

ČESKÝ METROLOGICKÝ INSTITUT

OBLASTNÍ INSPEKTORÁT BRNO

ZÁVĚREČNÁ ZPRÁVA Č. 6014-TR-Z0001-23

o plnění úkolu TR č. UTR23E601417

Kombinace optických a dotykových měření v nanometrologii

Odpovědný řešitel:	Mgr. Petr Klapetek, Ph.D.
--------------------	---------------------------

Vypracovali: Mgr. Petr Klapetek, Ph.D. Mgr. Miroslav Valtr, Ph.D. Bc. Václav Hortvík Mgr. Radek Šlesinger, Ph.D.

Ředitel VOJ: Ing. Radovan Wiecek ředitel OI Brno

Datum: 21. listopadu 2023

Schválil: Dr. Ing. Radek Strnad, PhD. odborný ředitel pro vědu, výzkum a inovace



RESUMÉ

Cílem úkolu bylo vyvinout nástroje pro měření kritických rozměrů kombinací dotykových metod (např. AFM) a optických měření (např. měření rozptylu) s využitím metod pokročilého numerického modelování pro interpretaci a fúzi dat měřených na velkých plochách. Hlavní metoda, na kterou jsme se zaměřili, byla koherentní Fourierovská sketerometrie. Vytvořili jsme pilotní experimentální zařízení, provedli řadu měření, upravili výpočetní nástroje tak, aby byly využitelné pro interpretaci dat, a výsledky porovnali s měřením pomocí AFM, reprezentujícím dotykové metody. Jak v oblasti experimentální, tak v oblasti numerické analýzy jsme navázali kontakty se zahraničními pracovišti zabývajícími se touto metodou a dohodli různá porovnávací měření a výpočty tak, aby bylo možné metodu dále rozvíjet.

RF	ESUM	IÉ	2
OI	BSAH	i de la constante de la constan	2
1	ÚVC)D	3
2	POP	'IS ŘEŠENÍ ÚKOLU	5
	2.1	Měření rozptylu pomocí koherentní Fourierovské sketerometrie	5
		2.1.1 Experimentální uspořádání	6
	2.2	Interpretace CFS dat	12
		2.2.1 Využití CFS jako senzoru	12
		2.2.2 Metoda FDTD a její využití v CFS	12
		2.2.3 Optimalizace FDTD pro výpočty na novém výpočetním clusteru	18
		2.2.4 Optimalizace výpočtu vzdáleného pole	21
	2.3	Vyhodnocení dat a kombinace s dotykovými měřeními	24
3	DOS	SAŽENÉ VÝSLEDKY	25
	3.1	1D mřížka	25
		3.1.1 Zjednodušená metoda	25
		3.1.2 Vyhodnocení pomocí metody FDTD	28
	3.2	2D mřížky	32
4	ČER	RPANÉ NÁKLADY NA ÚKOL	42
5	ZÁV	/ĚR	43
SE	ZNA	M BIBLIOGRAFICKÝCH CITACÍ	44
PŘ	ÍLOI	HA Č. 1 – PLÁNOVACÍ LIST	45
PŘ	ÍLOI	HA Č. 2 – POUŽITÉ ZKRATKY	48
PŘ	ÍLOI	HA Č. 3 – SEZNAM TABULEK A OBRÁZKŮ	49



ÚVOD 1.

V tomto úkolu technického rozvoje jsme se snažili o rozvoj metod optické délkové metrologie v mikrometrové a sub-mikrometrové oblasti, se zaměřením na periodické struktury, jako jsou difrakční mřížky. Problematikou měření periodických struktur pomocí mikroskopie atomárních sil jsme zabývali již v minulém roce a proto zde v rámci motivace uvádíme příklad takových struktur z loňské zprávy. Jak je možné vidět z obrázku 1, periodické struktury se kterými se v metrologii setkáváme můžou mít rozmanitou podobu a můžou zahrnovat různé typy difrakčních mřížek či samouspořádaných struktur. Vzorky mohou být vytvořené pro účely metrologie samotné (například difrakční mřížky využívané jako referenční vzorky pro přenos návaznosti), nebo pro zajištění nějaké funkce ve složitějším zařízení (difrakční mřížky pro monochromátory, pole optických senzorů v CCD, apod.



Obrázek 1: Příklady periodických struktur se kterými se setkáváme v nanometrologii (zpráva ÚTR 2022)

V tomto roce jsme se soustředili především na optické metody a jejich využití při měření periodických struktur. Dlouhodobým cílem našeho pracoviště je rozšířit spektrum měřicích metod k pokročilým bezkontaktním metodám, které, oproti metodám skenujícím sondou, jako je mikroskopie atomárních sil, lépe snášejí nasazení v průmyslovém prostředí. Měření velmi malých rozměrů optickými metodami je obtížné, neboť narážíme na limity dané vlnovou délkou světla. Pokud se nám nicméně podaří v určitých specifických případech převést délkové rozměry na veličiny, které dokážeme měřit velmi přesně, jako je například fázový rozdíl mezi dvěma laserovými svazky v interferometrii, můžeme dojít i optickými metodami k překvapivě dobrým výsledkům. Nemusí se přitom nutně jednat o překonání difrakčního limitu – spíše vhodně využijeme specifických vlastností studovaných vzorků, tj. v našem případě jejich periodicity, tak abychom získali průměrné hodnoty jejich geometrických parametrů s přesností vyšší, než by nám umožnilo například měření optickým mikroskopem.

Optická měření velmi malých struktur jsou relevantní v mnoha oblastech průmyslu. Optické enkodéry, které jsou na interakci světla s velmi malými periodickými strukturami založeny se využívají jako přesné senzory polohy v přesných měřicích či obráběcích strojích. V souvislosti se snahami o návrat polovodičových technologií do Evropy se také zvyšuje potřeba měření kritických rozměrů motivů využívaných pro různé účely v mikroelektronice, a i v tomto případě se často jedná o struktury o velikostech v řádu mikrometrů. Pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) je možné provádět řadu takových měření a ČMI tyto metody dlouhodobě rozvíjí. Paralelně se nicméně rozvíjí také pokročilé optické metody,



Počet listů: 4/50

které na některých pracovištích, se kterými spolupracujeme (např. na Technické univerzitě v Delftu, či metrologických institutech DFM a VSK), dosáhly velmi zajímavých výsledků. Jednou z těchto metod je koherentní Fourierovská sketerometrie (Coherent Fourier Scatterometry), kterou jsme zvolili za hlavní metodu rozvíjenou v rámci úkolu technického rozvoje v tomto roce. Jistou motivací byla i snaha pokusit se získat maximum informací o této metodě v období, kdy se s odborníky na ni pravidelně scházíme v rámci řešení evropských metrologických projektů a v pozitivním slova smyslu tak využít příležitost ke konzultacím.

Naší snahou bylo zahrnout celý řetězec potřebný pro měření pomocí CFS, od experimentu až po vyhodnocení. Proto se v následujícím textu snažíme nejen vyvinout naše vlastní zařízení pro měření pomocí CFS, ale také porovnat jeho výsledky s přesností polohovacích systémů a s měřeními pomocí mikroskopie atomárních sil. Měření kombinujeme také při vytváření numerických modelů pro interpretaci dat z CFS, kdy využíváme měření výšky pomocí mikroskopie atomárních sil pro stanovené počáteční hodnoty výšky struktur. S ohledem na to, že řešení inverzní úlohy – nalezení geometrie z CFS měření – je velmi obtížné, jak to pozorují i naši zahraniční kolegové, je každá doplňující informace, která může snížit výpočetní náročnost metody, velmi užitečná.

Problematika CFS je velmi rozsáhlá, a v rámci jednoletého projektu není možné obsáhnout všechny její aspekty. Snažili jsme se proto především provést experimentální i numerické kroky, které by nám pomohly odhalit náročnost metody, její aplikovatelnost na námi studované vzorky a definovat další možné směry rozvoje. Proto také tato zpráva obsahuje řadu technických a metodických detailů, na kterých by bylo možné stavět v dalším rozvoji optických měření.



POPIS ŘEŠENÍ ÚKOLU 2.

2.1. Měření rozptylu pomocí koherentní Fourierovské sketerometrie

Koherentní Fourierovská sketerometrie je technika, jejíž rozvoj v metrologických institutech můžeme spojovat především s vývojem metod metrologické návazností v oblasti mikroelektronického průmyslu. Metrologické instituty v severozápadní Evropě (dánské DFM, holandské VSL, a německé instituty PTB a BAM) jsou tradičně velmi aktivní ve spolupráci s polovodičovými firmami, zejména s institutem IMEC, který je špičkovým výzkumným centrem v této oblasti, případně se špičkovými technologickými firmami jako je ASML. Požadavky na co nejpřesnější sesazování masek využívaných k vytváření struktur v polovodičovém průmyslu vedly k řadě metrologických vývojových aktivit v oblasti metrologie difrakčních prvků, jako jsou 1D a 2D difrakční mřížky. Právě ty jsou totiž často využívány pro polohování křemíkových desek vůči maskám v pokročilých depozičních aparaturách. Velkou skupinou vyvíjených technik jsou přitom optické metody, jejichž výhodou je rychlé a šetrné použití.

Měření difrakčních mřížek pomocí analýzy odraženého světla je velmi intuitivní postup a v ČMI byl využíván v minulosti například při některých mezinárodních porovnáních. V nejjednodušším uspořádání je mřížka osvětlena ze směru kolmého na její rovinu kolimovaným svazkem a v poloprostoru nad ní jsou detekovány polohy difrakčních maxim, tj. směrů šíření rozptýleného světla, které, v závislosti na periodě mřížky, tvoří hustší či řidší síť pravidelně rozmístěných paprsků. Pro úhly jednotlivých maxim platí v případě 1D mřížky (tj. například sady rovnoběžně uspořádaných vrypů) vztah

$$\theta_m = \arcsin\left(\sin\theta_i - \frac{m\lambda}{d}\right) \tag{1}$$

kde θ_i je úhel dopadu, λ je vlnová délka světla, d je perioda mřížky a m je řád difrakčního maxima.

Přímé měření poloh difrakčních maxim na stínítku má svá omezení. Již z praktického hlediska není snadné s vysokou přesností maxima v poloprostoru lokalizovat a proto se nabízí možnost jejich zachycení pomocí nějaké optické soustavy, kamery a následného vyhodnocení v počítači. Kolimovaný svazek navíc neposkytuje vysoké prostorové rozlišení a není tedy možné například studovat plošnou nehomogenitu v uspořádání objektů tvořících mřížku.

Koherentní Fourierovská sketerometrie (CFS – Coherent Fourier Scatterometry) je rozšířením prostého měření naznačeného v předchozích odstavcích, přičemž je dosaženo jak vyššího prostorového rozlišení, tak vyšší citlivosti. Princip metody je naznačen v obr. 2. Studovaná mřížka je osvětlena fokusovaným laserovým světlem, typicky s využitím objektivu s velkou numerickou aperturou. To zapříčiní, že namísto jednoho směru dopadu je mřížka osvětlena pod velkým množstvím úhlů. Rozložení dopadajících úhlů si můžeme představit jako kruh o průměru souvisejícím s numerickou aperturou objektivu. Obdobě i difraktované svazky budou vykazovat takové rozložení směrů, tj. namísto jednotlivých diskrétních úhlů a maxim pozorujeme také kruhy, o stejném průměru. Optická sestava je přitom seřízena tak, abychom zaznamenali svazky tak, jak letí prostorem (tj. jedná se o zaostření do nekonečna, nikoliv na rovinu čipu kamery jako v optické mikroskopii). Pokud bychom pro takový experiment použili nekoherentní osvětlení, výsledek by byl stále obdobný konvenčnímu měření, jen by jednotlivá difrakční maxima vypadala jako částečně se překrývající kruhy. Využití koherentního osvětlení však metodu dále posouvá, protože dochází k interferenci mezi jednotlivými řády difrakce v oblasti překryvů stop od různých řádů difrakce. Interferenční jevy jsou velmi citlivé na vstupní parametry (posunutí mřížky, její geometrické a optické parametry, polarizace světla), což výrazně zvyšuje možnosti metody.

Jak bylo naznačeno v úvodu této kapitoly, s metodou CFS jsme se v minulosti setkávali průběžně při spolupráci s ostatními metrologickými instituty (DFM, VSL, PTB) i akademickými partnery, kteří stáli u jejího zrodu (TU Delft). V některých případech jsme se dokonce podíleli na interpretaci dat, například pomocí numerických simulací, ale obecně stály optické difrakční metody, až do tohoto roku, mimo oblast





Obrázek 2: Princip konvenčního měření difrakce na mřížce (A) a měření pomocí CFS (B). V případě CFS dopadá světlo na mřížku pod mnoha směry a pod mnoha směry se také šíří difraktované svazky, což vede k překryvu svazků odpovídajících různým řádům difrakce.

našeho zájmu. Nicméně, ve snaze vyvíjet metody které by se více přiblížily očekávaným požadavkům polovodičového průmyslu, a také s ohledem na fakt, že požadavky na naše simulace v této oblasti stále vzrůstaly a s metodou jsme se stále více setkávali, jsme se rozhodli pokusit se tuto metodu vyvinout i v rámci naší laboratoře – jak po experimentální stránce, tak po stránce zpracování dat.

2.1.1. Experimentální uspořádání

Schéma experimentálního uspořádání pro CFS experiment je překvapivě jednoduché. Jak jsme nicméně při experimentech zjistili, problémy se skrývají v řadě detailů, které ze schématu ani publikovaných prací není možné vyčíst, jako je vliv interního uspořádání objektivu, rovinnost vlnoploch, či minimalizace interferenčních jevů na jednotlivých optických prvcích. Proto je také nezanedbatelnou částí této zprávy popis jednotlivých kroků justáže a komentáře k různým chybovým jevům, se kterými se je možné při konstrukci CFS zařízení setkat.

Experimentální uspořádání je uvedeno na obrázku 3. Jako zdroj světla pro CFS jsme použili nestabilizovaný HeNe laser, který emituje na vlnové délce 633 nm. Svazek je pomocí kolimátoru Fiberport od firmy Thorlabs navázán do jednomodového vlákna, na jehož druhém konci je kolimátor s pevnou ohniskovou vzdáleností (Thorlabs). Použili jsme kolimátor s dlouhou ohniskovou vzdáleností (18,24 mm), abychom získali co možná nejširší svazek. Dále svazek postupuje přes půlvlnnou destičku a polarizátor, což nám umožní nastavit polarizaci světla, které dopadá na vzorek; kromě toho můžeme natočením rychlé osy půlvlnné destičky regulovat intenzitu světla. Soustava čoček s geometrií "best form" L_1 a L_2 s ohniskovými vzdálenostmi 40 mm a 150 mm pak tvoří teleskop, který svazek dále rozšíří. Pomocí štěrbiny, která je našroubovaná do děliče svazku typu pellicle BS₁, je v případě potřeby možné svazek opět zmenšit. Z experimentů vyplývá, že pokud je svazek větší než vstupní štěrbina na objektivu, kterým se soustřeďuje svazek na vzorek, objeví se na interferenčním obrazci pozorovaném kamerou soustředné kruhy. Jako vhodný objektiv se z tohoto pohledu zdá být objektiv s velkou pracovní vzdáleností od firmy Mitutoyo se zvětšením 10x a numerickou aperturou NA=0,28. Z diskuze s kolegy z TU Delft dále vyplynulo, že na kvalitu interferenčního obrazce bude mít velký vliv i samotná konstrukce či design objektivu, bude např. velmi záležet na vzdálenosti první čočky uvnitř objektivu od jeho vstupní štěrbiny. V dizertační práci [1] byl kupříkladu použit objektiv Leica N PLAN L 20x/0.40. Také je důležité zmínit, že jakékoliv rovné plochy ve optické trase svazku mohou způsobit nežádoucí interference na obrazci pozorovaném kamerou. Z tohoto důvodu jsme použili právě "best form" čočky, které jsou bi-konkávní, nebo zmiňovaný typ děliče svazku. Pokud by nebylo potřeba nastavovat polarizaci nebo intenzitu, bylo by z tohoto důvodu



Počet listů: 7/50



Obrázek 3: Schéma sketerometru. HWP – půlvlnná destička, L – čočka, BS – dělič svazku, M – zrcátko.

vhodnější půlvlnnou destičku a polarizátor také vynechat.

V aktuální konfiguraci jsme na kameře pozorovali rozložení amplitudy světla odraženého od vzorku. Pokud bychom ovšem z děliče BS₁ sundali záslepku tak, aby se mohl svazek odrazit i od zrcátka M₁, vytvořili bychom Michelsonův interferometr, kde mezi sebou interferují svazky odražené od zrcátka a od vzorku. Na kameře bychom pak pozorovali rozložení fáze. To může být užitečné pro zmapování rovinnosti vlnoplochy. Pro měření periody mřížky jsme nicméně v děliči svazku záslepku ponechali a zaznamenávali tak amplitudu. Svazek po odrazu od vzorku podruhé prošel objektivem, odrazil se na děliči BS_1 , prošel děličem BS₂ a po odrazu od zrcátka M₂ dopadl na čip kamery. Čočka L₃ s ohniskovou vzdáleností 200 mm nebyla během CFS měření instalována. Tato čočka společně s LED diodou (Thorlabs, 635 nm), kolimační čočkou L_4 a děličem BS₂ sloužila pouze pro nastavení místa pro měření na vzorku. Pomocí čočky L_3 se původně rovnoběžný svazek zfokusuje na čip kamery. Vzorek byl umístěn na 2D goniometru, abychom mohli nastavit jeho polohu vůči optické ose sketerometru, ten pak byl namontován na dvouosý stolek vybavený piezoposuvy pro přesné polohování vzorku. Vyzkoušeli jsme dva stolky – Thorlabs NF3D2P50 a model Hera P-622K110 od Physik Instrumente. Druhý jmenovaný stolek byl vybavený enkodéry pro odměřování polohy, takže jej bylo možné provozovat v režimu zpětné vazby. Fotografie popsané sestavy je na obr. 4 vlevo. Při měření s objektivem Mitutoyo, který má relativně malou numerickou aperturu se ukázalo, že bude nutné zmenšit interferenční obrazec tak, aby se vešel na čip kamery. Toho jsme dosáhli vložením dalších dvou čoček, které vytvořily druhý teleskop. Použili jsme kombinaci "best form" čoček s ohniskovými vzdálenostmi 75 mm a 40 mm. Sestava byla dále modifikována tak, že za děličem BS_2 byla vložena dvě nastavitelná zrcátka, pomocí kterých jsme mohli doladit směr a polohu svazku tak, aby optimálně dopadal na čip kamery, a pevné zrcátko, které pouze změnilo optickou dráhu svazku o 90°. Modifikovaná sestava je na obr. 4 vpravo.

V obou popisovaných sestavách se pracuje s rovnoběžnými svazky. Je tedy například potřeba nasta-





Obrázek 4: Fotografie původní sestavy sketerometru (vlevo). Modifikovaná varianta s druhým teleskopem je zobrazena vpravo.

vit přesně rozestup čoček, které navzájem tvoří teleskop, nebo nastavit polohu objektivu vůči povrchu vzorku tak, aby byla rovna pracovní vzdálenosti objektivu. Pro tyto účely se osvědčil tzv. shear interferometr, který je založený na principu interference světla na klínové vrstvě. Pokud svazek není rovnoběžný, proužky na matnici budou natočené (obr. 5 vlevo). Cílem je tedy nastavit rozestup čoček tvořících teleskop tak, aby proužky směřovaly svisle (obr. 5 vpravo). Další možností jak zkontrolovat vzdálenost mezi objektivem a vzorkem je pomocí samotného interferenčního obrazce pozorovaného na kameře. Na obr. 6 vlevo jde vidět, že na místech, kde interferuje nultý difrakční řád s prvním, jsou vidět proužky. Pokud je objektiv ve správné vzdálenosti od vzorku, oblasti jsou bez proužků, jak je ukázáno na obrázku 6 vpravo.

Pro testovací měření jsme využili 1D mřížku RSB8, kterou jsme získali v rámci řešení EMPIR projektu BeCOMe od kolegů z National Physical Laboratory. Na obr. 7 vlevo je zobrazen snímek 1D mřížky s nominální periodou 2 μ m. Snímek byl pořízen se zapnutým LED osvětlením a vloženou čočkou L₃ (viz obr. 3). Uprostřed můžeme zároveň vidět stopu HeNe laseru a nastavit si vzorek do požadované polohy. Pro získání interferenčního obrazce LED osvětlení vypneme a čočku L₃ vyjmeme. Na obr. 7 uprostřed vidíme, že obrazec vyplňuje celý čip kamery. Výsledky v této zprávě byly pořízeny s ethernetovou kamerou od IDS Imaging UI-6250SE-M-GL se senzorem o velikosti 1/1.8". Pokud bychom chtěli pozorovat obrazec celý, museli bychom použít kameru s větším senzorem. Alternativou, kterou jsme nakonec zvolili, bylo použít další teleskop a celý obrazec si pomocí něj zmenšit. Výsledek je na obr. 7 vpravo, kde vidíme, že nyní se již obrazec na senzor kamery vejde celý.

Jak již bylo zmíněno, objektiv je důležitou komponentou sketerometru, na které závisí, jak bude vypadat interferenční obrazec. Porovnali jsme tak několik objektivů, které máme na oddělení k dispozici. Pro tyto účely posloužila 2D mřížka označovaná jako L₁ s nominální periodou 4 μ m, jejíž optický snímek je na obr. 8. Na obrázcích 9 a 10 jsou pak vyobrazeny interferenční obrazce. Na prvním z těchto obrázků





Obrázek 5: Proužky na matnici na shear interferometru jsou v případě rovnoběžného svazku natočeny svisle, jak je patrné na obrázku vpravo.



Obrázek 6: Interferenční obrazec pozorovaný na kameře. Vlevo je případ špatně zaostřeného objektivu, vpravo je vzdálenost mezi objektivem a vzorkem správná.

je porovnání objektivu Mitutoyo s 0,28 NA a objektivu Zeiss s podobnou numerickou aperturou o velikosti 0,25. Zvětšení obou objektivů je desetinásobné. Je patrné, že zatímco na snímku pořízeném pomocí objektivu Mitutoyo je možné vidět hranice jednotlivých difrakčních řádů, na snímku pořízeném Zeiss objektivem tyto hranice pozorovány nejsou. Srovnání dvou objektivů Olympus je pak na obr. 10. Vlevo je obrazec pořízený objektivem se zvětšením 4x a velmi malou numerickou aperturou (0,1). V tomto případě dochází jen malému překryvu nultého a prvního difrakčního řádu. Vpravo je uveden snímek pořízený objektivem se zvětšením 20x a relativně velkou numerickou aperturou (0,4). I tady můžeme vidět překryvy různých difrakčních řádů, ale nejsou tak ostré jako v případě objektivu Olympus s menším zvětšením nebo v případě objektivu Mitutoyo. Z uvedeného je patrné, že pro mřížku s danou periodou je potřeba zvolit objektiv s vhodnou numerickou aperturou. Pokud by byla moc malá, jednotlivé difrakční řády se nebudou překrývat, nebo naopak pokud bude moc velká, bude spolu interferovat několik vyšších difrakčních řádů, což pak bude komplikovat zpracování dat. Během experimentů jsme přišli na možnost si uměle zmenšit numerickou aperturu objektivu pomocí štěrbiny vložené do optické dráhy svazku někam před objektiv. To ale zase s sebou přináší podstatné zhoršení kvality pozorovaného obrazce, protože se začnou objevovat parazitní jevy spojené s difrakcí svazku na kruhové štěrbině.





Obrázek 7: Optický snímek 1D mřížky s nominální periodou 2000 nm. Interferenční obrazec – bez teleskopu (uprostřed) a s teleskopem (vpravo).



Obrázek 8: Optický snímek 2D mřížky L1 s nominální periodou 4 μ m.



Obrázek 9: Srovnání interferenčních obrazců na mřížce L1. Vlevo je obrázek pořízený objektivem Mitutoyo 10x (0,28 NA), vpravo pak obrázek pořízený objektivem Zeiss 10x (0,25 NA).





Obrázek 10: Srovnání interferenčních obrazců pořízených pomocí objektivů Olympus. Vlevo je obrázek pořízený objektivem se zvětšením 4x (0,1 NA), vpravo pak obrázek pořízený objektivem se zvětšením 20x (0,4 NA).



Počet listů: 12/50

2.2. Interpretace CFS dat

Výsledkem měření metodou CFS je v nejjednodušším případě obrázek mapující rozložení směrů a interferencí světla rozptýleného difrakční strukturou. V případě využití objektivu s velkou numerickou aperturou (tj. s malou stopou v porovnání s periodou difrakční struktury) je výsledkem sada obrázků pro různá posunutí vzorku. Na rozdíl od některých jiných měřicích metod tedy nedostáváme přímo výsledek, ale výsledek musíme získat dalším zpracováním, typicky fitováním experimentálních dat vhodně zvoleným modelem. S ohledem na fakt, že výpočty odrazu světla z difrakční struktury jsou výpočetně poměrně náročné, není fitování, tj. řešení inverzního problému kdy chceme najít takové parametry modelu, které poskytnou pozorovaný difrakční obrazec, snadné. I u kolegů z partnerských metrologických institutů je tato část úlohy považována za úzké hrdlo v celém postupu a metodami fitování CFS dat se zabývá řada vědeckých pracovišť. Při naší práci v tomto roce jsme se nesnažili zreplikovat všechny dostupné metody, ale zaměřili jsme se na dvě metody interpretace dat:

- využití CFS pouze jako přesného senzoru laterálního posunu mřížky, tj. interpretaci dat bez fitování optickým modelem,
- využití metody konečných diferencí v čase (FDTD Finite Difference in Time Domain) pro fitování optickým modelem.

Vybrané metody představují v podstatě dva extrémy složitosti vyhodnocení dat z CFS. V praxi se často setkáváme s fitováním pomocí metody RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis), která je schopna pro jednoduché periodické struktury modelovat optickou odezvu podstatně rychleji. Touto metodou disponuje řada našich zahraničních partnerů, proto nám připadalo z pohledu našich pilotních experimentů zajíma-vější využít metodu FDTD, která je obecnější a máme s ní již praktické zkušenosti. Pro překonání omezení metody RCWA se v literatuře také můžeme setkat s využitím metody konečných prvků (FEM – Finite Element Method), nicméně ta je svou složitostí a výpočetní náročností obdobná metodě FDTD.

2.2.1. Využití CFS jako senzoru

Vzhledem k tomu, že v CFS dochází k interferenci difrakčních řádů, je tato metoda z principu velmi citlivá. Aniž bychom museli složitě fitovat naměřená data optickým modelem, můžeme jednoduše posouvat studovaný vzorek a dívat se, jak se mění interferenční obrazec. Pokud například poslouží jako vzorek difrakční mřížka, kde se nachází nějaká periodická struktura, bude se při posouvání vzorku i periodicky měnit interferenční obrazec. Ze série těchto měření pak můžeme určit periodu dané mřížky. Naopak budeme-li periodu mřížky znát, můžeme zmapovat linearitu stolku, který byl pro posun mřížky použit. Ve srovnání se standardní metodou pro měření periody mřížek – AFM – je tato metoda rychlá, bez jakéhokoliv mechanického kontaktu se vzorkem a nenáročná na přístrojové vybavení. Je otázkou, jakých nejistot se dá dosáhnout, pravděpodobně to nebudou hodnoty srovnatelné s AFM, ale i tak by se mohlo jednat o zajímavou a pro zákazníky cenově atraktivní alternativu měření periody mřížky.

2.2.2. Metoda FDTD a její využití v CFS

Metoda FDTD (Finite-Difference Time-Domain) patří mezi nejčastěji využívané přístupy pro řešení Maxwellových rovnic nano- a mikroměřítku. V případě lineárního, izotropního materiálu je možné získat základní diferenční rovnice využívané ve FDTD diferencováním Maxwellových rovnic ve tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E} - \frac{1}{\mu} (\mathbf{M} + \sigma^* \mathbf{H})$$
(2)

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{J} + \sigma \mathbf{E})$$
(3)



kde E a H jsou vektory elektrické a magnetické intenzity, μ je magnetická permeabilita, ε je elektrická permitivita, σ je elektrická vodivost σ^* je magnetický ekvivalent elektrické vodivosti a M, resp. J je proudová hustota odpovídající magnetickým a elektrickým zdrojům. Základem metody FDTD je, kromě odvozených diferenčních rovnic, koncept počítání hodnot vektorů elektrického a magnetického pole ve dvou mřížkách posunutých o polovinu periody, což umožňuje velmi snadno vyčíslit rotace, které se v Maxwellových rovnicích vyskytují. Dalším důležitým aspektem je velmi hustá diskretizace, alespoň $\lambda/10$ kde λ je vlnová délka zdroje světla a také dostatečně malý krok v čase. To limituje využití metody na výpočty v oblasti prostoru o velikosti jednotek až desítek vlnových délek, což je v případě viditelného světla právě oblast v řádu stovek nanometrů až desítek mikrometrů. Pomocí metody FDTD jsme tedy schopni spočítat rozložení elektromagnetického pole v určité oblasti, v našem případě v objemu ve kterém světlo interaguje s difrakční strukturou, a pomocí dalších algoritmů získat také hodnoty pole mimo tuto oblast, v našem případě na čipu kamery.

Metodě FDTD se na našem pracovišti věnujeme dlouhodobě. Naší prvotní motivací byly výpočty efektivity struktur pro zachytávání světla v solárních článcích. Po útlumu výzkumu v oblasti solárních článků v Evropě (a přesunutí výroby do Číny) jsme metodu začali využívat v oblasti interpretace dat v rastrovací optické mikroskopii v blízkém poli. Průběžně jsme vyvíjeli náš vlastní kód, pro urychlení výpočtu spustitelný na grafických kartách a ten jsme v nedávné době také prezentovali v časopise Computer Physics Communications. Hlavní výhodou našeho programu GSvit je jeho schopnost zpracovávat povrchovou drsnost a objemovou nehomogenitu vzorků, což by v případě analýzy difrakčních struktur metodou CFS byl až poměrně pokročilý problém. Výhodou z pohledu interpretace dat v CFS je především řada let zkušeností s využitím tohoto programu, a možnost snadno provádět jeho úpravy aby bylo možné jej na řešení problémů v CFS adaptovat.

Cílem tohoto textu není popisovat metodou FDTD jako takovou, pro tyto účely je možné využít řadu knih, nicméně pro úplnost zde stručně popisujeme některé klíčové prvky a pojmy, ze kterých se FDTD simulace skládá. Celý výpočetní prostor je rozdělen pravidelnou sítí se vzájemně kolmými stěnami na tzv. voxely, tj. krychle či hranoly. Hrana voxelu je velká jednotky až desítky nanometrů. V objemu a na stěnách voxelu jsou umístěny jednotlivé komponenty vektorů elektrického a magnetického pole. Jeden voxel je tedy základní stavební jednotkou, v rámci něhož jsou hodnoty polí v daném časovém kroku konstantní. Výpočetní prostor je nutné nějak ohraničit. Pro tyto účely se nejčastěji používají buď periodické okrajové podmínky, nebo absorpční okrajové podmínky, které simulují šíření elektromagnetického pole ven z výpočetního prostoru, bez odrazu na jeho okraji. Uvnitř výpočetního prostoru jsou umístěny objekty, jejichž interakci s elektromagnetickým polem chceme studovat. Každý voxel může mít v principu jinak nastavené hodnoty permitivity, permeability a elektrické i magnetické vodivosti. Pro excitaci pole používáme zdroje – například dipól, nebo rovinnou vlnu, kterou do prostoru můžeme přivést přes virtuální kvádr na jehož hranách přičítáme a odečítáme předem spočítané hodnoty elektrického a magnetického pole odpovídající rovinné vlně. Kombinací více rovinných vln můžeme vytvořit i složitější zdroje, například fokusovaný zdroj světla. Konečně, pro vyhodnocení časového vývoje vektoru elektrického pole v oblasti mimo výpočetní prostor můžeme využít transformaci z blízkého do vzdáleného pole, která integrací polí po povrchu uzavřeného prostoru dokáže, takové výsledky zprostředkovat.

Pro výpočty jsme využili následující nastavení:

- Aby bylo možné zahrnout větší množství struktur na povrchu byl výpočetní prostor typicky podstatně větší v laterálním směru, než ve směru normálovém ke studovanému povrchu, např. 500 × 500 × 100 voxelů. Velikost voxelu byla 10–50 nm.
- Výpočetní prostor byl ohraničen absorpčními okrajovými podmínkami.
- Mřížka byla zadána jako množina jednoduchých geometrických objektů vytvořených skriptem. Materiál byl buď křemík (optické parametry z databáze SOPRA), nebo dokonalý elektrický vodič.



- Zdroj byl vytvořen složením rovinných vln. Numerická apertura objektivu, tj. i maximální úhel ze kterého v rámci zdroje přicházely rovinné vlny, byla 0.1–0.5. Pro větší numerické apertury bylo nutné integrovat velké množství vln – např. 40 úhlů od normály povrchu × 60 úhlů azimutu.
- Pro získání hodnot na stínítku (kameře) byla použita transformace z blízkého do vzdáleného pole v časové doméně. Na stínítku jsme analyzovali hodnoty intenzity s poměrně malý rozlišením, např 90x90 bodů, z důvodu vysoké výpočetní náročnosti transformace.

Typický výsledek simulace pro 1D mřížku a její různá laterální posunutí je uveden v obrázku 11. Obdobně jako v experimentu můžeme v souvislosti s posunutím mřížky pozorovat změny intenzity v oblasti překryvu difrakčních řádů, což je klíčový prvek při vyhodnocení výsledků měření. Stejný jev můžeme pozorovat i u 2D mřížky, jejíž simulace jsou v obrázku 12. Další stupeň volnosti při pohybu mřížky nám dává velké množství potenciálních posunutí a pro každé získáme jiný výsledný obrazec. Konečně v obrázku 13 uvádíme příklad výsledku pro mřížku tvořenou hexagonálně uspořádanými křemíkovými nanodrátky.

Při sestavování numerického modelu se často dostáváme před volbu optimální velikosti výpočetního modelu vs jeho rozlišení. Z pohledu výpočetní náročnosti je rozhodující celkový počet voxelů ve výpočetním prostoru, tj. jak snaha o vyšší prostorové rozlišení, tak snaha o zahrnutí velké oblasti výpočetní náročnost navyšuje, typicky s třetí mocninou. Nalezení nejmenšího využitelného module je proto poměrně zásadní problém, zejména pokud chceme výpočty využít pro řešení inverzní úlohy, tj. fitovat numerickým modelem experimentální data. V případě výpočtů v oblasti CFS bohužel potřebujeme jak velký výpočetní prostor, tak vysoké rozlišení. Na obrázku 14 je uveden příklad výpočtu pro 1D mřížku při využití stejné diskretizace (velikosti voxelu) ale různé velikosti výpočetního prostoru. Z obrázku je patrné, že menší výpočetní prostor způsobuje artefakty ve výsledku výpočtu, které souvisí s omezenou velikostí fokusova-ného zdroje. Tento jev je tedy nutné mít na paměti, pokud se snažíme výpočet optimalizovat na rychlost.

Výhodou programu GSvit je, že dokáže do výpočtu integrovat i náhodnou drsnost, nebo nehomogenity vzorku. Příklad studia vlivu drsnosti na vypočtená CFS data je znázorněn v obrázku 15. Program by tedy mohlo být možné využít i ke studiu vlivu drsnosti na CFS měření, případně k fitování hodnoty drsnosti různých částí studovaných mřížek, což je z pohledu průmyslu velmi atraktivní. Takové výpočty by byly nicméně v tuto chvíli velmi výpočetně náročné a v rámci řešení úkolu jsme se zaměřovali na mnohem jednodušší problémy, zde tento obrázek uvádíme jen jako příklad dalších možností rozvoje techniky CFS a jejího vyhodnocování metodou FDTD.





Obrázek 11: Výsledek FDTD simulace na 1D mřížce o periodě 2 $\mu m,$ různá posunutí.





Obrázek 12: Výsledek FDTD simulace na 2D mřížce o periodě 2 $\mu m,$ různá posunutí.



Obrázek 13: Výsledek FDTD simulace na hexagonální struktuře, různé numerické apertury.





Obrázek 14: Výsledek FDTD simulace na 1D mřížce pro dvě různé velikosti výpočetního prostoru: vlevo 560x560 voxelů, vpravo 400x400 voxelů.



Obrázek 15: Výsledek FDTD simulace na 1D mřížce pro hladkou a drsnou strukturu



2.2.3. Optimalizace FDTD pro výpočty na novém výpočetním clusteru

V letních měsících roku 2023 byl v prostorách ČMI OI Brno zprovozněn nový cluster pro náročné výpočty, který nahrazuje stávající HPC systém z roku 2014. Základem nového clusteru je 20 výpočetních uzlů osazených vždy dvojicí 32jádrových procesorů AMD EPYC 7543 a 512 GB operační paměti. Další jeden uzel stejného typu je navíc osazen grafickým akcelerátorem NVIDIA A100.

Výpočty metodou FDTD jsou časově poměrně náročné – iteruje se po malých časových krocích a v každém kroku je mimo jiné třeba provést v každém voxelu výpočet intenzity střídavě elektrického a magnetického pole. Jde tedy o mnohokrát opakované provádění téže, poměrně nenáročné, výpočetní operace, což dává možnost urychlit výpočet prováděním více operací souběžně. Program GSvit nabízí dvě varianty akcelerace výpočtu:

- Na grafickém akcelerátoru (GPU, graphics processing unit) s využitím nástrojů NVIDIA CUDA, které nabízejí vlastní programovací rozhraní postavené na jazyku C/C++ a zajistí pak rychlý běh na GPU s velkým počtem výpočetních vláken. Nevýhodou je však vázanost na hardware od společnosti NVIDIA.
- Na procesoru (CPU) s využitím rozhraní OpenMP. Technologie OpenMP, dostupná v překladačích jazyků C, C++ a Fortran, umožňuje paralelizaci výpočtu formou běhu ve více vláknech se sdílenou pamětí (multithreading; každé vlákno má přístup k všem proměnným v rámci paralelizované funkce, nemá-li vytvořené jejich privátní kopie). Její využití je poměrně přímočaré, neboť znamená jen doplnění úseků kódu, kde má výpočet běžet vícevláknově, vhodnými direktivami pro překladač, který sám vygeneruje potřebný kód. Programátor tak nemusí řešit distribuci dat mezi jednotlivá vlákna a jejich vzájemnou komunikaci, musí však ohlídat řádné rozdělení proměnných na sdílené a privátní, aby nedocházelo ke vzájemnému přepisování dat mezi vlákny.

Efektivně je technologie OpenMP použitelná v rámci jednoho procesoru s více fyzickými výpočetními jádry. Za hranicí jednoho CPU, byť stále v rámci víceprocesorové základní desky, nebylo pozorováno žádné další zrychlení, pravděpodobně kvůli bariéře v komunikaci mezi jednotlivými výpočetními vlákny.

Vyšší rychlosti výpočtu stále dosahují výpočty na GPU, avšak nový systém představuje zajímavou výzvu, neboť procesory s velkým počtem jader nabízí potenciál k výraznějšímu urychlení výpočtů prováděných na CPU. Velký počet fyzických procesorů dostupných v clusteru pak dává možnost současného běhu vícero samostatných výpočtů, např. v rámci simulačních studií.

Efektivita škálování víceprocesových či vícevláknových výpočtů s rostoucím počtem použitých procesorových jader obvykle klesá – to je i případ FDTD simulací v programu GSvit, jak ukazují výsledky zabudovaných testů. Příčinou může být povaha výpočetního problému, např. pokud vstupní hodnoty paralelizované funkce v nějakém bodě závisí na výsledcích téže funkce v jiném bodě, nebo také nedostatky v softwarové implementaci, které se na systémech s menším počtem výpočetních jader nemusí projevovat. Začali jsme se proto věnovat detailnější analýze výpočetního kódu a dílčím úpravám s cílem zefektivnit běh výpočtů na CPU. Z něj budou ve výsledku benefitovat i další uživatelé mimo ČMI, kteří program GSvit neprovozují na systémech s akcelerátory NVIDIA.

Překladač Součástí akceptace nového výpočetního clusteru byla mj. demonstrace chodu programu GSvit přeloženého pomocí optimalizovaných překladačů AMD AOCC (zde ve verzi 4.0), které jsou proprietárními modifikacemi překladačů Clang a Flang z projektu LLVM (verze 14). Už jen použití jiného překladače bez doplňkových optimalizací dávalo oproti výchozím překladačům GCC 12 zhruba 10% zrychlení, v závislosti na počtu vláken. Lze předpokládat, že použití dalších optimalizačních parametrů



Počet listů: 19/50

překladače, jako je generování kódu přímo pro konkrétní procesorovou architekturu, přinese ještě další zrychlení.

Profilování Základním nástrojem pro analýzu běhu programového kódu je profilování (profiling). Profilovací nástroj (profiler) sleduje, kolik času stráví běžící program v jednotlivých funkcích. Na základě výstupů z profileru se pak programátor může zaměřit na funkce s nejvyšším podílem na celkovém výpočetním času, jejichž urychlení se tak nejvíce projeví v celkové době běhu programu. K profilování jsme využili nástroj Callgrind, který je součástí volně dostupného softwaru pro dynamickou analýzu programů (tj. analýzu za běhu). Příkazem valgrind -tool=callgrind -dump-instr=yes -collect-jumps=yes -trace-children=yes PRIKAZ se spustí analyzovaný program, výsledky profilování se pak ukládají do souboru callgrind.out.PID, kde PID je identifikátor spuštěného procesu (parametr -trace-children =yes aktivuje profilování i u dceřiných procesů, pokud se program za běhu větví). Tato analýza však běh programu výrazně zpomaluje, a nelze ji proto použít pro analýzu rozsáhlých výpočtů. Nicméně zde to ani není třeba, neboť rozdělení práce lze zmapovat i na malém počtu iterací.

Výstup nástroje Callgrind lze poté komfortně analyzovat programem KCachegrind. Obrázek 16 ukazuje vizualizaci výstupu z profilování programu GSvit verze 1.9.4 se spuštěným interním testem – volný prostor, bez okrajových podmínek (pro lepší přehlednost). Užitečné je také znázornění volání funkcí s vyznačením podílu stráveného času ve formě orientovaného grafu, jak ukazuje obrázek 17.

Užitečné informace o efektivitě provedených změn přináší kromě profilování také analýza vygenerovaného strojového kódu. K rychlému experimentování lze využít interaktivní online nástroj Compiler Explorer na stránkách https://godbolt.org/, kde je možné snadno sledovat, jaký vliv na výsledek mají změny v kódu a volba použitého překladače či jeho parametrů.



Obrázek 16: Vizualizace profilování nástrojem Callgrind – čas strávený ve funkcích, před zahájením optimalizace kódu.

Funkce *sv_yee_data_ystep_e* a *sv_yee_data_ystep_h* (další znaky v jejich názvech jsou dílem překladače při automatickém generování kódu pro paralelní výpočet) představují dvě hlavní funkce výpočtu, které při střídavém volání aktualizují stav elektrického a magnetického pole. Je patrné, že podstatně více času se stráví ve funkci sv_yee_data_ystep_e, zejména v jí dále volaných funkcích sv_yee_data_get_cabs, *sv_yee_data_get_epsilon_delta* a *sv_yee_data_get_tbc*.



Základní metody akcelerace běhu Se zlepšujícími se dovednostmi analýzy zdrojových kódů dokáží moderní překladače provádět řadu optimalizací výsledného strojového kódu automaticky. Stále se však ukazuje, že určitá úroveň nápovědy na úrovni zdrojového kódu je přínosná a vede ke znatelnému zrychlení výpočtu.

V rámci revize kódu jsou v jednotlivých zdrojových soubore postupně prováděny především tyto úpravy:

• Inline funkce. U relativně krátkých funkcí, které jsou však volány mnohokrát, se velká část strojového času spotřebuje kopírováním argumentů na vstupu do funkce, a je proto výhodnější začlenit jejich obsah přímo do volající funkce. To je ovšem na úkor přehlednosti znovuvyužitelnosti kódu. Překladače však takovou úpravu dokáží dělat automaticky, případně je možné je k tomu navést klíčovým slovem *inline*. Tato optimalizace je ale obvykle možná jen na úrovni jedné překladové jednotky (typicky zdrojového souboru .c) a při volání z funkce umístěné v jiné jednotce ji nelze využít; takové volání je pak již zatíženo příslušnou režií.

To byl právě případ výše zmiňovaných funkcí sv_yee_data_get_cabs, sv_yee_data_get_epsilon_delta a sv_yee_data_get_tbc volaných ve funkci sv_yee_data_ystep_e. Ty jsou dosti jednoduché a slouží jen ke zjištění materiálových parametrů v daném voxelu, avšak počet jejich volání v každé iteraci dosahuje mnoha milionů. Jejím přesunem do hlavičkového souboru společného pro více zdrojových souborů a deklarováním jako inline došlo ke zrychlení výpočtu a vyrovnání času stráveného ve funkcích sv_yee_data_ystep_e a sv_yee_data_ystep_h, jak ukazuje obrázek 18.

- Přidání atributu const u čistě vstupních argumentů typu ukazatel a vyšší specializace funkcí. Interní datové struktury programu GSvit jsou tvořeny vícenásobně vnořenými proměnnými typu struktura a jedno- či vícerozměrné pole, mnohé funkce však pracují jen s jejich částí. Takové funkce jsou teď postupně upravovány, aby jako argumenty přijímaly jen ty části dat, se kterými skutečně pracují. Takto kompilátor získává lepší přehled, která data se reálně mohou měnit a kde kód naopak může předpokládat, že jsou v daném úseku neměnná a může s nimi pracovat efektivněji.
- Hodnoty podvýrazů. Pokud v kódu blízké výrazy obsahují společný podvýraz, za jistých okolností jej překladač identifikuje a výsledný kód jej nevyhodnocuje vícekrát. Zdá se ovšem, že takto to funguje jen v jednoduchých situacích a jinak je vhodné vícekrát využívané hodnoty podvýrazů uložit do pomocných proměnných. Např. při blízkém výskytu výrazů typu sin(x) a cos(x) dokáže překladač nahradit samostatná volání funkcí sin a cos z matematické knihovny funkcí sincos, která dvojici sdružených hodnot spočítá rychleji. Pokud však na místě x figuruje složitější výraz, může se stát, že bude vyhodnocen pokaždé zvlášť a sdružený výpočet se nevyužije.
- Předpočítání konstantních parametrů. V mnoha funkcích volaných pro každý voxel zahrnuje vyhodnocovaný početní výraz podvýrazy, které závisejí pouze na parametrech, které jsou napříč celým výpočtem neměnné, například velikosti voxelu, délce časového kroku či permitivitě materiálu. Tyto podvýrazy je vhodné předpočítat při inicializaci výpočtu a v dílčích funkcích pak vyhodnocovat pouze zbytek výrazu závisející např. na souřadnicích voxelu.

Aktuální stav Přínosy prováděných úprav sledujeme pomocí časování interních testů a analýzou pomocí profileru. Míra zrychlení výpočtu (oproti výchozí verzi 1.9.4) se liší v závislosti na parametrech simulace, jako jsou druh materiálu či okrajových podmínek, které aktivují dodatečné výpočetní kroky mimo základní aktualizace elektrického a magnetického pole, případně vyžadují doplňkové výpočty v jednotlivých voxelech.



V jednoduchých situacích, jako jsou základní elektrické a magnetické materiály a jednovláknový běh, se podařilo dosáhnout i dvojnásobného zrychlení výpočtu, v řadě dalších testů je viditelné zrychlení v desítkách procent. V některých kombinacích parametrů výpočtu a vícevláknového běhu se zrychlení dosáhnout nepodařilo a je zde třeba ještě identifikovat kritická místa, která výpočet brzdí.

Z důvodu úprav velkých úseků kódu, neuspokojivých výsledků některých testů a nutnosti důkladného ověření prováděných změn vývoj prozatím probíhá v samostatné větvi zdrojového kódu. Začlenění do hlavní vývojové větve je plánováno po dokončení uceleného souboru změn a dostatečné verifikaci výsledků interních testů.

2.2.4. Optimalizace výpočtu vzdáleného pole

S ohledem na to, že výpočetně nejnáročnější část simulace CFS pomocí FDTD je výpočet vzdáleného pole, tj. transformace z oblasti ve které metoda FDTD řeší hodnoty intenzity elektrického a magnetického pole do oblasti ve které je umístěna kamera, pokusili jsme se tuto část výpočtu oddělit od samotné simulace. Výhodou takového uspořádání je možnost řešit časový vývoj v oblasti vzorku podstatně rychleji (základní FDTD algoritmy je možné lépe paralelizovat) a výpočet vzdáleného pole volat až v případě potřeby při řešení inverzního problému, s potřebným rozlišením či v potřebných bodech na stínítku.

Na straně FDTD výpočet v této variantě probíhá obdobně jako ve výchozím uspořádání, jediným rozdílem je, že poté, co je dosaženo rovnovážného stavu se ukládají pole v oblasti hranice využívané pro transformaci do vzdáleného pole. V případě simulací CFS se jedná o rovinu umístěnou mimo mřížku a zdroj, tj. například 20 voxelů daleko od okraje výpočetního prostoru, přičemž rovina zdroje je o 10 voxelů hlouběji a mřížka o dalších 10 voxelů hlouběji. Kromě této hranice je nutné uložit také pole v sousedících voxelech, neboť transformace do vzdáleného pole pracuje i s nimi. Ve zde uvedeném příkladu tedy ukládáme po nějakou dobu (např. 200 časových kroků) hodnoty vektorů elektrického pole v rovinách ve výšce 19, 20 a 21 voxelů. Program, který po skončení FDTD výpočtu řeší transformaci do vzdáleného pole tuto sadu polí načte a obdobným způsobem jako by tomu bylo při konvenčním výpočtu iterativně řeší časový vývoj hodnot elektrického pole v předepsaných bodech ve vzdálené oblasti. Pokud by bylo bodů stejné množství a výpočet by probíhal totožně, o žádnou časovou úsporu by nešlo, nicméně oddělení obou algoritmů nám přináší další možnosti:

- Vzhledem k tomu, že k dispozici máme celý časový vývoj elektrického pole na rozhraní na kterém se transformace provádí, můžeme uspořádat cykly výpočtu efektivněji, než při řešení transformace v průběhu výpočtu, kdy jsou vždy k dispozici jen aktuální hodnoty pro daný časový krok.
- Podle potřeby můžeme transformaci do vzdáleného pole přepočítat, tj. například počítat jen v bodech, které jsou relevantní pro řešení inverzního problému.
- Transformaci můžeme optimalizovat, například se pokusit o redukci jevů souvisejících s konečnou velikostí výpočetní oblasti.





Obrázek 17: Vizualizace profilování nástrojem Callgrind – graf volání funkcí, před zahájením optimalizace kódu.



sv_yee_data_ystep_eomp_fn.0 25.76 % gsvit: yee.c, yee-inlines.h	sv_yee_data_ystep_homp_fn.0 24.99 % gsvit: yee.c	sv_yee_data_ystep_eomp_fn.0 gsvit: yee.c, yee-inlines.h	24.99 % sv_yee_data_ystep_homp_fn.(224.23 % gsvit: yee.c

Obrázek 18: Vizualizace profilování nástrojem Callgrind – čas strávený ve funkcích, v aktuálním stavu optimalizace kódu.



2.3. Vyhodnocení dat a kombinace s dotykovými měřeními

Pomocí výše uvedených experimentálních metod jsme schopni získat mapy rozložení rozptýleného světla zahrnující interference mezi různými řády difrakce na studované periodické struktuře. Tyto mapy závisí na laterální poloze periodické struktury vůči objektivu. Obdobné mapy můžeme získat také pomocí FDTD výpočtů, byť, i po všech dosud provedených optimalizacích, za podstatně delší dobu než je doba potřebná pro měření. Zatímco jeden měřený snímek získáme za dobu dlouhou řádově sekundy (včetně pohybu mřížky a ustálení), i nejrychlejší zde testované výpočty využívající grafické karty a minimalizující všechny nepotřebné algoritmy a pomocné hodnoty vyžadují výpočetní čas řádově v minutách. Plné výpočty, prováděné na procesoru a zahrnující velké množství integrovaných úhlů pro vytvoření fokusovaného zdroje i velké množství bodů na stínítku pak trvají i několik hodin. Takové chování nebude nic neobvyk-lého – problematika řešení inverzního problému na základě simulací elektromagnetického pole je v tomto případě považována za velmi výpočetně náročnou i u našich zahraničních partnerů a není výjimkou, že časy, které odhadují pro řešení některých konkrétních inverzních problémů se pohybují od stovek hodin až po roky. Pro řešení je proto výhodné kombinovat informace z více zdrojů a optimalizovat množství informace, které se při vyhodnocení využívá:

- Pro inicializaci modelu i vymezení oblasti fitování je vhodné využít maximum informace o nominálních hodnotách jednotlivých geometrických parametrů a materiálových konstant.
- Všechny parametry, které můžeme získat jinou, rychlejší metodou (například zjednodušeným vyhodnocením popsaným výše) při fitování zafixujeme.
- V případě vyhodnocení složitějších struktur se snažíme využít dostupné informace z dotykových měření abychom snížili počet parametrů. Příkladem může být vyhodnocení sklonu stěn difrakční mřížky, což je parametr, který dotykovými metodami (vinou konvoluce hrotu) získat nemůžeme. Můžeme nicméně získat velmi přesně výšku a periodu a sklon stěn tak může být jediným parametrem při fitování optických dat.
- Při fitování nepostupujeme intuitivně nejjednodušším způsobem tj. vyhodnocování shody celého snímku z CFS s celým vypočteným obrazem na stínítku z FDTD. Takový přístup by byl velmi výpočetně náročný. Místo toho se snažíme najít reprezentativní parametry, kterými by bylo možné informace na obrazech vyjádřit, například průměrné hodnoty intenzity v jednotlivých oblastech překryvů difrakčních řádů.

V rámci řešení tohoto úkolu technického rozvoje jsme neprováděli fitování většího množství složitých geometrických parametrů (ani dosud nemáme vzorky, na kterých by to dávalo smysl), i tak však byly výše uvedené body aplikovány v různých jednodušších případech diskutovaných v následující kapitole.



Počet příloh: 3

Počet listů: 25/50

3. DOSAŽENÉ VÝSLEDKY

3.1. 1D mřížka

3.1.1. Zjednodušená metoda

Jak už bylo zmíněno dříve, metodu CFS lze využít k měření periody mřížky i jednoduchým způsobem bez optického modelování. V rámci tohoto přístupu umístíme vzorek na přesný polohovací systém a postupně vzorek posunujeme a zaznamenáváme interferenční obrazce pomocí kamery. V případě 1D mřížek stačí přesné polohování jen v jedné ose. Pokud bychom chtěli měřit periody 2D mřížek, šlo by měření rozložit do dvou kroků, kdy v prvním se kroku se naměří perioda podél jedné osy a v druhém se vzorek otočí o 90° a opět se provede měření periody. Praktičtější by ovšem bylo použít 2D polohovací systém. Pro měření periody jsme využili 1D mřížku RSB8, kterou jsme získali v průběhu řešení EMPIR projektu BeCOMe od kolegů z National Physical Laboratory. Jedná se o mřížku s postupně se měnící periodou, podle výrobních parametrů se perioda mění v závislosti na poloze s faktorem 100 nm/mm. Vzhledem k tomu, že jsme měřili na rozsahu menším než 100 μm , dá se vzhledem k pozorovaným rozptylům naměřených hodnot tento fakt zanedbat. Navíc takto malá změna v periodě nebyla pozorována ani na AFM měření, které proběhlo na rozsahu 70 μ m. Ukázka naměřené topografie mřížky je zobrazena na obr. 19. Rychlým vyhodnocením vybraných profilů bylo zjištěno, že perioda na jednom okraji a uprostřed je 1 434 nm, zatímco na druhém okraji vyšlo 1 427 nm. Z globálního fitu, kdy se vyhodnocovalo celé měření, vyšlo 1 436 nm. K měření byl využit AFM mikroskop Bruker Dimension Icon, měřilo se v bezkontaktním režimu standardním hrotem pro bezkontaktní měření. Typická nejistota pro měření vzorku s takovouto periodou činí cca 15 nm. Pro ověření zda odpovídají výrobní parametry mřížky realitě bychom tedy museli provést větší objem měření na větším rozsahu.

V první sadě CFS měření jsme použili 2D stolek Thorlabs NF3D2P50, který má nominální rozsah $50 \ \mu m$ v obou osách. Stolek bohužel nedisponuje senzory posunutí, nelze jej tedy používat v režimu zpětné vazby a polohování se děje pouze přiložením napětí na piezo elementy. Citlivost je 50 μ m na 75 V. Jako zesilovač napětí jsme použili standardní zesilovač Thorlabs KPZ101, který byl nastaven tak, že rozsah 0 V až 10 V na analogovém vstupu odpovídal 0 V až 75 V na vysokonapěťovém výstupu. Vstupní napětí pro Thorlabs zesilovač byla generována kartou National Instruments PCI-6221. Optický snímek z místa měření na mřížce a ukázka interferenčních obrazců zachycených kamerou pro dvě různé polohy stolku jsou uvedeny na obrázku 20. V tomto případě jsme použili sestavu popsanou schematicky na obr. 3 a vyfocenou na obr. 4 vlevo. V sestavě byl tedy objektiv Olympus se zvětšením 20x a numerickou aperturou 0,4 a naopak tam nebyl druhý z teleskopů pro zmenšování interferenčního obrazce. Porovnáním interferenčních obrazců můžeme vidět, že dochází k částečnému překryvu nultého a prvního difrakčního řádu a dochází také v těchto místech k jejich interferenci. Při posouvání stolkem se intenzita světla pozorovaná v těchto oblastech periodicky mění. Napětí na National Instruments kartě se postupně zvyšovalo z nuly na 10 V s krokem 10 mV. Pokud by se stolek hýbal ideálně, znamenalo by to posunutí z nuly na $50 \ \mu m s$ krokem 50 nm. Při periodě řádově 1 400 nm by to znamenalo naměřit 28 vzorků na periodu, což by mělo podle práce [2] stačit pro spolehlivé určení periody.

Zpracování CFS dat probíhalo tak, že se pro každou polohu stolku uložil snímek interferenčního obrazce a spočítala se průměrná intenzita na určité oblasti. V tomto případě jsme počítali průměr na oblasti vymezené pixely [0;600]×[0;1 200], což zahrnovalo levou oblast, kde se překrývaly jednotlivé difrakční řády. Pro úplnost dodáváme, že použitá kamera měla rozlišení 1600×1200 pixelů a bitová hloubka je 12 bitů. Obrázky byly ukládány jako (resamplované) 16bitové PNG obrázky, takže intenzita v každém pixelu mohla nabývat hodnot v rozmezí 0 až 65 535, dynamický rozsah ale zůstává 12bitový (4 096 hodnot). Získaná závislost průměrné intenzity na poloze byla postupně fitována funkcí



$$a\sin\left(\frac{2\pi x}{b}+c\right)+d,$$
(4)

kde *a* je amplituda oscilací, *b* je hledaná perioda a *c* a *d* jsou offsety. Při fitování bylo na ose *x* napětí generované NI kartou a na ose *y* průměrná intenzita. Jako výchozí hodnoty parametrů pro fitování jsme zvolili $a = 5\,000, b = 0,2, c = 1$ a $d = 8\,000$. Pro samotné fitování byl využit volně šiřitelný software Gnuplot. Příklad takového fitu je na obr. 21, na ose *x* je pro přehlednost vyneseno posunutí stolku v mi-krometrech spočítané z napětí na základě údajů z datového listu. Pro fitování periody se uvažovaly bloky dat s 20 polohami, což podle grafu odpovídalo přibližně jedné periodě. To je ovšem v rozporu s úvahou výše, kde se předpokládalo, že na jednu periodu by mělo být poloh 28. Jde tedy vidět, že polohování stolku Thorlabs je do značné míry vzdáleno údajům odvozeným z datového listu. Hned z prvního bloku dat vidíme, že perioda je cca 0,8 μ m, nicméně podle měření pomocí AFM je perioda mřížky 1,436 μ m. Vyhodnotíme-li analogicky periody i ze všech ostatních bloků dat, tj. podél celého rozsahu stolku, dojdeme ke grafu na obr. 22. Na ose *x* je opět napětí přepočítáno podle datového listu na vzdálenost a na ose *y* jsou periody vyhodnocené z jednotlivých bloků dat. Kdyby se stolek pohyboval v souladu s datovým listem, měla by tato závislost být konstantní, nezávislá na *x*, se střední hodnotou kolem 1,436 μ m. Po-kud bychom tedy naopak považovali periodu mřížky určenou pomocí AFM za správnou, můžeme tímto způsobem zmapovat přesnost polohování stolku Thorlabs.



Obrázek 19: AFM měření na 1D mřížce s nominální periodou 1 400 nm.



Obrázek 20: Optický snímek 1D mřížky s nominální periodou 1400 nm (vlevo). Interferenční obrazce na dvou vybraných místech pořízené objektivem Olympus 20x.





Obrázek 21: Ukázka závislosti intenzity světla na poloze stolku společně s fitem.



Obrázek 22: Graf závislosti periody na poloze stolku Thorlabs.





Obrázek 23: Optický snímek 1D mřížky s nominální periodou 2 μ m (vlevo). Interferenční obrazec na dvou vybraných místech pořízené objektivem Mitutoyo 10x.

Obdobný experiment jsme provedli s modifikovanou sestavou prezentovanou na obr. 4 vpravo, kde došlo k výměně objektivu (nyní Mitutoyo 10x/0,28) a polohovacího stolku (Physik Instrumente Hera). Přidán byl i druhý teleskop pro zmenšení interferenčního obrazce. Z pohledu polohování to byla zásadní změna, protože stolek PI Hera je vybaven kapacitními senzory a umožňuje tak polohování v režimu zpětné vazby, tj. stolek si sám nastavuje napětí na piezoelektrických elementech tak, aby dojel na zadanou polohu. V tomto případě se se stolkem komunikovalo digitálně přes rozhraní RS232 a posílala se požadovaná poloha. Měření bylo nastaveno tak, aby se zmapoval celý rozsah stolku (100 µm), krok byl 60 nm. Optický snímek mřížky společně s ukázkou interferenčních obrazců pro dvě různé polohy stolku jsou na obrázku 23. Pro fitování byly zvoleny bloky o velikosti 34 bodů (poloh stolku), což by při kroku 60 nm mělo odpovídat nominální periodě 2 μ m. Na grafu 24 vidíme, že tomu tak opravdu je. Pro úplnost uvádíme výchozí hodnoty parametrů při fitování: $a = 12\,000, b = 1,99, c = -2,32$ a $d = 22\,200$, k fitování byl opět využit SW Gnuplot. Vyhodnocovala se oblast vymezena pixely [300;600]×[450;800]. Periody vyhodnocené ze všech bloků můžeme vidět na obr. 25. Střední hodnota vychází na 1.993 μm a RMS pak na 17 nm, což vůbec není špatný výsledek, uvážíme-li, že vyhodnocujeme jen část naměřených dat. Měření by šlo dále zpřesnit výpočtem průměrné hodnoty z pravé oblasti překryvu a udělat rozdíl mezi těmito dvěma průměry. Fluktuaci osvětlení by bylo možné kompenzovat podělením rozdílu intenzit střední hodnotou spočtenou na oblasti, kde k překryvu nedochází. Navíc je možné, že se nám do výsledku promítla nelinearita kalibrace kapacitních senzorů od výrobce. Pro spolehlivé určení polohy stolku by bylo zapotřebí odměřování pomocí interferometru, podobně jako to děláme např. ve Státním etalonu délky a tvaru v oblasti nanometrologie. Prozkoumali jsme také variantu zpracování, kde si jako referenci uložíme obrazec mimo mřížku a pak tuto referenci odečteme od každého interferenčního obrazce naměřeného na mřížce. Ke zvýšení kontrastu mezi oblastmi s překryvem různých difrakčních řádů vůči oblasti bez překryvu však nedošlo. Na vině je nejspíš fakt, že dochází k interferenci laserového svazku mezi vzorkem a nějakých optickým prvkem v sestavě. Pozorovali jsme, jak se drobné interferenční proužky postupně posouvají během posunu vzorku, odečtením referenčního obrazce jsme se těchto parazitních proužků tudíž nezbavili.

Vyhodnocení pomocí metody FDTD 3.1.2.

Při vyhodnocení mřížky pomocí FDTD jsme se zaměřili na další geometrický parametr, kterým je výška mřížky. Tu již není možné zjednodušenou metodou získat. Vytvořili jsme proto numerický model FDTD, obdobný modelům diskutovaným v předchozí sekci zprávy, kde je uvedena také řada příkladů FDTD výsledků pro 1D mřížky. Ideálním postupem při fitování experimentálních dat numerickým modelem by bylo srovnat CFS výsledek pozorovaný na kameře pro různá posunutí vzorku s výsledkem FDTD pro stejná posunutí. Tj. bylo by možné vytvořit nějaký globální parametr vyjadřující neshodu dvojic experimentálních a simulovaných snímků (například sumu středních kvadratických odchylek jednotlivých





Obrázek 24: Ukázka závislosti intenzity světla na poloze stolku PI. Zobrazeno je i nejlepší proložení funkcí sinus.

pixelů na snímcích) a tento globální parametr se snažit minimalizovat změnami geometrických parametrů mřížky, která nám vstupuje do FDTD výpočtu. Z praktického hlediska by to bylo velmi obtížné. Měřená data jsou zatížena velkým šumem, přítomností parazitních interferenčních jevů a přítomností jevů souvisejících s difrakcí na kruhové apertuře, a tyto jevy často v datech dominují. FDTD simulace celých snímků jsou navíc velmi časově náročné. Proto jsme se snažili najít postup, kterým by bylo možné proces zjednodušit a také vhodný parametr, který bychom mohli získat jednoduše a robustně jak z experimentálních dat, tak ze simulací. Tímto parametrem je rozdíl mezi intenzitou ve středu levé a pravé oblasti CFS snímku, ve kterých dochází k překryvu svazků od různých difrakčních řádů (viz obr. 23). Při vyhodnocení tedy záměrně vynecháváme oblasti na okraji zorného pole i hranice mezi různými částmi CFS snímku, navíc celý CFS snímek redukujeme na jediné číslo. Tento parametr, dále nazývaný "asymetrie", jsme normalizovali podělením hodnotou intenzity ve středu snímku, což odpovídá nultému řádu difrakce. Stejný proces jsme zopakovali i u simulovaných FDTD dat. FDTD simulace jsme provedli pro několik různých výšek mřížky a výsledky simulace jsme srovnali s experimentálními daty (což bylo možné právě proto, že oba typy dat byly normalizované intenzitou nultého řádu difrakce). Výsledek – závislost asymetrie na poloze mřížky – je uveden v obr. 26 vlevo. Je patrné, že experimentální data se svým průběhem nejvíce podobají simulovaným datům z mřížky vysoké 60 nm, což také odpovídá reálné hodnotě výšky, pro srovnání naměřené pomocí AFM. Pro orientační odhad s jakou přesností jsme schopni hodnotu výšky v tomto případě získat jsme vyhodnotili rozptyl numerických dat v rámci překryvů interferenčních řádů a do pravé části obrázku 26 vynesli také odhadnuté chybové intervaly (pro lepší názornost fitované polynomem). Je patrné, že rozptyl numerických dat je v tomto případě poměrně velký – jen tento příspěvek k nejistotě vyhodnocené výšky mřížky by byl cca 5 nm. To je dáno především poměrně malou hodnotou výšky mřížky oproti její periodě, což je z pohledu přesnosti FDTD simulací nepříznivý faktor. Nicméně, i tak považujeme možnost vyhodnocení výšky mřížky jen optickou metodou i získanou shodu s AFM





Obrázek 25: Graf závislosti periody na poloze stolku Physik Instrumente.

měřením za velmi zajímavé.





Obrázek 26: Vyhodnocení pomocí metody FDTD: vlevo závislosti normalizované asymetrie mezi překryvy na poloze pro různě vysoké mřížky, vykresleno spolu s experimentálními daty. Vpravo závislost amplitudy tohoto parametru na výšce a průsečík s amplitudou měřených dat (modrá vodorovná čára). Naznačené chybové intervaly odpovídají odhadu vlivu nehomogenity intenzity v překryvech difrakční řádů v FDTD simulaci.





Obrázek 27: AFM měření na mřížce L1 (vlevo), difrakce pozorovaná na kameře (vpravo).

3.2. 2D mřížky

Jedním z nejstarších etalonů pro kalibraci laterálních rozměrů na našem oddělení je difrakční mřížka označovaná jako L1. Je to periodická struktura vyleptaná do křemíku s nominální periodou 4 μm v obou směrech a výškou 200 nm. Je zajímavá především tím, že je vyleptaná na velké ploše, $5 \times 5 \ \mu m$, a celá oblast je tedy viditelná pouhým okem. To usnadňuje kalibraci kolimovaným laserovým svazkem, kde si vystačíme s běžnými svazky o velikosti několika milimetrů čtverečních. Perioda mřížky je zároveň vhodná pro naprostou většinu AFM mikroskopů, běžně tedy tuto mřížku používáme pro zajištění návaznosti komerčního mikroskopu Bruker Dimension ICON. Na obr. 27 vlevo uvádíme příklad AFM měření na této mřížce, zatímco vpravo je difrakční obrazec pro případ, že laserový svazek není zaostřen do nekonečna jako je tomu v případě CFS, ale na rovinu tvořenou čipem kamery. Je to analogie ke klasickému měření periody pomocí difrakce kolimovaného laserového svazku, kde odečítáme vzdálenosti jednotlivých difrakčních řádů na vzdáleném stínítku. Pokud se nyní vrátíme k CFS a objektiv přeostříme tak, aby na kameru dopadal kolimovaný svazek, můžeme pozorovat obrazce v horní partii obrázku 28. Tím jak se vzorkem hýbeme podél osy x nebo y, můžeme pozorovat zesvětlání či tmavnutí určitých oblastí. Tento fenomén jsme se pokusili namodelovat pomocí metody FDTD. Výsledek je patrný ve spodní části zmiňovaného obrázku, přičemž můžeme konstatovat velmi dobrou shodu výsledku modelování s experimentem. Je možné si rovněž povšimnout, že modelovaná oblast je nepatrně menší než oblast naměřená, což je dáno časovou náročností FDTD výpočtů. Vzhledem k tomu, že se dá úloha snadno paralelizovat s ohledem na různé vstupní parametry, jako je například poloha mřížky vzhledem k poloze laserového svazku, lze s výhodou využít nově pořízený HPC systém pro vědecké výpočty, který už jenom na tzv. compute nódech má k dispozici téměř 1 300 jader. I tak bude pro vyhodnocování dat z 2D mřížek nutné, obdobně jako v 1D případě, nalézt vhodnou parametrizaci metody vyhodnocení, což ponecháváme jako úkol do budoucnosti. S přidáním dalšího stupně volnosti v pohybu mřížky vůči objektivu v každém případě roste také množství snímků, které je nutné pro vyhodnocení simulovat.





Obrázek 28: Porovnání simulací FDTD a měření CFS na mřížce L1.





Obrázek 29: Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 2 μ m (vlevo). Výška schodků je 40 nm. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutoyo 10x.



Obrázek 30: Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 2 μ m (vlevo). Výška schodků je 1 000 nm. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutoyo 10x.

Další skupinou pro nás velmi důležitých vzorků je skupina PTB vzorků, které používáme pro kalibraci výšky schodku na AFM. Kromě samotných schodků jsou na vzorcích i struktury typu šachovnice s různými periodami a nabízí se tedy možnost podívat se na tyto struktury pomocí CFS. Na obrázcích 29, 30 a 31 jsou znázorněny obrazce zachycené na šachovnicích s nominální periodou 2 μ m a výškami postupně 40 nm, 1 000 nm a 2 000 nm. Můžeme vidět, že na vysokých strukturách jsou překryvy jednotlivých řádů velmi dobře patrné, zatímco na struktuře s výškou 40 nm je kontrast mnohem nižší. Na obrázku 32 je možné vidět, že pokud bychom na tomto typu struktury s periodou 4 μ m použili objektiv s NA 0,28, dojde nejen k překryvu nultého a prvního difrakčního řádu, ale i jednotlivých prvních difrakčních řádů navzájem.

I v případě mřížek PTB jsme vytvořili první verzi numerického modelu a jeho srovnání pro mřížku o výšce 1000 nm je uvedeno v obrázku 33. Srovnání jsme opět provedli jen pro některé vybrané polohy mřížky vůči objektivu. Je dobré si povšimnout, že tvar obrazce je u šachovnicové mřížky jiný než u jednoduché 2D mřížky. To je dáno faktem, že nejnižší hodnotu periody v rámci vzorku pozorujeme nikoliv v horizontálním či vertikálním směru (ve smyslu zobrazení mřížky na obr. 34), ale diagonálně. Je možné vidět, že také FDTD data tento fakt reflektují.





Obrázek 31: Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 2 μ m (vlevo). Výška schodků je 2 μ m. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutoyo 10x.



Obrázek 32: Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 4 μ m (vlevo). Výška schodků je 1 000 nm. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutoyo 10x.



Počet příloh: 3 Počet listů: 36/50



Obrázek 33: Porovnání simulací FDTD a měření CFS na mřížce PTB pro vybrané polohy posunutí mřížky. Šipky označují posunutí mřížky vůči středové poloze v rámci měření či výpočtu.





Obrázek 34: AFM měření na 2D mřížce PTB s nominální periodou 4 $\mu \mathrm{m}.$





Obrázek 35: Optický snímek struktury TGX pro charakterizaci AFM hrotů. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Olympus 20x.

Pro zajímavost jsme zaznamenali interferenční obrazce na dalších (2D) strukturách, které jsou na našem oddělení k dispozici. Jednou z takových mřížek je vzorek TGX od firmy MikroMasch, který je určen pro kalibraci poloměru hrotu AFM. Mřížka má v tomto případě mírně podleptané okraje, na kterých se při AFM měření zobrazuje tvar špičky hrotu (v důsledku konvoluce hrotu s povrchem, který při AFM měřeních pozorujeme vždy). Na mřížce je zajímavé, že není uspořádaná v pravidelných sloupcích a řadách jako je tomu u většiny 2D mřížek. Výsledek měření pomocí CFS je uveden v obrázku 35, AFM topografie je uvedena v obrázku 36. FDTD simulace takové struktury jsou již velmi obtížné. Analýzou experimentálních dat můžeme zjistit, že pozorujeme velkou řadu překryvů (znázorněných čarami v obr. 37), nicméně nalézt polohy a parametry mřížky tak, aby bylo možné srovnat výsledky simulace s numerickým modelem by vyžadovalo velké množství simulací. Pro zajímavost uvádíme jeden z výsledků, byť ne získaný s optimálními parametry. Zajímavé na něm je, že pro získání shody v polohách jednotlivých kružnic reprezentujících překryvy řádů difrakce jsme museli pracovat s numerickou aperturou o něco nižší než je nominální apertura objektivu (0,26 namísto 0,28). To patrně souvisí s uspořádáním optické cesty v tomto konkrétním experimentu, kde nebyla apertura objektivu plně využita. To také ilustruje další možnost metody CFS: v případě, že známe jak vlnovou délku, tak periodu mřížky, můžeme CFS data využít pro kalibraci numerické apertury objektivu.





Obrázek 36: AFM měření na mřížce TGX.



Obrázek 37: Analýza struktury difrakčního obrazce na mřížce TGX a výsledek FDTD simulace na obdobné struktuře (numerická apertura 0,26).



Počet listů: 40/50



Obrázek 38: Optický snímek 2D mřížky Topometrix. Dále jsou zobrazeny interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutoyo 10x.

Další dvě periodické struktury uvádíme v této zprávě jen pro ilustraci a referenci v rámci budoucích aktivit; získali jsme pro ně řadu experimentálních dat s různými parametry měření a objektivy, nicméně vyhodnocení kteroukoliv z metod jsme dosud neprováděli. Jedná se o referenční mřížku od firmy Topometrix, kterou používáme k rutinnímu testování v rámci mikroskopie atomárních sil (viz obrázky 38 a 39). Dále se jedná o hexagonálně uspořádané pole nanodrátků vyrobené Technickou univerzitou v Braunschweigu v rámci projektu EMPIR Nanowires, které můžeme vidět v obrázcích 40 a 41. Z obrázků je patrné, že perioda mřížky je v obou těchto případech velmi příhodná pro CFS měření. Vyhodnocování dat pomocí zjednodušené metody i pomocí FDTD na těchto vzorcích se proto budeme věnovat v období od sepsání této zprávy do konce roku.



Obrázek 39: AFM měření na mřížce Topometrix.





Obrázek 40: Optický snímek hexagonální mřížky z TU Braunschweig (vlevo). Zobrazeny jsou pak interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutoyo 10x.



Obrázek 41: AFM měření na mřížce z TU Braunschweig (vlevo). Difrakční obrazec pro případ, že svazek je zaostřený na rovinu tvořenou čipem kamery (vpravo).



ČERPANÉ NÁKLADY NA ÚKOL 4.

		Plán	Odhad čerpání do 31. 12. 2023
Cena hodin	tis. Kč	1 720	1 720
Materiál	tis. Kč	150	300
Externí kooperace	tis. Kč	130	80
Výdaje na porovnání v zahraničí	tis. Kč		
Interní kooperace	tis. Kč	70	
Kooperující středisko		8014	
Cestovné zahraniční	tis. Kč	30	
Celkem	tis. Kč	2 100	2 100

Tabulka 1: Tabulka plánovaných a čerpaných nákladů (v tis. Kč):

Většina výdajů byla čerpána formou hodin. Externí kooperace se týkala vývoje programu Gwyddion, který byl využit pro zpracování experimentálních dat z AFM a CFS. Materiál byl použit na stavbu jednotlivých experimentálních zařízení zmíněných v technické části zprávy. Tato položka byla navýšena z důvodu velké technické náročnosti při stavbě experimentálního zařízení. Zahraniční cesta nebyla realizována, protože s různými zahraničními partnery jsme mohli jednat při jiných příležitostech (např. v rámci konference Nanoscale 2023).



ZÁVĚR 5.

Zkonstruovali jsme experimentální zařízení, které nám umožňuje metodou CFS měřit vlastnosti periodických struktur, jako jsou difrakční mřížky. Metoda využívá vysoké citlivosti měření rozdílu fáze mezi difraktovanými svazky různých řádů pomocí jejich interference a překonává tak prosté měření difrakce rovnoběžného svazku. Navíc umožňuje získat podstatně vyšší prostorové rozlišení. Řada měření, které jsme provedli, nás vede k úvahám o dalších možných směrech rozvoje metody:

- Kvalita výstupního obrazce podstatným způsobem závisí na vnitřní konstrukci objektivu. Obecně se osvědčily objektivy s velkou pracovní vzdáleností, které se vyznačují velkou světelností, bylo by tedy vhodné využít tento typ objektivu i pro další zvětšení (mimo stávající zvětšení 10x pomocí objektivu Mitutoyo).
- Pro snížení vlivu parazitních interferencí by bylo vhodné redukovat přítomnost planparalelních optických prvků v sestavě.
- Defekty v obrazovém poli by bylo možné odstranit odečtením pozadí ideálně kombinací CFS zařízení s polohovacím systémem ve velkém rozsahu, který by umožnil provést referenční měření na stejném vzorku v oblasti, na které není periodická struktura, bez nutnosti manuálního zásahu do měření.
- Pro širší rozsah period měřených struktur i pro zpřesnění výsledků by bylo vhodné provádět měření na více vlnových délkách, zejména směrem ke krátkovlnné oblasti.

Aby bylo možné interpretovat data, testovali a upravili jsme náš výpočetní program využívající metody FDTD tak, aby bylo možné zrychlit výpočty obrazců z metody CFS. To je základem řešení inverzního problému, tj. nalezení geometrie, která vede ke konkrétním měřeným datům. I po těchto úpravách se jedná o poměrně náročnou výpočetní úlohu a bez kombinace měření CFS s dotykovými metodami jako je mikroskopie atomárních sil by nebylo možné vhodné numerické modely vytvořit. Z pohledu dalšího rozvoje metod interpretace dat v CFS by bylo možné dále postupovat takto:

- Minimalizovat počet potřebných bodů ve vzdáleném poli automatickým odhadem tvaru difrakčního obrazce na základě předpokládaných geometrických parametrů mřížky a vhodnou volbou nejmenší množiny bodů reprezentujících jednotlivé překryvy různých difrakčních řádů.
- Zrychlit implementaci fokusovaného zdroje na grafické kartě a umožnit tím plně využít potenciální zrychlení výpočtů.
- Využít pro implementaci transformace z blízkého do vzdáleného pole fitované hodnoty amplitudy a fáze vektorů elektrické intenzity namísto hodnot jejich časového vývoje a tím zkrátit dobu potřebnou pro výpočet.

Výše uvedenými kroky by bylo možné dosáhnout experimentálních i výpočetních možností překonávajících stávající systémy, se kterými jsme se setkali v zahraničních laboratořích. To je také naším dlouhodobým cílem a předpokládáme, že výsledky řešení úkolu technického rozvoje v tomto roce nám k tomu dává dobré předpoklady.

Všech plánovaných cílů úkolů bylo dosaženo do 30. 11. 2023.



SEZNAM BIBLIOGRAFICKÝCH CITACÍ

- [1] Nitish Kumar. *COHERENT FOURIER SCATTEROMETRY*. PhD thesis, Technische Universiteit Delft, 2014.
- [2] David Nečas, Andrew Yacoot, Miroslav Valtr, and Petr Klapetek. Demystifying data evaluation in the measurement of periodic structures. *Meas. Sci. Technol.*, 34:055015, 2023.

PLÁNOVACÍ LIST ÚKOLU	J TECHNICKÉHO ROZVOJE
----------------------	-----------------------

Číslo					Termíny	řešení	Neinvestič.
úkolu*	Název úkolu		Stručná charakteristika úkolu				prostředky
			Výsledek řešení úkolu		zahájení	ukončení	tis. Kč
UTR23E601417	Kombinace dotykových a optických měření v nanometrologii.	Cílem kombin (např. : numeri velkýc	úkolu je vyvinout nástroje pro měření kritických nací dotykových metod (např. AFM) a optických měření rozptylu) s využitím metod pokročilého ického modelování pro interpretaci a fůzi dat mě h plochách.	n rozměrů h měření ířených na	1/2023	12/2023	2 100,-
Předkládá:			Bank. spojení / č. účtu: 198139621/0710				
Český metrologický institut,		IČO / DIČ: 00177016/CZ00177016	Č.j.:				
úsek FM, Hvožďanská 3, 148 01, Praha 4			5				
odb. řed. pro FM		Odpovědný řešitel: Mgr. Petr Klapetek, Ph.D.	Došlo:				
		Podpis:	Zdroj financ	cování: ČM	4I		
		Tel. / Fax: 545 555 239 / 545 555 183	Poznámka:				
	-		Datum: 26. 10. 2022				

 * v případě externího zadavatele (např. ÚNMZ), nezadává toto číslo ČMI Verze 17-001_P02C_011-ZS-C008

1.1 Hlavní cíle úkolu (důvod zadání úkolu, např. zákonné požadavky, plnění koncepce rozvoje NMS, plnění požadavků CIPM MRA):

V souvislosti se snahami o návrat polovodičových technologií do Evropy se zvyšuje potřeba měření kritických rozměrů motivů využívaných pro různé účely v mikroelektronice, počínaje kalibrací výrobních technologií a konče charakterizací přesných struktur pro sesazování masek či charakterizací drsnosti bočních stěn. Pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) je možné provádět řadu takových měření a ČMI tyto metody dlouhodobě rozvíjí. Nicméně, existuje také skupina optických metod vycházejících z měření rozptylu, která má potenciál AFM vhodně doplnit v oblastech, kde je jeho využití velmi obtížné, jako je analýza velkých sklonů či drsnosti bočních stěn. Další výhodou optického měření je také jeho statistický charakter, kdy jsou parametry vyhodnoceny s většího množství motivů. Měření rozptylu z polovodičových struktur, zejména s využitím zdrojů světka v UV oblasti, je proto v některých metrologických institutech rozvíjeno dlouhodobě (např. PTB, DFM, VSL). I tato technologie má značné limity, zejména související s poměrně složitým postupem zpracování dat, kdy je inverzní úloha – nalezení strukury, které odpovídá naměřený rozptyl světla – řešena pomocí složitých a časově náročných simulací, řádově převyšujících časovou náročnost měření samotného.

Cílem tohoto úkolu je rozvinout kombinaci obou typů metod a zajistit zrychlení a zpřesnění metod využívaných pro interpretaci měření využitím kombinace optických a dotykových dat, které v mnoha směrech představují vzájemně se doplňující informace. Pro tyto účely bude využita platforma pro hybridní měření vyvinutá v roce 2021, která umožní na stejném vzorku a stejné měřené oblasti získat oba typy dat, což je v případě partnerských NMI velmi náročný proces (kde jsou často různé typy měření prováděny na různých odděleních). Kromě toho budou využity dlouhodobé zkušenosti s modelováním šíření elektromagnetického pole v mikro – a nanoměřítku metodou FDTD, což je jedna z metod využitelných pro řešení inverzní úlohy. Cílem měření i numerických simulací bude vytvořit postup, kterým by bylo možné kombinací AFM dat a dat z měření rozptylu snadno nalézt počáteční parametry pro řešení inverzní úlohy v rozumném čase, tj. v čase srovnatelném s dobou potřebnou pro experimentální měření.

Projekt navazuje na koncepci rozvoje metrologie a cíl roku 2023: Zabezpečení metrologické návaznosti pro měření topografie v rozsahu větším než 5x5 cm s nejistotu polohování menší než 10 nm.

1.2 Objektivně ověřitelné výsledky řešení úkolu:

Hardwarové a softwarové nástroje pro kombinaci optických a dotykových dat.

1.3 Způsob ověření: (uvést neopomenutelné účastníky):

Závěrečná oponentura za účasti oponentů.

1.4 Navrhovaní oponenti úkolu (minimálně 2, podléhají odsouhlasení zadavatelem úkolu): Prof. RNDr. Miloslav Ohlídal, CSc., VUT v Brně

Mgr. Petr Klenovský, Ph. D, Masarykova univerzita v Brně

- 2.1 Dílčí cíle nezbytné k dosažení hlavních cílů úkolu (I. etapa řešení):Vytvoření metrologické návaznosti pro měření rozptylu na nano a mikrostrukturách.
- 2.2 Objektivně ověřitelné ukazatele dílčích cílů Rozpočet nejistoty pro měření rozptylu.
- 2.3 Způsob ověření dílčích cílů

Průběžná oponentura za účasti oponentů.

3. Kalkulace úkolu (rozpis nákladů) a ekonomické zhodnocení (přínos ekonomický): odhad jednorázových nákladů (stroje, zařízení, budovy) a odhad nákladů na projekt (pracovní hodiny, materiál, kooperace)

číslo střediska			6014	
č. úkolu	neuvádět			
počet hodin střediska na celý úkol x sazba		568h. x 3 154 Kč=1720		
materiál	tis. Kč		150	
externí kooperace	tis. Kč	130		
výdaje na porovnání v zahraničí	tis. Kč			
interní kooperace	tis. Kč	70		
kooperující středisko		8014		
cestovné zahraniční	tis. Kč		30	
celkem	tis. Kč		2 100	

4. Zdroj financování úkolu (v %): 100 % ČMI.

5. Praktické využití výsledků řešení a požadavky pro udržovatelnost výsledků (včetně vlivu výsledku na životní prostředí):

Výsledky řešení úkolu budou využity při měření pro zákazníky v oblasti optického a elektronického průmyslu.

6. Spoluřešitelé úkolu (uvést rozsah spolupráce-věcný, finanční): Mgr. David Nečas, Ph.D. - vývoj software pro zpracování dat, 80 tis. Kč

7. Nároky na zahraniční cesty (stát, organizace, délka pobytu, finanční nároky):

- National Physical Laboratory, 1 osoba, 2 dny, 30 tis. Kč
- 8. Prohlašujeme, že naše organizace současně nenárokovala, resp. nemá přislíbeny finanční prostředky na řešení úkolu ze státního rozpočtu prostřednictvím jiného orgánu státní správy, popř. nevyužila jiné, duplicitní cesty k financování navrhovaného úkolu. Název, adresa, razítko a podpis statutárního zástupce:

Český metrologický institut Okružní 31 638 00 Brno

doc. RNDr. Jiří Tesař, Ph.D. generální ředitel



Český metrologický institut

Zpráva úkolu TR č.

6014-TR-Z0001-23

Počet listů: 48/50

PŘÍLOHA Č. 2 – POUŽITÉ ZKRATKY

AFM – Atomic Force Microscopy BAM - Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung BeCOMe - Beyond Classical Optical Metrology BS - Beamsplitter CFS - Coherent Fourier Scatterometry CPU - Central Processing Unit DFM – Dansk Fundamental Metrologi EMPIR - European Metrology Programme for Innovation and Research FDTD - Finite Difference Time Domain FEM - Finite Element Method GPU - Graphics Processing Unit HeNe – Helium-Neon HPC – High Performance Computing HWP - Half-wave plate LED – Light Emitting Diode LWD - Long Working Distance NA – Numerical Aperture NI – National Instruments NMI – National Metrology Institute NPL - National Physical Laboratory PI – Physik Instrumente PNG - Portable Network Graphics PTB - Physikalish-Technische Bundesanstalt RCWA - Rigorous Coupled Wave Analysis RMS - Root Mean Square TU Braunschweig - Technische Universität Braunschweig TU Delft - Technische Universiteit Delft UV - Ultraviolet



PŘÍLOHA Č. 3 – SEZNAM TABULEK A OBRÁZKŮ

Seznam tabulek

1	Tabulka plánovaných a čerpaných nákladů (v tis. Kč):	12
---	--	----

Seznam obrázků

1	Příklady periodických struktur se kterými se setkáváme v nanometrologii (zpráva ÚTR 2022)	3
2	Princip konvenčního měření difrakce na mřížce (A) a měření pomocí CFS (B). V pří- padě CFS dopadá světlo na mřížku pod mnoha směry a pod mnoha směry se také šíří	
	difraktované svazky, což vede k překryvu svazků odpovídajících různým řádům difrakce.	6
3	Schéma sketerometru. HWP – půlvlnná destička, L – čočka, BS – dělič svazku, M – zrcátko.	7
4	Fotografie původní sestavy sketerometru (vlevo). Modifikovaná varianta s druhým te-	
	leskopem je zobrazena vpravo.	8
5	Proužky na matnici na shear interferometru jsou v případě rovnoběžného svazku natočeny	
	svisle, jak je patrné na obrázku vpravo.	9
6	Interferenční obrazec pozorovaný na kameře. Vlevo je případ špatně zaostřeného objek-	
	tivu, vpravo je vzdálenost mezi objektivem a vzorkem správná.	9
7	Optický snímek 1D mřížky s nominální periodou 2000 nm. Interferenční obrazec – bez	
	teleskopu (uprostřed) a s teleskopem (vpravo).	10
8	Optický snímek 2D mřížky L1 s nominální periodou 4 μ m	10
9	Srovnání interferenčních obrazců na mřížce L1. Vlevo je obrázek pořízený objektivem	
	Mitutoyo 10x (0,28 NA), vpravo pak obrázek pořízený objektivem Zeiss 10x (0,25 NA).	10
10	Srovnání interferenčních obrazců pořízených pomocí objektivů Olympus. Vlevo je obrá-	
	zek pořízený objektivem se zvětšením 4x (0,1 NA), vpravo pak obrázek pořízený objek-	
	tivem se zvětšením 20x (0,4 NA)	11
11	Výsledek FDTD simulace na 1D mřížce o periodě 2 μ m, různá posunutí	15
12	Výsledek FDTD simulace na 2D mřížce o periodě 2 μ m, různá posunutí	16
13	Výsledek FDTD simulace na hexagonální struktuře, různé numerické apertury.	16
14	Výsledek FDTD simulace na 1D mřížce pro dvě různé velikosti výpočetního prostoru:	
	vlevo 560x560 voxelů, vpravo 400x400 voxelů.	17
15	Výsledek FDTD simulace na 1D mřížce pro hladkou a drsnou strukturu	17
16	Vizualizace profilování nástrojem Callgrind – čas strávený ve funkcích, před zahájením	
	optimalizace kódu.	19
17	Vizualizace profilování nástrojem Callgrind – graf volání funkcí, před zahájením optima-	
	lizace kódu.	22
18	Vizualizace profilování nástrojem Callgrind – čas strávený ve funkcích, v aktuálním stavu	
	optimalizace kódu.	23
19	AFM měření na 1D mřížce s nominální periodou 1 400 nm	26
20	Optický snímek 1D mřížky s nominální periodou 1 400 nm (vlevo). Interferenční obrazce	
	na dvou vybraných místech pořízené objektivem Olympus 20x	26
21	Ukázka závislosti intenzity světla na poloze stolku společně s fitem.	27
22	Graf závislosti periody na poloze stolku Thorlabs	27
23	Optický snímek 1D mřížky s nominální periodou 2 μm (vlevo). Interferenční obrazce na	
	dvou vybraných místech pořízené objektivem Mitutoyo 10x	28



24	Ukázka závislosti intenzity světla na poloze stolku PI. Zobrazeno je i nejlepší proložení funkcí sinus	20
25	Graf závislosti periody na poloze stolku Physik Instrumente	30
25 26	Vyhodnocení pomocí metody FDTD: vlevo závislosti normalizované asymetrie mezi pře- kryvy na poloze pro různě vysoké mřížky, vykresleno spolu s experimentálními daty.	50
	Vpravo závislost amplitudy tohoto parametru na výšce a průsečík s amplitudou měře- ných dat (modrá vodorovná čára). Naznačené chybové intervaly odpovídají odhadu vlivu	
	nehomogenity intenzity v překryvech difrakční řádů v FDTD simulaci	31
27	AFM měření na mřížce L1 (vlevo), difrakce pozorovaná na kameře (vpravo),	32
28	Porovnání simulací FDTD a měření CFS na mřížce L1	33
29	Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 2 μ m (vlevo). Výška schodků je	
	40 nm. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objekti-	
	vem Mitutoyo 10x.	34
30	Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 2 μm (vlevo). Výška schodků	
	je 1 000 nm. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené	
	objektivem Mitutoyo 10x	34
31	Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 2 μm (vlevo). Výška schodků je	
	$2\mu{\rm m}.$ Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem	
	Mitutoyo 10x	35
32	Optický snímek 2D mřížky PTB s nominální periodou 4 μ m (vlevo). Výška schodků	
	je 1 000 nm. Zobrazeny jsou i interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené	
	objektivem Mitutoyo 10x	35
33	Porovnání simulací FDTD a měření CFS na mřížce PTB pro vybrané polohy posunutí	26
24	mřížky. Sipky označují posunutí mřížky vůči středové poloze v rámci měření či výpočtu.	36
34	AFM mereni na 2D mrizce PTB s nominalni periodou 4 μ m.	37
35	Opticky snimek struktury IGX pro charakterizaci AFM hrotu. Zobrazeny jsou i interte-	20
26	AEM měžení na měžení ze TCY	38
30 27	APM mereni na mrizce IGA	39
57	chách struktuře (numerické aporture 0.26)	20
38	Optický snímek 2D mřížky Topometrix. Díle isou zobrazeny interferenční obrazce ze	39
50	dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutovo 10x	40
30	AFM měření na mřížce Tonometrix	40
40	Ontický snímek hexagonální mřížky z TU Braunschweig (vlevo) Zobrazeny isou pak	70
10	interferenční obrazce ze dvou vybraných míst pořízené objektivem Mitutovo 10x	41
41	AFM měření na mřížce z TU Braunschweig (vlevo). Difrakční obrazec pro případ. že	••
	svazek je zaostřený na rovinu tvořenou čipem kamery (vpravo).	41