

## ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

**Использование фиктивных частиц при анализе рассеивающих свойств малозаметных дефектов подложки**Ю. А. Еремин<sup>1,a</sup>, А. Г. Свешников<sup>2,b</sup>*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,*<sup>1</sup> *факультет вычислительной математики и кибернетики, кафедра математической физики;*<sup>2</sup> *физический факультет, кафедра математики.**Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1.**E-mail: <sup>a</sup> eremin@cs.msu.ru <sup>b</sup> sveshnikov@phys.msu.ru*

Статья поступила 01.07.2013, подписана в печать 18.07.2013.

Предложена и реализована модификация метода дискретных источников, основанная на использовании «фиктивной» частицы. Подобный подход позволяет проводить эффективный численный анализ рассеивающих свойств наноразмерных дефектов подложки, таких как пологая ямка или пологий бугорок. Приведены численные результаты, иллюстрирующие возможности реализованного компьютерного модуля.

*Ключевые слова:* наноразмерный дефект подложки, численный анализ, метод дискретных источников, фиктивная частица.

УДК: 535.36; 535.42. PACS: 42.25.-p; 42.25.Fx.

**Введение**

Продолжающийся прогресс в совершенствовании интегральных схем, процессоров и дисков накопителей ставит новые задачи перед исследователями. Миниатюризация транзисторов требует обеспечения строгой чистоты подложек, которые служат основой их реализации. Особое беспокойство вызывает присутствие малозаметных дефектов, таких как углубление в подложке (shallow pit) или бугорок (shallow bump). Особенность подобных дефектов заключается в том, что они имеют пологую форму, а их диаметр может быть значительным — 50–400 нм, в то время как глубина (высота) составляет не более 5–10 нм. Использование оптических сканеров для обнаружения и идентификации этих дефектов требует наличия адекватных средств математического моделирования для предсказания их рассеивающих свойств, а также для оценки интенсивности рассеяния.

Опыт работы последних 15 лет в данном направлении показал, что метод дискретных источников (МДИ) является эффективным и малозатратным инструментом численного анализа рассеивающих свойств различных дефектов подложки [1–3]. В отличие от других подходов [4] МДИ позволяет учесть все особенности рассматриваемой задачи рассеяния. Кроме того, он дает возможность проводить апостериорную оценку погрешности приближенного решения, контролируя реальную сходимость к точному решению граничной задачи рассеяния [5]. Сложность анализа пологих дефектов малой толщины состоит в том, что при требовании высокой точности результатов оказывается недостаточно места для расположения дискретных источников (ДИ). Кроме того, в этом случае рассеиватель содержит острые края, что создает дополнительные сложности при аппроксимации полей. При наклонном падении возбуждающей волны необходимо привлекать для представления ре-

шения мультиполи высокого порядка. Все это ведет к существенному усложнению вычислительной схемы МДИ и не позволяет получать решение с высокой степенью точности. Имевшиеся попытки преодолеть эти трудности как в рамках МДИ [6], так и в рамках сходного с МДИ метода вспомогательных источников [7] не принесли желаемого результата.

Недавно появилась идея рассматривать подобные дефекты как часть некоторой «фиктивной» частицы существенно большего размера с аналитической формой поверхности, индекс рефракции которой совпадает с индексом рефракции либо воздуха, либо подложки [8]. Однако в случае акустической задачи эта идея не была реализована в полной мере. В настоящей работе идея «фиктивной» частицы реализована применительно к задаче рассеяния поляризованного светового излучения наноразмерными дефектами кремниевой подложки в полной векторной постановке. Проведена оценка интенсивности рассеяния ямки и бугорка. Выполнен сравнительный анализ их рассеивающих свойств. Выявлены существенные отличия от полноразмерных дефектов.

**1. Математическая модель задачи рассеяния**

Рассмотрим случай осесимметричной проникающей частицы, расположенной на границе раздела двух полупространств. Пусть  $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$  — поле плоской электромагнитной волны линейной поляризации, падающей под углом  $\pi - \theta_0$  относительно нормали, совпадающей с осью  $Oz$ , на плоскую границу  $\Sigma$  (плоскость  $z = 0$ ) раздела воздух–подложка  $D_0 - D_1$ . Расположенная на границе раздела полупространств частица, внутренняя область которой обозначена как  $D_i$ , имеет гладкую границу  $D_0$ . Пусть ось симметрии частицы совпадает с осью  $Oz$ , направленной в  $D_0$ . В этом случае геометрическая структура частица–подложка обладает осевой симметрией. Математическая постановка подобной

задачи рассеяния может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H}_\zeta &= jk\varepsilon_\zeta \mathbf{E}_\zeta, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_\zeta &= -jk\mu_\zeta \mathbf{H}_\zeta, \quad \text{в } D_\zeta, \quad \zeta = 0, 1, i, \\ \mathbf{n}_p \times (\mathbf{E}_i(p) - \mathbf{E}_{0,1}(p)) &= 0, \\ \mathbf{n}_p \times (\mathbf{H}_i(p) - \mathbf{H}_{0,1}(p)) &= 0, \quad p \in \partial D_i, \\ \mathbf{e}_z \times (\mathbf{E}_0(p) - \mathbf{E}_1(p)) &= 0, \\ \mathbf{e}_z \times (\mathbf{H}_0(p) - \mathbf{H}_1(p)) &= 0, \quad p \in \Sigma, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r \cdot (\sqrt{\varepsilon_0} \mathbf{E}_0^s \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \sqrt{\mu_0} \mathbf{H}_0^s) &= 0, \quad r = |M| \rightarrow \infty, \quad z > 0, \\ (|\mathbf{E}_1^s|, |\mathbf{H}_1^s|) &= o(\exp\{-|\operatorname{Im} k_1| r\}), \quad z < 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $\{\mathbf{E}_\zeta, \mathbf{H}_\zeta\}$  — полное поле в соответствующей области  $D_\zeta$ ,  $\{\mathbf{E}_\zeta^s, \mathbf{H}_\zeta^s\}$  — рассеянное поле,  $\mathbf{n}_p$  — единичная нормаль к поверхности  $\partial D_i$ , а  $k_\zeta = k \cdot \sqrt{\varepsilon_\zeta \mu_\zeta}$ . Отметим, что рассматривается постановка задачи (1) для частицы, расположенной частично в полупространствах  $D_0$  и  $D_1$ . Полагаем, что поверхность частицы является гладкой  $\partial D_i \subset C^2$ , а параметры сред, будучи постоянными в своих областях, удовлетворяют условиям  $\operatorname{Im} \varepsilon_0, \mu_0 = 0$ ,  $\operatorname{Im} \varepsilon_1, \mu_1 < 0$  и  $k_i = k_0$  в случае ямки или  $k_i = k_1$  в случае бугорка. Тогда граничная задача (1) имеет единственное решение [9].

Решим задачу отражения и преломления поля плоской волны  $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$  на границе раздела полупространств. В верхнем полупространстве  $D_0$  суммарное поле падающей и отраженной волны будем обозначать как  $\{\mathbf{E}_0^0, \mathbf{H}_0^0\}$ , а в  $D_1$  поле преломленной волны — как  $\{\mathbf{E}_1^0, \mathbf{H}_1^0\}$ . Для установления конкретных выражений для поля внешнего возбуждения введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \gamma_\zeta^\pm &= \exp\{-jk_\zeta(x \sin \theta_\zeta \pm z \cos \theta_\zeta)\}, \\ \mathbf{e}_\zeta^\pm &= (\mp \mathbf{e}_x \cos \theta_\zeta + \mathbf{e}_z \sin \theta_\zeta), \quad \zeta = 0, 1. \end{aligned}$$

Здесь  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  — единичные векторы базиса декартовой системы координат,  $\theta_1$  — угол, под которым преломленная волна проходит в подложку, следуя закону Снелиуса. Ограничимся рассмотрением случая  $P$ -поляризации, как было ранее установлено, именно эта поляризация позволяет отличать частицы от ямок [1, 3]. Для  $P$ -поляризации будем обозначать

$$\mathbf{E}_\zeta^{P(\pm)} = \mathbf{e}_\zeta^\pm \cdot \gamma_\zeta^\pm, \quad \mathbf{H}_\zeta^{P(\pm)} = -\mathbf{e}_y \cdot n_\zeta \cdot \gamma_\zeta^\pm,$$

где  $n_\zeta = \sqrt{\varepsilon_\zeta \mu_\zeta}$  — индекс рефракции в соответствующем полупространстве  $D_{0,1}$ .

Тогда поле внешнего возбуждения может быть записано как

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0^{0(P)} &= \mathbf{E}^{0(P)} + R_P \cdot \mathbf{E}_0^{P(+)}, \\ \mathbf{H}_0^{0(P)} &= \mathbf{H}^{0(P)} + R_P \cdot \mathbf{H}_0^{P(+)}, \\ \mathbf{E}_1^{0(P)} &= T_P \cdot \mathbf{E}_1^{P(-)}, \\ \mathbf{H}_1^{0(P)} &= T_P \cdot \mathbf{H}_1^{P(-)}, \quad z < 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $R_P, T_P$  — коэффициенты отражения и преломления Френеля [10]. Таким образом, построено поле внешнего возбуждения во всем пространстве.

В данном случае рассеянное поле  $\{\mathbf{E}_\zeta^s, \mathbf{H}_\zeta^s\}$ ,  $\zeta = 0, 1$  есть полное поле  $\{\mathbf{E}_\zeta, \mathbf{H}_\zeta\}$  минус поле внешнего возбуждения (2).

Будем строить приближенное решение задачи (1) на основе базовой концепции МДИ [11]. В данном случае суть МДИ состоит в представлении рассматриваемого поля в виде конечной линейной комбинации полей диполей и мультиполей, которые аналитически удовлетворяют системе уравнений Максвелла в областях  $D_{0,1,i}$ , условиям на бесконечности для рассеянного поля в  $D_{0,1}$ , а также условиям сопряжения для тангенциальных компонент полей на поверхности подложки  $\Sigma$ . В этом случае решение граничной задачи рассеяния (1) сводится к задаче аппроксимации поля внешнего возбуждения (2) на поверхности фиктивной частицы  $\partial D_i$ . Таким образом, определение неизвестных амплитуд ДИ будет производиться из условий сопряжения, поставленных на поверхности  $\partial D_i$ :

$$\mathbf{n}_p \times (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_{0,1}^s) = \mathbf{n}_p \times \mathbf{E}_{0,1}^0, \quad \mathbf{n}_p \times (\mathbf{H}_i - \mathbf{H}_{0,1}^s) = \mathbf{n}_p \times \mathbf{H}_{0,1}^0. \quad (3)$$

Построим приближенное решение так, чтобы учесть осевую симметрию геометрии задачи (1). В основу конструкции положим фурье-компоненты тензора Грина слоистой среды, которые могут быть записаны в виде интегральных представлений Вейля–Зоммерфельда [11]

$$\begin{aligned} G_m^{e,h}(\xi, z_n^e) &= \int_0^\infty J_m(\lambda \rho) v_{11}^{e,h}(\lambda, z, z_n^e) \lambda^{1+m} d\lambda, \\ g_m^{e,h}(\xi, z_n^e) &= \int_0^\infty J_m(\lambda \rho) v_{31}^{e,h}(\lambda, z, z_n^e) \lambda^{1+m} d\lambda. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $J_m(\cdot)$  — цилиндрическая функция Бесселя, точка  $\xi = (\rho, z)$  располагается в полуплоскости  $\varphi = \text{const}$ , а точки локализации мультиполей распределены вдоль оси симметрии  $z_n^e \in 0z$  строго внутри  $D_i$  или в соответствующей области комплексной плоскости [2]. Спектральные функции электрического и магнитного типов  $v_{11}^{e,h}, v_{31}^{e,h}$  обеспечивают выполнение условий сопряжения на границе интерфейса  $z = 0$ . В данном случае для них справедливы следующие выражения:

$$v_{11}^{e,h}(\lambda, z, z_0) = \begin{cases} \frac{\exp\{-\eta_0|z-z_0|\}}{\eta_0} + A_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_0 z\}, & z_0 > 0, \quad z \geq 0, \\ B_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{\eta_1 z\}, & z_0 > 0, \quad z \leq 0, \\ C_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_0 z\}, & z_0 < 0, \quad z \geq 0, \\ \frac{\exp\{-\eta_1|z-z_0|\}}{\eta_1} + D_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_1 z\}, & z_0 < 0, \quad z \leq 0, \end{cases}$$

$$v_{31}^{e,h}(\lambda, z, z_0) = \begin{cases} A_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_0 z\}, & z_0 > 0, \quad z \geq 0, \\ B_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{\eta_1 z\}, & z_0 > 0, \quad z \leq 0, \\ C_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_0 z\}, & z_0 < 0, \quad z \geq 0, \\ D_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_1 z\}, & z_0 < 0, \quad z \leq 0, \end{cases}$$

где  $\eta_\zeta^2 = \lambda^2 - k_\zeta^2$ . Спектральные коэффициенты  $A, B, C$  и  $D$  определяются из скачков полей при  $z = 0$  [12].

Отсюда легко получить, что

$$\begin{aligned}
 A_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \frac{\chi_0^{e,h} - \chi_1^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}} \cdot \frac{\exp\{-\eta_0 z_0\}}{\eta_0}, \\
 B_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \frac{2\chi_0^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}} \cdot \frac{\exp\{-\eta_0 z_0\}}{\eta_0}, \\
 C_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \frac{2\chi_1^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}} \cdot \frac{\exp\{-\eta_0 z_0\}}{\eta_1}, \\
 D_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \frac{\chi_1^{e,h} - \chi_0^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}} \cdot \frac{\exp\{\eta_1 z_0\}}{\eta_1}, \\
 A_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \frac{2\delta \cdot \exp\{-\eta_0 z_0\}}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)}, \\
 B_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \left(\frac{\mu_1}{\mu_0}, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}\right) \frac{2\delta \cdot \exp\{-\eta_0 z_0\}}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)}, \\
 C_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \left(\frac{\mu_0}{\mu_1}, \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_1}\right) \frac{2\delta \cdot \exp\{\eta_1 z_0\}}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)}, \\
 D_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) &= \frac{2\delta \cdot \exp\{\eta_1 z_0\}}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)}.
 \end{aligned}$$

Здесь были введены обозначения

$$\eta_\zeta = \sqrt{\lambda^2 - k_\zeta^2}, \quad \chi_\zeta^e = \frac{\eta_\zeta}{\mu_\zeta}, \quad \chi_\zeta^h = \frac{\eta_\zeta}{\varepsilon_\zeta}, \quad \delta = \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} - \frac{1}{\varepsilon_1 \mu_1}.$$

Существенным отличием от предшествующих реализаций МДИ является то, что  $v_{31}^e \neq v_{31}^h$ , когда источник и точка наблюдения принадлежат различным полупространствам. Это приводит к существенному усложнению схемы вычислительного алгоритма, в частности при расчете интегралов (4).

Будем строить приближенное решение так, чтобы учесть осевую симметрию геометрии задачи (1) и поляризацию внешнего возбуждения [11]. Рассмотрим  $P$ -поляризованную плоскую волну, в которой вектор электрического поля принадлежит плоскости падения  $zx$  (2). Воспользуемся разложением плоской волны в ряд Фурье по азимутальной переменной  $\varphi$  [13]. В этом случае для построения приближенного решения для рассеянного поля в  $D_{0,1}$  можно использовать векторные потенциалы, которые в цилиндрической системе координат  $(\rho, \phi, z)$  принимают вид

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_{mn}^{e,\zeta} &= \{G_m^e(\xi, z_n^e) \cos(m+1)\phi; -G_m^e(\xi, z_n^e) \sin(m+1)\phi; \\
 &\quad -g_m^e(\xi, z_n^e) \cos(m+1)\phi\}, \\
 \mathbf{A}_{mn}^{h,\zeta} &= \{G_m^h(\xi, z_n^e) \sin(m+1)\phi; G_m^h(\xi, z_n^e) \cos(m+1)\phi; \\
 &\quad -g_{m+1}^h(\xi, z_n^e) \sin(m+1)\phi\}, \\
 \mathbf{A}_{0n}^{e,\zeta} &= \{0; 0; G_0^h(\xi, z_n^e)\}.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Для представления полного поля внутри частицы, в  $D_i$ , учитывая поляризацию внешнего возбуждения, аналогично [13] будем использовать следующие потенциалы:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_{mn}^{e,i} &= \{Y_m(\xi, \omega_n^i) \cos(m+1)\phi; -Y_m(\xi, \omega_n^i) \sin(m+1)\phi; 0\}, \\
 \mathbf{A}_{mn}^{h,i} &= \{Y_m(\xi, \omega_n^i) \sin(m+1)\phi; Y_m(\xi, \omega_n^i) \cos(m+1)\phi; 0\}, \\
 \mathbf{A}_n^{e,i} &= \{0; 0; Y_0(\xi, \omega_n^i)\}.
 \end{aligned} \tag{6}$$

где  $Y_m^i(q, \omega) = h_m^{(2)}(k_i R_{q\omega_n^i}) \times (k_i \rho / R_{q\omega_n^i})^m$ ,  $R_{\xi\omega_n^i} = \sqrt{\rho^2 + (z - \omega_n^i)^2}$ ,  $h_m^{(2)}$  — сферическая функция Ханкеля, а  $\{\omega_n^i\}$  — комплексные координаты источников, вещественная часть которых соответствует координатам оси  $Z$ , расположенным вне области  $D_i$ .

Таким образом, приближенное решение для рассеянного поля в  $D_{0,1}$ , которое дополнительно удовлетворяет условиям сопряжения на плоскости  $\Sigma$ , и полного поля внутри  $D_i$  может быть записано как

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_N^\zeta &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_m^\zeta} \left\{ p_{mn}^\zeta \frac{j}{k \varepsilon_\zeta \mu_\zeta} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}_{mn}^{e,\zeta} + q_{mn}^\zeta \frac{1}{\varepsilon_\zeta} \nabla \times \mathbf{A}_{mn}^{h,\zeta} \right\} + \\
 &\quad + \sum_{n=1}^{N_0^\zeta} r_n^\zeta \frac{j}{k \varepsilon_\zeta \mu_\zeta} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}_n^{e,\zeta}, \\
 \mathbf{H}_N^\zeta &= \frac{j}{k \mu_\zeta} \nabla \times \mathbf{E}_N^\zeta(M), \quad \zeta = 0, 1, i.
 \end{aligned} \tag{7}$$

Последнее слагаемое в (7) соответствует вертикальным электрическим диполям, так как в случае  $P$ -поляризации вектор  $\mathbf{E}_0^0$  имеет  $z$ -компоненту.

Отметим одно существенное обстоятельство. Приближенное решение (7) удовлетворяет системе уравнений Максвелла в областях  $D_{0,1}$  с одним и тем же набором амплитуд  $\{p_{mn}^0, q_{mn}^0, r_n^0\}$  ДИ, поскольку непрерывность на границе раздела полупространств обеспечивается автоматически за счет специального построения векторных потенциалов (5)–(6).

## 2. Численная схема МДИ

Поскольку геометрия задачи представляет собой осесимметричную конфигурацию и внешнее возбуждение (2) и приближенное решение (7) представлены разложениями в ряд Фурье по азимутальной переменной  $\phi$ , то определение неизвестных амплитуд ДИ  $\{p_{mn}^{0,i}, q_{mn}^{0,i}, r_n^{0,i}\}$  проводится из граничного условия (3) последовательно для каждой  $m$ -й гармоники Фурье. Амплитуды ДИ определяются из требования минимизации невязок гармоник Фурье граничного условия (3) в норме  $l_2(\Gamma_i)$  на образующей поверхности частицы. Вычислительный алгоритм представляет собой обобщенный метод коллокаций с последующим псевдорешением соответствующих переопределенных систем линейных алгебраических уравнений. Для каждой отдельной гармоники производится регуляризация А.Н. Тихонова в норме  $l_2$ . Согласно величину параметра регуляризации с погрешностью вычисления интегралов Вейля–Зоммерфельда, удается обеспечить устойчивость результатов при увеличении числа точек коллокаций и ДИ. Как уже упоминалось выше, вычисляя значение поверхностной невязки выполнения граничных условий (3) в промежуточных точках по отношению к точкам коллокаций, мы получаем апостериорную оценку погрешности приближенного решения (7). Кратко описанная выше схема вычислительного алгоритма МДИ дает возможность организовать вычисления таким образом, что расчет характеристик рассеяния производится одновременно для всех углов падения  $\theta_0$ .

Для вычисления интенсивности рассеянного поля нам необходимо иметь диаграмму рассеяния  $\mathbf{F}(\theta, \phi)$ . В данном случае она определяется лишь в верхнем полупространстве  $z > 0$  как

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) / |\mathbf{E}^0(\mathbf{r})| = \frac{\exp\{-jk_0 r\}}{r} \mathbf{F}(\theta, \phi) + O(1/r^2), \quad r \rightarrow \infty, \quad z > 0. \quad (8)$$

Для получения конкретного вида диаграммы рассеяния в рамках МДИ достаточно использовать асимптотические представления для интегралов Вейля–Зоммерфельда, как это сделано в [2]. Тогда для  $\theta, \varphi$ -компонент диаграммы рассеяния в случае  $P$ -поляризации получим

$$F_{\theta}^P(\theta, \phi) = jk_0 \sum_{m=0}^M \cos((m+1)\phi) (jk_0 \sin \theta)^m \times \sum_{n=1}^{N_0^m} \left\{ p_{nm}^0 \left[ \bar{G}_n^e \cos \theta + jk_0 \bar{g}_n^e \sin^2 \theta \right] + q_{nm}^0 \bar{G}_n^h \right\} - j \frac{k_0}{\varepsilon_0} \sin \theta \sum_{n=1}^{N_0^0} r_n^0 \bar{G}_n^h, \quad (9)$$

$$F_{\phi}^P(\theta, \phi) = -jk_0 \sum_{m=0}^M \sin((m+1)\phi) (jk_0 \sin \theta)^m \times \sum_{n=1}^{N_0^m} \left\{ p_{nm}^0 \bar{G}_n^e + q_{nm}^0 \left[ \bar{G}_n^h \cos \theta + jk_0 \bar{g}_n^h \sin^2 \theta \right] \right\},$$

где спектральные функции  $\bar{G}_n^{e,h}$ ,  $\bar{g}_n^h$  принимают следующий вид:

$$\bar{G}_n^{e,h}(\theta) = \begin{cases} \exp\{jk_0 z_n^e \cos \theta\} + \\ + jk_0 \cos \theta v_{11}^{e,h}(k_0 \sin \theta, z=0, z_n^e), & z_n^e > 0, \\ jk_0 \cos \theta v_{11}^{e,h}(k_0 \sin \theta, z=0, z_n^e), & z_n^e < 0 \end{cases}$$

$$\bar{g}_n^{e,h}(\theta) = jk_0 \cos \theta v_{31}^{e,h}(k_0 \sin \theta, z=0, z_n^e).$$

Здесь значения  $v_{11}^{e,h}$ ,  $v_{31}^{e,h}$  берутся в стационарной точке,  $\lambda = k_0 \sin \theta$  и формально полагается  $z = 0$ .

Таким образом, оказывается, что элементы тензора Грина в дальней зоне, а тем самым и компоненты диаграмм не содержат интегралов Вейля–Зоммерфельда, и после определения неизвестных амплитуд ДИ  $\{p_{nm}^0, q_{nm}^0, r_n^0\}$  для расчета характеристик рассеяния достаточно вычислить лишь конечные линейные комбинации элементарных функций (9). Данное обстоятельство позволяет проводить детальный анализ характеристик рассеяния, таких как интенсивность рассеяния (DSC)

$$DSC^P(\theta_0, \theta, \phi) = |F_{\theta}^P(\theta_0, \theta, \phi)|^2 + |F_{\phi}^P(\theta_0, \theta, \phi)|^2. \quad (10)$$

Здесь  $F_{\theta, \phi}^P(\theta_0, \theta, \phi)$  — компоненты диаграммы рассеяния (9), или сечение рассеяния (SCS) — интенсивности поля, рассеянного в заданный телесный угол  $\Omega$ :

$$\sigma^P(\theta_0) = \int_{\Omega} DSC^P(\theta_0, \theta, \phi) d\omega, \quad (11)$$

В силу определения диаграммы рассеяния (8) размерность DSC и SCS будет мкм<sup>2</sup>.

### 3. Обсуждение результатов

Перейдем к обсуждению численных результатов. Прежде всего отметим, что проверка работы реализованного программного модуля осуществлялась сравнением с результатами для полусферической ямки и бугорка [1, 3]. Будем рассматривать длину  $P$ -поляризованной плоской волны  $\lambda = 633$  нм, а в качестве формы дефектов — сфероидальную форму как для ямок, так и для бугорков, при этом индекс рефракции кремния  $n_i = 3.88 - 0.04j$ . Будем характеризовать дефект двумя параметрами — диаметром  $D$  и максимальной толщиной  $t$ .

На рис. 1 приведены результаты расчета  $\sigma^P(\theta_0)$ :  $\Omega = \{85^\circ \geq \theta \geq 0; 360^\circ \geq \varphi \geq 0\}$  для полусферического бугорка (ямки)  $D = 60$  нм,  $t = 30$  нм и дефектов сфероидальной формы  $D = 120$  нм,  $t = 10$  нм в зависимости от угла падения  $\theta_0$ . Как видно из рисунка, для полусферического бугорка SCS возрастает по мере увеличения угла падения и достигает своего максимума в окрестности  $60^\circ$ , в то время как для полусферической ямки оно убывает в полном соответствии с результатами [1, 3]. Для сфероидальных дефектов оно практически остается постоянным до угла падения  $\theta_0 = 45^\circ$ .

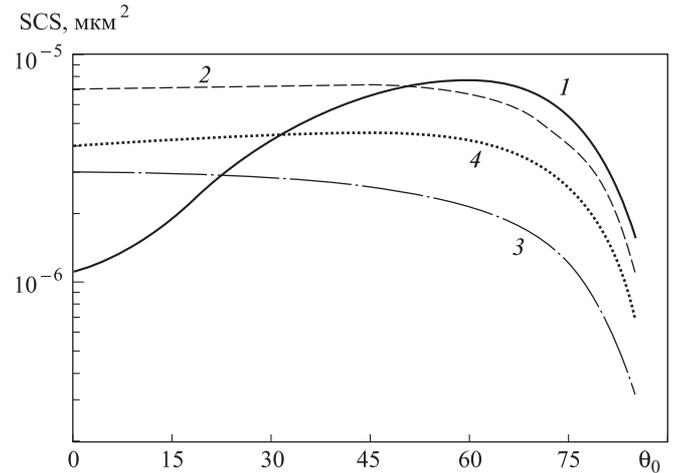


Рис. 1. SCS (11) в зависимости от угла падения плоской волны  $\theta_0$ . Полусферическому бугорку  $D = 60$  нм,  $t = 30$  нм соответствует кривая 1; сфероидальному бугорку  $D = 120$  нм,  $t = 10$  нм — кривая 2; полусферической ямке  $D = 60$  нм,  $t = 30$  нм — кривая 3; сфероидальной ямке  $D = 120$  нм,  $t = 10$  нм — кривая 4

Сравним распределение интенсивности DSC в плоскости падения для этих же дефектов для угла падения  $60^\circ$ , что соответствует направлению  $\theta = -60^\circ$  на рис. 2. Как следует из рис. 2, DSC для полусферического бугорка имеет характерный провал в середине диапазона углов наблюдения, в то время как для ямки оно не имеет заметных углублений. Отметим, что именно это обстоятельство позволило сформулировать критерий отличия частиц от ям [1, 3]. Что же касается сфероидального дефекта, то значения интенсивности для бугорка и ямки незначительно отличаются, за исключением направления зеркального отражения  $\theta = 60^\circ$ , где у бугорка имеется глубокий локальный минимум.

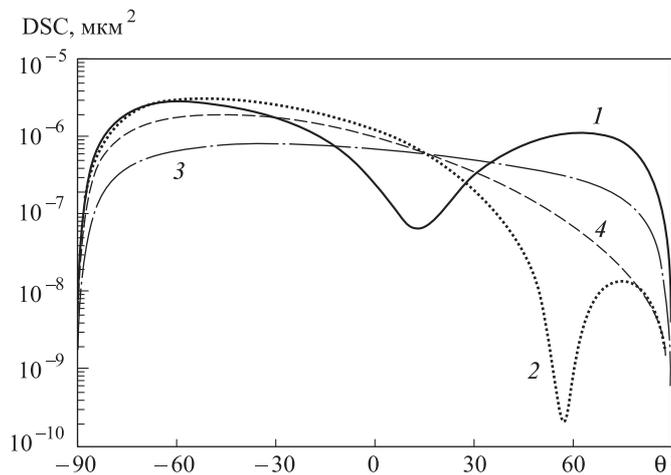


Рис. 2. DCS (10) в плоскости падения волны при  $\theta_0 = 60^\circ$  в зависимости от угла наблюдения  $\theta$ . Бугорок  $D = 60$  нм,  $t = 30$  нм — кривая 1; бугорок  $D = 120$  нм,  $t = 10$  нм — кривая 2; ямка  $D = 60$  нм,  $t = 30$  нм — кривая 3; ямка  $D = 120$  нм,  $t = 10$  нм — кривая 4

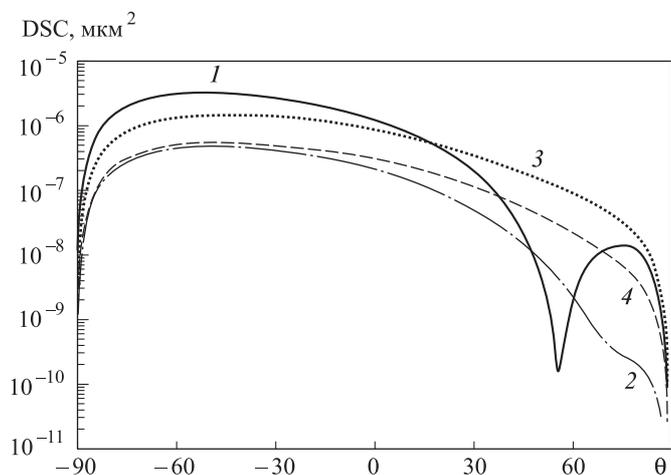


Рис. 3. DSC в плоскости падения для дефекта  $D = 120$  нм,  $\theta_0 = 60^\circ$ . Бугорок  $t = 10$  нм — кривая 1; бугорок  $t = 5$  нм — кривая 2; ямка  $t = 10$  нм — кривая 3; ямка  $t = 5$  нм — кривая 4

Посмотрим, что случится, если уменьшить толщину дефекта. Динамику можно видеть на рис. 3, где приведена интенсивность для сфероидальных дефектов  $D = 120$  нм,  $t = 5, 10$  нм. Как и раньше, отличие в интенсивности для ямки и бугорка наиболее заметно проявляется для направления зеркального отражения плоской волны. Попробуем увеличить диаметр дефекта. На рис. 4 приведены результаты для  $D = 180$  нм,  $t = 5, 10$  нм. Приведенные результаты, аналогичны предыдущим, наибольшее различие наблюдается в направлении зеркального отражения. Казалось бы, можно попытаться построить алгоритм отличия бугорка от ямки, основываясь на отношении откликов вперед и назад, в ограниченном диапазоне углов наблюдения, как это было предложено делать ранее, чтобы отличать полноразмерную частицу от ямы. Однако эта идея не работает, что иллюстрируется результатами, приведенными на рис. 5 для  $D = 60$  нм,  $t = 10$  нм. В этом случае в окрестности направления зеркального

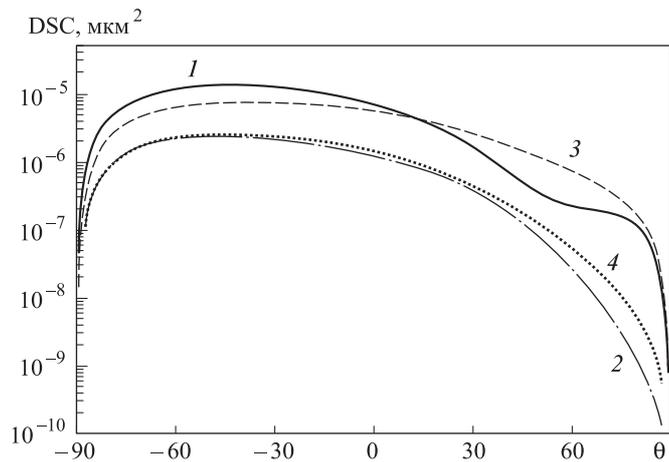


Рис. 4. DSC для дефекта  $D = 180$  нм,  $\theta_0 = 60^\circ$ . Бугорок  $t = 10$  нм — кривая 1; бугорок  $t = 5$  нм — кривая 2; ямка  $t = 10$  нм — кривая 3; ямка  $t = 5$  нм — кривая 4

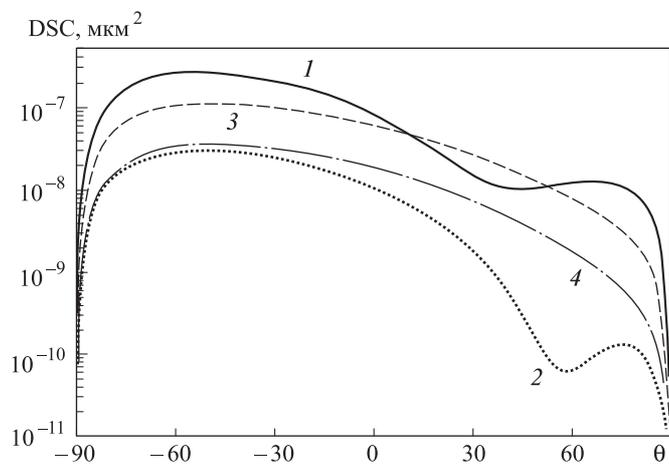


Рис. 5. DSC для дефекта  $D = 60$  нм,  $\theta_0 = 60^\circ$ . Бугорок  $t = 10$  нм — кривая 1; бугорок  $t = 5$  нм — кривая 2; ямка  $t = 10$  нм — кривая 3; ямка  $t = 5$  нм — кривая 4

отражения кривая интенсивности для бугорка лежит как ниже интенсивности для ямки, так и выше нее.

### Заключение

В работе реализован метод дискретных источников применительно к анализу рассеивающих свойств фиктивной частицы, расположенной на границе раздела полупространств. На основе программной реализации проведено исследование рассеивающих свойств малоаметных дефектов кремниевой подложки. Проведенное исследование показало, что имеется существенное отличие рассеивающих свойств «классических» дефектов (частиц и ям) от дефектов малой толщины. Возможно, что подобный результат не является неожиданным, ибо при уменьшении толщины дефекта величины рассеяния от бугорка и ямки становятся близкими друг другу, это особенно заметно на примере, приведенном на рис. 4 для максимальной толщины дефекта  $t = 5$  нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 12-01-00541).

## Список литературы

1. Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г. // Фундамент. и прикл. матем. 1998. **4**, № 3. С. 889.
2. Eremin Yu.A., Orlov N.V., Sveshnikov A.G. Models of Electromagnetic Scattering Problems Based on Discrete Sources Methods Generalizes Multipole Techniques for Electromagnetic and Light Scattering / Ed. by T. Wriedt. Amsterdam, 1999, P. 39.
3. Eremin Yu.A., Stover J.C., Orlov N.V. // Optical Engineering. 1999. **38**, N 8. P. 1296.
4. Nebeker V.M., de la Peña J.L., Hirleman E.D. // J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2001. **70**, N 4-6. P. 749.
5. Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2009. № 1. С. 32.
6. Еремин Ю.А. // Дифференц. уравнения. 2009. **45**, № 9. С. 1349.
7. Shubitidze F., Anastassiou H.T., Dimitra I., Kaklamani D.I // IEEE Trans. AP. 2004. **52**, N 1. P. 302.
8. Baryshev A.V., Eremin Yu.A. // PIERS Proc. August 18-21. Moscow, Russia, 2009. P. 1699.
9. Боголюбов А.Н., Минаев Д.В., Свешников А.Г. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 2002. **42**, № 4. С. 514.
10. Борн М. Вольф Э. Основы оптики. М., 1973.
11. Еремин Ю.А., Свешников А.Г. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. **47**, № 2. С. 266.
12. Дмитриев В.И. Электромагнитные поля в неоднородных средах. М., 1969.
13. Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2011. № 6. С. 59.

## Employing fictitious particles under investigation of scattering properties of an undistinguished substrate defects

Yu. A. Eremin<sup>1,a</sup>, A. G. Sveshnikov<sup>2,b</sup><sup>1</sup>Department of Mathematical Physics, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.<sup>2</sup>Department of Mathematics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.E-mail: <sup>a</sup>eremin@cs.msu.ru <sup>b</sup>sveshnikov@phys.msu.ru.

Modification of the Discrete Sources Method based on employing of «fictitious» particle has been suggested and realized. The approach enables to perform an effective numerical analysis of the scattering properties of nanodimensional substrate defects such as shallow pit and shallow bump. Numerical results demonstrated the opportunities of the corresponding computer module have been presented.

*Keywords:* substrate nanodimensional defect, numerical analysis, Discrete Sources Method, fictitious particle.

PACS: 42.25.-p; 42.25.Fx.

Received 1 July 2013.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 6(2013).

## Сведения об авторах

1. Еремин Юрий Александрович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-17-76, e-mail: eremin@cs.msu.ru.
2. Свешников Алексей Георгиевич — доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: sveshnikov@phys.msu.ru.