В.В. Лопушенко

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛОСКИХ ДЕФЕКТОВ ВНУТРИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКИ МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

ВВЕДЕНИЕ

Продолжающийся прогресс в совершенствовании интегральных схем, процессоров и дисковых накопителей ставит новые задачи перед исследователями. Миниатюризация транзисторов и необходимость перехода к новым нанотехнологическим стандартам требует обеспечения строгой чистоты подложек, которые служат основой их производства. Особое беспокойство у разработчиков интегральных схем вызывает присутствие малозаметных дефектов, которые имеют малую глубину (высоту) 4-10нм, в то время как их диаметр может достигать 200-500нм. Использование оптических сканеров для мониторинга качества поверхности подложек с малозаметными дефектами требует наличия соответствующих средств математического моделирования их рассеивающих свойств. Изучение малозаметных дефектов представляется особенно актуальным ввиду того, что выявлены заметные отличия их рассеивающих свойств от свойств полноразмерных дефектов [1].

В настоящей работе предложена новая модификация метода объемных интегральных уравнений в спектральной области, построенного в [2,3] для поверхностных дефектов малой толщины. Реализована возможность моделирования объектов в форме эллиптических цилиндров, расположенных внутри диэлектрической подложки. При этом могут рассматриваться объекты как примыкающие к поверхности подложки, так и расположенные на некотором расстоянии от нее. Метод строится на основе традиционного объемного интегрального уравнения [4] 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, а также использованием спектральных функций в аналитическом виде, а не в представлении Вейля-Зоммерфельда [1,4]. 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 расстояния от поверхности подложки.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ НА ОСНОВЕ ОБЪЕМНОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Пусть $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$ – поле плоской электромагнитной волны линейной поляризации, падающей под углом θ_0 относительно нормали на плоскую границу Ξ раздела воздух-подложка $D_0 - D_1$, а однородная частица, занимающая область D_i с гладкой границей ∂D, расположена так, что лежит полностью внутри подложки D_1. Введем прямоугольную систему координат таким образом, чтобы граница раздела Ξ совпала с плоскостью Oxy. Ось Oz направим в область D_0. Тогда математическая постановка задачи рассеяния принимает вид

$$rot\ \mathbf{H}_t = ik\varepsilon_t \mathbf{E}_t, \quad rot\ \mathbf{E}_t = -ik\mathbf{H}_t \ \text{ в } D_t, \ t = 0,1,i, \tag{1.1}$$

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

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

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

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 ∂D, ε_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 Ξ как $\{\mathbf{E}_t^0, \mathbf{H}_t^0\}$ и учитывая, что полное поле представляет собой сумму поля плоской волны и рассеянного поля, можно записать (опуская для удобства нижний индекс среды):

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

и соответствующую систему уравнений в нижнем полупространстве:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}^{\mathbf{s}} = -ik\mathbf{H}^{\mathbf{s}} \\ \nabla \times \mathbf{H}^{\mathbf{s}} = ik\varepsilon_1 \mathbf{E}^{\mathbf{s}} + \mathbf{I}^{\mathbf{E}} \end{cases} \tag{1.3}$$

где ток $\mathbf{I}^{\mathbf{E}} = ik(\varepsilon_i - \varepsilon_1)\mathbf{E}_1$ (1.4)

принимает ненулевые значения в точках $P \in D_i$. В основу представления для рассеянного частицей поля положим тензор Грина полупространства [4]. В этом случае векторный потенциал для тока $\mathbf{j}$ с точностью до постоянного множителя выглядит как интеграл

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

с тензором Грина вида

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

Для компонент тензора используем представления Вейля-Зоммерфельда:

$$G_{nm}(M,P) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^\infty J_0(\beta r)\, v_{nm}(\beta, z_M, z_P)\beta d\beta, \quad (n,m) = (1,1), (3,3), (3,1). \tag{1.7}$$

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

$$v_{11}(\beta, z_M, z_P) = \zeta_{11}^- \exp\left(-\eta_1 |z_P - z_M|\right) + \zeta_{11}^+ \exp\left(\eta_1 (z_P + z_M)\right)$$

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

$$v_{33}(\beta, z_M, z_P) = \zeta_{33}^- \exp\left(-\eta_1 |z_P - z_M|\right) + \zeta_{33}^+ \exp\left(\eta_1 (z_P + z_M)\right), \tag{1.8}$$

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

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

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 $z = 0$ [4].

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

$$\mathbf{E}^s = \frac{1}{ik}\left(k^2 + grad\left(\frac{1}{\varepsilon_1} div\right)\right)\mathbf{A}, \tag{1.9}$$

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

$$\mathbf{E}\left(M\right) = \mathbf{E}^0\left(M\right) + \left(k^2 + grad_M\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right)div_M\right)\int_{D_i} \mathbf{G}\left(M,P\right)(\varepsilon_i - \varepsilon_1)\mathbf{E}\left(P\right)\mathbf{d}v_P\,. \tag{1.10}$$

Используя обозначения, принятые в [4] для плотности объемных токов $\mathbf{J} = \left(\varepsilon_i - \varepsilon_1\right)\mathbf{E}$ и $\mathbf{J}^0 = \left(\varepsilon_i - \varepsilon_1\right)\mathbf{E}^0$, перепишем уравнение в виде

$$\mathbf{J}\left(M\right) = \mathbf{J}^0\left(M\right) + (\varepsilon_i - \varepsilon_1)\left(k^2 + grad_M\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right)div_M\right)\int_{D_i} \mathbf{G}\left(M,P\right)\mathbf{J}\left(P\right)\mathbf{d}v_P\,, \tag{1.11}$$

В уравнение (1.11) входит поле внешнего возбуждения в области D_1. Будем рассматривать поле Р-поляризованной плоской волны (вектор электрического поля $\mathbf{E}^0$ лежит в плоскости падения волны Ozx), распространяющейся под углом θ_0 к оси Oz в верхнем полупространстве и преломленной под углом θ_1 в нижнее полупространство. Тогда поле внешнего возбуждения в нижнем полупространстве принимает вид

$$\mathbf{E}_1^0 = \left(\mathbf{e}_x \cos\theta_1 + \mathbf{e}_z \sin\theta_1\right) T_P\, \chi^{-},$$

$$\chi^{-} = \exp\left(-ik_1\left(x\sin\theta_1 - z\cos\theta_1\right)\right), \tag{1.12}$$

а коэффициент Френеля равен [5]

$$T_P = \frac{2n_0\cos\theta_0}{n_1\cos\theta_0 + n_0\cos\theta_1}.$$

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

$$\mathbf{E}_1^0 = -\mathbf{e}_y \, T_S \chi^- , \tag{1.13}$$

а коэффициент Френеля для S поляризации принимает вид [5]

$$T_S = \frac{2n_0 \cos\theta_0}{n_0 \cos\theta_0 + n_1 \cos\theta_1} .$$

При наличии поглощения в подложке угол θ_1 принимает, вообще говоря, комплексные значения.

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

2. ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

Аналогично методике [3], построим вычислительный алгоритм в несколько этапов. Прежде всего, предполагая, что рассматриваемая неоднородность имеет структуру вида $D_i = S_i \times \; z_{\max} - h, z_{\max}$, где S_i - площадь основания, $z_{\max}$ - верхняя точка цилиндра, а его 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

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

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

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

$$G_{nm}(M,P)=\mathscr{F}^{-1}\left[v_{nm}\left(x_M-x_P,y_M-y_P\right)\right]= \tag{2.3}$$

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

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

$$I^-\left[f\right]\left(z_M\right)=\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\exp\left(-\eta_1\left|z_P-z_M\right|\right)f(z_p)dz_P \tag{2.4}$$

$$\text{и}\quad I^+\left[f\right]\left(z_M\right)=\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\exp\left[\eta_1\left(z_P+z_M\right)\right]f(z_p)dz_P\,. \tag{2.5}$$

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

$$\frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}I^-\left[f\right]\left(z_M\right)\simeq\Psi^{-(n)}f_{av},\ \frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}I^+\left[f\right]\left(z_M\right)\simeq\Psi^{+(n)}f_{av},\quad n=0,1,2, \tag{2.6}$$

где приняты обозначения:

$$\Psi^{-(n)}=\frac{1}{h}\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\exp\left(-\eta_1\left|z_P-z_M\right|\right)dz_Pdz_M\ ,$$

$$\Psi^{+(n)}=\frac{1}{h}\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\frac{\partial^n}{\partial {z_M}^n}\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\exp\left[\eta_1\left(z_P+z_M\right)\right]dz_Pdz_M\ ,$$

$$f_{av}=\frac{1}{h}\int\limits_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}f(z_p)dz_p\,.$$

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

$$\Psi^{-(0)}=\frac{2}{\eta_1}\left(1-\frac{1-\exp\left(-\eta_1h\right)}{\eta_1h}\right);\ \Psi^{-(1)}=0\,;\ \Psi^{-(2)}=-\frac{2\left[1-\exp\left(-\eta_1h\right)\right]}{h}; \tag{2.7a}$$

$$\Psi^{+(0)}=\exp\left(2\eta_1z_{\max}\right)\frac{\left[1-\exp\left(-\eta_1h\right)\right]^2}{\eta_1^2h},\Psi^{+(1)}=\eta_1\Psi^{+(0)},\Psi^{+(2)}=\eta_1\Psi^{+(1)}\,. \tag{2.7b}$$

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

$$\mathbf{G}^1\ \ M,P\ \ =\mathbf{(}k^2+grad_M\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right)div_M\mathbf{)G}\ \ M,P\ \ \ , \qquad (2.8)$$

который в явном виде выглядит следующим образом:

$$\mathbf{G}^1=\begin{pmatrix} k^2G_{11}+\frac{1}{\varepsilon_1}\left(\frac{\partial^2 G_{11}}{\partial x_M^2}+\frac{\partial^3 G_{31}}{\partial x_M^2\partial z_M}\right) & \frac{1}{\varepsilon_1}\left(\frac{\partial^2 G_{11}}{\partial x_M\partial y_M}+\frac{\partial^3 G_{31}}{\partial x_M\partial y_M\partial z_M}\right) & \frac{1}{\varepsilon_1}\frac{\partial^2 G_{33}}{\partial x_M\partial z_M} \\ \frac{1}{\varepsilon_1}\left(\frac{\partial^2 G_{11}}{\partial x_M\partial y_M}+\frac{\partial^3 G_{31}}{\partial x_M\partial y_M\partial z_M}\right) & k^2G_{11}+\frac{1}{\varepsilon_1}\left(\frac{\partial^2 G_{11}}{\partial y_M^2}+\frac{\partial^3 G_{31}}{\partial y_M^2\partial z_M}\right) & \frac{1}{\varepsilon_1}\frac{\partial^2 G_{33}}{\partial y_M\partial z_M} \\ k^2\frac{\partial G_{31}}{\partial x_M}+\frac{1}{\varepsilon_1}\left(\frac{\partial^2 G_{11}}{\partial x_M\partial z_M}+\frac{\partial^3 G_{31}}{\partial x_M\partial z_M^2}\right) & k^2\frac{\partial G_{31}}{\partial y_M}+\frac{1}{\varepsilon_1}\left(\frac{\partial^2 G_{11}}{\partial y_M\partial z_M}+\frac{\partial^3 G_{31}}{\partial y_M\partial z_M^2}\right) & k^2G_{33}+\frac{1}{\varepsilon_1}\frac{\partial^2 G_{33}}{\partial z_M^2} \end{pmatrix}$$

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

$$\mathcal{F}\ \ \mathbf{J}\ \ =\mathcal{F}\ \ (\varepsilon_i-\varepsilon_1)\mathbf{T}\mathcal{F}\ \ \mathbf{J}\ \ \ +\mathbf{R} \qquad (2.9)$$

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

Матрица $\mathbf{T}$ имеет компоненты

$$T_{11}=\left(k^2-\frac{k_x^2}{\varepsilon_1}\right)\ \zeta_{11}^-\Psi^{-\ 0}\ +\zeta_{11}^+\Psi^{+\ 0}\ \ -\frac{k_x^2\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 1}}{\varepsilon_1},$$

$$T_{12}=-\frac{k_xk_y}{\varepsilon_1}\ \zeta_{11}^-\Psi^{-\ 0}\ +\zeta_{11}^+\Psi^{+\ 0}\ \ -\frac{k_xk_y\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 1}}{\varepsilon_1},\ \ T_{21}=T_{12},$$

$$T_{13}=-\frac{ik_x\zeta_{33}^+\Psi^{+\ 1}}{\varepsilon_1},\quad T_{22}=\left(k^2-\frac{k_y^2}{\varepsilon_1}\right)\ \zeta_{11}^-\Psi^{-\ 0}\ +\zeta_{11}^+\Psi^{+\ 0}\ \ -\frac{k_y^2\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 1}}{\varepsilon_1}, \qquad (2.11)$$

$$T_{23}=-\frac{ik_y\zeta_{33}^+\Psi^{+\ 1}}{\varepsilon_1},\ \ T_{31}=-ik^2k_x\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 0}\ -\frac{ik_x}{\varepsilon_1}\ \zeta_{11}^+\Psi^{+\ 1}\ +\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 2}\ \ \ ,$$

$$T_{32}=-ik^2k_y\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 0}\ -\frac{ik_y}{\varepsilon_1}\ \zeta_{11}^+\Psi^{+\ 1}\ +\zeta_{31}^+\Psi^{+\ 2}$$

$$T_{33} = k^2 \left(\zeta_{33}^{-}\Psi^{-\,0} + \zeta_{33}^{+}\Psi^{+\,0} \right) + \frac{\zeta_{33}^{-}\Psi^{-\,2} + \zeta_{33}^{+}\Psi^{+\,2}}{\varepsilon_1}.$$

Заметим, в уравнении (2.9) все элементы матрицы вычисляются аналитически, т.е. необходимости в вычислении интегралов Вейля-Зоммерфельда нет. Требуется лишь вычислить свертку подынтегрального выражения, содержащего искомое решение, с образом площади S_i неоднородности. С целью использования быстрых алгоритмов вычисления сверток целесообразно ввести равномерную сетку в прямоугольнике $\Pi = [-\mathcal{K}_x/2, \mathcal{K}_x/2] \times [-\mathcal{K}_y/2, \mathcal{K}_y/2]$ таком, что $\mathcal{F}(S_i)(\pm\mathcal{K}_x/2, k_y) \ll 1$ и $\mathcal{F}(S_i)(k_x, \pm\mathcal{K}_y/2) \ll 1$. 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:

$$\mathbf{G}^{far} = \begin{bmatrix} \nu_{11}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) & 0 & 0 \\ 0 & \nu_{11}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) & 0 \\ \begin{matrix} -ik_0\sin\theta\cos\varphi\times \\ \times\nu_{31}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) \end{matrix} & \begin{matrix} -ik_0\sin\theta\sin\varphi\times \\ \times\nu_{31}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) \end{matrix} & \nu_{33}^{far}(k_0\sin\theta, z_P) \end{bmatrix} \times \tag{3.1}$$
$$\times\frac{\exp(-ik_0R)}{2\pi R} ik_0\cos\theta\exp(ik_0\sin\theta(x_P\cos\varphi + y_P\sin\varphi)).$$

Выражения для $v_{nm}^{far}(\beta, z_P)$ получаются из спектральных функций $v_{11}(\beta, z_M, z_P)$, записанных в областях $z_P < 0$, $z_M > 0$ и принимают форму

$$v_{11}^{far}(\beta, z_P) = \frac{\exp(\eta_1 z_P)}{\eta_0 + \eta_1}, \quad v_{33}^{far}(\beta, z_P) = \frac{\varepsilon_0\exp(\eta_1 z_P)}{\varepsilon_1\eta_0 + \varepsilon_0\eta_1}, \tag{3.2a}$$

$$\nu_{31}^{far}(\beta, z_P) = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \quad \exp \quad \eta_1 z_P}{\eta_0 + \eta_1 \quad \varepsilon_1\eta_0 + \varepsilon_0\eta_1}, \tag{3.2b}$$

где $\eta_n^2 = \beta^2 - k_n^2, \;\; k_n^2 = k^2\varepsilon_n, \;\; n = 0{,}1.$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 $\mathbf{B}$ в сферической системе координат R, θ, φ записываются следующим образом

$$B_R = 0, \;\; B_\theta = k^2 \;\; \nu_{11}^{far}\cos\theta + \nu_{31}^{far} ik_0\sin^2\theta \quad E_x\cos\varphi + E_y\sin\varphi \;\; - k^2\nu_{33}^{far}\sin\theta \; E_z,$$

$$B_\varphi = k^2\nu_{11}^{far} \;\; -E_x\sin\varphi + E_y\cos\varphi \;\; . \tag{3.5}$$

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

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

а для диаграммы направленности $\mathbf{F}\ \theta,\varphi$, определяемой как

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

имеем

$$\mathbf{F} = \frac{ik_0\cos\theta}{2\pi}\int_{D_i}\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\ \theta,\varphi,z_p\ \exp(ik_0\sin\theta(x_P\cos\varphi + y_P\sin\varphi))\mathbf{J}\ P\ \mathbf{d}v_P \tag{3.8}$$

или

$$\mathbf{F} = \frac{ik_0\cos\theta}{2\pi}\int_{z_{\max}-h}^{z_{\max}}\tilde{\mathbf{G}}^{1,far}\ \theta,\varphi,z_p\ \mathcal{F}\ \mathbf{J}\quad k_0\sin\theta\ \cos\varphi,k_0\sin\theta\ \sin\varphi\quad dz_P \tag{3.9}$$

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_θ и F_φ. Интенсивность рассеяния в направлении θ,φ при заданном угле падения θ_0 может быть записана в виде:

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

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

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Предлагаемый вычислительный алгоритм на основе объемного интегрального уравнения был применен к анализу подповерхностных дефектов кремниевых подложек, имеющих форму эллиптических цилиндров с малой высотой h и полуосями основания a и b: $D_i = \left\{(x,y,z): \left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 \le 1;\ z_{\max-h} \le z \le z_{\max}\right\}$. 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 $\theta_0 = 70^{\mathbf{0}}$.

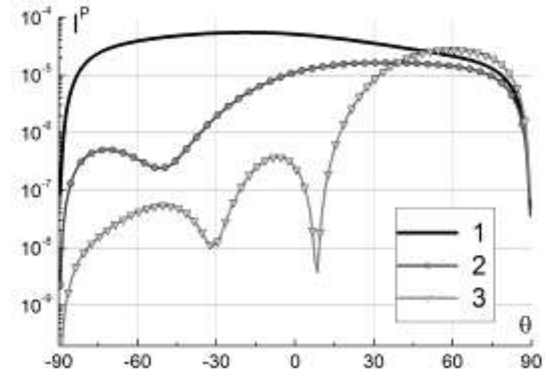

Рис. 1

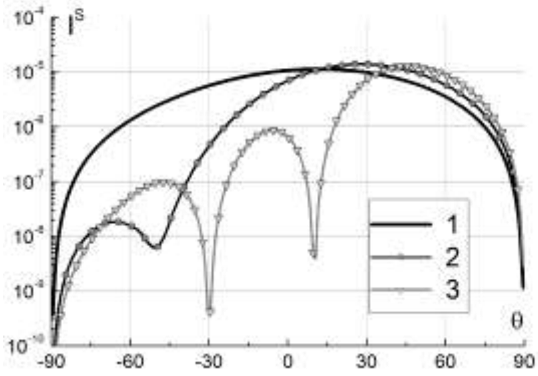

Рис. 2

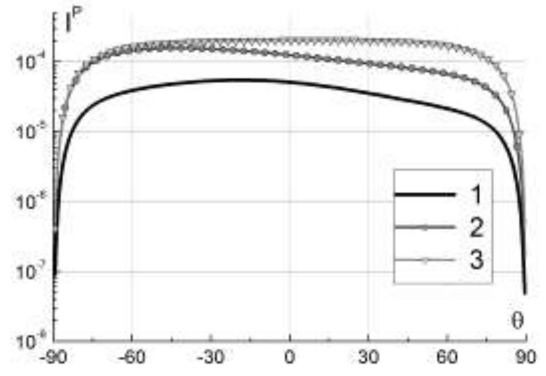

Рис. 3

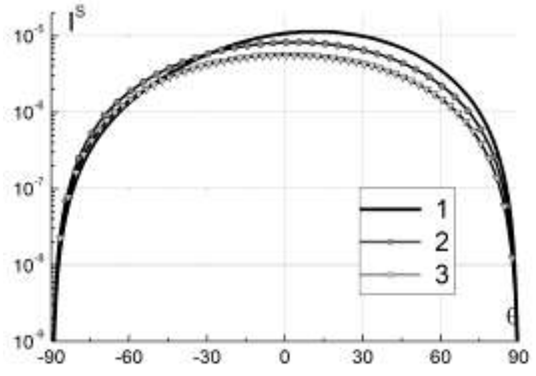

Рис. 4

На рис.1 приведены численные результаты, полученные для интенсивности рассеянного поля (3.10) в плоскости падения (плоскость Ozx) в зависимости от угла рассеяния θ при дифракции P-поляризованной плоской волны на цилиндрической ямке (показатель преломления $n=1$) глубины $h=10$нм 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 ямок были одинаковы и основное влияние на картину рассеяния оказывала только форма объекта. Из рис.1 видно, что в направлении зеркально отраженного луча кривые почти совпадают, тогда как в других направлениях они существенно отличаются. Следовательно, форма дефекта меняет характер рассеяния в широком диапазоне углов за исключением окрестности угла зеркально отражения.

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 объекты 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 ямки с размерами a, b = (50нм,50нм) - кривая 1, (25нм,100нм) - кривая 2 и (12нм, 208нм) - кривая 3. В данном случае большая полуось дефектов расположена вдоль оси Y. Можно заметить, что обе поляризации значительно слабее реагируют на изменение формы объекта в направлении, перпендикулярном плоскости падения волны. Примечательно, что для P- и S-поляризации поведение интенсивности рассеянного поля при вытягивании дефекта вдоль оси Y почти противоположно: в первом случае кривые поднимаются, а во втором – опускаются в широком диапазоне углов.

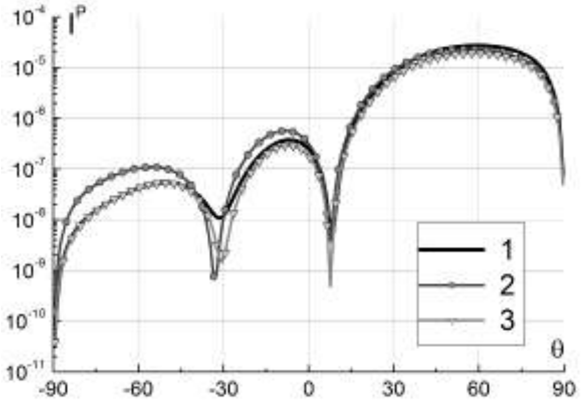

Рис. 5

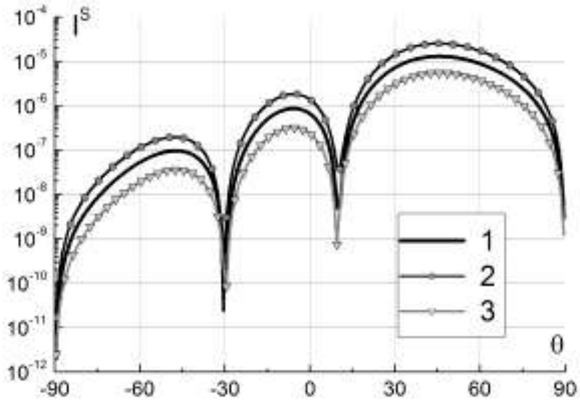

Рис. 6

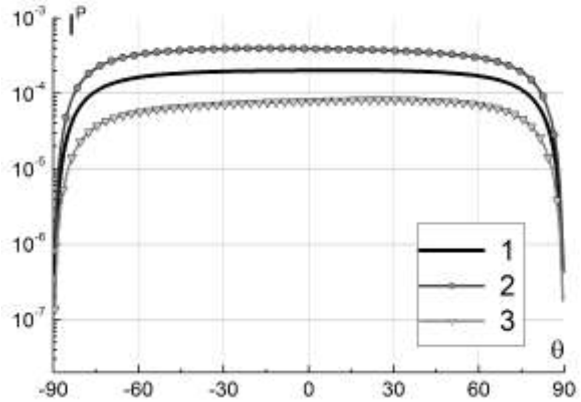

Рис. 7

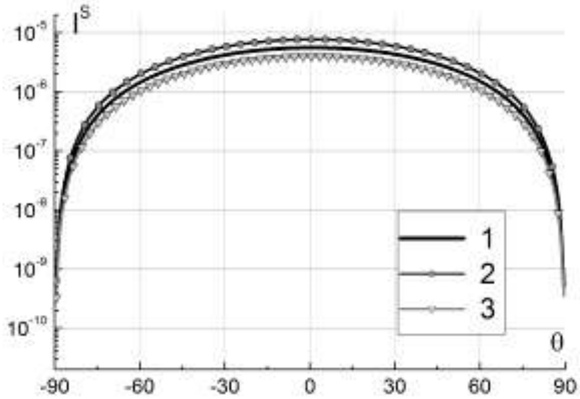

Рис. 8

С целью изучения зависимости интенсивности рассеяния от материала частицы проводились расчеты для частиц из трех материалов: воздуха $(n = 1)$ (кривая 1), нитрида кремния (SiN) $(n = 2.00 - 0.0i)$ (кривая 2) и титана (Ti) $(n = 1.52 - 1.68i)$ (кривая 3). На рис. 5,6 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 для прозрачных частиц (PSL и SiN), но падает при появлении поглощения в материале (Ti). Можно также отметить, что форма кривых при изменении материала меняется слабо.

Аналогичные результаты, полученные для вытянутых вдоль оси *Y* частиц (12нм, 208нм), представлены на рис. 7,8. Видно, что P-поляризация более чувствительна к материалу частицы, тогда как в случае S-поляризации графики, соответствующие разным материалам, очень близки.

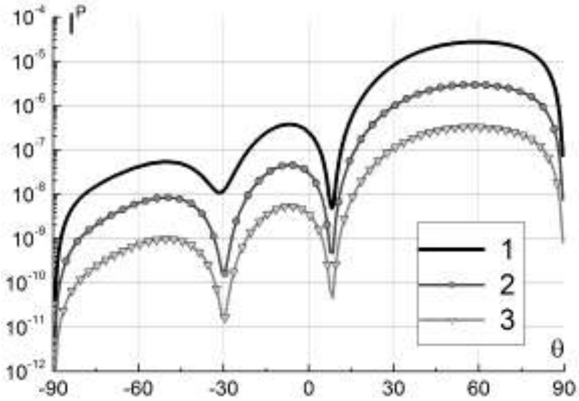

Рис. 9

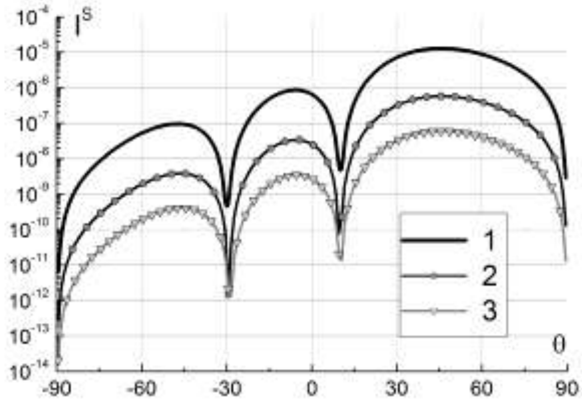

Рис. 10

В заключение рассмотрим влияние параметра $z_{\max}$, определяющего величину углубления цилиндра в подложку, на картину рассеяния. Заметим, что во всех предыдущих численных экспериментах частица примыкала снизу к краю подложки, т.е. $z_{\max} = 0$. Как и ранее, будем рассматривать кремниевую (Si) подложку, на которую падает плоская волна (λ = 266 нм) под углом $\theta_0 = 70^{\mathbf{0}}$.

На рис. 9,10 приведены кривые рассеяния P- и S-поляризованных волн воздушной полостью, вытянутой вдоль оси *X* и имеющей значения полуосей основания (208нм, 12нм). Представлены результаты моделирования для трех значений параметра $z_{\max} = 0, 5, 10$ нм, которым соответствуют кривые 1,2,3. Отметим, что для обеих поляризаций падающей плоской полны картина рассеяния дефектом, примыкающим к поверхности подложки (кривая 1), заметно отличается от случаев, когда объект находится на некотором удалении от поверхности. Иначе говоря, при углублении объекта происходят существенные изменения в интенсивности рассеянного поля. При этом форма кривых интенсивности меняется слабо.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Еремин Ю.А., Свешников А.Г. Использование фиктивных частиц при анализе рассеивающих свойств малозаметных дефектов подложки //Вестник МГУ, Сер. 3. Физика. Астрономия. 2013, №6, с.8-13.
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. Lopushenko V.V. Analysis of Plane Cylindrical Wafer Defects by the Spectral-Domain Integral Equation Method //Computational Mathematics and Modeling. 2016, Vol. 27, N1, pp. 44-59.
4. Дмитриев В.И., Захаров Е.В. Метод интегральных уравнений в вычислительной электродинамике. //М.: Макс пресс, 2008.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. //М.: Наука, 1970.
6. Фелсен Л., Маркувиц Н. Излучение и рассеяние волн. //М.:Мир, 1978, Т.1.