

УДК 519.642.3

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СИГНАЛА ЭЛЕКТРОННОГО МИКРОСКОПА В РЕЖИМЕ ОТРАЖЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА МНОЖЕСТВЕ ФУНКЦИЙ ОГРАНИЧЕННОЙ ВАРИАЦИИ

Н. А. Кошев¹, Н. А. Орликовский², Э. И. Рау², А. Г. Ягола²

Быстрое развитие микро- и нанотехнологий влечет за собой развитие методов диагностики и изучения микроскопических структур. Одним из таких методов является томография в режиме отраженных электронов. Пространственное разрешение сигнала электронного микроскопа может быть повышено путем решения обратной задачи восстановления сигнала, определяемого свойствами образца и электронного зонда. Рассматривается метод решения задачи восстановления сигнала на множестве функций с ограниченной полной вариацией и его численная реализация. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 11-01-00040) и Visby Program, Swedish Institute, Stockholm.

Ключевые слова: микроскопия, обратные задачи, цифровая обработка изображений, вариация.

1. Введение. При линейном профилировании и формировании изображений в режиме отраженных электронов (ОЭ) в растровом электронном микроскопе (РЭМ) пространственное разрешение определяется двумя факторами. Во-первых, размером диаметра электронного зонда d , который в современных микроскопах достигает единиц нанометров, и, во-вторых, размерами трехмерной области выхода ОЭ, которые на порядки величины больше диаметра зонда [1]. Эффект размытия электронного зонда в объеме его взаимодействия с твердотельной мишенью может быть понижен фильтрацией ОЭ по энергиям [2] или уменьшением энергии облучающих электронов в РЭМ, что значительно уменьшает глубину выхода ОЭ и повышает как латеральное, так и “глубинное” разрешение в методе электронной микротомографии [3]. Однако в практических экспериментах первый метод осуществить достаточно сложно, а второй способ не всегда приемлем, так как сопряжен с уменьшением отношения сигнал/шум при формировании изображений и глубины информации. В этой связи предпринимаются попытки повышения пространственного разрешения в режиме ОЭ с помощью разработки соответствующих математических алгоритмов, учитывающих расплывание электронного пучка в твердотельной среде [4, 5]. Эти методы основаны, как правило, на решении уравнения Фредгольма первого рода, определяющего измеряемый в РЭМ видеосигнал как свертку истинной интенсивности сигнала с аппаратной функцией прибора, в роли которой выступает функция размытия электронного зонда в зависимости от материала мишени и энергии первичных электронов. Восстановление истинного изображения осуществляется решением обратной задачи при известной аппаратной функции [6].

В настоящей статье предлагается усовершенствованный алгоритм решения задачи получения изображений с повышенным пространственным разрешением. Разработанный алгоритм применен к решению обратной задачи восстановления сигналов электронного микроскопа и показал свою эффективность как при высокоразрешающей профилометрии микро- и наноструктур, так и при получении томографических изображений скрытых под поверхностью деталей структуры.

2. Схема и принцип действия установки томографа. На рис.1. представлено схематическое изображение томографа. Электронный зонд (1) (моноэнергетический пучок электронов) нормально падает на объект исследования (2), находящийся на металлической подложке (3). Часть пучка отражается с различных глубин объекта и попадает на детектор электронов (11) или на вход спектрометра (4) в зависимости от положения переключателя (6). С детекторов (5) или (11), фиксирующих интенсивность сигнала, пропорциональную количеству попавших на них электронов и их энергии, сигнал поступает на видеоконтрольное устройство (8) или персональный компьютер (9). На спектрометр подается “пилообразное” напряжение с питающего устройства (10) с целью понижения шумов (см. [7]). Фильтрация ОЭ по

¹ Пензенский государственный университет архитектуры и строительства, ул. Титова, 28, 440028, Пенза; аспирант, e-mail: nikolay.koshev@gmail.com

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, 119991, Москва; Н. А. Орликовский, аспирант, e-mail: rau@phys.msu.ru; Э. И. Рау, профессор, e-mail: rau@phys.msu.ru; А. Г. Ягола, профессор, e-mail: yagola@physics.msu.ru

энергиям при помощи спектрометра позволяет фиксировать только те электроны, которые отражаются с глубины залегания исследуемого слоя объекта, определяемой, в частности, энергиями первичного пучка (зонда РЭМ) и отраженных электронов [7]. Более подробно принцип действия установки описан в [7, 8].

3. Определение аппаратной функции — величины размытия электронного зонда. Обозначим радиус электронного зонда РЭМ на поверхности через r_0 . Радиус зонда по мере проникновения в мишень на глубину t можно оценить выражением [1]

$$r^2 = r_0^2 + 0.625 \left(\frac{Z}{E_0} \right) \left(\frac{\rho}{A} \right)^{0.5} t^{1.5}, \quad (1)$$

где r и t выражены в [см], E_0 — в [кэВ], ρ — в [г·см⁻³], Z и A — атомный номер и атомный вес соответственно, ρ — плотность материала мишени.

Установлено [9], что распределение интенсивности электронного зонда на поверхности характеризуется гауссовским распределением, и это распределение трансформируется по глубине t с изменяющимся параметром подобия $r = r(t)$, определяющимся выражением (1) и являющимся радиусом зонда РЭМ. Распределение плотности тока в сечении зонда может быть рассчитано на основе соотношения

$$k(r') = \frac{1}{2\pi r^2} \exp\left(-\frac{r'^2}{2r^2}\right), \quad (2)$$

где r' — текущее удаление от центра пучка (зонда). При изменении наиболее вероятной глубины отражения площади под кривыми распределения остаются постоянными.

4. Математическая постановка задачи и результаты моделирования. Рассмотрим моноэнергетический пучок электронов с энергией E_0 в несколько кэВ (от 1 до 50), падающий нормально на плоскую поверхность твердого тела.

Для удобства перепишем соотношение (2) в декартовой системе координат, заданной в плоскости сканируемого слоя (далее — плоскость объекта): $k(x, y) = \frac{1}{2\pi r^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2r^2}\right)$, где r — радиус зонда РЭМ, равный r_0 на поверхности и определяемый по мере проникновения вглубь исследуемого образца выражением (1).

Изображение объекта формируется посредством измерения интегральной интенсивности пучка отраженных электронов при сканировании зондом объекта. Сканирование производится “построчно”. Полученная интенсивность записывается в точке плоского изображения, которая отвечает латеральному положению зонда в данный момент времени (в дальнейшем в плоскости изображения). Изображение поступает на экран персонального компьютера, при этом в силу ненулевого радиуса первичного пучка картина несколько искажается. Целью данного исследования является изучение механизмов этого искажения, построение модели (аппаратной функции) и восстановление точного (или близкого к нему) изображения из экспериментального снимка.

Рассмотрим подробнее процесс формирования изображения. Пусть $z(x, y)$ — коэффициент отражения электронов в точке (x, y) образца. Зададим в плоскости изображения декартову систему координат (ξ, η) . Без ограничения общности положим ее аналогичной первой системе координат, заданной в плоскости исследуемого слоя объекта. При позиционировании центра зонда в точке объекта с координатами (ξ, η) в соответствующей точке изображения фиксируется некоторая интенсивность сигнала $u(\xi, \eta)$, пропорциональная числу отраженных от объекта исследования электронов. Рассмотрим малую прямоугольную площадку со сторонами dx и dy в плоскости слоя объекта, содержащую точку (x, y) объекта. Будем считать коэффициент отражения в пределах этой площадки постоянным и равным $z(x, y)$. Число элек-

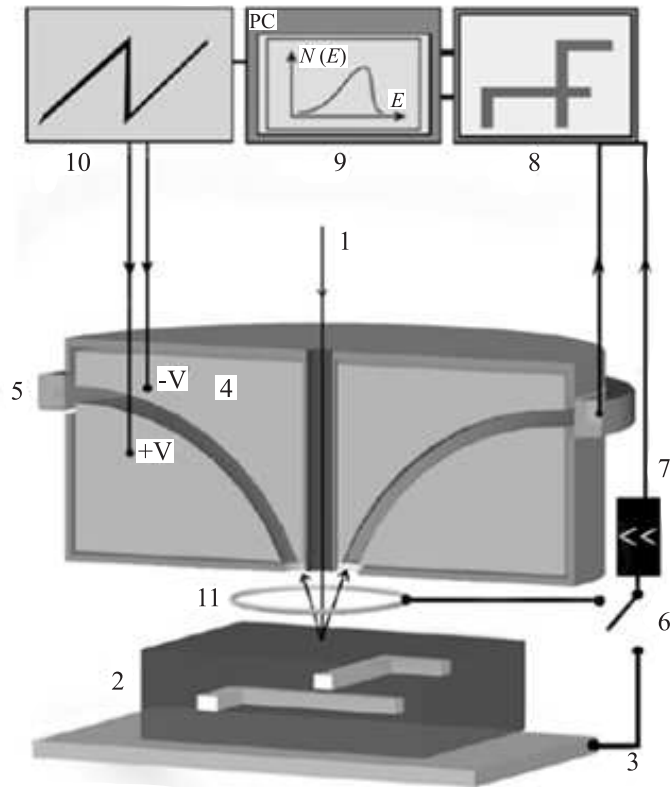


Рис. 1. Схематическое изображение установки микрофотографа

тронов, отраженных этой площадкой, определяет вклад du этой площадки в общий сигнал в точке (ξ, η) : $du(x, y, \xi, \eta) = z(x, y)k(x - \xi, y - \eta) dx dy$.

Общий сигнал в точке (ξ, η) определяется суперпозицией сигналов от всех малых площадок образца при позиционировании зонда в точке (ξ, η) :

$$u(\xi, \eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} z(x, y)k(x - \xi, y - \eta) dx dy. \quad (3)$$

Задача состоит в вычислении распределения истинного коэффициента отражения электронов z при известных u и k и является некорректной.

В работе [10] данная задача решена в пространстве W_2^2 методом деконволюции в предположении о том, что решение уравнения (3) является гладкой функцией:

$$z_\alpha(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda d\mu e^{i(\lambda x + \mu y)} \frac{U(\lambda, \mu)K^*(\lambda, \mu)}{|K(\lambda, \mu)|^2 + \alpha(1 + \lambda^2 + \mu^2)^2}. \quad (4)$$

Здесь U и K — фурье-образы распределений u и k соответственно.

Однако решение может быть, вообще говоря, разрывным. При получении решения (4) не использована априорная информация о возможной разрывности решения, что привело к появлению

1) граничного эффекта, связанного с осциллирующей помехой, которая распространяется от границ изображения;

2) осциллирующей помехи, пронизывающей изображение и усиливающейся при попытке увеличения точности реконструкции посредством уменьшения параметра регуляризации.

Эти недостатки возникают в силу невозможности точной аппроксимации разрывной функции гладкой функцией и существенно влияют на качество восстановления. Для увеличения точности реконструкции был предложен поиск решения уравнения (3) на классе функций ограниченной вариации [11–13].

5. Пространство функций с ограниченной вариацией. Пусть $z(x, y)$ — некоторая (вообще говоря, разрывная) функция в прямоугольнике $B = \{x, y : 0 < x < a; 0 < y < b\}$. Введем в B произвольную сетку $S = \{(x_i, y_j), i = 0, \dots, N - 1; j = 0, \dots, M - 1\}$. Полной вариацией функции $z(x, y)$ называется функционал VH [11, 12]:

$$VH[z] = \sup_S \left\{ \sum_{i=0}^{N-2} \sum_{j=0}^{M-2} |z_{i+1, j+1} - z_{i, j+1} - z_{i+1, j} + z_{ij}| + \sum_{i=0}^{N-2} |z_{i+1, 0} - z_{i0}| + \sum_{j=0}^{M-2} |z_{0, j+1} - z_{0j}| \right\}. \quad (5)$$

Здесь $z_{ij} = z(x_i, y_j)$. Супремум берется по всем возможным сеткам S . Функции с конечной полной вариацией образуют банахово пространство $VH(B)$ с нормой $\|z\|_{VH} = |z(0, 0)| + VH[z]$.

6. Метод А.Н. Тихонова в применении к задаче (3). К решению задачи (3) мы будем подходить как к задаче минимизации тихоновского функционала [12–16]

$$M_\alpha[z] = \|Az - u\|_{L^2}^2 + \alpha\Omega[z], \quad (6)$$

где $\Omega[z] = \|z\|_{VH}$. Как показано в работе [12] (Теорема 2.1), при адекватно выбранном параметре регуляризации α данный метод обеспечивает кусочно-равномерную сходимость приближенных решений z_α к нормальному псевдорешению при устремлении погрешностей начальных данных к нулю. Параметр регуляризации α выбирается, например, по обобщенному принципу невязки [15].

7. Конечно-разностная аппроксимация задачи (6). Без ограничения общности будем считать прямоугольник B квадратом со стороной, равной единице: $B = \{x, y : 0 < x < 1, 0 < y < 1\}$. Введем на B равномерную сетку $\left\{x_i, y_j : x_i = i \frac{1}{N}; y_j = j \frac{1}{N}; i, j = 0, \dots, N - 1\right\}$. Для простоты дальнейших выкладок, не ограничивая общности, положим, что $z_{0j} = z_{i0} = 0$.

Тогда стабилизатор Ω примет вид: $\Omega[z] = \sum_{i=0}^{N-2} \sum_{j=0}^{N-2} |z_{i+1, j+1} - z_{i, j+1} - z_{i+1, j} + z_{ij}|$. Невязку $\varphi = Az - u$ запишем в форме

$$\varphi_{ij} = \frac{1}{N^2} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} k_{i-p, j-l} z_{pl} - u_{ij}. \quad (7)$$

В формуле (7) u_{ij} и k_{ij} — значения функций u и k на узлах сетки. Конечно-разностная аппроксимация функционала (6) примет вид

$$M_\alpha[z] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{1}{N^2} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} k_{i-p,j-l} z_{pl} - u_{ij} \right) + \alpha \sum_{i=0}^{N-2} \sum_{j=0}^{N-2} |z_{i+1,j+1} - z_{i,j+1} - z_{i+1,j} + z_{ij}|. \quad (8)$$

Легко убедиться, что функционал Ω не является гладким, что не позволяет применять для численной минимизации функционала (6) градиентные методы. Для преодоления этой трудности предлагается заменить функционал гладкой аппроксимацией $\hat{\Omega}^\varepsilon[z]$, удовлетворяющей требованию

$$0 \leq \hat{\Omega}^\varepsilon[z] - \Omega[z] \leq \varepsilon(1 + \Omega[z]). \quad (9)$$

Одним из примеров такой аппроксимации является следующий функционал:

$$\hat{\Omega}^\varepsilon[z] = \sum_{i=0}^{N-2} \sum_{j=0}^{N-2} f_\varepsilon(z_{i+1,j+1} - z_{i,j+1} - z_{i+1,j} + z_{ij}), \quad \text{где } f_\varepsilon(t) = \sqrt{t^2 + \left(\frac{\varepsilon}{N^2}\right)^2}. \quad (10)$$

Путем простейших выкладок, здесь опускаемых, можно получить оценку $0 \leq \hat{\Omega}^\varepsilon[z] - \Omega[z] \leq \varepsilon$, что гарантирует выполнение неравенства (9). Таким образом, тихоновский функционал (8) со стабилизатором вида (10) можно минимизировать при помощи градиентных методов. В настоящей работе использовался метод проекций сопряженных градиентов.

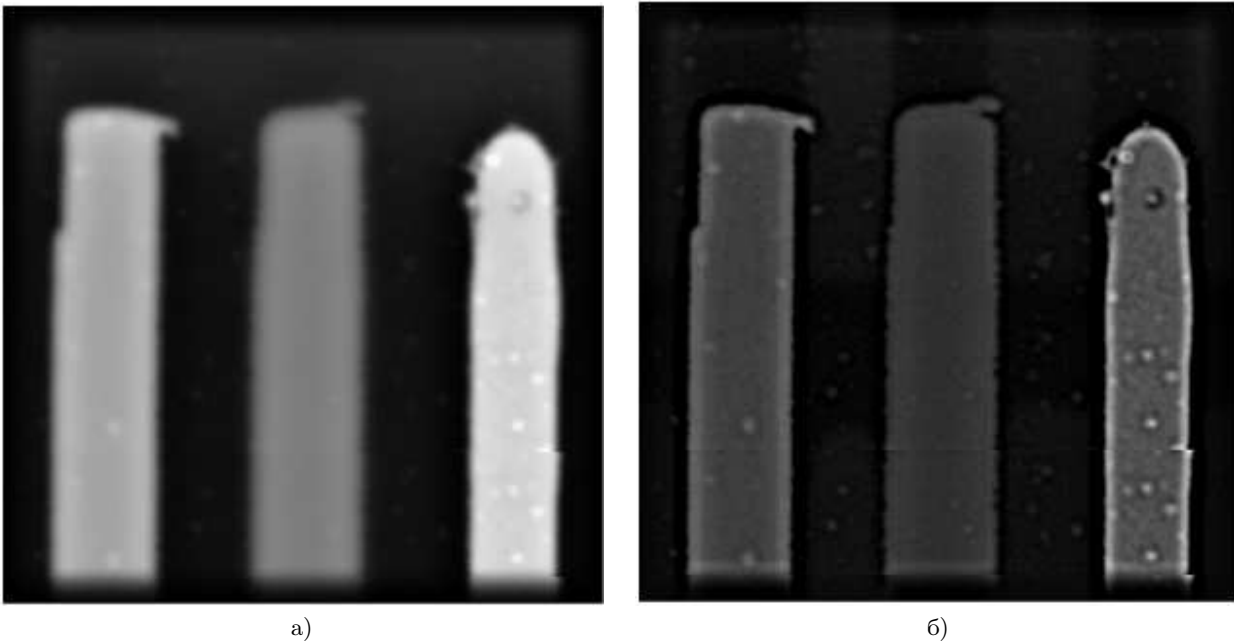


Рис. 2. Фрагмент планарной микросхемы: а) исходный сигнал, б) результат реконструкции

8. Метод проекций сопряженных градиентов. Для минимизации функционала (8) опишем процедуру нахождения градиента тихоновского функционала как градиента функции N^2 переменных:

$$\widehat{M}_\alpha^\varepsilon(z_{00}, \dots, z_{N-1,N-1}) = \Phi(z_{00}, \dots, z_{N-1,N-1}) + \alpha \widehat{\Omega}^\varepsilon(z_{00}, \dots, z_{N-1,N-1}), \quad \nabla \widehat{M}_\alpha^\varepsilon = \nabla \Phi + \alpha \nabla \widehat{\Omega}^\varepsilon.$$

Здесь $\Phi(z_{00}, \dots, z_{N-1,N-1}) \approx \|\varphi(x, y)\|_{L_2}^2$. Пользуясь теоремой о свертке, путем простых преобразований получаем для Φ : $\nabla \Phi|_{ij} = \frac{2}{N^2} \operatorname{Re} \left[F^{-1} \left(\widehat{\varphi} \widehat{K} \right) \right]_{ij}$. Здесь \widehat{K} — конечно-разностная аппроксимация фурье-образа распределения k , а $\widehat{\varphi}$ — конечно-разностная аппроксимация фурье-образа невязки φ .

Для градиента стабилизатора $\widehat{\Omega}^\varepsilon$ несложно получить следующее выражение:

$$\nabla \widehat{\Omega}^\varepsilon|_{ij} = \frac{\widetilde{z}_{ij}}{f_\varepsilon(\widetilde{z}_{ij})} + \frac{\widetilde{z}_{i-1,j-1}}{f_\varepsilon(\widetilde{z}_{i-1,j-1})} - \frac{\widetilde{z}_{i,j-1}}{f_\varepsilon(\widetilde{z}_{i,j-1})} - \frac{\widetilde{z}_{i-1,j}}{f_\varepsilon(\widetilde{z}_{i-1,j})}, \quad \text{где } \widetilde{z}_{ij} = z_{i+1,j+1} - z_{i+1,j} - z_{i,j+1} + z_{ij}.$$



Рис. 3. Дефект спайки микросхемы: а) исходное изображение, б) реконструированное

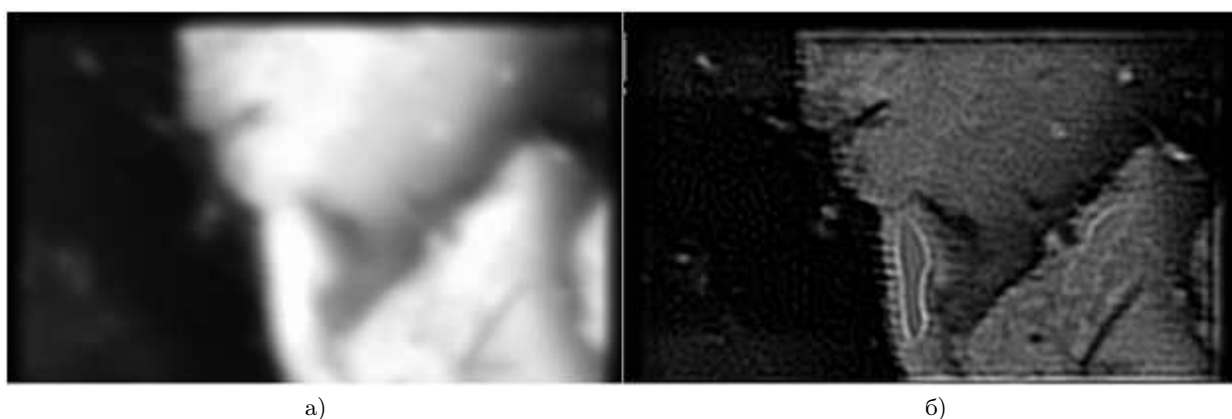


Рис. 4. Восстановление с деконволюцией в первом приближении: а) исходное изображение, б) реконструированное

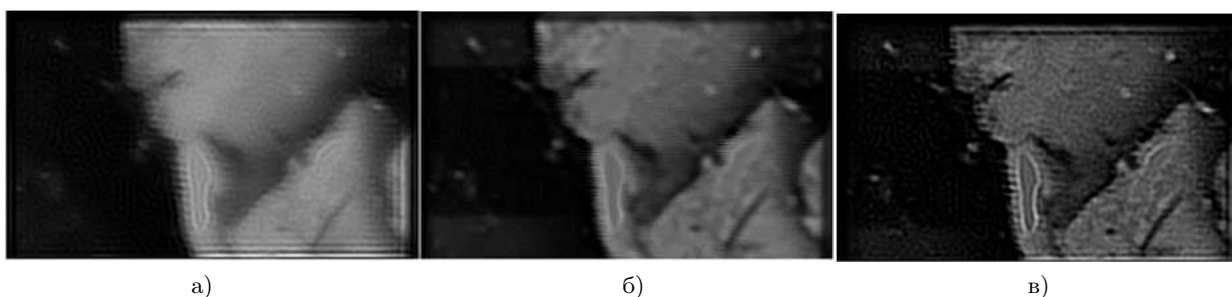


Рис. 5. Сравнение деконволюции с методом реконструкции на классе функций с ограниченной полной вариацией (ФОВ) при различных первых приближениях: а) результат деконволюции [10]; б) результат восстановления на классе ФОВ с первым приближением в виде правой части; в) результат восстановления на классе ФОВ с первым приближением в виде результата деконволюции (а)

9. Краткое описание программы и результаты. Результатом нашей работы стала программа, осуществляющая решение задачи (3) на классе функций ограниченной полной вариации. Программа была написана на языке C++ с использованием кросс-платформенного фреймворка QT4.5 для создания пользовательского интерфейса. Ниже приведены некоторые результаты реконструкции сигнала. Весь расчет осуществлялся на тестовой платформе, обладающей процессором Intel DualCore E5200 (2.5 GHz) и объемом памяти 4 Gb DDR3. Объем оперативной памяти, занимаемый при расчетах, составлял каждый раз около 720 Mb.

На рис. 2 приведен результат реконструкции реального изображения планарной микросхемы. Линейные размеры кадра составляют около 12 мкм, радиус размытия зонда составляет 0.21 мкм. Разрешение — 1024×1024 , время расчета — 298 с, 80 итераций, $\alpha = 10^{-6}$. В качестве первого приближения было взято исходное изображение.

На рис. 3 приведен еще один результат: спайка в планарной микросхеме. Размеры кадра порядка 10 мкм, радиус размытия зонда — 0.18 мкм. Разрешение 1024×1024 , время расчета — 312 с, 80 итераций, $\alpha = 10^{-4}$. В качестве первого приближения для метода сопряженных градиентов было взято исходное изображение.

На рис. 4 та же задача, что и на рис. 2, с теми же параметрами. Однако в качестве первого приближения брался результат реконструкции методом деконволюции [10]. Время расчета — 225 с, 70 итераций.

На рис. 5 приведено сравнение методов деконволюции и реконструкции на классе функций с ограниченной полной вариацией. Видно, что самый хороший результат достигается при последовательном применении этих двух методов, если взять в качестве первого приближения результат деконволюции. Отметим также, что применение метода деконволюции перед методом сопряженных градиентов по ресурсоемкости эквивалентно одной дополнительной итерации расчета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Nosker R. W.* Scattering of highly focused kilovolt electron beams by solids // *J. Appl. Phys.* 1969. **40**, N 4. 1872–1882.
2. *Wells O.* Low-loss image for surface scanning electron microscope // *Appl. Phys. Lett.* 1971. **19**. 232–235.
3. *Лукьянов Ф.А., Рау Э.И., Сеннов Р.А.* Глубина пробега первичных электронов, размытие электронного пучка и пространственное разрешение в электронно-зондовых исследованиях // *Изв. РАН. Сер. Физ.* 2009. **73**, № 4. 463–472.
4. *Konkol A., Booker G.R., Wilshaw P.R.* Backscattered electron contrast on cross sections of interfaces and multilayers in scanning electron microscope // *Ultramicroscopy.* 1995. **58**. 233–237.
5. *Гайдук И.М., Бородина И.Н., Тарасов В.К.* Практический алгоритм вычета аппаратной функции при линейном профилировании методом преобразования, обратного свертке // *Изв. АН СССР. Сер. Физ.* 1990. **54**, № 2. 332–337.
6. *Yano F., Notira S.* Deconvolution of scanning electron microscopy images // *Scanning.* 1993. **15**. 19–24.
7. *Гостев А.В., Дицман С.А., Лукьянов Ф.А., Орликовский Н.А., Рау Э.И., Сеннов Р.А.* Метод и аппаратура микротомографии в сканирующей электронной микроскопии // *Приборы и техника эксперимента.* 2010. № 4. 124–134.
8. *Александров А.Ф., Дицман С.А., Лукьянов Ф.А., Орликовский Н.А., Рау Э.И., Сеннов Р.А.* Электронно-зондовая неразрушающая бесконтактная диагностика приборных структур микроэлектроники // *Микроэлектроника.* 2010. **39**, № 5. 327–336.
9. *Зайцев С.И., Кошев Н.А., Лукьянов Ф.А., Рау Э.И., Якимов Е.Б.* Прямое измерение диаметра и распределения плотности тока в кроссовере электронного зонда // *Тр. XXIII Российской конференции по электронной микроскопии.* Черноголовка: Богородский печатник, 2010. 103–104.
10. *Кошев Н.А., Лукьянов Ф.А., Рау Э.И., Сеннов Р.А., Ягола А.Г.* Повышение пространственного разрешения в режиме отраженных электронов в сканирующей электронной микроскопии // *Изв. РАН. Сер. Физ.* 2011. **75**, № 9. 1248–1251.
11. *Леонов А.С.* О сходимости по полным вариациям регуляризирующих алгоритмов решения некорректно поставленных задач // *Журн. вычисл. матем. и матем. физ.* 2007. **47**, № 5. 767–783.
12. *Леонов А.С.* Применение функций нескольких переменных с ограниченными вариациями для численного решения двумерных некорректных задач // *Сиб. журн. вычисл. матем.* 1999. **2**, № 3. 257–270.
13. *Леонов А.С.* Решение некорректно поставленных обратных задач. М.: Либроком, 2010.
14. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
15. *Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990.
16. *Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г.* Нелинейные некорректные задачи. М.: Наука, 1995.

Поступила в редакцию
01.09.2011