### В.В.Лопушенко

# АНАЛИЗ ПЛОСКИХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ ПОДЛОЖКИ МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

### **ВВЕДЕНИЕ**

Интенсивное развитие технологий производства и совершенствования интегральных схем, процессоров, дисковых накопителей, солнечных батарей обусловливает необходимость разработки эффективных математических методов исследования подобных устройств. Огромное значение в производстве миниатюрных электронных компонентов имеет строгая чистота поверхностей, которые служат основой их производства. В частности, весьма важно иметь инструменты, способные обнаруживать малозаметные дефекты подложек в виде пологих бугорков малой высоты. Показатель преломления и горизонтальные размеры подобных дефектов могут меняться в широком диапазоне. Настройка оптических сканеров с целью обнаружения и идентификации подобных дефектов требует тщательного математического моделирования и изучения их рассеивающих свойств [1].

В настоящей работе предложена новая модификация метода объемных интегральных уравнений в спектральной области, построенного в [2] для поверхностных дефектов малой толщины. Реализована возможность моделирования объектов в форме эллиптических цилиндров, расположенных как непосредственно на подложке, так и на некотором расстоянии от нее. Метод строится на основе тензора Грина полупространства [3] с последующим переходом в спектральную область. Важной особенностью рассматриваемого подхода является прямое вычисление рассеянного поля в дальней зоне через спектральные образы объемных токов внутри рассеивателя. К достоинствам рассматриваемого подхода следует отнести его высокую производительность, обусловленную применением быстрых алгоритмов дискретного преобразования Фурье и вычисления сверток. С помощью построенного метода проведен анализ рассеивающих характеристик ряда дефектов различной формы. В частности, исследовано поведение диаграммы рассеяния в зависимости от поляризации падающей плоской волны, а также вытянутости объекта, его показателя преломления и возвышения над подложкой.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ НА ОСНОВЕ ОБЪЕМНОГО ИНТЕ-ГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Пусть  $\{ \mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0 \}$  — поле плоской электромагнитной волны линейной поляризации, падающей под углом  $\theta_0$  относительно нормали на плоскую границу  $\Xi$  раздела воздух-подложка  $D_0$  —  $D_1$ , а однородная частица, занимающая область  $D_i$  с гладкой границей  $\partial D$ , расположена так, что лежит на подложке  $D_1$ . Введем прямоугольную систему координат таким образом, чтобы граница раздела  $\Xi$  совпала с плоскостью Oxy. Ось Oz направим в область  $D_0$ . Тогда математическая постановка задачи рассеяния принимает вид

$$rot \mathbf{H}_{t} = ik \varepsilon_{t} \mathbf{E}_{t}, \quad rot \mathbf{E}_{t} = -ik \mathbf{H}_{t} \quad \mathbf{B} \ D_{t}, \quad t = 0, 1, i,$$

$$(1.1)$$

$$\begin{split} & \mathbf{n}_p \times \left( \mathbf{E}_i(p) - \mathbf{E}_0(p) \right) = 0, \\ & \mathbf{n}_p \times \left( \mathbf{H}_i(p) - \mathbf{H}_0(p) \right) = 0, \\ & \mathbf{n}_p \times \left( \mathbf{H}_i(p) - \mathbf{H}_0(p) \right) = 0, \end{split} \qquad \begin{aligned} & \mathbf{e}_z \times \left( \mathbf{E}_0(p) - \mathbf{E}_1(p) \right) = 0, \\ & \mathbf{e}_z \times \left( \mathbf{H}_0(p) - \mathbf{H}_1(p) \right) = 0, \end{aligned} \qquad p \in \Xi \;, \end{split}$$

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

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

Здесь  $\times$  – векторное произведение,  $\{\mathbf{E}_t, \mathbf{H}_t\}$  - полное и  $\{\mathbf{E}_t^s, \mathbf{H}_t^s\}$  - рассеянное поля в соответствующих областях  $D_t$ ,  $k = \omega/c$ , а  $\mathbf{n}_p$  - нормаль к поверхности  $\partial D$ ,  $\varepsilon_t$  - диэлектрическая проницаемость среды в  $D_t$ . Полагаем поверхность частицы гельдеровой  $\partial D \subset C^{(1,\alpha)}$ . Тогда граничная задача (1.1) имеет единственное решение.

Представляя решение задачи отражения и преломления поля плоской волны на поверхности проницаемой подложки  $\Xi$  как  $\{\mathbf{E}^0,\mathbf{H}^0\}$  и учитывая, что в области  $D_0$  полное поле включает в себя падающую и зеркально отраженную от подложки плоские волны, определим рассеянное поле в  $D_0$ :

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

которое в верхнем полупространстве удовлетворяет системе:

$$\begin{cases}
\nabla \times \mathbf{E}^{s} = -ik\mathbf{H}^{s} \\
\nabla \times \mathbf{H}^{s} = ik\varepsilon_{0}\mathbf{E}^{s} + \mathbf{I}^{E}
\end{cases}$$
(1.3)

где ток 
$$\mathbf{I}^{\mathbf{E}} = ik(\boldsymbol{\varepsilon}_i - \boldsymbol{\varepsilon}_0)\mathbf{E}_0$$
 (1.4)

принимает ненулевые значения в точках  $P \in D_i$ . В основу представления для рассеянного частицей поля положим тензор Грина полупространства [3]. В этом случае векторный потенциал для тока  $\mathbf{j}$  с точностью до постоянного множителя выглядит как интеграл

$$\mathbf{A}(M) = \int_{D_i} \mathbf{G}(M, P)\mathbf{j}(P)dv_P$$
 (1.5)

с тензором Грина вида

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

Компоненты тензора представимы в виде

$$G_{nm}(M,P) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} J_{0}(\beta r) v_{nm}(\beta, z_{M}, z_{P}) \beta d\beta, \quad (n,m) = (1,1), (3,3), (3,1). \quad (1.7)$$

Здесь  $r^2 = (x_M - x_P)^2 + (y_M - y_P)^2$ ,  $J_0(.)$  — цилиндрическая функция Бесселя,  $(x_n, y_n, z_n)$ , n = M, P — декартовы координаты точек M и P. Для спектральных функций  $v_{nm}$  справедливы следующие представления:

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

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

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

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

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

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 [3].

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

$$\mathbf{E}(M) = \mathbf{E}^{0}(M) + (k^{2} + grad_{M}(\frac{1}{\varepsilon_{0}})div_{M}) \int_{D_{i}} \mathbf{G}(M, P)(\varepsilon_{i} - \varepsilon_{0}) \mathbf{E}(P) \mathbf{d}v_{P}. \quad (1.10)$$

Используя обозначения, принятые в [4] для плотности объемных токов  $\mathbf{J} = (\varepsilon_i - \varepsilon_0)\mathbf{E}$  и  $\mathbf{J}^0 = (\varepsilon_i - \varepsilon_0)\mathbf{E}^0$ , перепишем уравнение в виде

$$\mathbf{J}(M) = \mathbf{J}^{0}(M) + (\varepsilon_{i} - \varepsilon_{0})(k^{2} + grad_{M}\left(\frac{1}{\varepsilon_{0}}\right)div_{M}) \int_{D_{i}} \mathbf{G}(M, P)\mathbf{J}(P)\mathbf{d}v_{P}, \quad (1.11)$$

В уравнение (1.11) входит поле внешнего возбуждения в области  $D_0$ . Будем рассматривать поле Р-поляризованной плоской волны (вектор электрического поля  $\mathbf{E}^0$  лежит в плоскости падения волны Ozx), распространяющейся под углом  $\theta_0$  к оси Oz. Тогда поле внешнего возбуждения в верхнем полупространстве принимает вид

$$\mathbf{E}_0^0 = \mathbf{e}_x \cos \theta_0 (\chi^- - R_p \chi^+) + \mathbf{e}_z \sin \theta_0 (\chi^- + R_p \chi^+),$$

$$\chi^{-} = \exp\{-ik_0(x\sin\theta_0 - z\cos\theta_0)\}, \ \chi^{+} = \exp\{-ik_0(x\sin\theta_0 + z\cos\theta_0)\}, \ (1.12)$$
а коэффициент Френеля равен

$$R_{P} = \frac{\varepsilon_{1} \cos \theta_{0} - \varepsilon_{0} \sqrt{\varepsilon_{1} / \varepsilon_{0} - \sin^{2} \theta_{0}}}{\varepsilon_{1} \cos \theta_{0} + \varepsilon_{0} \sqrt{\varepsilon_{1} / \varepsilon_{0} - \sin^{2} \theta_{0}}}.$$

В случае S-поляризации падающей плоской волны, то есть когда вектор  ${\bf E}^0$  перпендикулярен плоскости падения, суммарное возбуждающее поле представляется в виде

$$\mathbf{E}_0^0 = -\mathbf{e}_{y} \left( \chi^- + R_{S} \chi^+ \right), \tag{1.13}$$

а коэффициент Френеля для S поляризации принимает вид [5]

$$R_{S} = \frac{\cos \theta_{0} - \sqrt{\varepsilon_{1} / \varepsilon_{0} - \sin^{2} \theta_{0}}}{\cos \theta_{0} + \sqrt{\varepsilon_{1} / \varepsilon_{0} - \sin^{2} \theta_{0}}}.$$

Принимая во внимание полученные соотношения, приступим к построению численного алгоритма решения уравнения (1.11).

## 2. ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

Аналогично методике [2], построим вычислительный алгоритм в несколько этапов. Прежде всего, предполагая, что рассматриваемая неоднородность имеет структуру вида  $D_i = S_i \times [z_{\min}, z_{\min} + h]$ , где  $S_i$  - площадь основания,  $z_{\min}$  - возвышение над подложкой, а постоянная высота h достаточно мала, аппроксимируем интегралы по z в (1.11), чтобы существенно упростить уравнение, снизив его размерность. Далее, пользуясь двумерным 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

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

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

и полагая  $\beta = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  , представим компоненты тензора Грина (1.7) в виде

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

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

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

$$I^{-}(f)(z_{M}) = \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \exp(-\eta_{0}|z_{P}-z_{M}|) f(z_{p}) dz_{P}$$
 (2.4)

$$\mathbf{H} \quad I^{+}(f)(z_{M}) = \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \exp(-\eta_{0}(z_{P} + z_{M})) f(z_{p}) dz_{P}. \tag{2.5}$$

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

$$\frac{\partial^{n}}{\partial z_{M}^{n}}I^{-}(f)(z_{M}) \square \Psi^{-(n)}f_{av}, \quad \frac{\partial^{n}}{\partial z_{M}^{n}}I^{+}(f)(z_{M}) \square \Psi^{+(n)}f_{av}, \quad n = 0, 1, 2, \qquad (2.6)$$

где приняты обозначения:

$$\begin{split} \Psi^{-(n)} &= \frac{1}{h} \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \frac{\partial^n}{\partial z_M} \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \exp\left(-\eta_0 \left| z_P - z_M \right| \right) dz_P dz_M , \\ \Psi^{+(n)} &= \frac{1}{h} \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \frac{\partial^n}{\partial z_M} \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \exp\left(-\eta_0 \left( z_P + z_M \right) \right) dz_P dz_M , \\ f_{av} &= \frac{1}{h} \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} f(z_P) dz_P . \end{split}$$

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

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

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

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:

$$\mathbf{G}^{1} = \begin{pmatrix} k^{2}G_{11} + \frac{1}{\varepsilon_{0}} \left( \frac{\partial^{2}G_{11}}{\partial x_{M}^{2}} + \frac{\partial^{3}G_{31}}{\partial x_{M}^{2} \partial z_{M}} \right) & \frac{1}{\varepsilon_{0}} \left( \frac{\partial^{2}G_{11}}{\partial x_{M} \partial y_{M}} + \frac{\partial^{3}G_{31}}{\partial x_{M} \partial y_{M} \partial z_{M}} \right) & \frac{1}{\varepsilon_{0}} \frac{\partial^{2}G_{33}}{\partial x_{M} \partial z_{M}} \\ \frac{1}{\varepsilon_{0}} \left( \frac{\partial^{2}G_{11}}{\partial x_{M} \partial y_{M}} + \frac{\partial^{3}G_{31}}{\partial x_{M} \partial y_{M} \partial z_{M}} \right) & k^{2}G_{11} + \frac{1}{\varepsilon_{0}} \left( \frac{\partial^{2}G_{11}}{\partial y_{M}^{2}} + \frac{\partial^{3}G_{31}}{\partial y_{M}^{2} \partial z_{M}} \right) & \frac{1}{\varepsilon_{0}} \frac{\partial^{2}G_{33}}{\partial y_{M} \partial z_{M}} \\ k^{2} \frac{\partial G_{31}}{\partial x_{M}} + \frac{1}{\varepsilon_{0}} \left( \frac{\partial^{2}G_{11}}{\partial x_{M} \partial z_{M}} + \frac{\partial^{3}G_{31}}{\partial x_{M} \partial z_{M}} \right) & k^{2} \frac{\partial G_{31}}{\partial y_{M}} + \frac{1}{\varepsilon_{0}} \left( \frac{\partial^{2}G_{11}}{\partial y_{M} \partial z_{M}} + \frac{\partial^{3}G_{31}}{\partial y_{M} \partial z_{M}} \right) & k^{2}G_{33} + \frac{1}{\varepsilon_{0}} \frac{\partial^{2}G_{33}}{\partial z_{M}^{2}} \end{pmatrix}$$

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 искомой плотности тока

$$\mathcal{F}(\mathbf{J}) = \mathcal{F}((\varepsilon_i - \varepsilon_0)\mathbf{T}\mathcal{F}(\mathbf{J})) + \mathbf{R}$$
 (2.9)

с правой частью 
$$\mathbf{R} = \mathcal{F}(\mathbf{J}^0)$$
. (2.10)

Матрица Т имеет компоненты

$$T_{11} = \left(k^{2} - \frac{k_{x}^{2}}{\varepsilon_{0}}\right) \left(\zeta_{11}^{-}J^{-(0)} + \zeta_{11}^{+}J^{+(0)}\right) - \frac{k_{x}^{2}\zeta_{31}^{+}J^{+(1)}}{\varepsilon_{0}},$$

$$T_{12} = -\frac{k_{x}k_{y}}{\varepsilon_{0}} \left(\zeta_{11}^{-}J^{-(0)} + \zeta_{11}^{+}J^{+(0)}\right) - \frac{k_{x}k_{y}\zeta_{31}^{+}J^{+(1)}}{\varepsilon_{0}}, \quad T_{21} = T_{12},$$

$$T_{13} = -\frac{ik_{x}\zeta_{33}^{+}J^{+(1)}}{\varepsilon_{0}}, \quad T_{22} = \left(k^{2} - \frac{k_{y}^{2}}{\varepsilon_{0}}\right) \left(\zeta_{11}^{-}J^{-(0)} + \zeta_{11}^{+}J^{+(0)}\right) - \frac{k_{y}^{2}\zeta_{31}^{+}J^{+(1)}}{\varepsilon_{0}}, \quad (2.11)$$

$$T_{23} = -\frac{ik_{y}\zeta_{33}^{+}J^{+(1)}}{\varepsilon_{0}}, \quad T_{31} = -ik^{2}k_{x}\zeta_{31}^{+}J^{+(0)} - \frac{ik_{x}}{\varepsilon_{0}}\left(\zeta_{11}^{+}J^{+(1)} + \zeta_{31}^{+}J^{+(2)}\right),$$

$$T_{32} = -ik^{2}k_{y}\zeta_{31}^{+}J^{+(0)} - \frac{ik_{y}}{\varepsilon_{0}}\left(\zeta_{11}^{+}J^{+(1)} + \zeta_{31}^{+}J^{+(2)}\right)$$

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

Заметим, в уравнении (2.9) требуется вычислить свертку подынтегрального выражения, содержащего искомое решение, с образом площади  $S_i$  неоднородности. С целью использования быстрых алгоритмов вычис-

ления сверток целесообразно ввести равномерную сетку в прямоугольни- $\Pi = [-\mathcal{K}_x / 2, \mathcal{K}_x / 2] \times [-\mathcal{K}_y / 2, \mathcal{K}_y / 2]$ что  $\mathcal{F}(S_i)(\pm \mathcal{K}_x/2,k_y)$   $\square$  1 и  $\mathcal{F}(S_i)(k_x,\pm \mathcal{K}_y/2)$   $\square$  1. Тогда система (2.9) может быть решена с помощью итерационных методов, например, метода минимальных невязок (GMRES).

## 3. ВЫЧИСЛЕНИЕ РАССЕЯННОГО ПОЛЯ В ДАЛЬНЕЙ ЗОНЕ

Покажем, что по найденному решению системы (2.9) можно легко вычислить характеристики поля в дальней зоне. Для этого следует вычислить соответствующие компоненты тензора Грина в верхнем полупространстве с использованием его асимптотики, которая находится методом стационарной фазы [6]. В результате выражение для тензора Грина в сферических координатах  $M(R,\theta,\varphi)$  при  $R\to\infty$  принимает следующий вид:

$$\mathbf{G}^{far} = \begin{bmatrix} v_{11}^{far} (k_0 \sin \theta, z_P) & 0 & 0 \\ 0 & v_{11}^{far} (k_0 \sin \theta, z_P) & 0 \\ -ik_0 \sin \theta \cos \varphi \times & -ik_0 \sin \theta \sin \varphi \times \\ \times v_{31}^{far} (k_0 \sin \theta, z_P) & \times v_{31}^{far} (k_0 \sin \theta, z_P) \end{bmatrix} \times$$

$$\exp(-ik_0 R) = 0 \quad \text{(i.e. i. 2)} \quad (3.1)$$

$$\times \frac{\exp(-ik_0R)}{2\pi R} ik_0 \cos\theta \exp(ik_0 \sin\theta (x_P \cos\varphi + y_P \sin\varphi)).$$

Представления для спектральных функций (1.8) принимают форму

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

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

$$v_{31}^{far}(k_0 \sin \theta, z_P) = \zeta_{31}^+(k_0 \sin \theta) \exp(-ik_0 z_P \cos \theta). \tag{3.2}$$

В свою очередь, тензор (2.8) можно представить в виде

$$\mathbf{G}^{1,far} = \frac{\exp(-ik_0R)}{R}\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\frac{ik_0\cos\theta}{2\pi}\exp(ik_0\sin\theta(x_p\cos\varphi + y_p\sin\varphi))$$
(3.3)

где соответствующие компоненты тензора  $\tilde{\mathbf{G}}^{1,\mathit{far}}$  также записываются с помощью спектральных функций (3.2)

$$\tilde{G}_{11}^{1,far} = k^2 \left[ \left( 1 - \cos^2 \varphi \sin^2 \theta \right) v_{11}^{far} + v_{31}^{far} i k_0 \cos \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \theta \right],$$

$$\begin{split} \tilde{G}_{12}^{1,far} &= k^2 \cos \varphi \sin \varphi \sin^2 \theta \Big[ - v_{11}^{far} + v_{31}^{far} i k_0 \cos \theta \Big], \ \tilde{G}_{21}^{1,far} &= \tilde{G}_{12}^{1,far}, \\ \tilde{G}_{13}^{1,far} &= - k^2 v_{33}^{far} \cos \varphi \cos \theta \sin \theta, \\ \tilde{G}_{22}^{1,far} &= k^2 \Big[ \Big( 1 - \sin^2 \varphi \sin^2 \theta \Big) v_{11}^{far} + v_{31}^{far} i k_0 \cos \theta \sin^2 \varphi \sin^2 \theta \Big], \\ \tilde{G}_{23}^{1,far} &= - k^2 v_{33}^{far} \sin \varphi \cos \theta \sin \theta, \\ \tilde{G}_{31}^{1,far} &= - k^2 \cos \varphi \sin \theta \Big[ v_{11}^{far} \cos \theta + v_{31}^{far} i k_0 \sin^2 \theta \Big], \\ \tilde{G}_{32}^{1,far} &= - k^2 \sin \varphi \sin \theta \Big[ v_{11}^{far} \cos \theta + v_{31}^{far} i k_0 \sin^2 \theta \Big], \ \tilde{G}_{33}^{1,far} &= k^2 v_{33}^{far} \sin^2 \theta. \end{split}$$

Рассмотрим результат умножения тензора  $\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}$  на вектор  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$ . Пусть

$$\mathbf{B} = \tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\mathbf{E} \tag{3.4}$$

Тогда компоненты вектора  ${\bf B}$  в сферической системе координат  $(R, \theta, \varphi)$  записываются следующим образом

$$B_{R} = 0, \quad B_{\theta} = k^{2} \left( v_{11}^{far} \cos \theta + v_{31}^{far} i k_{0} \sin^{2} \theta \right) \left( E_{x} \cos \varphi + E_{y} \sin \varphi \right) - k^{2} v_{33}^{far} \sin \theta E_{z},$$

$$B_{\varphi} = k^{2} v_{11}^{far} \left( -E_{x} \sin \varphi + E_{y} \cos \varphi \right). \tag{3.5}$$

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

$$\mathbf{E}^{s,far}(M) = \int_{D_i} \mathbf{G}^{1,far}(M,P) \mathbf{J}(P) \mathbf{d}v_P, \qquad (3.6)$$

а для диаграммы направленности  $\mathbf{F}( heta, oldsymbol{arphi})$ , определяемой как

$$\mathbf{E}^{s,far} = \frac{\exp(-ik_0R)}{R} \mathbf{F}(\theta, \varphi), \qquad (3.7)$$

имеем

$$\mathbf{F} = \frac{ik_0 \cos \theta}{2\pi} \int_{D_i} \tilde{\mathbf{G}}^{1,far} \left( \theta, \boldsymbol{\varphi}, z_p \right) \exp(ik_0 \sin \theta (x_p \cos \boldsymbol{\varphi} + y_p \sin \boldsymbol{\varphi})) \mathbf{J} \left( P \right) \mathbf{d} v_p$$
 (3.8)

или

$$\mathbf{F} = \frac{ik_0 \cos \theta}{2\pi} \int_{z_{\min}}^{z_{\min}+h} \tilde{\mathbf{G}}^{1,far} (\theta, \varphi, z_p) \mathcal{F}(\mathbf{J}) ((k_0 \sin \theta \cos \varphi, k_0 \sin \theta \sin \varphi)) dz_p$$
 (3.9)

Отметим, что в выражение (3.9) входит решение системы (2.9), вычисленное в спектральной области и переход в пространственную область не требуется. Это обстоятельство является одним из преимуществ рассматриваемого подхода. Интеграл по переменной z в (3.9) вычисляется аналитически с учетом поляризации падающей плоской волны. Как следует из (3.4), (3.5), в диаграмме направленности необходимо вычислить только угловые компоненты  $F_{\theta}$  и  $F_{\varphi}$ . Интенсивность рассеяния в направлении  $(\theta,\varphi)$  при заданном угле падения  $\theta_0$  может быть записана в виде:

$$I(\theta, \varphi) = (\mathbf{F}(\theta, \varphi), \mathbf{F}^*(\theta, \varphi))$$
(3.10)

Таким образом, получено окончательное выражение, позволяющее расчитывать интенсивность рассеянного поля в волновой зоне.

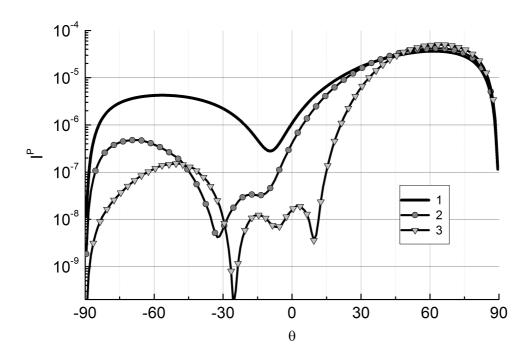
#### 4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Представленная модель объемного интегрального уравнения была использована для анализа дефектов кремниевых подложек, имеющих форму эллиптических цилиндров малой высоты h и полуосями основания

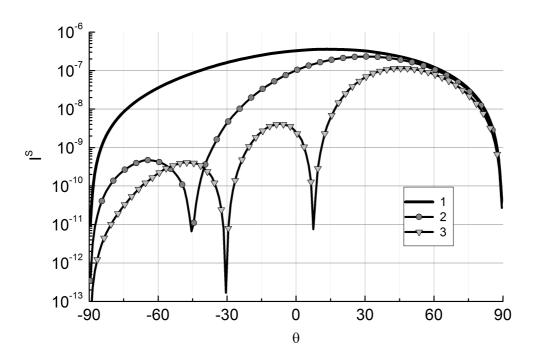
$$a$$
 и  $b$ :  $D_i = \left\{ (x, y, z) : \left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 \le 1; \ z_{\min} \le z \le z_{\min} + h \right\}$ . Всюду далее бу-

дем полагать, что частица расположена на кремниевой (Si) подложке с показателем преломления n=1.85-4.43i, а длина волны падающего излучения  $\lambda=266$  нм. Расчеты проводились для P- и S- поляризованной плоской волны, угол падения которой составляет  $\theta_0=70^{\circ}$ .

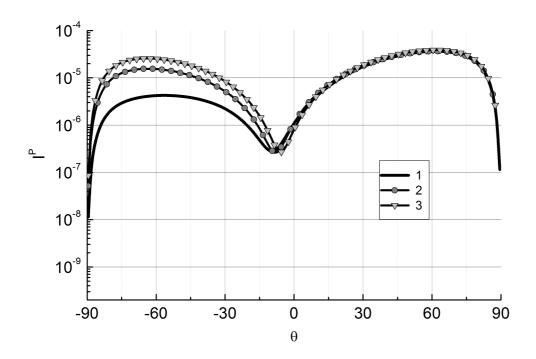
На рис.1 приведены результаты расчетов интенсивности рассеянного поля (3.10) в плоскости падения (плоскость Ozx) в зависимости от угла рассеяния  $\theta$  при дифракции P-поляризованной плоской волны на частицах полистирола латекса (PSL) (показатель преломления n=1.59-0.0i) толщины h=10нм и размерами (a,b)=(50нм,50нм) - кривая 1, (100нм,25нм) - кривая 2 и (208нм, 12нм) - кривая 3, что соответствует параметру вытянутости a/b=1, 4, 17.3. Величины полуосей были выбраны таким образом, чтобы объемы частиц были одинаковы и основное влияние на картину рассеяния оказывала только форма частицы. Из рис.1 видно, что в направлении зеркально отраженного луча кривые почти совпадают, тогда как в других направлениях они существенно отличаются. Следовательно, форма частицы меняет характер рассеяния в широком диапазоне углов за исключением окрестности угла зеркально отражения.



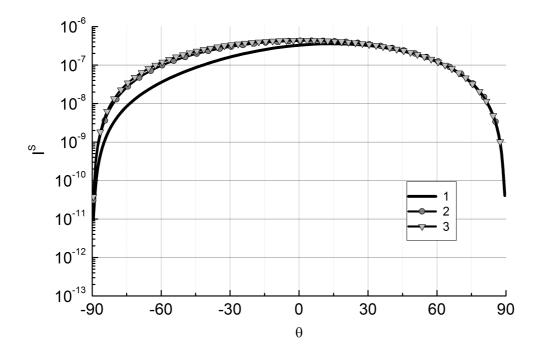
**Рис. 1.** Р-поляризация; частицы PSL с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (100нм,25нм), 3 - (208нм,12нм).



**Рис. 2.** S-поляризация; частицы PSL с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (100нм,25нм), 3 - (208нм,12нм).



**Рис. 3.** Р-поляризация; частицы PSL с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (25нм,100нм), 3 - (12нм,208нм).



**Рис. 4.** S-поляризация; частицы PSL с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (25нм,100нм), 3 - (12нм,208нм).

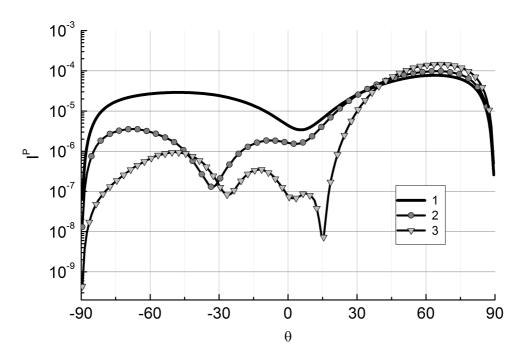
На рис.2 показаны аналогичные кривые интенсивности (3.10) при рассеянии на тех же частицах S-поляризованной плоской волны. Графики вновь демонстрируют хорошее совпадение в направлении зеркального луча и полностью расходятся при других углах рассеяния. Можно сделать вывод, что эквиобъемные частицы даже весьма различной формы рассеивают практически одинаково в прямом направлении.

Рис.3,4 демонстрируют аналогичные кривые интенсивности рассеянного поля при падении соответственно P- и S-поляризованной волны на PSL частицы с размерами (a,b) = (50нм,50нм) - кривая 1, (25нм,100нм) - кривая 2 и (12нм, 208нм) - кривая 3. В данном случае большая полуось частиц расположена вдоль оси Y. Можно заметить, что обе поляризации слабо чувствительны к изменению формы объекта в направлении, перпендикулярном плоскости падения волны. Интенсивность рассеянного поля лишь незначительно возрастает в направлении обратного рассеяния при вытягивании частицы вдоль оси Y.

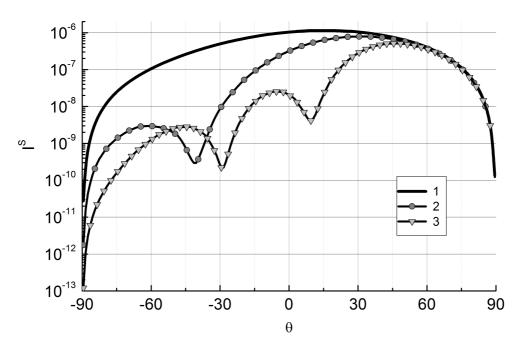
На рисунках 5,6 и 7,8 представлены результаты моделирования для титановых (Ті) частиц (n = 1.18 - 1.26i) тех же размеров, что и на рис.1,2 и 3,4. Наблюдается примерно такая же картина рассеяния, что и в случае PSL частиц – кривые очень близки в направлении зеркального отражения, а существенные различия видны только у частиц, вытянутых вдоль оси X (рис. 5,6) т.е. в плоскости падения плоской волны. При изменении размеров вдоль перпендикулярной оси Y немного возрастает интенсивность рассеяния P-поляризованной волны (рис. 7) и несколько изменяется величина обратного рассеяния S-поляризованной волны (рис. 8).

С целью изучения зависимости интенсивности рассеяния от материала частицы проводились расчеты для частиц из трех материалов: полистирола латекса (PSL) (n=1.59-0.0i) (кривая 1), нитрида кремния (SiN) (n=2.00-0.0i) (кривая 2) и титана (Ti) (n=1.52-1.68i) (кривая 3). На рис. 9,10 показаны кривые интенсивности рассеянного поля для P- и S-поляризаций соответственно, частицы вытянуты вдоль оси X и имеют размеры (208нм, 12нм). Из приведенных результатов видно, что интенсивность рассеяния растет при увеличении значений показателя преломления материала. Кроме того, наблюдается различный характер рассеяния прозрачными (PSL и SiN) и металлической (Ti) частицей. В частности, у титановой частицы интенсивность рассеяния при некоторых углах на порядок выше.

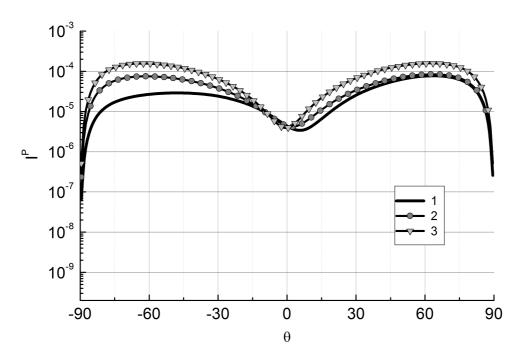
Аналогичные результаты, полученные для вытянутых вдоль оси *У* частиц (12нм, 208нм), представлены на рис. 11,12. Видно, что Р-поляризация более чувствительна к материалу частицы, тогда как в случае S-поляризации графики SiN и Ti практически совпадают. Кроме того, при Р-поляризации титановой частица рассеивает значительно сильнее, особенно в обратном направлении.



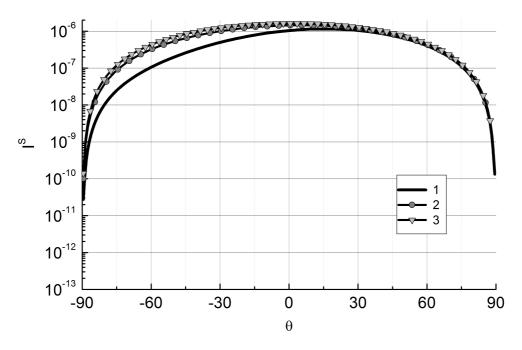
**Рис. 5.** Р-поляризация; частицы Ті с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (100нм,25нм), 3 - (208нм,12нм).



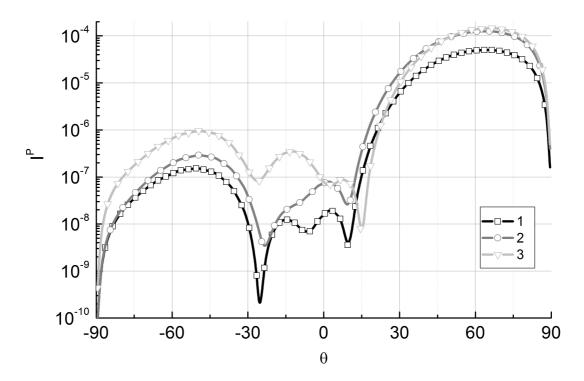
**Рис. 6.** S-поляризация; частицы Ті с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (100нм,25нм), 3 - (208нм,12нм).



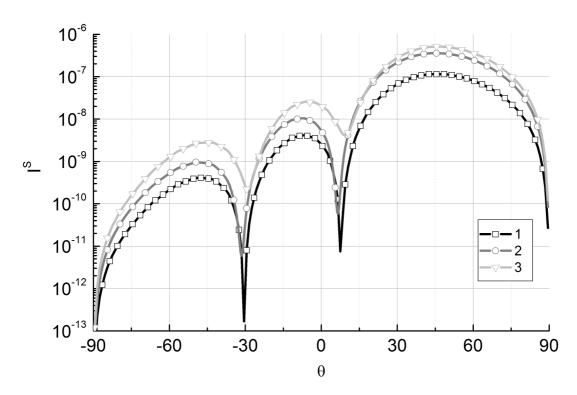
**Рис. 7.** Р-поляризация; частицы Ті с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (25нм,100нм), 3 - (12нм,208нм).



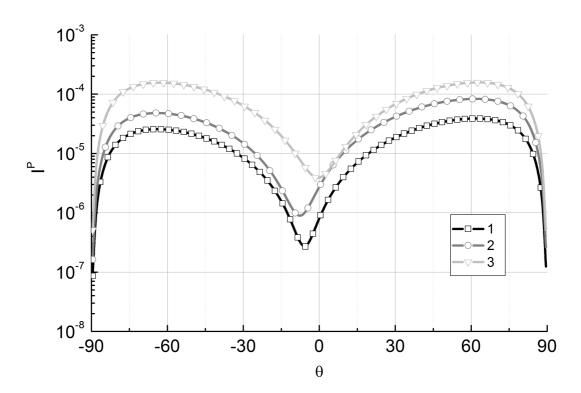
**Рис. 8** S-поляризация; частицы Ti с размерами: 1 - (50нм,50нм), 2 – (25нм,100нм), 3 - (12нм,208нм).



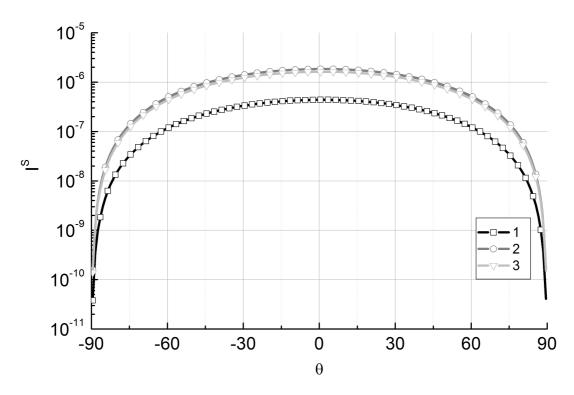
**Рис. 9.** Р-поляризация; частицы: 1 - PSL, 2 – SiN, 3 - Тi; размер (208нм, нм)



**Рис. 10.** S-поляризация; частицы: 1 - PSL, 2 - SiN, 3 - Тi; размер (208нм, 12нм)



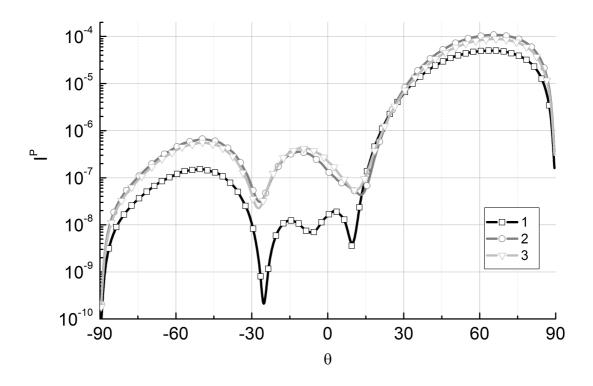
**Рис. 11.** Р-поляризация; частицы: 1- PSL, 2 - SiN, 3 - Ti; размер (12нм, 208нм)



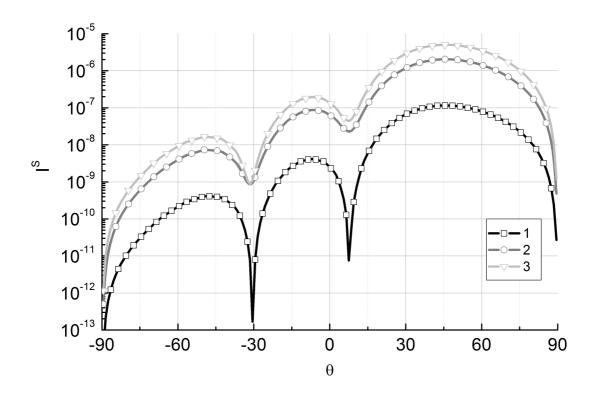
**Рис. 12.** S-поляризация; частицы: 1- PSL, 2 – SiN, 3 - Ti; размер (12нм, 208нм)

В заключение рассмотрим влияние параметра  $z_{\min}$ , определяющего возвышение цилиндра над подложкой, на картину рассеяния. Заметим, что во всех предыдущих численных экспериментах частица располагалась непосредственно на подложке, т.е.  $z_{\min}=0$ . Как и ранее, полагаем, что подложка состоит из кремния (Si), а длина волны падающего излучения  $\lambda=266$  нм. Плоская волна падает на частицу наклонно, под углом  $\theta_0=70^{0}$ .

На рис. 13,14 приведены кривые рассеяния P- и S-поляризованных волн частицей из полистирола латекса (PSL), вытянутой вдоль оси X и имеющей значения полуосей основания (208нм, 12нм). Представлены результаты моделирования для трех значений параметра  $z_{\min} = 0,5,10$  нм, которым соответствуют кривые 1,2,3. Отметим, что для обеих поляризаций падающей плоской полны картина рассеяния частицей, лежащей на подложке (кривая 1), заметно отличается от случаев, когда частица находится на некотором удалении от поверхности. Иначе говоря, при первоначальном удалении от подложки происходят существенные изменения в интенсивности рассеянного поля. При последующем удалении интенсивность меняется значительно слабее.



**Рис. 13.** Р-поляризация; частица PSL, размер (208нм, 12нм);  $z_{min} = 1 - 0$  нм, 2 - 5 нм, 3 - 10 нм;



**Рис. 14.** S-поляризация; частица PSL, размер (208нм, 12нм);  $z_{min} = 1 - 0$  нм, 2 - 5 нм, 3 - 10 нм;

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан и реализован численный метод анализа рассеивающих свойств плоских рассеивателей малой толщины, имеющих форму эллиптических цилиндров и расположенных вблизи или на поверхности подложки. Метод апробирован при расчетах характеристик рассеяния ряда дефектов. Результаты численных экспериментов свидетельствуют о высокой эффективности предложенного подхода применительно к тонким рассеивателям.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Eremin Yu.A., Stover J.C. and Orlov N.V. Modeling scatter from silicon wafers features based on discrete sources method //Optical Engineering. 1999, Vol.38, N8, pp.1296-1304.

- 2. 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.
- 3. Дмитриев В.И., Захаров Е.В. Метод интегральных уравнений в вычислительной электродинамике. //М.: Макс пресс, 2008.
- 4. Eremin Yu.A., Ivakhnenko V.I. Analysis of inhomogeneities on wafers by the integral transform method //Differential Equations. 2000. Vol.36, N9. pp.1370-1380.
- 5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. //М.: Наука, 1970.
- 6. Фелсен Л., Маркувиц Н. Излучение и рассеяние волн. //М.:Мир, 1978, Т.1.