

На правах рукописи

Михеев Пётр Андреевич

**Программные методы расчёта и коррекции
электромагнитных полей**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук».

Научные руководители: доктор технических наук, профессор
Бобков Сергей Геннадьевич
доктор физико-математических наук, профессор
Шамаев Алексей Станиславович

Официальные оппоненты: **Александров Андрей Федорович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», кафедра физической электроники
Смирнов Юрий Геннадьевич,
доктор физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пензенский государственный университет»,
заведующий кафедрой «Математика и суперкомпьютерное моделирование»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

Защита состоится 14 декабря 2016 г. в 14⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 при федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики Российской академии наук (ИВМ РАН), расположенном по адресу: 119333, г. Москва, ул. Губкина, 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института вычислительной математики РАН.

Автореферат разослан «__» _____ 2016 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 002.045.01, д.ф.-м.н.

Бочаров Геннадий Алексеевич

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Во многих областях науки и техники возникает задача создания электромагнитной волны с заданными свойствами. Один из способов решения этой задачи заключается в преобразовании когерентного излучения перфорированной пластиной, размеры и расположение отверстий в которой специальным образом рассчитаны. Такой подход позволяет значительно упростить и удешевить оптическую систему.

Определение размеров и положений отверстий, которые необходимо сделать в пластине, чтобы при дифракции на ней получилась нужная электромагнитная волна, является сложной обратной задачей. Будем называть эту обратную задачу расчетом перфорированной пластины. В теории дифракции существует классический метод для решения подобных задач. Однако в данном случае этот метод имеет существенные недостатки, ограничивающие возможность его практического применения.

1. Недостаточная точность синтеза электромагнитной волны. Результирующая волна существенно отличается от желаемой, особенно, если требуется получить неоднородности субволнового размера.
2. Высокая вычислительная сложность. Некоторые практические приложения требуют таких объемов вычислений, что даже на крупнейших современных суперкомпьютерах расчет может занимать несколько лет.

Предлагаемые в диссертации методы расчета и оптимизации устраняют эти недостатки. Полученные в работе результаты имеют многочисленные приложения в оптике, в том числе при контроле качества различных оптических систем с целью поиска и дальнейшей коррекции дефектов в упомянутых оптических системах.

В задачах радиолокации, радиометрии, в антенной и волноводной технике предлагаемые методы расчета и оптимизации также могут быть с успехом использованы, в частности, в целях синтеза гибридных антенных устройств и для контроля качества различных отражающих и преломляющих электромагнитные волны элементов этих устройств.

Целью данной работы является разработка нового метода расчета размеров и положений отверстий в перфорированной пластине, обладающего приемлемой вычислительной сложностью и обеспечивающего высокую точностью синтеза заданных электромагнитных волн.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи.

1. Исследовать область применимости скалярной модели дифракции в задаче рассеяния электромагнитной волны на перфорированной пластине.
2. Модифицировать существующий метод расчета перфорированной пластины, уменьшив его вычислительную сложность.
3. Разработать метод коррекции, повышающий точность синтеза заданной электромагнитной волны.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Определена область параметров, в которой при расчете перфорированных пластин допустимо использовать скалярную модель дифракции.
2. Были разработаны алгоритмы, кардинально снижающие вычислительную сложность расчета перфорированной пластины.
3. Разработан метод коррекции, позволяющий значительно снизить отклонение результирующего электромагнитного поля от желаемого.

Научная новизна.

1. Было выполнено оригинальное исследование области применимости скалярной модели дифракции в задаче рассеяния электромагнитной волны на перфорированной пластине.
2. Был разработан новый алгоритм расчета свёртки двумерных функций с различным шагом сетки на входе и на выходе.
3. Был разработан новый метод расчета градиента в пространстве большой размерности.

Практическая значимость. Результаты работы используются при расчете голографических масок для микролитографии в Nanotech SWHL GmbH.

Достоверность изложенных в работе результатов обеспечивается серией расчетов и сравнением их результатов с экспериментальными данными.

Апробация работы. Основные положения диссертации доложены на следующих конференциях и семинарах:

- 58-ая научная конференция МФТИ (г. Долгопрудный, 2015);
- конференция «Quasilinear equations, inverse problems and their applications» (г. Долгопрудный, 2015);
- семинар кафедры дифференциальных уравнений мехмата МГУ (г. Москва, 2015);

- семинар кафедры физической электроники физфака МГУ (г. Москва, 2015).

Личный вклад. Основные результаты диссертации получены автором самостоятельно.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 10 публикациях [1–10], три из которых опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК [1, 2, 4], три — в тезисах докладов [3, 5, 6], четыре патента [7–10].

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и приложения. Полный объем диссертации **83** страницы текста с **63** рисунками и **3** таблицами. Список литературы содержит **38** наименований.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Первая глава посвящена постановке задачи расчета перфорированной пластины для создания электромагнитной волны с заданными свойствами и обзору некоторых результатов решения этой задачи.

Задача рассматривается в рамках скалярной модели дифракции (вопросу корректности использования здесь скалярного приближения посвящена глава 3). Пусть мы имеем:

1. функцию $P_T(x, y)$, задающую желаемое распределение энергии электромагнитного поля в области T плоскости $z = L$;
2. монохроматическую электромагнитную волну, приходящую из полупространства $z < 0$ с комплексной амплитудой $F_T(x, y)$ в плоскости $z = 0$ и длиной волны λ .

В плоскости $z = 0$ помещена непрозрачная пластина. Требуется рассчитать, как нужно расставить отверстия в пластине, чтобы при дифракции освещающей волны на этой пластине, распределение энергии в области T получалось как можно ближе к заданному. Оптическая схема показана на рис. 1.

На проведенные в данной диссертационной работе исследования существенно повлияла статья В. А. Боровикова «Математика, лежащая в основе голографии, как я её понимаю»¹, поскольку в ней коротко и математически строго

¹http://nanotech-swhl.com/files/holography_math.pdf

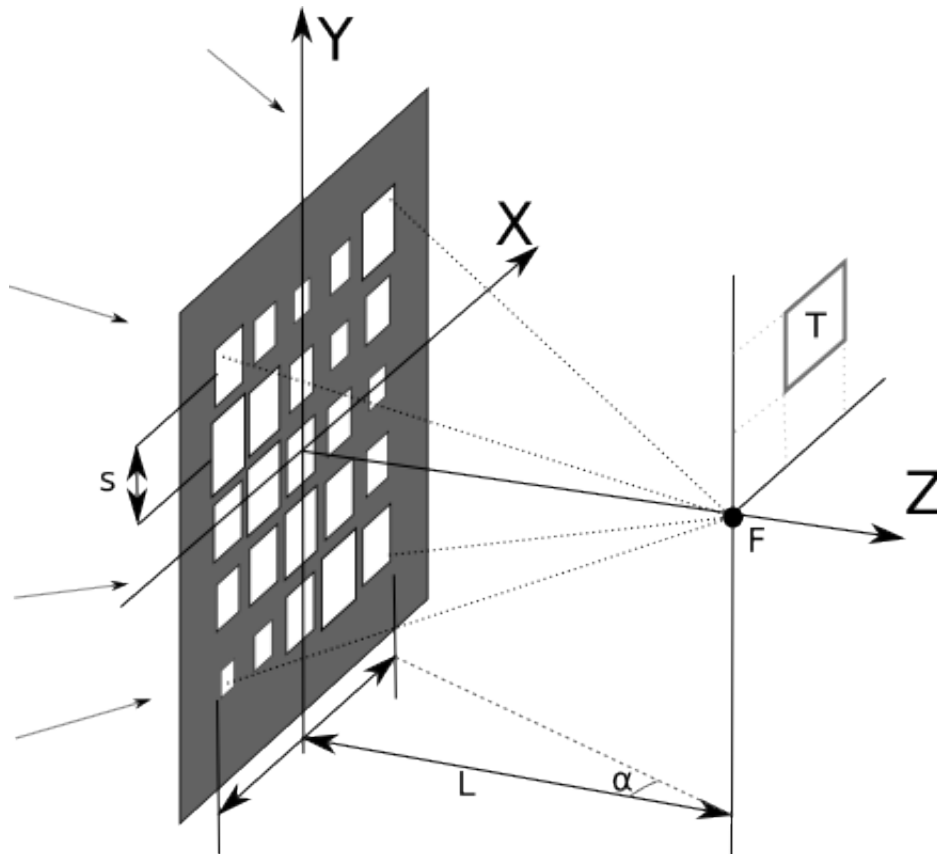


Рис. 1: Оптическая схема.

были сформулированы общие принципы голографии и показана важность использования сферических волн для засветки перфорированных пластин. Приведем краткое описание метода, обычно используемого в задачах расчета перфорированных пластин. Метод состоит из нескольких этапов.

1. Размещение в области T виртуальных источников с распределением плотности $2\sqrt{P_T(x, y)}$.
2. Численный расчет поля $F_O(x, y)$, создаваемого виртуальными источниками в плоскости $z = 0$.
3. Расчет функции прозрачности $V(x, y) = c_1 \frac{F_O \cdot F_I + \overline{F_O} \cdot \overline{F_I}}{|F_I|^2} + c_2$, где коэффициенты c_1 и c_2 подобраны так, чтобы значения функции лежали в диапазоне от 0 до 1.
4. Аппроксимация непрерывной функции $V(x, y)$ отверстиями, расположенными по равномерной сетке. Площадь каждого отверстия должна быть пропорциональна значению $V(x, y)$ в соответствующей точке.
5. Моделирование дифракции освещающей волны на рассчитанной перфорированной пластине. Сравнение полученного распределения энергии в области T с желаемым.

Если не учитывать погрешность аппроксимации непрерывной функции отверстиями, то прошедшее поле будет иметь комплексную амплитуду:

$$W(x, y) = \left(c_1 \frac{F_O \cdot F_I + \overline{F_O} \cdot \overline{F_I}}{|F_I|^2} + c_2 \right) \cdot F_I.$$

Легко видеть, что поле W раскладывается в сумму трёх полей:

$$W = W_1 + W_2 + W_3,$$

$$W_1(x, y) = c_1 \frac{F_O \cdot F_I^2}{|F_I|^2},$$

$$W_2(x, y) = c_1 \overline{F_O},$$

$$W_3(x, y) = c_2 F_I.$$

Волна W_3 пропорциональна освещающей волне F_I . В большинстве случаев целесообразно использовать сходящуюся сферическую освещающую волну с точкой фокуса F . Волна W_2 является обратной к F_O и в области наблюдения T будет иметь распределение энергии, близкое к заданному (с поправкой на коэффициент пропорциональности c_1). Область T следует разместить в фокальной плоскости, на некотором расстоянии от F , чтобы сфокусированная в точке F волна W_3 не внесла искажений в получаемое поле. Волна W_1 в этом случае также незначительно повлияет на создаваемое поле — показано, что в фокальной плоскости она будет локализована в области, симметричной целевой области T и расположенной с противоположной стороны от точки фокуса F .

В большинстве случаев желаемое распределение энергии не является физически воспроизводимым. Из базовых принципов электродинамики известно существование дифракционного предела — минимального размера пятна, которое можно получить посредством электромагнитного излучения с фиксированной длиной волны. В частности это означает, что никакая ступенчатая функция не может быть передана электромагнитным излучением без искажений. В расчете перфорированной пластины это проявляется в том, что спектральные (по пространству) компоненты излучения, соответствующие неоднородностям с размером менее половины длины волны (дифракционный предел), экспоненциально убывают с удалением от перфорированной пластины.

Описанный метод расчета позволяет синтезировать волну с распределением энергии в области T , близким (с поправкой на физическую воспроизводимость) к заданному. Метод имеет следующие существенные недостатки.

1. Его вычислительная сложность очень велика. В практических приложениях количество виртуальных источников может достигать 10^{12} . При этом количество операций в расчете получается порядка 10^{24} , что слишком много да-

же при использовании суперкомпьютера с производительностью в несколько петафлопс.

2. При расчете указанным способом расхождения между желаемым и получаемым распределением энергии оказываются значительно больше, чем диктуется физическими ограничениями, определяемыми законами распространения электромагнитных волн.

Оптимизационные методы для повышения качества восстановленного электромагнитного поля впервые систематически используются в работе «Методы создания и коррекции качества голографических изображений геометрических объектов с элементами субволновых размеров»², однако трудоемкость предлагаемых в этой статье алгоритмов пока еще не дает возможности использовать их для создания больших полей, состоящих из сотен миллионов элементов, что требуется в приложениях.

На основе имеющихся методов автором данной диссертационной работы был разработан новый метод расчета, повышающий точность воссоздания нужного распределения энергии и обладающий приемлемой для использования в практических приложениях вычислительной сложностью.

Во **второй главе** изучаются вопросы численного моделирования распространения электромагнитных волн. В соответствии с современными представлениями электромагнитное поле полностью описывается системой уравнений Максвелла с некоторыми дополнительными граничными условиями. Точные аналитические решения уравнений Максвелла существуют лишь в некоторых частных случаях, а получение точных численных решений связано со значительными сложностями. По этой причине развитие теории рассеяния электромагнитных волн связано с исследованием различных приближений и разработкой численных алгоритмов для практических применений.

Были рассмотрены две приближенные модели дифракции (скалярная и векторная), применительно к задаче дифракции на прямоугольных³ отверстиях. Постановка задачи дифракции описана в разделе 2.1. Обе модели используют приближенные граничные условия, соответствующие методу Кирхгофа.

Скалярная модель не учитывает векторную природу электромагнитного поля и имеет значительно более простой математический аппарат, однако её применение ограничено некоторой областью параметров. В разделе 2.2 описано получение расчетных формул для векторной модели, в разделе 2.3 — для скаляр-

² М.В. Борисов, В.А. Боровиков, А.А. Гавриков, Д.Ю.Князьков, В.И. Раховский, Д.А. Челюбеев, А.С. Шамаев. Методы создания и коррекции качества голографических изображений геометрических объектов с элементами субволновых размеров // Доклады академии наук, 2010, т. 434, №3, с. 332–336.

³Полученные в диссертации результаты не зависят от формы отверстий. Прямоугольные отверстия были выбраны для удобства расчета.

ной. В выводе этих формул нет научной новизны, но они важны для дальнейших построений. Ниже приведены полученные формулы для прошедшего поля при дифракции на одиночном прямоугольном отверстии.

Исходные данные:

1. координата точки наблюдения \vec{r} (отверстие находится в начале координат, экран ориентирован в плоскости XY);
2. половина размера отверстия по X и Y — a, b ;
3. длина волны λ ;
4. падающее электромагнитное поле для векторной модели — \vec{E}_0, \vec{H}_0 , для скалярной модели — поле U_0 и направление распространения \vec{l} .

Расчетные формулы для векторной модели имеют вид:

$$\vec{E}(\vec{r}, \vec{E}_0, \vec{H}_0, \lambda, a, b) = \frac{ike^{ikr}}{\pi r} \left\{ \begin{bmatrix} m_z E_{0x} \\ m_z E_{0y} \\ -m_x E_{0y} - m_y E_{0x} \end{bmatrix} - \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \cdot \begin{bmatrix} -H_{0y} \\ H_{0x} \\ 0 \end{bmatrix} + E_{0z} \cdot \begin{bmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{bmatrix} \right\} \cdot \frac{\sin\alpha a \cdot \sin\beta b}{\alpha\beta},$$

$$\vec{H}(\vec{r}, \vec{E}_0, \vec{H}_0, \lambda, a, b) = \frac{ike^{ikr}}{\pi r} \left\{ \begin{bmatrix} m_z H_{0x} \\ m_z H_{0y} \\ -m_x H_{0y} - m_y H_{0x} \end{bmatrix} + \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cdot \begin{bmatrix} -E_{0y} \\ E_{0x} \\ 0 \end{bmatrix} + H_{0z} \cdot \begin{bmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{bmatrix} \right\} \cdot \frac{\sin\alpha a \cdot \sin\beta b}{\alpha\beta},$$

$$I(\vec{r}) = \operatorname{Re} \left(\frac{1}{2} \left[\vec{E}(\vec{r}) \times \vec{H}^*(\vec{r}) \right] \cdot \vec{e}_z \right).$$

Расчетные формулы для скалярной модели имеют вид:

$$U(\vec{r}, U_0, \vec{l}, \lambda, a, b) = \frac{ike^{ikr}}{\pi r} \cdot (l_z + m_z) U_0 \cdot \frac{\sin\alpha a \cdot \sin\beta b}{\alpha\beta},$$

$$I(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cdot |U(\vec{r})|^2.$$

Используются следующие обозначения: $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, $r = |\vec{r}|$, $\vec{m} = \vec{r}/r$, $\alpha = k \cdot (l_x - m_x)$, $\beta = k \cdot (l_y - m_y)$, $I(\vec{r})$ — энергия, переносимая перпендикулярно площадке наблюдения в точке \vec{r} .

В разделе 2.4 описан разработанный автором алгоритм для быстрого расчета поля от большого числа точечных источников. Для применения алгоритма требуется, чтобы виртуальные источники при расчете перфорированной пластины были расположены по прямоугольной сетке, а шаг этой сетки был кратен

шагу сетки, по которой будут расположены отверстия в перфорированной пластине. Расчет поля сводится к суммированию по отдельным точечным источникам:

$$b_{i,j} = \sum_{p,q} F(s \cdot i - p, s \cdot j - q) \cdot a_{p,q}.$$

Здесь $a_{p,q}$ — комплексные амплитуды точечных источников, $b_{i,j}$ — рассчитанное поле, F — функция излучения точечного источника, а s — отношение шага сетки на входе и на выходе. К аналогичной формуле можно свести моделирование дифракции на перфорированной пластине и расчет результирующего поля. Несмотря на предельную простоту формулы, именно на её долю приходится основная вычислительная сложность при расчете перфорированной пластины. Если матрицы $A = \{a_{i,j}\}$ и $B = \{b_{i,j}\}$ имеют размер $10^6 \times 10^6$ каждая (предельный размер, встречающийся на практике), количество операций умножения и сложения составит 10^{24} и, соответственно, расчет будет занимать годы даже на петафлопных суперкомпьютерах с тысячами вычислительных узлов. Поэтому было необходимо найти более эффективный способ суммирования. Основное препятствие заключается в различном шаге сетки на входе и на выходе (иначе это преобразование было бы обычной свёрткой и вычислялось бы стандартным методом через быстрое преобразование Фурье).

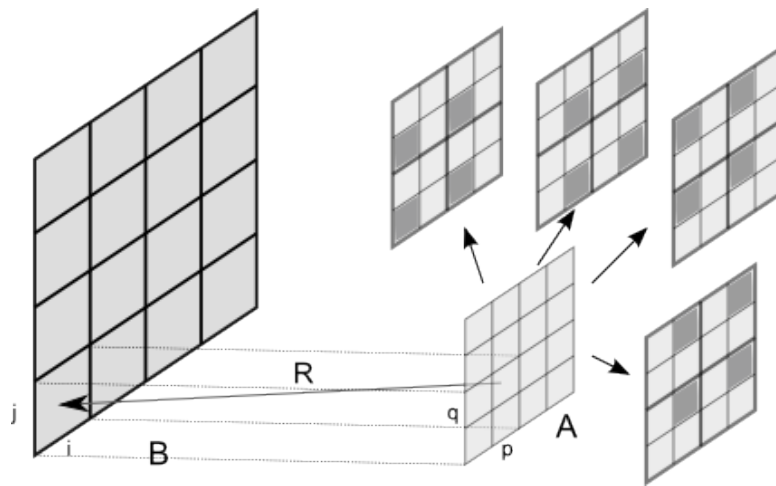


Рис. 2: Пример разложения A на разреженные матрицы при $s = 2$.

Чтобы сделать возможным применение быстрого преобразования Фурье, матрица A раскладывается на несколько разреженных матриц (рис. 2). В результате расчет можно свести к выполнению большого числа БПФ относительно небольшой размерности. Если матрицы A и B имеют одинаковый размер и состоят из S элементов, вычислительная сложность составляет порядка $O(s^2 \cdot S \cdot \log_2 S)$. Описание нового алгоритма и сравнение его с существующими было представлено автором в работе [2].

Алгоритм хорошо масштабируется, однако требует значительных объемов оперативной памяти. Была разработана параллельная программная реализация и проведен расчет для матрицы с $3 \cdot 10^{10}$ элементов и $s = 24$. Использовался кластер из двух узлов с процессорами Intel Xeon E5 2690 v2 (по два процессора на узле) и 192ГБ оперативной памяти на узле. Расчет занял 36 часов.

Показано, что с помощью этого алгоритма перфорированная пластина любых востребованных на практике размеров может быть рассчитана менее, чем за неделю (при наличии специализированного суперкомпьютера). В случае предельного размера матрицы 10^{12} элементов для этого потребуются кластер из нескольких сотен узлов.

Третья глава посвящена исследованию границ применимости скалярной модели дифракции в задаче рассеяния на отверстиях. Результаты исследования представлены автором в работе [1].

Скалярная модель позволяет получать точные решения лишь при небольшой угловой апертуре (угле схождения лучей), но обладает простым математическим аппаратом и наиболее удобна для расчета. При расчете перфорированной пластины вычислительная сложность имеет принципиальное значение, поэтому, если погрешность решения будет не слишком велика, целесообразно использовать именно скалярную модель. Возникает потребность определить предельную угловую апертуру, для которой применима скалярная модель. Для этого было проведено численное сравнение с более точной векторной моделью, описанной в разделе 2.2. Сравнение с точным решением не производилось. Известно, что граничные условия Кирхгофа, использованные в векторной модели, хорошо соответствуют действительности, если размеры отверстий существенно превышают длину волны. Однако вопрос о том, как в точности зависит погрешность векторной модели от размеров отверстий, остается открытым. В дальнейшем будет считаться, что размеры всех отверстий превышают две длины волны.

В разделе 3.1 проведено сравнение результатов, полученных по скалярной и по векторной моделям для случая дифракции на одном отверстии. Были установлены следующие факты.

1. При переходе от векторной модели к скалярной на площадке наблюдения не смещаются дифракционные максимумы, может лишь измениться их яркость.
2. Функция отношения интенсивности дифракционной картины, рассчитанной по скалярной модели, к интенсивности, рассчитанной по векторной модели (обозначена через Υ), зависит исключительно от углов, отмеченных на рисунке 3, и поляризации падающей волны. В таблице 1 показан

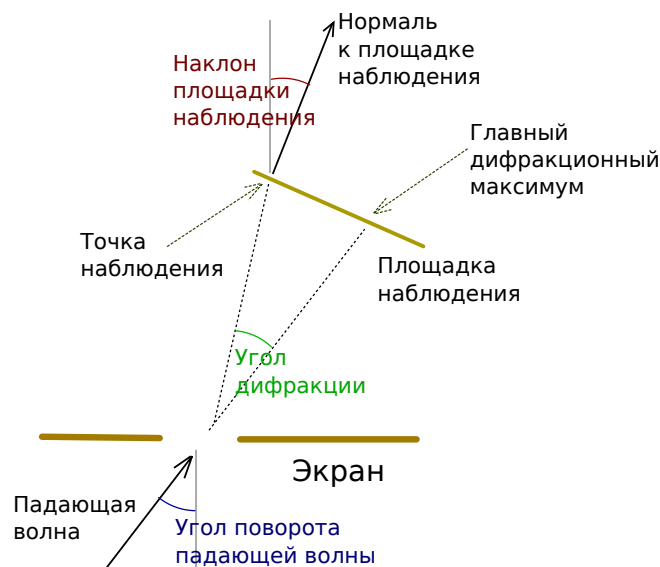


Рис. 3: Варьируемые параметры.

интервал возможных значений этой функции для различных значений параметров.

Таблица 1: Интервал достигаемых значений Υ (отношение интенсивности, рассчитанной по скалярной модели к интенсивности, рассчитанной по векторной модели), в зависимости от угла дифракции и направления распространения падающей волны; площадка наблюдения расположена параллельно экрану

угол дифракции	отклонение падающей волны от нормали					
	0°	до 10°	до 20°	до 30°	до 40°	до 50°
0°	1.0	(0.99, 1.0)	(0.95, 1.0)	(0.9, 1.0)	(0.83, 1.0)	(0.75, 1.0)
до 10°	1.0	(0.97, 1.01)	(0.93, 1.04)	(0.86, 1.08)	(0.77, 1.1)	(0.69, 1.15)
до 20°	1.0	(0.95, 1.02)	(0.9, 1.05)	(0.82, 1.09)	(0.73, 1.2)	(0.62, 1.32)
до 30°	1.0	(0.95, 1.04)	(0.87, 1.07)	(0.79, 1.15)	(0.7, 1.32)	(0.59, 1.56)
до 40°	1.0	(0.93, 1.06)	(0.87, 1.1)	(0.77, 1.21)	(0.68, 1.5)	(0.55, 4.06)

В разделе 3.2 сравниваются результаты для случая рассеяния сходящейся сферической волны на системе отверстий в экране и определяются условия применимости скалярной модели.

В случае системы отверстий при переходе от векторной модели к скалярной могут сдвинуться дифракционные максимумы. По этой причине отношение интенсивностей I_{scalar}/I_{vector} не годится для сравнения моделей. Вместо него введем функцию различия δ :

$$\delta = \frac{I_{scalar} - I_{vector}}{S(I_{vector})},$$

где S — оператор Гауссова размытия с $\sigma = \lambda/\sqrt{2}$. Значение δ в какой-либо точке площадки наблюдения — это отношение разности рассчитанных по обеим моделям интенсивностей к усредненной интенсивности в окрестности этой точки.

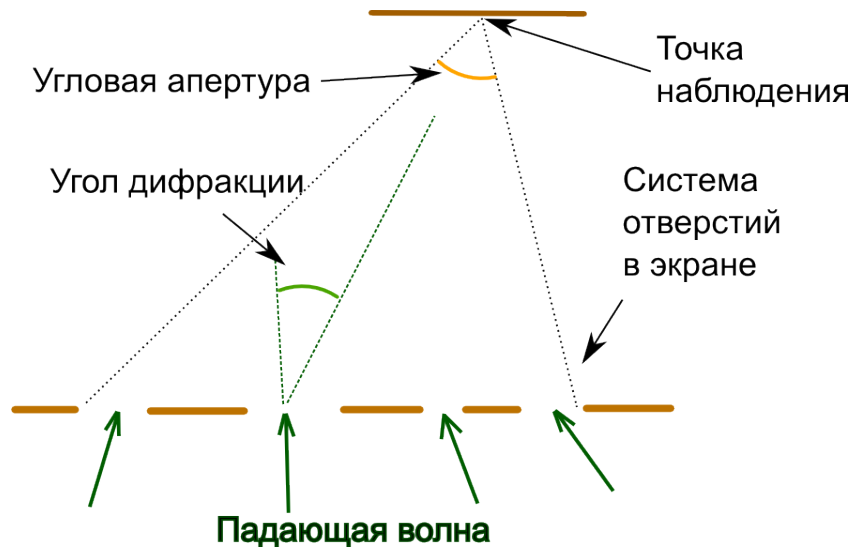


Рис. 4: Обозначения, используемые при рассмотрении дифракции сходящейся сферической волны на системе отверстий.

Исследовалась зависимость максимальных значений $|\delta|$ от показанных на рис. 4 параметров. Для каждого набора параметров была проведена серия численных экспериментов с различными случайными системами отверстий.

Получены следующие результаты.

1. Функция δ является быстро меняющейся функцией от координат на площадке наблюдения с характерным размером неоднородностей порядка λ .
2. Максимумы $|\delta|$ возрастают с увеличением угла дифракции и угловой апертуры. Оценки для максимумов $|\delta|$ приведены в таблице 2.

Таблица 2: Зависимость максимумов $|\delta|$ от угла дифракции и угловой апертуры

угол дифракции	апертура				
	до 30°	до 50°	до 70°	до 90°	до 110°
до 1°	0.03	0.08	0.12	0.18	0.22
до 5°	0.04	0.09	0.15	0.25	0.4
до 10°	0.05	0.1	0.23	0.36	0.47
до 20°	0.08	0.2	0.26	0.4	0.59
до 30°	0.1	0.23	0.4	0.57	0.68
до 40°	0.14	0.27	0.5	0.59	0.82

При расчете перфорированной пластины встречаются углы дифракции до 5° градусов и угловые апертуры до 90° , что по таблице 2 соответствует максимуму погрешности по энергии в 25%. Погрешность достаточно велика, но в практических приложениях интенсивность менее существенна, чем расположение дифракционных максимумов. Дифракционные максимумы могут сдвигаться, если погрешность по энергии приближается к 100%. Поэтому погрешность по энергии в 25% была признана приемлемой. Далее во всех расчетах подразумевается использование скалярной модели.

В четвертой главе приведено описание разработанного автором метода коррекции [6], уменьшающего различие между получаемым распределением энергии и желаемым. Чтобы улучшить качество синтеза электромагнитной волны, вносится предсказание в исходное распределение виртуальных источников. Затем перфорированная пластина рассчитывается прежним методом.

Для поиска оптимального предсказания используется метод градиентного спуска. Рассчитывать перфорированную пластину на каждой итерации метода затруднительно из-за большой вычислительной сложности (даже быстрый метод, описанный в разделе 2.4, будет занимать слишком много времени при применении на каждой итерации). Нужен более простой способ расчета результирующего поля для заданного распределения виртуальных источников.

В разделе 4.1 описан приближенный способ вычисления результирующего поля, не требующий расчета перфорированной пластины и моделирования дифракции на ней. Показано, что результирующее поле представимо в виде:

$$F_R(x, y) \approx c_1 \cdot \sum_{Y_\phi} a_{p,q}^* \cdot K(x - x_p, y - y_q).$$

Здесь

1. x, y — координаты на площадке наблюдения;
2. $a_{p,q}$ — комплексные амплитуды виртуальных точечных источников, расположенных по равномерной сетке x_p, y_q ;
3. K — предварительно рассчитанная функция влияния отдельного виртуального источника;
4. $Y_\phi = \{(p, q) : (x - x_p)^2 + (y - y_p)^2 < \phi^2\}$ — множество виртуальных источников, удаленных от x, y не более, чем на ϕ .

Коэффициент c_1 возникает из-за нормировки функции прозрачности перфорированной пластины перед аппроксимацией её отверстиями. Определить c_1 без расчета перфорированной пластины не представляется возможным, но поскольку он не зависит от x и y , при поиске оптимального предсказания его можно выбрать произвольно.

Важным вопросом является выбор радиуса окрестности ϕ . Чем меньше значение ϕ , тем меньше вычислительная сложность. Но при уменьшении ϕ увеличивается погрешность. На практике погрешность получается низкой (менее 5% по интенсивности), если $\phi \geq 30\lambda$. Однако в теории можно подобрать такую конфигурацию виртуальных источников (определенный набор концентрических окружностей), что погрешность в некоторых точках окажется существенной даже при $\phi = 300\lambda$. Поэтому, если при оптимизации конфигурации виртуальных источников используется приближенная формула, после расчета перфорированной пластины следует промоделировать дифракцию на ней и проверить соответствие приближенных значений F_R точным.

Также необходимо учитывать, что функция K различается в разных частях площадки наблюдения T . В диссертационной работе показано, что можно разбить область T на несколько частично пересекающихся блоков (с перекрытием не меньше $2 \cdot \phi$), в пределах каждого из которых считать K постоянной. Для каждого такого блока нужно индивидуально рассчитать функцию K и независимо выполнить расчет результирующего поля.

В разделе 4.2 описан алгоритм предыскажения амплитудно-фазового распределения виртуальных точечных источников, использующий приведенную выше приближенную формулу для результирующего поля. Введем обозначения:

- $a_{i,j}$ — комплексные амплитуды виртуальных точечных источников, расположенных по равномерной сетке;
- $d_{i,j}$ — желаемая энергия результирующего электромагнитного поля, заданная по той же сетке;
- $b_{i,j}$ — результирующее поле (рассчитываемое по той же сетке);
- σ — L_2 норма различия желаемой и полученной энергии результирующего поля.

Задача оптимизации формулируется так:

$$A = \{a_{i,j}^*\}, \quad B = \{b_{i,j}\}, \quad D = \{d_{i,j}\},$$

$$b_{i,j} = \sum_{Y_\phi} K(x_i - x_p, y_j - y_q) \cdot a_{p,q}^*,$$

$$\sigma = \sum_{i,j} \left(\frac{b_{i,j} \cdot b_{i,j}^*}{2} - d_{i,j} \right)^2,$$

$$\sigma(A) \rightarrow \min.$$

При реализации метода градиентного спуска существенным препятствием оказалась вычислительная сложность расчета градиента $\text{grad } \sigma(A)$. Градиент

имеет огромную размерность (по количеству элементов матрицы A), а каждая его компонента зависит от всех точек Y_ϕ — это более 10^5 точек для наиболее часто используемых параметров — $\phi = 30\lambda$ и шага сетки $\frac{1}{6}\lambda$.

Была выведена явная формула для градиента, сводящая расчет к выполнению свёртки и нескольких матричных операций. По вычислительной сложности полученный способ расчета градиента эквивалентен методу быстрого дифференцирования, но оказывается значительно удобнее для практической реализации. В результате переход к следующей итерации градиентного спуска описывается двумя формулами:

$$B_n = A_n \circ K,$$

$$A_{n+1} = A_n - \alpha_n \cdot \text{conj} \left([(B_n * \bar{B}_n - 2D) * \bar{B}_n] \circ K_R \right).$$

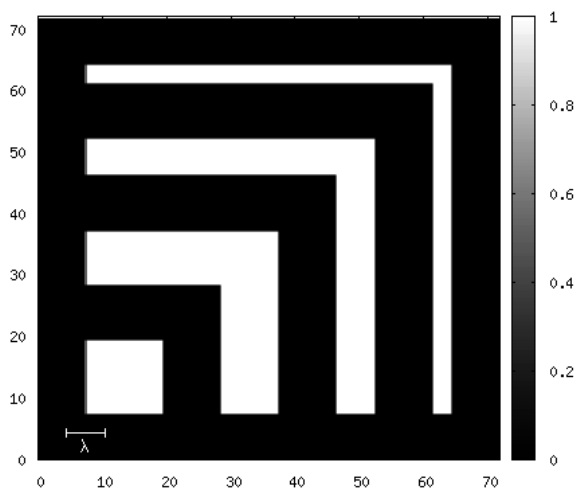
Здесь

- A_n и B_n — матрицы A и B на n -ой итерации градиентного спуска;
- α_n — шаг градиентного спуска на итерации n ;
- \circ — операция свертки;
- $*$ — операция поэлементного умножения матриц (Адамарово произведение);
- K — матрица, полученная из значений функции $K(x, y)$ в узлах расчетной сетки;
- K_R — матрица K после отражения по обеим осям; т.е. $(K_R)_{i,j} = K_{d_x-i+1, d_y-j+1}$, если $\dim K = (d_x, d_y)$;
- $\text{conj}(x)$ и \bar{x} — операция комплексного сопряжения.

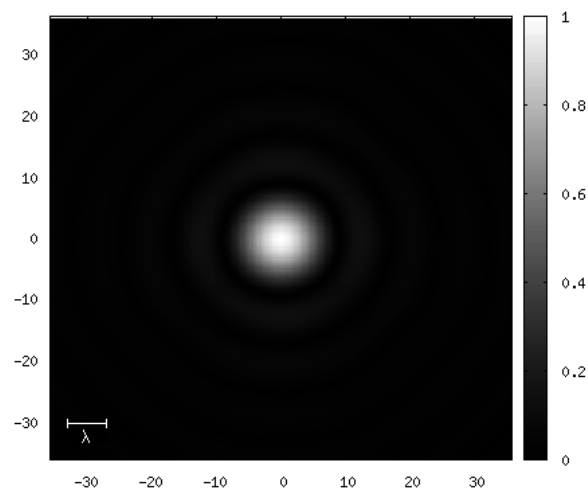
Перейдем к вопросу о выборе начального приближения A_0 . Если промежутки между различными максимумами в целевом распределении энергии существенно превышают предельное разрешение, начальное приближение может быть любым. Наименьшее количество итераций потребуется, если задать $a_{i,j} = 2\sqrt{d_{i,j}}$. В этом случае в начальном приближении A_0 все виртуальные источники имеют одну фазу.

Если же целевое распределение энергии имеет сложную структуру с небольшими промежутками между элементами, то начальное распределение фазы имеет принципиальное значение. Градиентный спуск находит один из локальных минимумов $\sigma(A)$. Было показано, что для попадания в «хороший» локальный минимум необходимо обеспечить в начальном приближении фазовый контраст между соседними элементами.

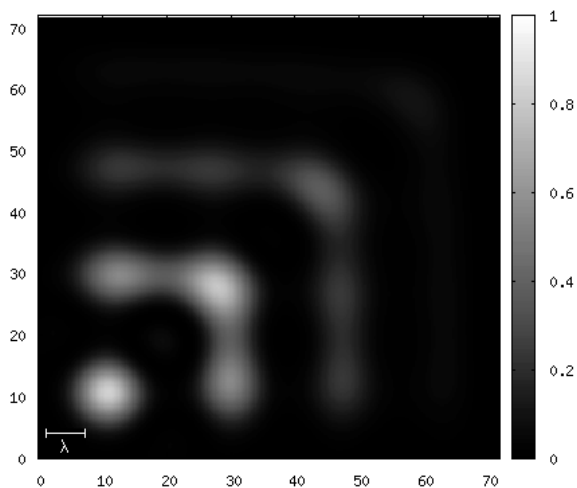
На рисунке 5 приведен пример работы алгоритма оптимизации.



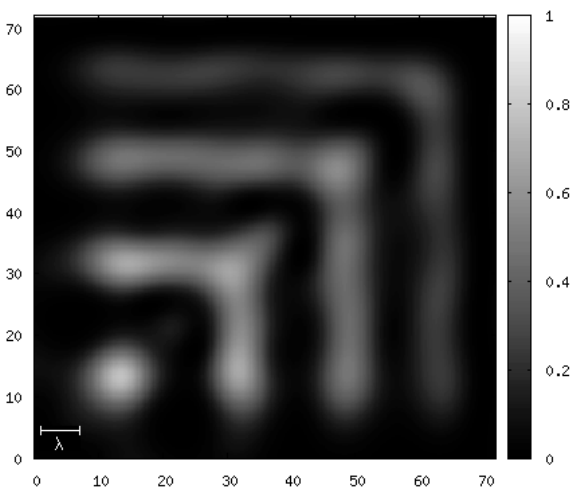
а) Целевое распределение энергии



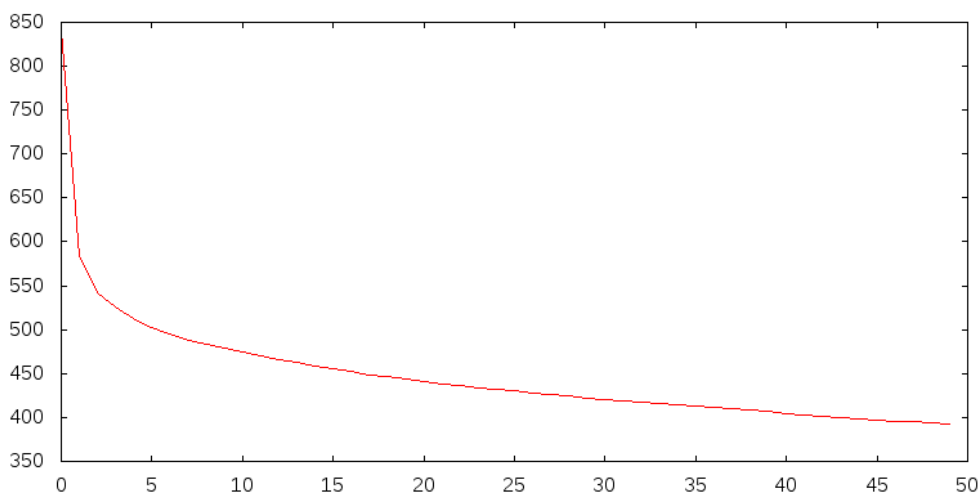
б) Амплитуда функции влияния K



в) Распределение энергии до оптимизации
($\frac{1}{2}|B_0|^2$)



г) Результирующее распределение энергии
после оптимизации ($\frac{1}{2}|B_{50}|^2$)



д) Зависимость σ от номера итерации

Рис. 5: Пример работы алгоритма оптимизации

На графике 5(д) видно, что норма сильно уменьшается на первых нескольких итерациях, но затем скорость оптимизации снижается. В этом примере за 50 итераций норма уменьшилась чуть более, чем в два раза. Это хороший результат, так как целевое распределение энергии не является физически воспроизводимым. На практике целесообразно использовать около 30-и итераций — компромисс между качеством оптимизации и продолжительностью расчета.

Разработанный алгоритм хорошо масштабируется. Данные делятся на частично перекрывающиеся блоки, которые могут обрабатываться на разных вычислительных узлах. При оптимизации каждого блока вводятся специальные граничные условия, чтобы исключить появление дефектов на границах с другими блоками. На кластере из двух узлов с процессорами Intel Xeon E5 2690 v2 (по два процессора на узле) расчет комплексных амплитуд для $3 \cdot 10^{10}$ виртуальных источников занимает менее 24-х часов. Вычислительная сложность алгоритма линейно зависит от количества обрабатываемых виртуальных источников.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем.

1. Определена область параметров, в которой при расчете перфорированных пластин допустимо использовать скалярную модель дифракции.
2. Разработаны алгоритмы, кардинально снижающие вычислительную сложность расчета перфорированной пластины.
3. Разработан итерационный метод коррекции, позволяющий значительно снизить отличие по среднеквадратичной норме результирующего электромагнитного поля от желаемого.

В **приложении** приведены некоторые результаты по расчету масок для субволновой голографической литографии (SWHL — Sub-Wave Holographic Lithography), полученные компанией Nanotech SWHL GmbH (<http://nanotech-swhl.com>) с использованием разработанных в данной диссертационной работе методов. Эти результаты не выносятся на защиту, так как являются собственностью компании.

Литография — основной способ формирования изображения на кремниевой подложке при производстве интегральных микросхем. Наиболее используемая технология литографии — проекционная фотолитография с ультрафиолетовым источником света (DUVL) — к настоящему моменту достигла предела дальнейшего уменьшения разрешения при сохранении приемлемой цены.

Субволновая голографическая литография — это новая технология фотолитографии, использующая при создании изображения описанные в данной диссертационной работе методы формирования электромагнитных полей. Голографическая литография обладает рядом преимуществ перед проекционной

литографией и в дальнейшем может стать альтернативой существующим подходам. На рисунке 6 приведена схема голографического степпера в сравнении с проекционным степпером. Голографический степпер не содержит проекционного объектива, за счет чего получается значительно дешевле и проще. В основе голографической маски лежит перфорированная пластина с квадратными отверстиями.

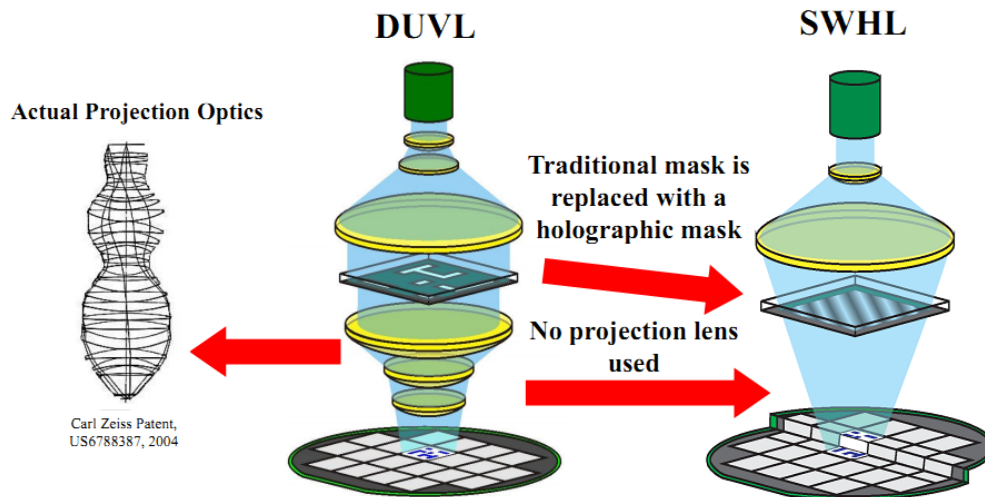


Рис. 6: Голографический степпер

Голографические маски могут содержать десятки и сотни миллиардов отверстий. Расчет конфигурации отверстий для голографической маски представляет большую сложность. Предложенный в §2.4 диссертации метод расчета позволил кардинально уменьшить вычислительную сложность и проблема с расчетом масок для больших топологий микросхем была решена.

Материал главы 4 был использован для повышения качества формируемого изображения. Без применения оптимизационных методов получение субволновых изображений с приемлемым качеством было бы невозможным. На рисунках 7 и 8 показан выбор начального фазового распределения виртуальных источников перед оптимизацией и рассчитанная яркость результирующего изображения. Работа со сложными топологиями потребовала разработки специального алгоритма расстановки фаз, что само по себе оказалось сложной задачей.

На рисунке 9 показан пример изображения в резисте после проявки (компьютерное моделирование), при использовании технологии SWHL. Ширина большинства элементов составляет 0.65λ ($CD = 240nm$ при $\lambda = 365nm$). Численная апертура голографического степпера — 0.6. После оптимизации среднеквадратичное отклонения контура в резисте от идеала составляет $4.8nm$ — 2% от ширины минимального элемента.

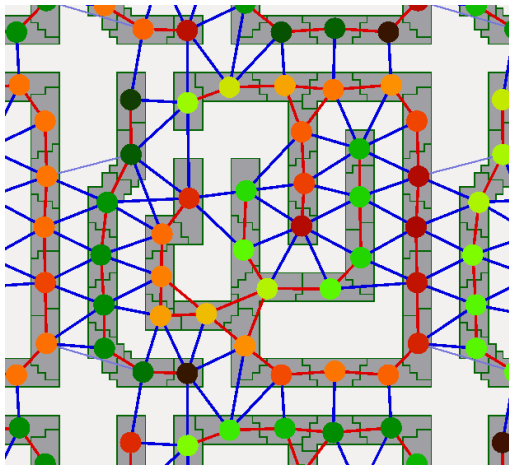


Рис. 7: Распределение фаз виртуальных источников перед оптимизацией; Разные цвета обозначают разные фазы.

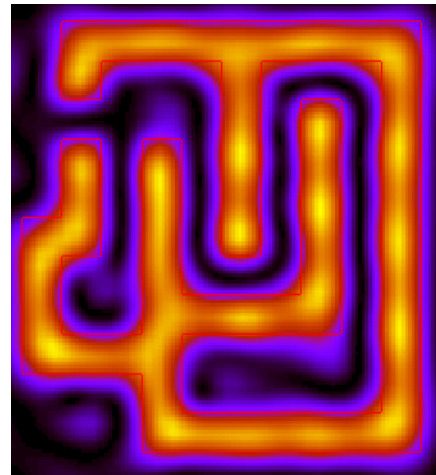


Рис. 8: Полученное изображение (интенсивность).

Предложенный метод формирования электромагнитного поля удалось адаптировать для получения изображений на искривленных поверхностях за одну экспозицию, что в настоящее время очень востребовано в микроэлектронике. На рисунке 10 приведен пример полученного изображения (компьютерное моделирование).

Публикации автора по теме диссертации

1. Михеев П. А. Численное решение задачи дифракции электромагнитного поля на системе отверстий // Вестник Московского университета. Серия 15: Вычислительная математика и кибернетика. 2014. Т. 1. С. 15–22.
2. Михеев П. А. Применение быстрого преобразования Фурье при расчете сегментированной свёртки // Доклады Академии Наук. 2015. Т. 464, № 2. С. 152–155.
3. Analysis of an effect of perturbations in SWHM and illuminating optical scheme parameters on an aerial image / V. Rakhovsky, D. Knyazkov, A. Shamaev, V. Chernik, A. Gavrikov, D. Chelyubeev, P. Mikheev, M. Borisov // Proc. of Advanced Semiconductor Manufacturing Conference, IEEE Conference Publications. DOI: 10.1109/ASMC.2012.6212903. 2012. С. 165–169.
4. Phase-Shift at Sub-Wavelength Holographic Lithography (SWHL) / V. Rakhovsky, D. Knyazkov, A. Shamaev, V. Chernik, A. Gavrikov, D. Chelyubeev, P. Mikheev, M. Borisov // Proc. European Mask

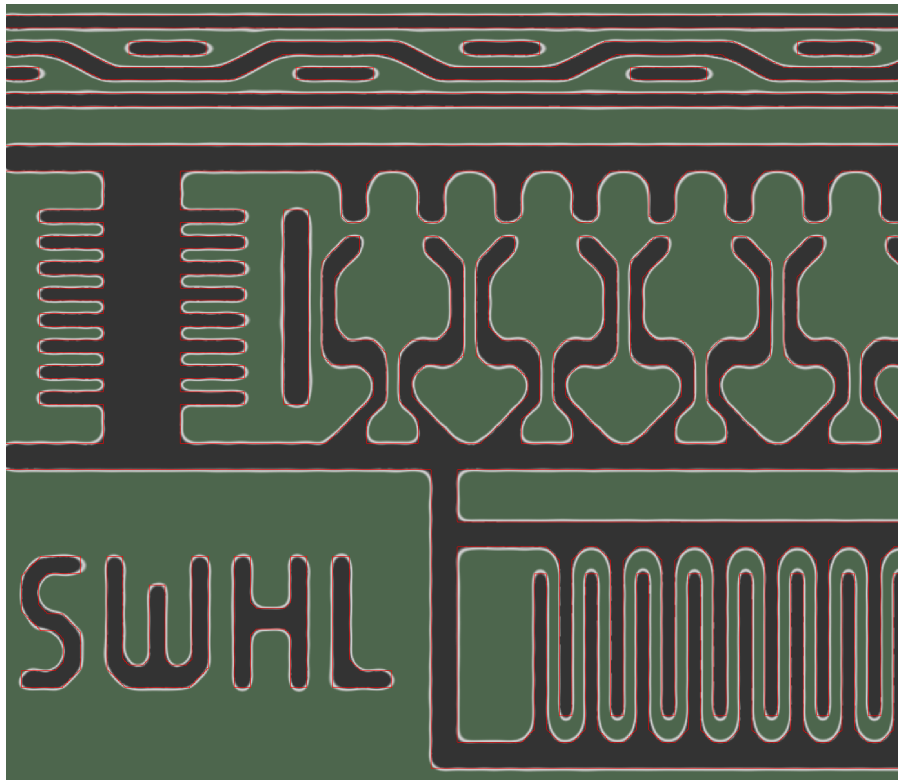


Рис. 9: Субволновое изображение в резисте с $CD = 240nm$, $\lambda = 365nm$.

Non-flat imaging with single exposure

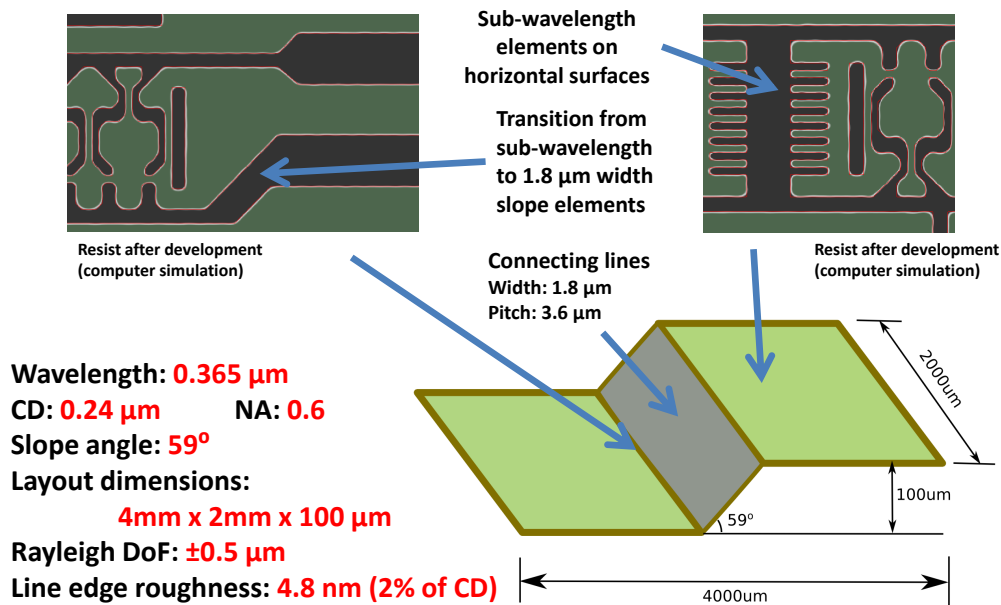


Рис. 10: Изображение на искривленной поверхности, получаемое за одну экспозицию

and Lithography Conference, SPIE. 2012. Vol. 8352. 83520P. DOI: <http://dx.doi.org/10.1117/12.918016>. 2012.

5. A Sub-Wavelength Holographic Lithography: The Possibilities And Advantages / V. Rakhovsky, D. Knyazkov, A. Shamaev, V. Chernik, A. Gavrikov, D. Chelyubeev, P. Mikheev, M. Borisov // Форум индустрии микроэлектрони-

ки и фотовольтаики в России SEMICON/SOLARCON Russia. Конференция EU-RU.NET Workshop. 2012.

6. Михеев П. А. Применение градиентного метода для оптимизации характеристик волнового фронта электромагнитной волны // Тезисы 58-й научной конференции МФТИ. 2015.
7. Патент 2486561 Российская Федерация, МПК G 03 F 7/20, G 03 H 1/08, Способ изготовления голографических изображений рисунка / В.И. Раховский, М.В. Борисов, А.А Гавриков, Д.Ю. Князьков, П.А. Михеев, Д.А. Челюбеев, В.В. Черник, А.С. Шамаев.
8. Патент 2511035 Российская Федерация, МПК G 03 H 1/10, Способ изготовления голографических изображений рисунка / В.И. Раховский, М.В. Борисов, А.А Гавриков, Д.Ю. Князьков, П.А. Михеев, Д.А. Челюбеев, В.В. Черник, А.С. Шамаев.
9. Патент 2539730 Российская Федерация, МПК G 03 F 7/00, Способ изготовления голограммы рисунка / В.И. Раховский, М.В. Борисов, А.А Гавриков, Д.Ю. Князьков, П.А. Михеев, Д.А. Челюбеев, В.В. Черник, А.С. Шамаев.
10. Patent US 7605928 B2, Method for synthesis and formation of a digital hologram for use in microlithography / V. Rakhovsky, A. Shamaev, V. Chernik, A. Gavrikov, D. Chelyubeev, P. Mikheev, M. Borisov.