0 \\ 0 & G_{11} & 0 \\ \partial G_{31}/\partial x_M & \partial G_{31}/\partial y_M & G_{33} \end{bmatrix}, \tag{1.6}$$

а компоненты представимы в виде

$$G_{nm}(M,P) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty J_0(\beta r)\, v_{nm}(\beta, z_M, z_P)\beta d\beta, \quad (n,m) = (1,1), (3,3), (3,1). \tag{1.7}$$

Здесь $r^2 = (x_M - x_P)^2 + (y_M - y_P)^2$, $J_0(.)$ – цилиндрическая функция Бесселя, (x_l, y_l, z_l), $l = M,P$ - декартовы координаты точек *M* и *P*. Для спектральных функций v_{nm} справедливы следующие представления:

$$v_{11}(\beta, z_M, z_P) = \zeta_{11}^{-}\exp\{-\eta_0|z_P - z_M|\} + \zeta_{11}^{+}\exp\{-\eta_0(z_P + z_M)\}$$

$$\zeta_{11}^{-}(\beta) = \frac{1}{2\eta_0} \quad \zeta_{11}^{+}(\beta) = \frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1}\frac{1}{2\eta_0}$$

$$v_{33}(\lambda, z_M, z_P) = \zeta_{33}^{-}\exp\{-\eta_0|z_P - z_M|\} + \zeta_{33}^{+}\exp\{-\eta_0(z_P + z_M)\}, \tag{1.8}$$

$$\zeta_{33}^{-}(\beta)=\frac{1}{2\eta_0}, \quad \zeta_{33}^{+}=\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\frac{1}{2\eta_0},$$

$$v_{31}(\lambda,z_M,z_P)=\zeta_{31}^{+}\exp\{-\eta_0(z_P+z_M)\}, \; \zeta_{31}^{+}=\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_0}{(\eta_0+\eta_1)(\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1)}, \;\; z_M,z_P>0,$$

где $\eta_n^2=\beta^2-k_n^2$, $k_n^2=k^2\varepsilon_n$, $n=0{,}1$. Спектральные функции обеспечивают выполнение условий сопряжения на границе $z=0$ [1].

Рассеянное поле $\mathbf{E}^s$ в верхнем полупространстве может быть представлено через векторный потенциал $\mathbf{A}$ в виде:

$$\mathbf{E}^s=\frac{1}{ik}(k^2+grad(\frac{1}{\varepsilon_0}div))\mathbf{A}. \tag{1.9}$$

Подставляя (1.4), (1.6) в (1.5) и далее в (1.9), получим следующее уравнение относительно полного поля $\mathbf{E}$ для точек $M\in D$:

$$\mathbf{E}(M)=\mathbf{E}^0(M)+(k^2+grad_M\left(\frac{1}{\varepsilon_0}\right)div_M)\int_D \mathbf{G}(M,P)(\varepsilon-\varepsilon_0)\mathbf{E}(P)\mathbf{d}\mathrm{v}_P. \tag{1.10}$$

Используя обозначения, принятые в [5] для плотности объемных токов $\mathbf{J}=(\varepsilon-\varepsilon_0)\mathbf{E}$ и $\mathbf{J}^0=(\varepsilon-\varepsilon_0)\mathbf{E}^0$, перепишем уравнение в виде

$$\mathbf{J}(M)=\mathbf{J}^0(M)+(\varepsilon-\varepsilon_0)(k^2+grad_M\left(\frac{1}{\varepsilon_0}\right)div_M)\int_D \mathbf{G}(M,P)\mathbf{J}(P)\mathbf{d}\mathrm{v}_P, \tag{1.11}$$

Следует отметить, что интегральное уравнение (1.11) остается справедливым и для структур, насчитывающих произвольное количество N-1 частиц, когда область $D=\bigcup_{n=2}^{N}D_n$ состоит из соответствующего числа подобластей. Входящее в (1.11) поле плоской волны $(\mathbf{E}^0,\mathbf{H}^0)$ вычисляется аналитически, как это сделано, например, в [5]. Уравнение (1.11) будет использоваться в качестве основы для построения предлагаемого метода, который будет описан в следующих разделах.

2. ВЫВОД СООТНОШЕНИЙ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

Пусть область $D = D_2 \cup D_3$ состоит из двух непересекающихся подобластей, как это показано на рис.1 . Кроме того, предположим для удобства изложения, что однородные частицы $D_{2,3}$ имеют одинаковые размеры и форму вида $D_n = S_n \times [z_{\min}, z_{\min} + h]$, $n = 2,3$, где S_n - площадь основания, $z_{\min}$ - возвышение над подложкой, а постоянная высота достаточно мала по сравнению с длиной волны падающего излучения $h \ll \lambda$. Следуя методике [5], построим вычислительный алгоритм в несколько этапов. Сначала аппроксимируем интегралы по z в (1.11), чтобы существенно упростить уравнение, снизив его размерность. Затем, пользуясь преобразованием Фурье по переменным (x, y), получим из (1.11) уравнение типа свертки в спектральной области. Наконец, применим итерационный метод решения уравнения, используя известные быстрые алгоритмы вычисления сверток.

Вводя операторы прямого и обратного преобразования Фурье

$$\mathcal{F}(g)(k_x, k_y) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} g(x, y) \exp(ik_x x + ik_y y) dx\, dy, \tag{2.1}$$

$$\mathcal{F}^{-1}(q)(x, y) = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} q(k_x, k_y) \exp(-ik_x x - ik_y y) dk_x\, dk_y, \tag{2.2}$$

и используя связь между преобразованиями Фурье и Фурье-Бесселя, представим компоненты тензора Грина (1.7) со спектральным параметром $\beta = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ в виде

$$G_{nm}(M, P) = \mathcal{F}^{-1}(v_{nm})(x_M - x_P, y_M - y_P) = \tag{2.3}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} v_{nm}(\beta, z_M, z_P) \exp\left(-ik_x(x_M - x_P) - ik_y(y_M - y_P)\right) dk_x dk_y .$$

Из (1.8) следует, что интегрирование спектральных функций $v_{nm}(\beta, z_M, z_P)$ по переменным z_M, z_P приводит к вычислениям интегралов

$$\Upsilon^-(f)(z_M) = \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \exp\left(-\eta_0 |z_P - z_M|\right) f(z_p) dz_P \tag{2.4}$$

$$\text{и} \quad \Upsilon^{+}(f)(z_M)=\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \exp\left(-\eta_0\left(z_P+z_M\right)\right) f(z_p)\,dz_P \,. \qquad (2.5)$$

Из соотношений (2.4), (2.5) становится очевидной целесообразность предположения об одинаковой форме частиц, так как совпадающие возвышение $z_{\min}$ и высота h делают последующие вычисления более наглядными. Кроме того, при изучении рассеивающих свойств больших кластеров частиц подобные предположения встречаются весьма часто [6,7].

Благодаря малой толщине h области D, можем аппроксимировать эти интегралы и их производные средними значениями следующего вида:

$$\frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}\Upsilon^{-}(f)(z_M)\simeq \Psi^{-(n)} f_{av}\,,\quad \frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}\Upsilon^{+}(f)(z_M)\simeq \Psi^{+(n)} f_{av}\,,\quad n=0,1,2\,, \qquad (2.6a)$$

где приняты обозначения:

$$\Psi^{-(n)}=\frac{1}{h}\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h}\frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h}\exp\left(-\eta_0\left|z_P-z_M\right|\right)dz_P dz_M\,, \qquad (2.6b)$$

$$\Psi^{+(n)}=\frac{1}{h}\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h}\frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h}\exp\left(-\eta_0\left(z_P+z_M\right)\right)dz_P dz_M\,, \qquad (2.6c)$$

$$f_{av}=\frac{1}{h}\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} f(z_p)\,dz_p\,. \qquad (2.6d)$$

Величины $\Psi^{\pm(n)}$ вычисляются аналитически:

$$\Psi^{-(0)}=\frac{2}{\eta_0}\left(1-\frac{\left(1-\exp(-\eta_0 h)\right)}{\eta_0 h}\right);\ \ \Psi^{-(1)}=0\,;\ \Psi^{-(2)}=-\frac{2\left(1-\exp(-\eta_0 h)\right)}{h}; \qquad (2.7a)$$

$$\Psi^{+(0)}=\exp\left(-2\eta_0 z_{\min}\right)\frac{\left(1-\exp(-\eta_0 h)\right)^2}{{\eta_0}^2 h},\Psi^{+(1)}=-\eta_0\Psi^{+(0)},\Psi^{+(2)}=-\eta_0\Psi^{+(1)}. \qquad (2.7b)$$

Полученные приближенные значения интегралов и их производных будем использовать при расчете тензора

$$\mathbf{G}^1(M,P)=(k^2+grad_M\left(\frac{1}{\varepsilon_0}\right)div_M)\mathbf{G}(M,P)\ ,\qquad(2.8)$$

который в явном виде выглядит следующим образом:

$$\mathbf{G}^1=\begin{pmatrix} k^2G_{11}+\frac{1}{\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2G_{11}}{\partial x_M^2}+\frac{\partial^3G_{31}}{\partial x_M^2\partial z_M}\right) & \frac{1}{\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2G_{11}}{\partial x_M\partial y_M}+\frac{\partial^3G_{31}}{\partial x_M\partial y_M\partial z_M}\right) & \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{\partial^2G_{33}}{\partial x_M\partial z_M} \\ \frac{1}{\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2G_{11}}{\partial x_M\partial y_M}+\frac{\partial^3G_{31}}{\partial x_M\partial y_M\partial z_M}\right) & k^2G_{11}+\frac{1}{\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2G_{11}}{\partial y_M^2}+\frac{\partial^3G_{31}}{\partial y_M^2\partial z_M}\right) & \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{\partial^2G_{33}}{\partial y_M\partial z_M} \\ k^2\frac{\partial G_{31}}{\partial x_M}+\frac{1}{\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2G_{11}}{\partial x_M\partial z_M}+\frac{\partial^3G_{31}}{\partial x_M\partial z_M^2}\right) & k^2\frac{\partial G_{31}}{\partial y_M}+\frac{1}{\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2G_{11}}{\partial y_M\partial z_M}+\frac{\partial^3G_{31}}{\partial y_M\partial z_M^2}\right) & k^2G_{33}+\frac{1}{\varepsilon_0}\frac{\partial^2G_{33}}{\partial z_M^2} \end{pmatrix}$$

Подставляя (2.3), (2.8) в (1.11) и дифференцируя по переменным (x_M, y_M, z_M) с учетом (2.6), (2.7), получим двумерное уравнение в переменных (k_x, k_y) относительно Фурье-образа усредненной по z в соответствии с (2.6d) искомой плотности тока

$$\mathcal{F}(\mathbf{J}_{av})=\mathcal{F}\left((\varepsilon-\varepsilon_0)\mathbf{T}\mathcal{F}(\mathbf{J}_{av})\right)+\mathbf{R}\qquad(2.9)$$

с правой частью $\quad \mathbf{R}=\mathcal{F}\left(\mathbf{J}_{av}^0\right).\qquad(2.10)$

Матрица $\mathbf{T}$ имеет компоненты

$$T_{11}=\left(k^2-\frac{k_x^2}{\varepsilon_0}\right)\left(\zeta_{11}^-\Psi^{-(0)}+\zeta_{11}^+\Psi^{+(0)}\right)-\frac{k_x^2\zeta_{31}^+\Psi^{+(1)}}{\varepsilon_0},$$

$$T_{12}=-\frac{k_xk_y}{\varepsilon_0}\left(\zeta_{11}^-\Psi^{-(0)}+\zeta_{11}^+\Psi^{+(0)}\right)-\frac{k_xk_y\zeta_{31}^+\Psi^{+(1)}}{\varepsilon_0},\ \ T_{21}=T_{12},$$

$$T_{13}=-\frac{ik_x\zeta_{33}^+\Psi^{+(1)}}{\varepsilon_0},\quad T_{22}=\left(k^2-\frac{k_y^2}{\varepsilon_0}\right)\left(\zeta_{11}^-\Psi^{-(0)}+\zeta_{11}^+\Psi^{+(0)}\right)-\frac{k_y^2\zeta_{31}^+\Psi^{+(1)}}{\varepsilon_0},\quad(2.11)$$

$$T_{23}=-\frac{ik_y\zeta_{33}^+\Psi^{+(1)}}{\varepsilon_0},\ \ T_{31}=-ik^2k_x\zeta_{31}^+\Psi^{+(0)}-\frac{ik_x}{\varepsilon_0}\left(\zeta_{11}^+\Psi^{+(1)}+\zeta_{31}^+\Psi^{+(2)}\right),$$

$$T_{32} = -ik^2 k_y \zeta_{31}^{+} \Psi^{+(0)} - \frac{ik_y}{\varepsilon_0}\left(\zeta_{11}^{+}\Psi^{+(1)} + \zeta_{31}^{+}\Psi^{+(2)}\right)$$

$$T_{33} = k^2\left(\zeta_{33}^{-}\Psi^{-(0)} + \zeta_{33}^{+}\Psi^{+(0)}\right) + \frac{\left(\zeta_{33}^{-}\Psi^{-(2)} + \zeta_{33}^{+}\Psi^{+(2)}\right)}{\varepsilon_0}.$$

Заметим, что в уравнении (2.9) при рассмотрении одинаковых частиц с $\varepsilon = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = const$ диэлектрический контраст $(\varepsilon - \varepsilon_0)$ как постоянный множитель может быть вынесен за знак интеграла и понадобится лишь вычислить свертку подынтегрального выражения, содержащего искомое решение, с образом площади $S = S_2 \cup S_3$ неоднородности. В свою очередь, при условии сдвиговой эквивалентности оснований $S_n(x, y) = S_{ref}(x - x_n, y - y_n)$, $n = 2,3$, Фурье образ площади $S(x, y)$ вычисляется как

$$\mathcal{F}(S) = \mathcal{F}(S_{ref})\sum_{n=2}^{3}\exp\left(ik_x x_n + ik_y y_n\right).$$

Таким образом, при рассмотрении группы одинаковых частиц, отличающихся лишь смещением относительно начала координат, уравнение (2.9) изменяется незначительно по сравнению со случаем одиночной частицы, сохраняя возможность построения равномерной сетки в прямоугольнике $\Pi = [-\mathcal{K}_x/2, \mathcal{K}_x/2] \times [-\mathcal{K}_y/2, \mathcal{K}_y/2]$ таком, что $\mathcal{F}(S_{ref})(\pm\mathcal{K}_x/2, k_y) \ll 1$ и $\mathcal{F}(S_{ref})(k_x, \pm\mathcal{K}_y/2) \ll 1$. Следовательно, можно построить эффективную численную схему на базе быстрых алгоритмов вычисления сверток и решать систему (2.9) с помощью итерационных методов, например, метода минимальных невязок (GMRES).

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ДИАГРАММЫ РАССЕЯНИЯ

По аналогии с [5] покажем, что как и в случае одиночных рассеивателей, по найденному решению системы (2.9) можно легко вычислить характеристики поля группы частиц в дальней зоне. Для этого рассмотрим выражение для тензора Грина (2.8) в сферических координатах $M(R,\theta,\varphi)$ при $R \to \infty$:

$$\mathbf{G}^{1,far} = \frac{\exp(-ik_0R)}{R}\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\frac{ik_0\cos\theta}{2\pi}\exp(ik_0\sin\theta(x_P\cos\varphi + y_P\sin\varphi)), \qquad (3.1)$$

где соответствующие компоненты тензора $\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}$ записываются в виде:

$$\tilde{G}_{11}^{1,far} = k^2\left[\left(1-\cos^2\varphi\sin^2\theta\right)v_{11}^{far} + v_{31}^{far}ik_0\cos\theta\cos^2\varphi\sin^2\theta\right],$$

$$\tilde{G}_{12}^{1,far} = k^2\cos\varphi\sin\varphi\sin^2\theta\left[-v_{11}^{far} + v_{31}^{far}ik_0\cos\theta\right],\ \tilde{G}_{21}^{1,far} = \tilde{G}_{12}^{1,far},$$

$$\tilde{G}_{13}^{1,far} = -k^2v_{33}^{far}\cos\varphi\cos\theta\sin\theta,$$

$$\tilde{G}_{22}^{1,far} = k^2\left[\left(1-\sin^2\varphi\sin^2\theta\right)v_{11}^{far} + v_{31}^{far}ik_0\cos\theta\sin^2\varphi\sin^2\theta\right],$$

$$\tilde{G}_{23}^{1,far} = -k^2v_{33}^{far}\sin\varphi\cos\theta\sin\theta,$$

$$\tilde{G}_{31}^{1,far} = -k^2\cos\varphi\sin\theta\left[v_{11}^{far}\cos\theta + v_{31}^{far}ik_0\sin^2\theta\right],$$

$$\tilde{G}_{32}^{1,far} = -k^2\sin\varphi\sin\theta\left[v_{11}^{far}\cos\theta + v_{31}^{far}ik_0\sin^2\theta\right],\ \tilde{G}_{33}^{1,far} = k^2v_{33}^{far}\sin^2\theta.$$

а спектральные функции (1.8) принимают форму

$$v_{11}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) = \zeta_{11}^{-}\left(k_0\sin\theta\right)\exp\left(ik_0\ z_P\cos\theta\right) + \zeta_{11}^{+}\left(k_0\sin\theta\right)\exp\left(-ik_0z_P\cos\theta\ \right)$$

$$v_{33}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) = \zeta_{33}^{-}\left(k_0\sin\theta\right)\exp\left(ik_0\ z_P\cos\theta\right) + \zeta_{33}^{+}\left(k_0\sin\theta\right)\exp\left(-ik_0z_P\cos\theta\ \right)$$

$$v_{31}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) = \zeta_{31}^{+}\left(k_0\sin\theta\right)\exp\left(-ik_0z_P\cos\theta\ \right). \qquad (3.2)$$

Рассеянное поле в дальней зоне вычисляется из (1.10) как интеграл

$$\mathbf{E}^{s,far}\left(M\right) = \int_D \mathbf{G}^{1,far}\left(M,P\right)\mathbf{J}\left(P\right)\mathbf{d}v_P, \qquad (3.3)$$

а для диаграммы направленности $\mathbf{F}\left(\theta,\varphi\right)$, определяемой как

$$\mathbf{E}^{s,far} = \frac{\exp(-ik_0R)}{R}\mathbf{F}\left(\theta,\varphi\right), \qquad (3.4)$$

имеем

$$\mathbf{F} = \frac{ik_0\cos\theta}{2\pi}\int_D \tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\left(\theta,\varphi,z_p\right)\exp(ik_0\sin\theta(x_P\cos\varphi + y_P\sin\varphi))\mathbf{J}\left(P\right)\mathbf{d}\mathrm{v}_P \qquad (3.5)$$

или, принимая во внимание аппроксимацию (2.6d) и найденное в спектральной области решение уравнения (2.9) $\mathcal{F}\left(\mathbf{J}_{av}\right)$

$$\mathbf{F}=\frac{ik_0\cos\theta}{2\pi}\int\limits_{z_{\min}}^{z_{\min}+h}\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\left(\theta,\varphi,z_p\right)\mathcal{F}\left(\mathbf{J}_{av}\right)\left(\left(k_0\sin\theta\ \cos\varphi,k_0\sin\theta\ \sin\varphi\right)\right)dz_P \quad (3.6)$$

Таким образом, в выражении для диаграммы рассеяния (3.6) не требуется переход в пространственную область. Это обстоятельство является одним из преимуществ рассматриваемого подхода. Интеграл по переменной z в (3.6) вычисляется аналитически с учетом поляризации падающей плоской волны. С помощью (3.6) могут быть вычислены все необходимые характеристики рассеяния рассматриваемых структур плоских частиц.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Представленная модель объемного интегрального уравнения в спектральной области была использована для анализа групп дефектов кремниевых подложек, имеющих форму плоских дисков малой высоты h и радиусом основания a и получающихся с помощью операции сдвига по $\left(x,y\right)$ опорного цилиндра $D_{ref}=\left\{(x,y,z):x^2+y^2\le a^2;\ z_{\min}\le z\le z_{\min}+h\right\}$, имеющего радиус a = 50нм и высоту h = 10нм. Всюду далее будем полагать, что частица расположена на кремниевой (Si) подложке с показателем преломления $n=1.85-4.43i$, а длина волны падающего излучения λ = 266 нм. Расчеты проводились для *P*- и *S*- поляризованной плоской волны, угол падения которой составляет $\theta_0=70^{\mathbf{0}}$.

На рис.2,3 приведены результаты расчетов интенсивности рассеянного поля в плоскости падения (плоскость *Ozx*) в зависимости от угла рассеяния θ при дифракции соответственно *P*- и *S*- поляризованной плоской волны на паре частиц полистирола латекса (PSL) (показатель преломления $n=1.59-0.0i$), расположенных вдоль оси *Ox* с расстоянием между их центрами d = 100нм - кривая 1, d = 200нм – кривая 2 и d = 400нм – кривая 3. Из рис.2,3 видно, что в направлении зеркально отраженного луча кривые почти совпадают, что объясняется эквиобъемностью рассеивающих структур. В других направлениях кривые существенно отличаются, в частности, при увеличении зазора между частицами появляется больше осцилляций на графиках.

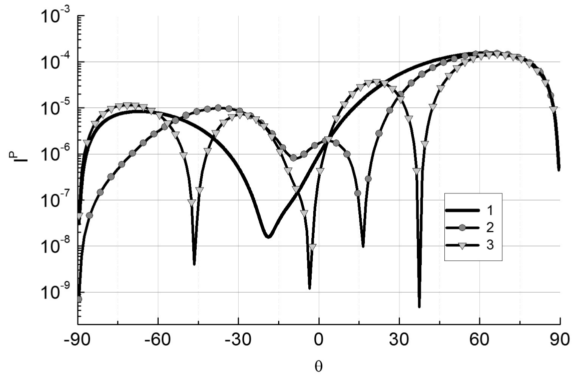

Рис. 2

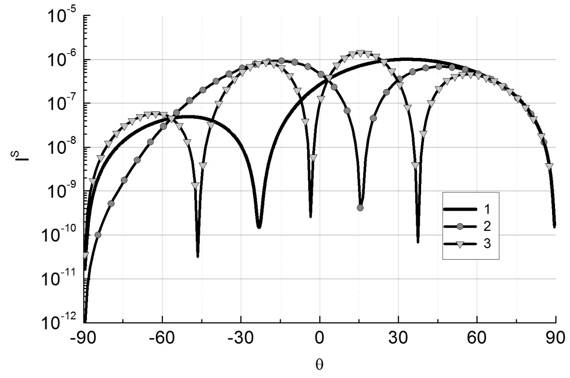

Рис. 3

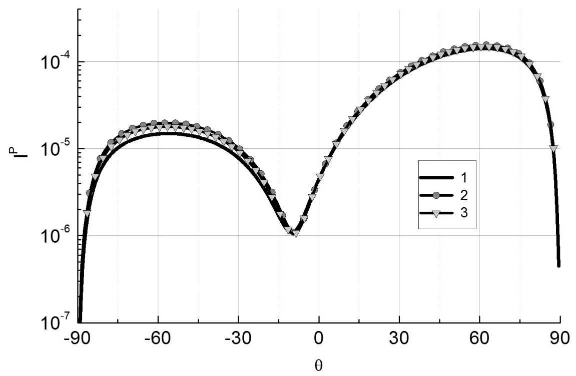

Рис. 4

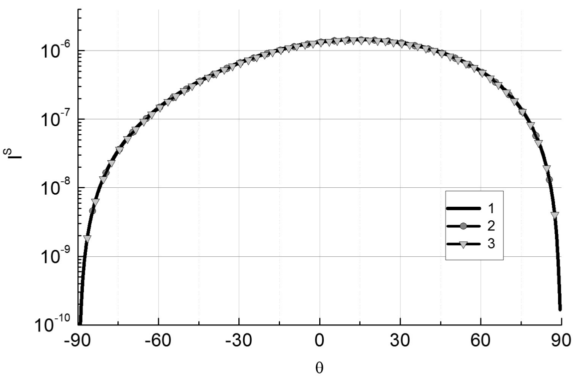

Рис. 5

На рис.4,5 показаны аналогичные кривые интенсивности рассеянного поля в плоскости падения (плоскость Ozx) при дифракции соответственно P- и S- поляризованной плоской волны на паре частиц PSL, расположенных вдоль оси Oy с промежутком между их центрами $d = 100$нм - кривая 1, $d = 200$нм – кривая 2 и $d = 400$нм – кривая 3. Графики демонстрируют хорошее совпадение, что свидетельствует о слабой чувствительности диаграммы рассеяния, рассматриваемой в плоскости падения, к изменению геометрии рассеивающей структуры в перпендикулярном направлении. Одинаковый объем рассеивателей в данном случае приводит к почти полному совпадению кривых.

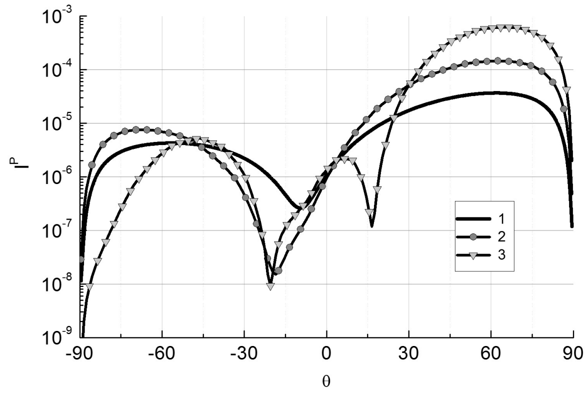

Рис. 6

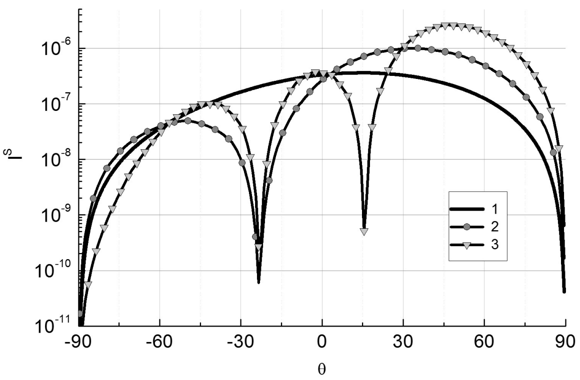

Рис. 7

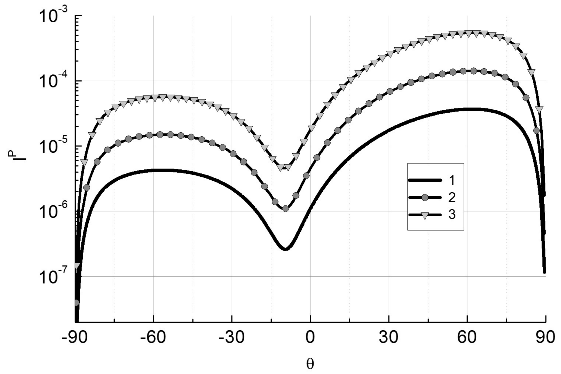

Рис. 8

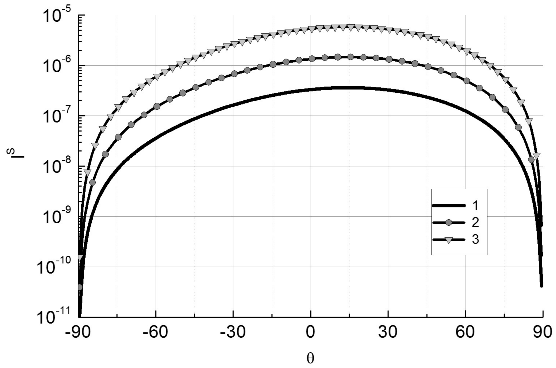

Рис. 9

Рис.6,7 демонстрируют зависимость диаграммы рассеянного поля от количества частиц в группе. Рисунки соответствуют *P*- и *S*-поляризованным волнам, падающим на группу PSL частиц, расположенную вдоль оси *Ox* и состоящую из одной - кривая 1, двух - кривая 2 и четырех частиц - кривая 3. В данном случае частицы вплотную примыкают друг к другу, т.е. расстояние между центрами $d = 100$нм. Можно заметить, что интенсивность в направлении зеркально отраженного луча растет при увеличении количества частиц, что объясняется соответствующим увеличением суммарного объема рассеивающей структуры. Изменение же геометрии структуры с добавлением новых частиц приводит к появлению дополнительных осцилляций в диаграмме.

Рис.8,9 соответствуют *P*- и *S*-поляризованным волнам, рассеянных на группе PSL частиц, расположенную вдоль оси *Oy* и состоящую из одной - кривая 1, двух - кривая 2 и четырех частиц - кривая 3. Расстояние между центрами частиц $d = 100$нм. Характер рассеяния в плоскости падения практически одинаков для всех групп, что подтверждает независимость диаграммы рассеяния в плоскости Ozx от изменения геометрии группы частиц в перпендикулярной плоскости Oy. Увеличение интенсивности рассеяния обусловлено лишь изменением суммарного объема группы.

На рисунках 10,11 представлены результаты моделирования для пары титановых (Ti) частиц ($n = 1.18 - 1.26i$) тех же размеров и ориентации, что и на рис.2,3. Наблюдается примерно такая же картина рассеяния, что и в случае PSL частиц – кривые очень близки в направлении зеркального отражения, так как количество частиц и, следовательно, общий объем не меняется. В других направлениях проявляются существенные различия, вызванные увеличением расстояния между частицами и, как следствие, общего размера группы, из-за чего появляется больше осцилляций на графиках.

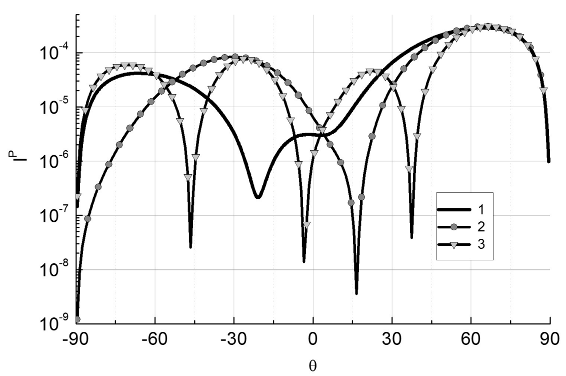

Рис. 10

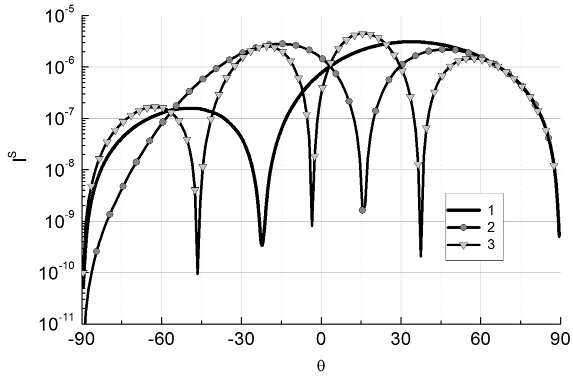

Рис. 11

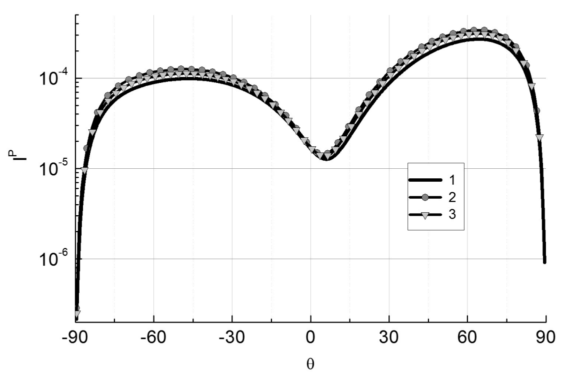

Рис. 12

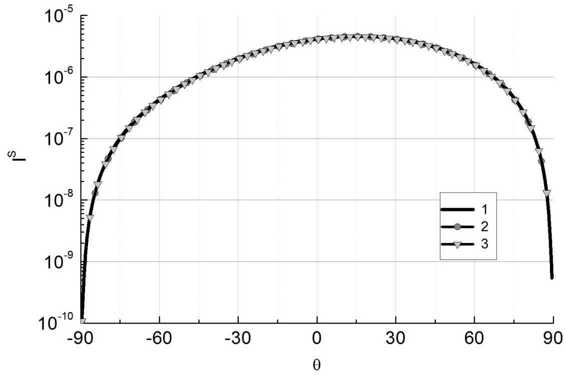

Рис. 13

На рис.12,13 показаны кривые интенсивности рассеянного поля в плоскости падения (плоскость Ozx) при дифракции на паре титановых частиц, расположенных вдоль оси Oy и имеющих размеры и ориентацию, соответствующих рис. 4,5. Графики вновь демонстрируют хорошее совпадение, так как объем рассеивающей группы не меняется. Увеличение же размеров группы в направлении оси *Oy* не оказывает влияния на картину рассеяния в плоскости *Ozx*.

Рис.14,15 демонстрируют влияние количества титановых частиц в группе, ориентированной вдоль оси *Ox* и аналогичной группе PSL (рис.6,7), на диаграмму рассеяния. В случае как *P*-, так и *S*-поляризованной волны интенсивность в направлении зеркально отраженного луча растет при увеличении количества (общего объема) частиц. Увеличение размеров структуры с добавлением новых частиц усиливает осциллирующий характер диаграммы рассеяния.

Совершенно иначе ведут себя группы титановых частиц, ориентированных вдоль оси *Oy* (Рис.16,17). Как и на рис.8,9, рост интенсивности рассеяния объясняется лишь увеличением объема рассеивающей группы. В остальных отношениях картина рассеяния оказывается нечувствительной к изменениям геометрии группы в перпендикулярном направлении.

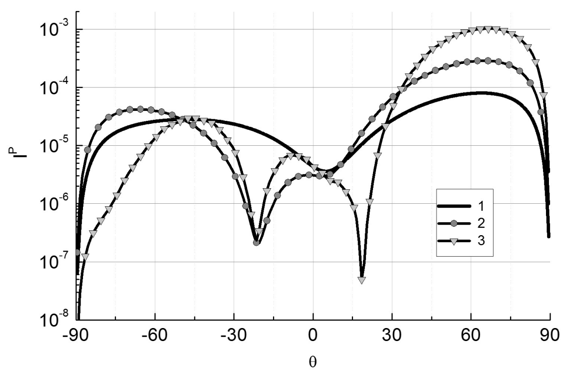

Рис. 14

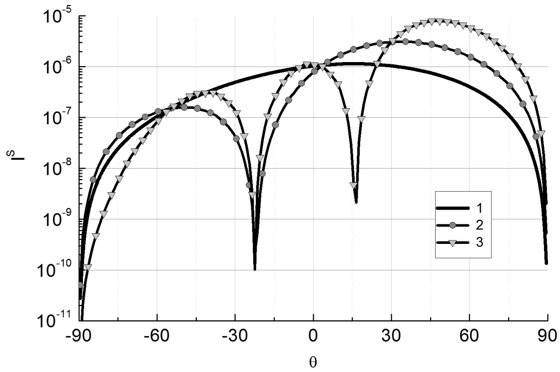

Рис. 15

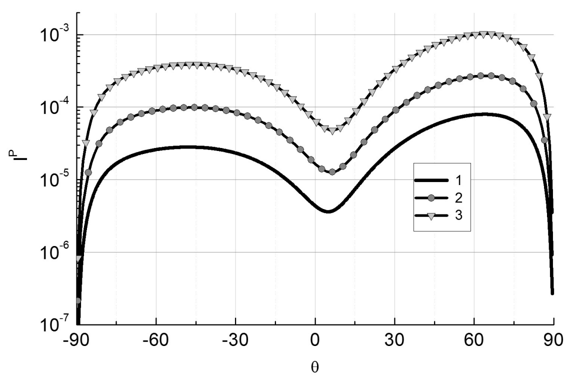

Рис. 16

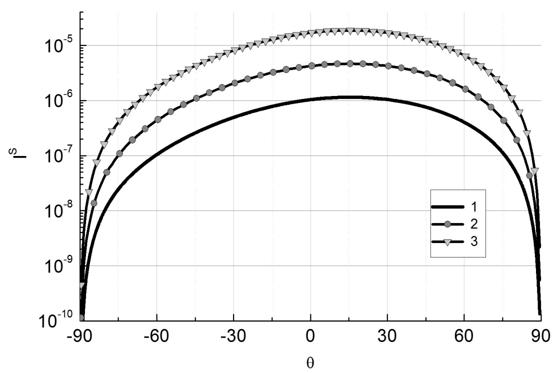

Рис. 17

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод интегральных уравнений в спектральной области обобщен на случай групп плоских рассеивателей малой толщины, имеющих форму сплюснутых цилиндров и расположенных вблизи или на поверхности подложки. Разработанная численная схема метода апробирована при расчетах характеристик рассеяния ряда групп, состоящих из одинаковых частиц. Результаты численных экспериментов свидетельствуют о высокой эффективности предложенного подхода применительно к плоским рассеивателям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дмитриев В.И., Захаров Е.В. Метод интегральных уравнений в вычислительной электродинамике. //М.: Макс пресс, 2008.
2. Koh I.-S., Sarabandi K. A new approximate solution for scattering by thin dielectric disks of arbitrary size and shape. //IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 2005, Vol.**53**, N6, pp.1920–1926.
3. Balaban M.V. Dual integral equations technique in electromagnetic wave scattering by a thin disk. //Progress In Electromagnetics Research B. 2009, Vol.**16**, pp.107-126.
4. Eremin Yu.A., Lopushenko V.V. Method of integral equations in the spectral domain for the analysis of plane defects of a substrate //Differential Equations. 2014, Vol.**50**, N9. pp.1173-1181.
5. Лопушенко В.В. Анализ плоских цилиндрических дефектов подложки методом интегральных уравнений в спектральной области //Прикладная математика и информатика. 2015, том **48**, с.56-75.
6. Баженов А.В., Горбунов А.В., Алдушин К.А., Масалов В.М., Емельченко Г.А. Оптические свойства тонких пленок из плотноупакованных SiO2-сфер //Физика твердого тела. 2002, том **44**, вып.6, с.1026-1031.
7. Wurm G., Relke H., Dorschner J., Krauss O. Light scattering experiments with micron-sized dust aggregates: results on ensembles of SiO2 monospheres and of irregularly shaped graphite particles //Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2004, Vol.**89**, pp.371–384