

ЗАДАЧИ РАСЧЕТА И ОПТИМИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ В ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЛИТОГРАФИИ

Д.Ю. Князьков

Институт Проблем Механики РАН

Россия, 119526, Москва, просп. Вернадского, 101, корп. 1

E-mail: knyaz@ipmnet.ru

В настоящей работе рассматриваются основные задачи голографической литографии: задача создания голограммы, оптимизации и восстановления. Предлагается алгоритм "Большого пиксела" расчета электромагнитных полей, позволяющий на современных супервычислителях производить расчеты для нужд голографической литографии. Приводятся результаты численных расчетов по указанному алгоритму на суперкомпьютере МВС-100К МСЦ РАН. В результате оптимизации синтезированной на компьютере голограммы удалось снизить амплитуду колебаний на изображении до технологически приемлемых значений, существенно уменьшив "эффект Гиббса" искажения возникающие на краях создаваемого объекта при физической регистрации голограммы. Показаны результаты оптимизации электромагнитных полей методом локальных вариаций.

CALCULATION AND OPTIMIZATION PROBLEMS FOR ELECTROMAGNETIC FIELDS IN HOLOGRAPHIC LITHOGRAPHY

/ D.U. Knyazkov (IPMech RAS, prosp. Vernadskogo, 101, block 1, Moscow, 119526, Russia). In the paper the following problems of holographic lithography are considered: hologram creation, optimization and reconstruction. New algorithm ("Big Pixel") of electromagnetic fields calculation is described. It makes possible to perform calculations for the needs of holographic lithography with the use of the current supercomputers. Results of numerical computations based on the algorithm obtained on MVS-100K MSC RAS cluster are described. It is shown that optimization of computer generated hologram allows to reduce aerial image oscillations to the technologically acceptable values. The Gibbs effect (distortions on object edges which are inevitable during physical registration of the holograms) is substantially reduced. Results of electromagnetic fields optimization with the use of local variations method are reported.

Настоящая работа представляет собой описание некоторых аспектов численной и алгоритмической реализации голографических методов создания световых изображений топологий интегральных микросхем, предложенных и разработанных группой авторов (см. [10], [11]). Рассматриваются основные задачи голографической литографии: задача создания голограммы, оптимизации и восстановления. Предлагается алгоритм "Большого пиксела" расчета электромагнитных полей, позволяющий на современных супервычислителях производить расчеты для нужд голографической литографии. Приводятся результаты численных расчетов по указанному алгоритму на суперкомпьютере МВС-100К МСЦ РАН. Показаны результаты оптимизации электромагнитных полей методом локальных вариаций.

Актуальность и постановка задачи. В голографической литографии возникает несколько задач, требующих для своего решения существенных вычислительных мощностей. Это задача создания голографической маски, когда по заданной топологии по методу Габора [6] синтезируется голограмма; задача восстановления, когда моделируется процесс освещения голограммы источником электромагнитного излучения и рассчитывается интенсивность в плоскости топологии - изображение; задача оптимизации полученной по методу Габора голограммы градиентными методами. Самая трудоемкая часть всех этих задач - расчет интегралов типа свертки следующего вида:

$$f(x, y) = \iint K(x - \xi, y - \eta) \varphi(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (1)$$

Особенностью задачи создания голограммы для нужд литографии является то, что шаг расчетной сетки должен быть не больше характерного минимального размера топологии σ . Иначе некоторые элементы топологии не будут учтены в расчете, что приведет к их исчезновению в конечном изделии - то есть браку. Более того, в задаче восстановления (и оптимизации) шаг сетки должен быть не больше $\frac{\sigma}{5}$. Таким образом, можно сформулировать следующую задачу: разработать алгоритм, позволяющий на существующих вычислительных комплексах за приемлемое время рассчитывать (восстанавливать и оптимизировать) голограммы для топологий реальных чипов.

Изображение с голограммы рассчитанной по методу Габора будет иметь искажения, обусловленные особенностями метода, в частности необходимостью использовать когерентное излучение [5]. Поэтому голограмма Габора - вещественнозначная функция $T(x, y)$ далее оптимизируется с целью уменьшить отличие получаемого с нее изображения от желаемой топологии $q_0(\xi, \eta)$. В общем виде задачу оптимизации можно сформулировать следующим образом:

$$\rho(q_0(\xi, \eta) - \left| \iint K(\xi - x, \eta - y) Q(x, y) T(x, y) \right|^2) \rightarrow \min \quad (2)$$

где ρ - некоторая функциональная норма, а $Q(x, y)$ - поле источника излучения.

Метод большого пиксела. Пусть интегрирование в (1) ведется по квадрату с размерами $a \times a$ с центром в точке (ξ_0, η_0) :

$$f(x, y) = \int_{-\frac{a}{2} + \eta_0}^{\frac{a}{2} + \eta_0} \int_{-\frac{a}{2} + \xi_0}^{\frac{a}{2} + \xi_0} K(x - \xi, y - \eta) \varphi(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (3)$$

Далее, пусть этот квадрат разбит на N^2 одинаковых маленьких квадратиков $\square_{k,l}$ с центрами в точках $(-\frac{a}{2} + \xi_0 + (k - \frac{1}{2})\sigma, -\frac{a}{2} + \eta_0 + (l - \frac{1}{2})\sigma)$, $k, l = 1, \dots, N$ с размером $\sigma \times \sigma$ - "больших пикселей" (рис. 1) и на каждом из этих квадратиков интеграл ядра свертки (3) может быть посчитан аналитически или заменен с достаточной точностью аналитическим приближением

$$S_{k,l}(x, y) = \iint_{\square_{k,l}} K(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta, \quad (4)$$

обладающим (как и ядро свертки K) свойством инвариантности относительно сдвига:

$$S_{k,l}(x, y) = S_{k+\Delta k, l+\Delta l}(x + \Delta k \cdot \sigma, y + \Delta l \cdot \sigma), \quad \forall \Delta k, \Delta l \in \mathbb{Z}; \quad (5)$$

а функция $\varphi(\xi, \eta)$ постоянна на каждом большом пикселе $\square_{k,l}$ и равна на нем $\varphi_{k,l}$. Тогда интеграл (3) может быть посчитан следующим образом:

$$f(x, y) = \int_{-\frac{a}{2} + \eta_0}^{\frac{a}{2} + \eta_0} \int_{-\frac{a}{2} + \xi_0}^{\frac{a}{2} + \xi_0} K(x - \xi, y - \eta) \varphi(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{k,l=1}^N \varphi_{k,l} S_{k,l}(x, y) \quad (6)$$

Воспользовавшись (5) можно записать (6) следующим образом:

$$f_{i,j} = \sum_{k,l=1}^N \varphi_{k,l} S_{i-k,j-l} \quad (7)$$

где $f_{i,j} = f(-\frac{a}{2} + \xi_0 + i\sigma, -\frac{a}{2} + \xi_0 + j\sigma)$, $i, j = 1, \dots, M = \frac{b}{\sigma}$, а $S_{i-k,j-l} = S_{k,l}(-\frac{a}{2} + \xi_0 + i\sigma, -\frac{a}{2} + \xi_0 + j\sigma)$. Таким образом, воспользовавшись (7) можно вычислить значение функции f на квадрате $b \times b$ в узлах сетки из $M \times M$ узлов с шагом σ (рис. 1).

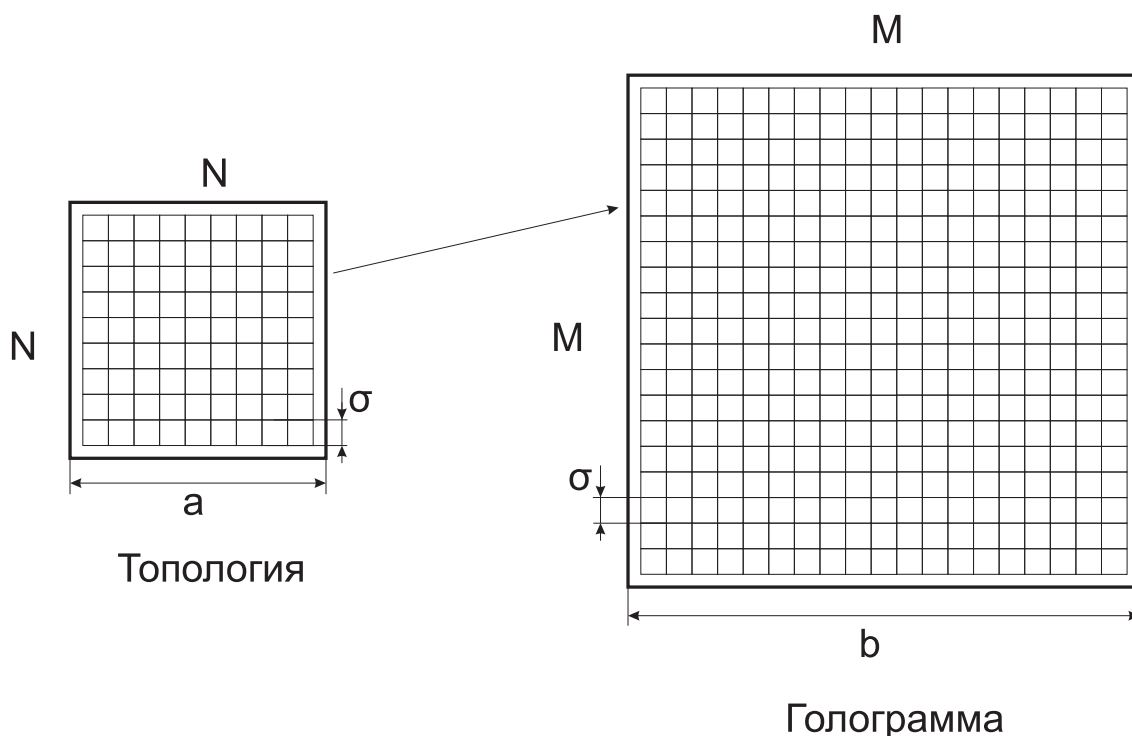


Рис. 1: Метод большого пиксела.

Сумма (7) представляет собой свертку двух последовательностей, и для ее вычисления может быть использован алгоритм быстрого преобразования Фурье (БПФ) [1]. Пусть \mathbf{S} , φ , \mathbf{f} - матрицы размера $(N+M-1) \times (N+M-1)$, соответствующие ядру свертки $S_{k,l}$, заданной функции $\varphi(\xi, \eta)$ и искомой функции $f(x, y)$. Матрица \mathbf{S} состоит из элементов $S_{k,l}$; матрица φ состоит из блока $N \times N$ заданных на квадрате $a \times a$ значений функции $\varphi(\xi, \eta)$, остальные элементы этой матрицы - нули. Тогда свертка (7) может быть вычислена следующим образом:

$$\mathbf{f} = F^{-1}(F(\mathbf{S}) \otimes F(\varphi)) \quad (8)$$

где $F(\cdot)$ и $F^{-1}(\cdot)$ - это прямое и обратное преобразование Фурье, а \otimes - операция поэлементного умножения матриц. Искомые значения функции $f(x, y)$ будут содержаться в блоке размера $M \times M$ результирующей матрицы \mathbf{f} .

Количество операций для вычисления одного преобразования Фурье при использовании алгоритма БПФ составит $2C^*(N+M-1)^2 \ln(N+M-1)$ умножений и $2C^+(N+M-1)^2 \ln(N+M-1)$ сложений, где константы C^* , C^+ будут зависеть от используемого алгоритма БПФ. Так, для $N = 2^p$, есть алгоритмы позволяющие осуществить одомерное БПФ за $5N \log_2 N$ операций [7]. Для поточечного умножения комплексных матриц понадобится $4(N+M-1)^2$ умножений и $2(N+M-1)^2$ сложений. Таким образом количество операций, необходимых для реализации метода большого

пиксела составит $6C^*(N + M - 1)^2 \ln(N + M - 1) + 4(N + M - 1)^2$ умножений и $2C^+(N + M - 1)^2 \ln(N + M - 1) + 2(N + M - 1)^2$ сложений.

Задачи синтеза голограммы и восстановления изображения. Изложенный выше алгоритм может быть применен при синтезе голограммы Габора $T(x, y)$ и при восстановлении, когда производится моделирование процесса освещения голограммы электромагнитной волной и с шагом в несколько раз меньшим, чем рассчитывается распределение интенсивности в заданной плоскости. В этих расчетах самая трудоемкая часть - это расчет дифракции когерентной монохроматической волны в приближении Френеля-Кирхгофа. Так, если плоская волна падает на плоский предмет с амплитудным пропусканием $\varphi(\xi, \eta)$, поле в плоскости, находящейся на расстоянии d может быть рассчитано следующим образом [3]:

$$f(x, y, d) = C_1 \iint \varphi(\xi, \eta) \frac{e^{-ikr}}{r} (1 + \cos\Theta) d\xi d\eta \quad (9)$$

где $r = (d^2 + (x - \xi)^2 + (y - \eta)^2)^{\frac{1}{2}}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, а $\cos\Theta = \frac{d}{r}$.

Таким образом, искомый интеграл совпадает с (3) для $K = C_1 \frac{e^{-ikr}}{r} (1 + \cos\Theta)$. В качестве (4) можно взять приближение Фраунгофера для дифракции в дальней зоне [4]:

$$S_{k,l} = C_2 \iint_{\square_{k,l}} e^{ik(\frac{x\xi}{d} + \frac{y\eta}{d})} d\xi d\eta \quad (10)$$

Это приближение справедливо, если на области интегрирования (10) выполнено условие дальнего поля: $\frac{\xi^2 + \eta^2}{\lambda} \ll d$. Интеграл (10) может быть посчитан аналитически:

$$S_{k,l} = C_3 \frac{\sin\alpha \sin\beta}{\alpha \beta} \quad (11)$$

где $\alpha = \frac{\pi\sigma x}{\lambda d}$, $\beta = \frac{\pi\sigma y}{\lambda d}$.

Очевидно, что для (11) выполнено свойство (5) и для вычисления (9) можно воспользоваться методом большого пиксела. Тогда, если расчетные сетки имеют размеры $N \times N$ и $M \times M$, интеграл (9) может быть вычислен при помощи трех БПФ (см. формулу (8)) с использованием $C(N + M - 1)^2 \ln(N + M - 1)$ операций.

Пример 1. Расчет голограммы для $N = 10^6$. Пусть функция задающая топологию $\varphi(\xi, \eta)$ определена на сетке из $N \times N$ узлов (см. рис. 1). Пусть топология имеет площадь 2×2 см, минимальный размер элемента на ней составляет $\sigma = 20$ нм, а длина волны $\lambda = 20$ нм. Тогда для задачи создания голограммы $N = 10^6$. Если использовать аналитическое решение задачи дифракции на прямоугольном отверстии, понадобится до 10^{23} операций (так, при самом трудоемком расчете - когда излучение от топологии состоящей из $\frac{1}{4} 10^{12}$ отдельных больших пикселей необходимо рассчитать в 10^{12} узлах расчетной сетки на голограмме, количество операций составит порядка $\frac{1}{4} 10^{24}$), а если использовать БПФ для расчета свертки (1), понадобится порядка 10^{19} операций. Если использовать последний из упомянутых методов, на создание голограммы на суперкомпьютере с производительностью 100 TFlops даже при достижении пиковой производительности уйдет более суток, что неоправданно долго (на самом деле при вычислении двумерного БПФ вряд ли удастся достичь более 5-10% от пиковой мощности). Описанный выше метод большого пиксела позволяет снизить количество операций с 10^{19} до 10^{17} , что делает возможным создавать и даже оптимизировать голограммы больших топологий на современных супервычислительных комплексах за приемлемое время.

Пример 2. Расчет голограммы для $N = 4 \cdot 10^4$ на МВС-100К МСЦ РАН. На суперкомпьютере МВС-100К МСЦ РАН был реализован следующий вариант алгоритма большого пиксела: голограмма разбивалась на одинаковые области и расчет

производился отдельно для каждой из областей (рис. 2). В таком виде алгоритм позволяет производить вычисления при ограниченном объеме оперативной памяти. Результаты тестирования показали, что на 10% этого вычислительного комплекса (суммарная пиковая производительность участвовавших в вычислении узлов примерно 10 TFlops) можно рассчитывать и оптимизировать голограммы для топологий с размером элемента 250 нм на площади 1x1 см. Сетка в этом расчете имела размер 40000x40000, размер отдельного двумерного БПФ составил соответственно 80000x80000, а время работы всей программы создания голограммы составило 100 минут.

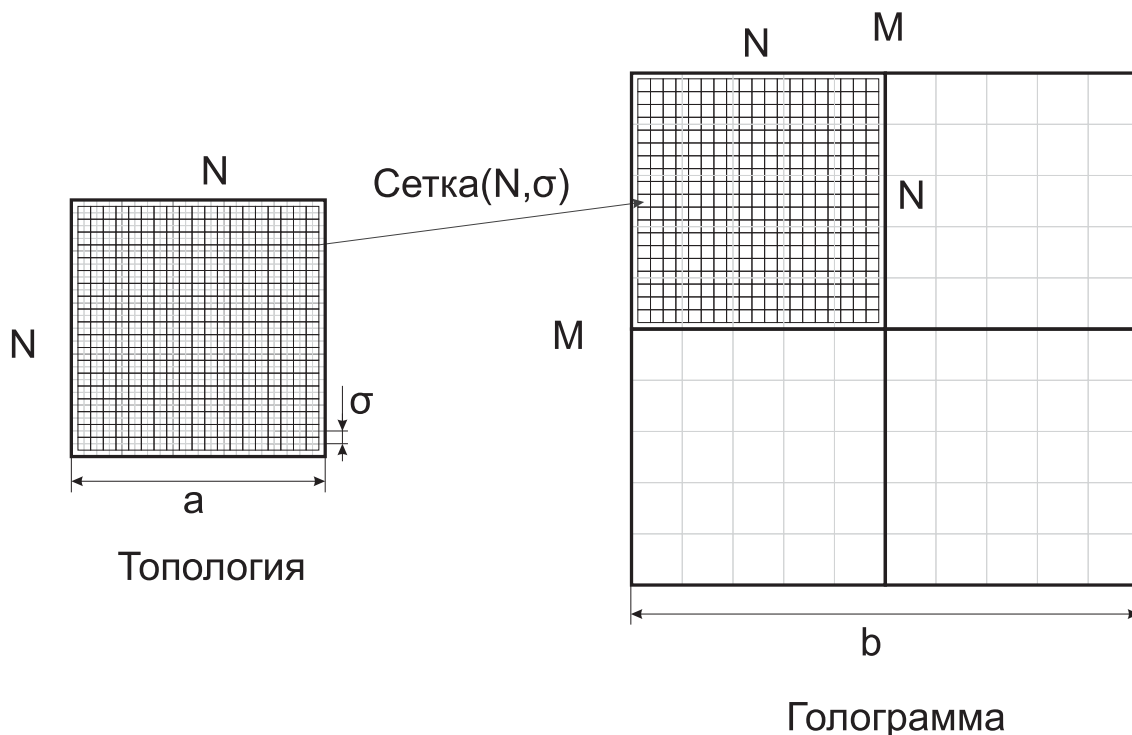


Рис. 2: Метод большого пиксела с разбиением голограммы на области.

Оптимизация голограммы. Для решения задачи оптимизации (2) голограммы Габора, рассчитанной по алгоритму, предложенному в предыдущем разделе, использовался метод локальных вариаций [2]. Пусть узлы сетки $N \times N$ на объектной плоскости занумерованы от 1 до N^2 . Если излучение освещающего источника описывается в плоскости голограммы функцией $Q(x, y)$, то поле в каждом таком узле с координатами (ξ_j, η_j) равно:

$$J_j = \iint_{\Gamma} K(\xi_j - x, \eta_j - y) Q(x, y) T(x, y) dx dy, \quad j = 1, \dots, N^2 \quad (12)$$

Необходимо минимизировать отклонение результирующего распределения интенсивности от заданной функции $q_0(\xi, \eta)$. Таким образом минимизируемый функционал, если в качестве меры отклонения взять сумму разностей модулей в точках (ξ_j, η_j) , $j = 1, \dots, N^2$ будет иметь следующий вид:

$$J = \sum_{j=1}^{N^2} \left| \frac{|J_j|^2}{\max_j |J_j|^2} - q_0(\xi_j, \eta_j) \right| \quad (13)$$

Окончательно задача оптимизации методом локальных вариаций имеет вид:

$$\sum_{j=1}^{N^2} \left| \frac{\left| \iint_{\Gamma} K(\xi_j - x, \eta_j - y) Q(x, y) T(x, y) dx dy \right|^2}{\max_j \left| \iint_{\Gamma} K(\xi_j - x, \eta_j - y) Q(x, y) T(x, y) dx dy \right|^2} - q_0(\xi_j, \eta_j) \right| \xrightarrow{T(x,y)} \min \quad (14)$$

При практической реализации для обеспечения бинаризуемости строящейся голограммы шаги по пространству Δx , Δy и величина вариации h выбираются в соответствии со следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \Delta x, \Delta y &\geq \gamma, \\ h &\geq h_0 \end{aligned} \quad (15)$$

где γ - это ячейка на голограмме, а h_0 - минимальная вариация, которую возможно передать при бинаризации для данных физических параметров. Был проведен ряд расчетов, в которых задача оптимизации (14) решалась методом локальных вариаций с параметрами $\Delta x = \Delta y = \gamma$, $h = h_0$. Для несложных топологий - полосок, квадратиков, уголков было получено снижение колебаний яркости изображения с неприемлемых 12-15% до технологически допустимых 3-5%.

Описанный выше метод большого пиксела может быть также применен при реализации оптимизации градиентными методами, так как если в качестве нормы отличия в (2) взять интеграл по площади изображения от квадрата разности функций, расчет вариации функционала сведется к расчету нескольких интегралов вида (1).

Пример 3. Оптимизация одиночной полоски. В качестве функции топологии $q_0(\xi, \eta)$ берется характеристическая функция полоски размером 1x10 мкм, равная 1 на этой полоске и 0 на окружающем ее поле размером 30x30 мкм, длина волны составляет 0,4416 мкм. Полученное с голограммы Габора изображение (слева на рис. 3) имеет колебания яркости относительно средней линии на площади полоски порядка 12%. После 30-ти итераций метода локальных вариаций размах этих колебаний падает до 3-4% (справа на рис. 3).

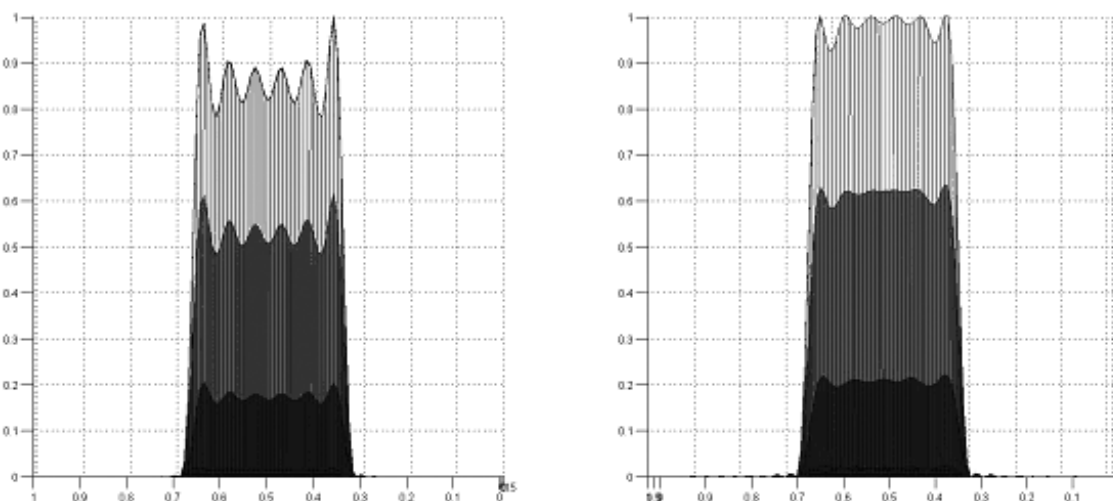


Рис. 3: Оптимизация полоски 1x10 мкм.

Основные результаты и научная новизна. В настоящей работе описан метод расчета дифракционного интеграла Френеля-Кирхгофа, позволяющий на существующих параллельных вычислительных комплексах создавать, восстанавливать и оптимизировать голограммы больших размеров для нужд голографической литографии.

Приводятся результаты численного расчета голограмм Габора и моделирования процесса восстановления на суперкомпьютере МВС-100К МСЦ РАН. Показаны результаты оптимизации методом локальных вариаций электромагнитных полей, формируемых голограммами в плоскости фоторезиста. В результате оптимизации синтезированной на компьютере голограммы удалось снизить амплитуду колебаний на изображении до технологически приемлемых значений, существенно уменьшив "эффект Гиббса" - искажения возникающие на краях создаваемого объекта при физической регистрации голограммы [5].

Похожие задачи создания масок, оптимизации и восстановления возникают и в обычной проекционной литографии [8], [9], однако для расчетов как правило достаточно мощности рабочей станции, так как вычисления здесь проводятся без учета дифракции от далеко расположенных элементов, что соответствует интегрированию в (1) по существенно меньшей области. Представляемые в настоящей работе численные аспекты решения прямой и обратной задачи голографии для объектов с количеством элементов 10^{10} и более впервые возникли в рамках исследовательского проекта по голографической литографии, результаты которого отражены в патенте [10] и являются частью компьютерной реализации идеи голографической литографии, изложенной в указанном патенте.

Список литературы

- [1] *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. М.: Бином, 2004, 636 с.
- [2] *Черноусько Ф.Л., Баничук Н.В.* Вариационные задачи механики и управления. Численные методы. М.: Наука, 1973, 240 с.
- [3] *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М., 1973, 720 с.
- [4] *Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л.* Оптическая голография. М.: Мир, 1973, 688 с.
- [5] *Considine Ph.S.* Effects of coherence on imaging systems // J. Opt. Soc. Am., V. 56, No. 8, August 1966.
- [6] *Gabor D. A.* A new microscopic principle // Nature, V. 161, PP. 777-778, 1948.
- [7] *Нуссбаумер Г.* Быстрое преобразование Фурье и алгоритмы вычисления сверток. М.: Радио и связь, 1985, 248 с.
- [8] *Poonawala A. and Milanfar P.* OPC and PSM design using inverse lithography: A non-linear optimization approach // Proc. of the SPIE Conference on Optical Microlithography XIX, San Jose, February 2006.
- [9] *Singh V., Hu B., Bollepalli S., Wagner S., Borodovsky Y.* Making a trillion pixels dance // Proc. of SPIE Vol. 6924, March 2008.
- [10] *Борисов М.В., Гавриков А.А., Князьков Д.Ю., Раховский В.И., Челюбеев Д.А., Шамаев А.С.* Способ изготовления голографических изображений рисунка. Патент РФ 2396584 С1, с приоритетом от 22.07.2009г., опубликован 10.08.2010г.
- [11] *Борисов М.В., Боровиков В.А., Гавриков А.А., Князьков Д.Ю., Раховский В.И., Челюбеев Д.А., Шамаев А.С.* Методы создания и коррекции качества голографических изображений геометрических объектов с элементами субволновых размеров // Доклады Академии Наук, 2010, т. 434, № 3, стр. 332-336.