

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ИНСТИТУТ
ТОЧНОЙ МЕХАНИКИ И ОПТИКИ
(ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

На правах рукописи

ИВАНОВА ТАТЬЯНА ВЛАДИМИРОВНА

УДК 535.317

**РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ
МОДЕЛИРОВАНИЯ И ВОССТАНОВЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК
СУБДЛИННОВОЛНОВЫХ ВТОРИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ СВЕТА**

Специальность 05.11.07 – Оптические и оптико-электронные приборы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Санкт-Петербург

1999

Работа выполнена на кафедре прикладной и компьютерной оптики
Санкт-Петербургского государственного института точной механики и оптики
(технического университета).

Научный руководитель – доктор технических наук, профессор
С. А. РОДИОНОВ

Официальные оппоненты – доктор технических наук, профессор
И. В. ПЕЙСАХСОН
кандидат технических наук, доцент
Л. А. ГУБАНОВА

Ведущее предприятие – АО ЛОМО

Защита диссертации состоится 29 ноября 1999 года в 14 ч. 00 мин. на заседании
диссертационного совета Д 053.26.01 “Оптические и оптико-электронные
приборы” при Санкт-Петербургском государственном институте точной механики
и оптики (техническом университете) по адресу: Санкт-Петербург, ул. Саблинская,
дом 14, аудитория 289.

Автореферат разослан “___” октября 1999 года.

Отзывы и замечания по автореферату направлять в адрес института:
197101, Санкт-Петербург, ул. Саблинская, д. 14, секретарю диссертационного
совета Д 053.26.01.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 053.26.01,
кандидат технических наук, доцент

В. М. КРАСАВИЦЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Одной из актуальных проблем быстро развивающейся в настоящее время ближнепольной растровой оптической микроскопии является контроль или аттестация субдлинноволновых зондов, то есть определение их размеров и формы. Эта проблема непосредственно связана с определением разрешающей способности сканирующего ближнепольного оптического микроскопа, поэтому крайне важно найти наиболее оптимальные и простые пути ее решения.

Одним из перспективных подходов к аттестации зондов является определение параметров вторичного источника света (выходной апертуры зонда) по характеристикам его излучения в дальней зоне. Задача осложняется тем, что размеры излучающего отверстия существенно меньше длины волны, поэтому приходится использовать лишь малую часть информации, переносимую незатухающими волнами. Вследствие этого необходима математическая обработка измеренных данных с использованием итерационных методов дополнения информации, которая отсутствует в дальней зоне.

Таким образом, разработка методики и алгоритма восстановления параметров субдлинноволнового вторичного источника света на основе измерений интенсивности света в дальней зоне, которой посвящена данная диссертационная работа, является весьма актуальной задачей.

Цель работы

Целью диссертационной работы является разработка метода восстановления параметров субдлинноволнового вторичного источника света, а также его реализация в виде пакета программ.

Задачи исследования

1. Расчет дифракционного распределения интенсивности света в дальней зоне.
2. Разработка методов решения задачи реконструкции параметров субдлинноволновых вторичных источников света.
3. Разработка алгоритма восстановления ближнепольных характеристик вторичных источников света.
4. Разработка программного обеспечения для восстановления размеров субдлинноволновых апертур.

Методы исследования

1. Методы дифракционной теории прохождения когерентного линейно-поляризованного света через нанометровые структуры.
2. Аналитические и численные методы аппроксимации функций и аппарат вычисления ортогональных полиномов Цернике.
3. Методы цифровой обработки сигналов, математические методы повышения разрешающей способности оптических систем.

Научная новизна диссертации

1. Предложена векторная модель дифракции света на субдлинноволновых препятствиях, которая дает возможность решить задачу реконструкции параметров препятствий по известному дифракционному распределению света в дальней зоне.
2. Разработана модель оптической аттестации субдлинноволновых апертур зондов для сканирующей ближнепольной микроскопии на основе регистрации распределения интенсивности излучения в дальней зоне.
3. Обоснован выбор параметров дискретизации спектра пространственных частот с целью детального описания субдлинноволновых дифракционных структур.
4. Предложен метод аналитического продолжения спектра на основе экстраполяции полиномами Цернике с измененной областью ортогональности.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. Векторная модель распределения интенсивности света в дальней зоне после дифракции на субдлинноволновом отверстии.
2. Многоступенчатый процесс восстановления размеров и формы апертуры ближнепольного зонда.
3. Метод аналитического продолжения спектра за пределы области регистрации на основе экстраполяции полиномами Цернике.
4. Алгоритм оптического сверхразрешения с обратной связью в пространстве спектра плоских волн.
5. Методика обработки реальных (измеренных) данных с целью уменьшения случайного шума.

Практическая ценность работы

1. Предложен метод аттестации оптических параметров субдлинноволновых апертур зондов для сканирующей ближнепольной микроскопии по регистрируемому распределению интенсивности излучения в дальней зоне.
2. Разработан пакет программ для обработки данных измерений в дальней зоне, позволяющий реконструировать размеры и форму субдлинноволновых апертур.
3. Предложенный метод аттестации субдлинноволновых апертур позволяет в отличие от других методов исследовать оптические характеристики ближнепольных зондов, которые определяют разрешающую способность ближнепольного микроскопа.
4. Предложен метод аналитического продолжения двумерных функций на основе ортогональных полиномов, который можно использовать в задачах повышения разрешающей способности оптических приборов.

Апробация работы

Основные результаты работы представлялись на международной конференции “Прикладная оптика-98” (16-18 декабря 1998 года, Санкт-Петербург), на конференции SPIE “43-th International Symposium on Optical Science, Engineering and Instrumentation” (19-24 July 1998, San Diego,

California, USA), на конференции ICONO'98 (29 June - 3 July 1998, Moscow, Russia), на международной конференции молодых ученых и специалистов "Оптика-99" (19-21 октября 1999 года, Санкт-Петербург), а также на семинарах молодых ученых в Санкт-Петербургском Доме ученых.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 8 печатных работ.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, библиографического списка из 98 наименований и 3 приложений, содержит 121 страницу основного текста, 24 рисунка и 3 таблицы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение

Оптический зонд является важнейшим элементом ближнепольных растровых сканирующих микроскопов, параметры которого определяют разрешающую способность всего микроскопа. В настоящее время в мире активно формируется целая отрасль производства оптических зондов для ближнепольной оптики с субдлинноволновой выходной апертуры (порядка 50–100 нм) (Рис.1). При этом разработка стабильного и эффективного контроля оптических зондов является весьма актуальной задачей.

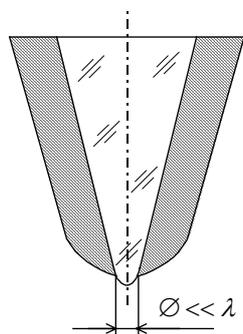


Рис. 1. Схема рабочей оконечности ближнепольного оптического зонда.

Одним из перспективных подходов к аттестации зондов является определение параметров выходной апертуры зонда по характеристикам его излучения в дальней зоне.

Поскольку размеры излучающего отверстия существенно меньше длины волны, приходится использовать лишь малую часть информации, переносимую незатухающими волнами, причем их доля в общей энергии излучения тем меньше, чем меньше размеры источника. Вследствие этого необходима математическая обработка измеренных данных с использованием итерационных методов дополнения информации, которая отсутствует в дальней зоне.

В данной работе предлагается методика оптического сверхразрешения для измерения малых объектов, являющихся вторичными источниками света, размером от десятков до сотен нанометров. Предлагается математический подход к определению размеров объекта через аналитическое продолжение углового спектра незатухающих векторных плоских волн.

Глава 1. Постановка задачи восстановления характеристик субдлинноволновых вторичных источников света

В первой главе диссертационной работы проводится анализ литературы, посвященный моделированию прохождения света через субдлинноволновый оптический зонд, и литературы, посвященный методам сверхразрешения.

Также описывается установка для регистрации дальнепольного излучения, прошедшего через оптический зонд.

Для решения задачи аттестации ближнепольных оптических зондов на основе метода оптического сверхразрешения необходима разработка стабильного и эффективного метода обработки распределения интенсивности, регистрируемой в дальней зоне.

Схема установки регистрации дальнепольного распределения интенсивности представлена на рис.2. Ближнепольный зонд размещается в передней фокальной плоскости объектива. В задней фокальной плоскости объектива регистрируется интенсивность, пропорциональная частотному спектру дальнепольного излучения.

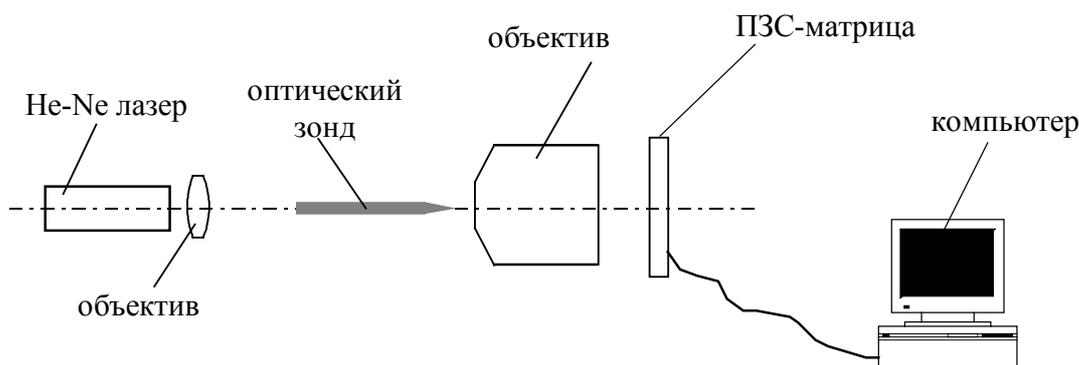


Рис.2. Схема регистрации дальнепольного распределения интенсивности.

Для определения математической связи описания источника с распределением интенсивности в дальней зоне необходимы:

- решение прямой задачи (математическое моделирование дальнепольных распределений с упрощенными граничными условиями) для исследования сходимости и погрешности предлагаемого метода восстановления;
- решение обратной задачи, то есть восстановление первоначальной структуры вторичного источника света.

Для математического моделирования прохождения света через субдлинноволновую апертуру необходимо применение строгой теории дифракции с учетом эффектов векторного характера электромагнитных волн. При дифракции света на сверхмалых элементах большая часть электромагнитной энергии остается в ближнем поле, и только небольшая часть энергии переносится в дальнюю зону. Для анализа дальнего распределения поля необходимо разделить затухающую и незатухающую часть электромагнитного поля.

Существующие методы моделирования дифракции света на субдлинноволновых структурах не пригодны для последующего решения обратной задачи, поскольку после вычисления итоговой интенсивности они не дают возможности различить затухающие и незатухающие компоненты. Кроме того, они не являются обратимыми, то есть не дают однозначной связи характеристик дифрагированного поля с параметрами рассеивающей структуры. Таким образом, необходимо сформулировать векторную

математическую модель дифракционного рассеяния на сверхмалых препятствиях, которая отвечала бы следующим требованиям:

- возможность разделения затухающей и незатухающей части электромагнитного поля;
- прямая связь характеристик дифрагированного поля с параметрами рассеивающей структуры;
- простота численной реализации;
- пригодность для дальнейшего решения обратной задачи, то есть обратимость.

При формировании поля в дальней зоне не участвует большое число функций, соответствующих быстро затухающим в пространстве волнам, поэтому при размерах отверстия меньше длины волны его восстановленные параметры не будут соответствовать исходным, причем различия увеличиваются с уменьшением размеров апертуры. Решение обратной задачи может быть реализовано на основе методов сверхразрешения, то есть аналитического продолжения пространственно-частотного спектра незатухающих векторных плоских волн.

Решение обратной задачи на основе аналитического продолжения спектра имеет смысл только при наличии достоверных априорных данных об исследуемом объекте:

- исследуемый объект является одиночным;
- размер исследуемого объекта меньше длины волны;
- исследуемый объект имеет круглую или эллиптическую форму.

Для восстановления параметров апертуры по распределению поля в дальней зоне, необходимо использование математических методов аналитического продолжения спектра в сочетании с применением итерационных алгоритмов сверхразрешения с обратной связью. Последовательность решения обратной задачи выглядит следующим образом:

- обработка измеренных данных с целью уменьшения случайного шума;
- расчет составляющих спектра векторной комплексной амплитуды поля по измеренной интенсивности;
- предварительное доопределение спектра за пределами области видимости;
- применение итерационной процедуры для более точного восстановления периферийных участков спектра;
- вычисление бинарной области, определяющей параметры выходного отверстия зонда.

Глава 2. Математическое моделирование дифракционного распределения интенсивности света в дальней зоне (прямая задача)

Во второй главе диссертационной работы рассматривается математическая модель дифракционного распределения интенсивности света в дальней зоне с упрощенными граничными условиями, основанная на представлении комплексной амплитуды поля через суперпозицию

затухающих и незатухающих плоских волн. Приводятся матричные соотношения для вычисления распределения интенсивности в дальней зоне.

Для анализа распределения поля в дальней зоне необходимо выделить ту часть поля за пределами отверстия зонда, которая не затухает и, следовательно, состоит из компонент с вещественными волновыми векторами \mathbf{k} . В качестве общего базиса можно предложить весь спектр плоских волн с пространственными частотами от 0 до $\pm \infty$:

- незатухающие волны – с пространственными частотами $|v| \leq \frac{1}{\lambda}$ и вещественными векторами \mathbf{k} ;
- затухающие волны – с пространственными частотами $|v| > \frac{1}{\lambda}$ и комплексными векторами $\hat{\mathbf{k}}$.

Магнитный и электрический векторы базисной плоской волны описываются выражениями (1) и (2) соответственно:

$$\mathbf{h}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{k}}{|\mathbf{j} \times \mathbf{k}|} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})], \quad (1)$$

$$\mathbf{e}(\mathbf{r}) = i \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{h}(\mathbf{r})}{|\mathbf{k} \times \mathbf{h}(\mathbf{r})|}, \quad (2)$$

где $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, \mathbf{j} – орт оси y , $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix}$ – волновой вектор, c_x, c_y, c_z –

направляющие косинусы.

Структуру затухающих волн можно описать при помощи комплексного волнового вектора $\hat{\mathbf{k}}$:

$$\hat{\mathbf{k}} = \begin{cases} k_x \\ k_y, \text{ где } k_x = 2\pi v_x, k_y = 2\pi v_y, k_z = 2\pi \sqrt{(v_x^2 + v_y^2) - \frac{1}{\lambda^2}} \\ ik_z \end{cases} \quad (3)$$

Тогда выражения для затухающих $\mathbf{u}_{ij}^E(\mathbf{r})$ и незатухающих $\mathbf{u}_{ij}^R(\mathbf{r})$ базисных волн будут выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{u}_{ij}^E(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{0ij}^E \cdot \exp[i(\hat{\mathbf{k}}^T \cdot \mathbf{r})], \quad \mathbf{u}_{ij}^R(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{0ij}^R \cdot \exp[i(\mathbf{k}^T \cdot \mathbf{r})], \quad (4)$$

где $\mathbf{u}_{0ij}^R = \frac{\mathbf{k}_{ij} \times \mathbf{p}_{ij}}{|\mathbf{k}_{ij} \times \mathbf{p}_{ij}|}$, $\mathbf{u}_{0ij}^E = \frac{\hat{\mathbf{k}}_{ij} \times \mathbf{p}_{ij}}{|\hat{\mathbf{k}}_{ij} \times \mathbf{p}_{ij}|}$ – векторные амплитуды

незатухающих и затухающих волн, \mathbf{p}_{ij} – единичный вектор поляризации, который определяет состояние поляризации и направлен перпендикулярно электрическому вектору каждой плоской волны.

Для моделирования дифракции света на субдлинноволновых структурах можно описать разложение ближнего и дальнего поля по плоским волнам в матричном виде. Тогда полное выражения для описания поля $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}) = \sum_i \sum_j \mathbf{B}_{ij} \mathbf{u}_{ij}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где $\mathbf{u}_{ij}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \mathbf{u}_{ij}^R(\mathbf{r}) \\ \mathbf{u}_{ij}^E(\mathbf{r}) \end{cases}$, \mathbf{B}_{ij} – матрица комплексных коэффициентов.

Для определения влияния размеров отверстия в экране на распределение поля в дальней зоне предлагается математическая модель с упрощенными начальными условиями, которые предполагают просто описание границ прозрачной области в идеально поглощающем плоском экране. Матрица \mathbf{S} упрощенных граничных условий будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \text{circ}\left(\frac{x}{t_x}, \frac{y}{t_y}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \text{circ}\left(\frac{x}{t_x}, \frac{y}{t_y}\right) & 0 \\ 0 & 0 & \text{circ}\left(\frac{x}{t_x}, \frac{y}{t_y}\right) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

При моделировании прямой задачи предположим, что все плоские волны одинаково линейно поляризованы в направлении Oy . При $z = 0$ математическое описание пространственной структуры незатухающих волн имеет такой же вид, как и описание затухающих волн. Тогда после некоторых преобразований получим:

$$\mathbf{S} = \mathbf{F} [\mathbf{B}_{ij} \cdot \mathbf{P}_{ij}], \quad (7)$$

где \mathbf{F} – преобразование Фурье от элементов матричного произведения $\mathbf{B}_{ij} \cdot \mathbf{P}_{ij}$, которое представляет собой спектр векторных плоских волн.

Матрица, \mathbf{P}_{ij} , определяющая ориентацию плоской волны в пространстве выглядит следующим образом:

$$\mathbf{P}_{ij} = \begin{pmatrix} \bar{f}_x & 0 & 0 \\ 0 & \bar{f}_y & 0 \\ 0 & 0 & \bar{f}_z \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где $\bar{f}^x = \frac{f_x}{\sqrt{f_x^2 + f_y^2 + f_z^2}}$, $\bar{f}^y = \frac{f_y}{\sqrt{f_x^2 + f_y^2 + f_z^2}}$, $\bar{f}^z = \frac{f_z}{\sqrt{f_x^2 + f_y^2 + f_z^2}}$.

Для принятого состояния поляризации $f_x = (c_{xij})^2$, $f_y = -(c_{zij})^2 - (c_{xij})^2$,

$f_z = (c_{z\ ij}) \cdot (c_{x\ ij} + c_{y\ ij})$, где $c_{x\ ij}$, $c_{y\ ij}$, $c_{z\ ij}$ – направляющие косинусы вектора k_{ij} .

Матрицу комплексных коэффициентов можно вычислить при помощи обратного преобразования Фурье:

$$\mathbf{B}_{ij} = \mathbf{P}_{ij}^{-1} \cdot \mathbf{F}^{-1}[\mathbf{S}]. \quad (9)$$

В используемой для проведения измерений схеме в задней фокальной плоскости микрообъектива угловое распределение комплексной амплитуды поля трансформируется в двумерное линейное. Следовательно, распределение векторной комплексной амплитуды дальнего поля может быть описано непосредственно через коэффициенты \mathbf{B}_{ij} :

$$\mathbf{U}'(v_x, v_y) = \mathbf{B}_{ij} \cdot \frac{\mathbf{k}_{ij} \times \mathbf{p}_{ij}}{|\mathbf{k}_{ij} \times \mathbf{p}_{ij}|}, \quad (10)$$

где v_x, v_y – линейные координаты в задней фокальной плоскости объектива, соответствующие пространственным частотам ($v_x = k_{x\ ij}/2\pi$, $v_y = k_{y\ ij}/2\pi$).

Распределение интенсивности в задней фокальной плоскости объектива описывается следующим образом:

$$I'(v_x, v_y) = |\mathbf{U}'(v_x, v_y)|^2 = |\mathbf{B}_{ij}|^2, \quad (11)$$

где $|\mathbf{B}_{ij}|^2$ – норма матрицы \mathbf{B}_{ij} .

Таким образом, для описания поля в ближней и дальней зоне вторичного источника света можно использовать затухающие и незатухающие линейно-поляризованные векторные плоские волны, что дает возможность разделить дальнее и ближнее поле. Предлагаемый подход также позволяет использовать при расчетах достаточно простой, эффективный и легко обратимый аппарат преобразования Фурье и матрично-векторных операций. При прямых расчетах определяется угловое распределение комплексной амплитуды в дальней зоне и угловое распределение интенсивности с учетом поляризации, а с применением обратных процедур возможно определение начального распределения поля вблизи зонда.

Глава 3. Восстановление параметров субдлинноволнового вторичного источника света (обратная задача)

В третьей главе диссертационной работы рассматривается метод сверхразрешения для восстановления параметров субдлинноволнового вторичного источника света по распределению интенсивности в дальней зоне.

Для восстановления параметров субдлинноволновой апертуры по распределению интенсивности в дальней зоне прежде всего необходимо перейти от распределения интенсивности к спектру плоских волн:

$$\left\{ f(v_x, v_y) \right\} = \mathbf{B}(v_x, v_y) \cdot \mathbf{P}(v_x, v_y), \quad (12)$$

где $\left\{ f(v_x, v_y) \right\}$ – спектр векторных плоских волн, матрица $\mathbf{B}(v_x, v_y)$, определяющая векторную амплитуду излучения, имеет следующий вид:

$$\mathbf{B}(v_x, v_y) = \mathbf{U}'(v_x, v_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{I'(v_x, v_y)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Поскольку центральный максимум спектра является гладкой функцией, для его доопределения до первого нулевого значения можно использовать ортогональные полиномы, например двумерные полиномы Цернике. Благодаря устойчивости ортогональных базисов при использовании различных методов аппроксимации полиномы Цернике хорошо подходят для решения численных задач.

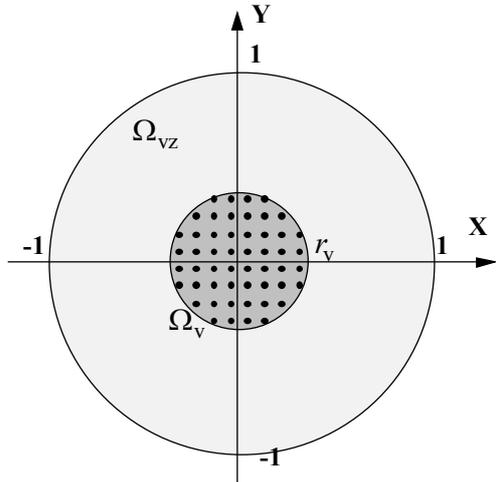


Рис.3. Область аналитического продолжения.

На рис.3 показана область регистрации Ω_v , и область аналитического продолжения Ω_{vz} , которая задается таким образом, чтобы включить в себя весь центральный максимум спектра. В относительных координатах радиус области Ω_{vz} единичный, а радиус области Ω_v определяется соотношением

$$r_v = 1/k_z, \quad (14)$$

где k_z – коэффициент экстраполяции, показывает во сколько раз будет продолжен спектр.

Если использовать полиномы Цернике, ортогональные на единичном круге, то узлы аппроксимации (точки, в которых измеряется спектр), занимают очень малую часть единичного круга. Чтобы задача аппроксимации при помощи полиномов Цернике была наиболее устойчивой, узлы аппроксимации должны равномерно располагаться по всей области ортогональности. Поэтому было решено использовать полиномы Цернике, существующие внутри единичного круга (область аналитического продолжения), но ортогональные на круге радиуса r_v (область регистрации Ω_v).

Разложение спектра в пределах центрального максимума (область аналитического продолжения Ω_{vz}) в ряд по полиномам Цернике будет выглядеть следующим образом:

$$f_{vz}(v_x, v_y) = \sum_n^p \sum_m^n c_{nm} \cdot R_n^m(v_r) \cos(m \cdot \theta) + \sum_n^p \sum_m^n s_{nm} \cdot R_n^m(v_r) \sin(m \cdot \theta), \quad (15)$$

где m, n – целые положительные числа, причем $n \geq m$, $(n - m)$ – четное число; p – максимальная степень полиномов; c_{nm} и s_{nm} – коэффициенты разложения; v_x, v_y – частотные координаты; $v_r = \frac{\lambda \cdot v}{k_z}$ – относительная пространственная частота $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$, $\theta = \arccos\left(\frac{v_y}{v}\right) = \arcsin\left(\frac{v_x}{v}\right)$ – полярная координата. При этом полиномы Цернике $R_n^m(v_r) \cos(m \cdot \theta)$, $R_n^m(v_r) \sin(m \cdot \theta)$ ортогональны на области регистрации спектра Ω_v , а (v_x, v_y) и (v_r, θ) – координаты точек на всей области аналитического продолжения Ω_{vz} .

Коэффициенты разложения c_{nm} , s_{nm} вычисляются на области регистрации спектра Ω_v , являющейся областью ортогональности полиномов, исходя из следующего соотношения:

$$f_v(v_{xv}, v_{yv}) = \sum_n^p \sum_m^n c_{nm} \cdot R_n^m(v_{rv}) \cos(m \cdot \theta) + \sum_n^p \sum_m^n s_{nm} \cdot R_n^m(v_{rv}) \sin(m \cdot \theta), \quad (16)$$

где $f_v(v_{xv}, v_{yv})$ – регистрируемая часть спектра; (v_{xv}, v_{yv}) , (v_{rv}, θ) – координаты внутри области ортогональности.

Задача определения коэффициентов c_{nm} , s_{nm} решается в матричной форме методом наименьших квадратов с использованием алгоритма ортогонализации Грама-Шмидта. Для вычисления значений полиномов использовалось трёхчленное рекуррентное соотношение Форсайта, которое связывает три последовательных полинома.

Экстраполяция производится за пределы области регистрации до достижения функцией (экстраполируемый спектр) первых нулевых значений. Таким образом, результатом первой стадии является расширение области регистрации в несколько раз для дальнейшего применения итерационного алгоритма сверхразрешения при более подходящих условиях.

Для дальнейшего продолжения спектра и восстановления его периферийных участков используется процедура, основанная на известном алгоритме Герхберга. Этот алгоритм состоит из следующих этапов:

- 1) получение i -го приближения входного сигнала:

$$s^{(i)}(x, y) = F\left[f_s^{(i)}(v_x, v_y)\right], \quad (17)$$

где для первой итерации $f_s^1(v_x, v_y) = f_{vz}(v_x, v_y)$;

- 2) нахождение наименьшей области Ω_s , включающей все точки, значения сигнала в которых превышает выбранный числовой порог s_0 ;

- 3) получение урезанного i -го приближения сигнала $Qs^{(i)}(x, y)$, то есть сигнала, который существует только внутри области Ω_s :

$$Qs^{(i)}(x, y) = \begin{cases} s^{(i)}(x, y), & \in \Omega_s; \\ 0, & \notin \Omega_s \end{cases}; \quad (18)$$

- 4) получение i -го приближения спектра выглядит следующим образом:

$$f^{(i)}(v_x, v_y) = F^{-1} \left[Qs^{(i)}(x, y) \right]; \quad (19)$$

- 5) “сшивка” первого приближения спектра $f^{(i)}(v_x, v_y)$ и первоначального спектра $f_{vz}(v_x, v_y)$, полученного из экстраполяции полиномами:

$$f_s^{(i+1)}(v_x, v_y) = \begin{cases} f^{(i)}(v_x, v_y), & \notin \Omega_{vz} \\ f_{vz}(v_x, v_y), & \in \Omega_{vz} \end{cases}, \quad (20)$$

где $f_s^{(i+1)}(v_x, v_y)$ – составной спектр, Ω_{vz} – область доопределенной (при помощи полиномов Цернике) части спектра.

Составной спектр $f_s^{(i+1)}(v_x, v_y)$ является входным для следующего шага, то есть подставляется в выражение (17) и итерационный цикл продолжается.

Процесс продолжается, пока выполняется следующее соотношение:

$$\sum_{\Omega_s} \left| f^{(i)}(v_x, v_y) - f_{vz}(v_x, v_y) \right|^2 < \sum_{\Omega_s} \left| f^{(i-1)}(v_x, v_y) - f_{vz}(v_x, v_y) \right|^2, \quad (21)$$

где $f^{(i)}(v_x, v_y)$ и $f^{(i-1)}(v_x, v_y)$ – спектры i -го и $(i-1)$ -го приближения входного сигнала.

Отличия приведенной процедуры от алгоритма Герхберга заключается в применении обратной связи в пространстве спектра, вследствие чего имеется возможность сравнивать очередное приближение с регистрируемой частью спектра. Кроме того, в приведенной процедуре Ω_s – произвольная область, а не прямоугольный кадр, что дает возможность определения не только размеров, но и формы апертуры.

При измерении распределения интенсивности в дальней зоне полученные данные имеют погрешность, связанную с ошибками измерений и с шумом приемника излучения. В наиболее общем случае можно считать, что данные складываются со случайным шумом, равномерно распределенным по всей плоскости регистрации. В качестве средства, уменьшающего влияние шума на результаты восстановления, предлагается обработка измеренных данных при помощи аппроксимации полиномами Цернике.

Для этого определяются коэффициенты разложения зашумленного спектра по полиномам Цернике, ортогональным на измеренной части спектра, соответствующей единичному кругу. Количество узлов аппроксимации должно значительно превышать количество полиномов,

используемых при аппроксимации, тогда при помощи метода наименьших квадратов определяются коэффициенты сглаженной функции, по которым затем можно ее восстановить.

Таким образом, решение обратной задачи происходит в несколько этапов. Экстраполяция спектра при помощи полиномов Цернике с измененной областью ортогональности позволяет доопределить спектр до первых нулевых значений, то есть восстановить центральный максимум. Для дальнейшего продолжения спектра и восстановления его периферийных участков используется итерационная процедура с обратной связью в пространстве спектра, основанная на известном алгоритме Герхберга. Кроме того, проводится обработка зашумленных данных на основе аппроксимации регистрируемого спектра, что позволяет значительно уменьшить случайный шум.

Глава 4. Компьютерная модель восстановления ближнепольных характеристик вторичных источников света.

В четвертой главе обсуждается численная реализация представленного метода сверхразрешения. Подробно описаны процедура выбора шага дискретизации и масштабирование измеренных данных.

Для восстановления параметров субдлинноволновой апертуры необходимо представить спектр пространственных частот в виде двумерной выборки $f(i, j)$ с шагами $\Delta \nu_x$ и $\Delta \nu_y$ по частотным координатам, а сигнал, то есть восстанавливаемая апертура, должна быть представлена в виде двумерной выборки $s(k, l)$ с шагами Δx и Δy по предметным координатам.

Для аналитического продолжения спектра необходимо, чтобы форма регистрируемой области спектра была близка к эллиптической. Численные исследования показали, что форма регистрируемой области будет близка к эллиптической при радиусе области 15 пикселей. Тогда шаг по частотным координатам должен быть не более $\Delta \nu = \frac{1}{15 \cdot \lambda}$.

С другой стороны, необходимо чтобы шаг по предметным координатам позволял моделировать апертуры порядка 50 нм. Для восстановления такой апертуры необходимо чтобы ее радиус был не менее 2 пикселей. Таким образом, максимальный шаг по предметным координатам составит $\Delta x = \Delta y = 12.5$ нм.

При восстановлении параметров субдлинноволновой апертуры с использованием дискретного преобразования Фурье шаг по предметным координатам связан с шагом по спектральным координатам по теореме Котельникова. Тогда для выборки 1024×1024 точек минимальный шаг по предметным координатам при $\lambda = 632$ нм составляет $\Delta x = 9.25$ нм. Таким образом, диапазон шагов по предметным и частотным координатам будет следующим:

$$\begin{cases} 9.25 \leq \Delta x \leq 12.5 \text{ (нм)} \\ \frac{1}{20 \cdot \lambda} \leq \Delta \nu \leq \frac{1}{15 \cdot \lambda} \end{cases} \quad (22)$$

В данной задаче было решено взять шаг по предметным координатам $\Delta x = \Delta y = 10 \text{ нм}$, тогда шаг по спектральным координатам $\Delta \nu = \frac{1}{16 \cdot \lambda}$.

Для восстановления параметров субдлинноволновой апертуры по регистрируемому распределению интенсивности в дальней зоне необходимо согласование выборки измеренных данных, размерность которой определяется размерностью ПЗС-матрицы, с выборкой, используемой при вычислениях.

Поскольку область регистрации занимает большую часть ПЗС-матрицы, аппроксимацию измеренных данных полиномами Цернике (для уменьшения случайного шума) желательно производить на выборке, полученной с ПЗС-матрицы, тогда при вычислении методом наименьших квадратов будет достигаться наибольшее сглаживание восстановленной функции. Восстановление сглаженной функции производится на выборке, используемой в дальнейшем при вычислениях и на которой область регистрации занимает только небольшую ее часть.

Таким образом, при помощи аппроксимации функции полиномами Цернике можно перейти от выборки, регистрируемой на ПЗС-матрице, к выборке, которая будет использоваться в алгоритме сверхразрешения, и одновременно уменьшить случайный шум.

После работы итерационного алгоритма восстановленная область представляет собой некоторое распределение интенсивности, которое соответствует восстанавливаемому отверстию. Для более точного определения параметров апертуры зонда необходимо сформировать бинарную область, точно соответствующую граничным условиям отверстия.

Определить границы бинарной области можно по наклону сечения функции интенсивности. В точке, соответствующей крайней границе исходной апертуры наклон сечения резко возрастает, а затем резко падает. Все значения после достижения максимума наклона обнуляются, а остальным присваивается единица. Эти действия выполняются во всех вертикальных и горизонтальных сечениях.

Восстановление характеристик субдлинноволновых вторичных источников света состоит из следующих этапов:

- 1) расчет составляющих спектра векторной комплексной амплитуды поля по измеренной интенсивности $f(i, j)$;
- 2) обработка измеренных данных с целью устранения случайного шума и изменение масштаба выборки:
 - а) вычисление массива коэффициентов $CS_v(n, m)$ аппроксимации функции $f(i, j)$ при помощи метода наименьших квадратов ;

- б) восстановление значений функции $f_v(i, j)$ по коэффициентам $CS_v(n, m)$;
- 3) аналитическое продолжение спектра за пределы области регистрации при помощи полиномов Цернике:
 - а) вычисление массива коэффициентов $CS_z(n, m)$ аппроксимации функции $f_v(i, j)$ при помощи метода наименьших квадратов;
 - б) восстановление значений функции $f_z(i, j)$ по коэффициентам $CS_z(n, m)$;
- 4) применение итерационной процедуры для более точного восстановления периферийных участков спектра $f_s(i, j)$;
- 5) вычисление бинарной области, определяющей параметры выходного отверстия зонда $s_r(k, l)$.

На основе предложенных в данной работе математических моделей и алгоритмов был разработан пакет исследовательских программ восстановления параметров субдлинноволновых вторичных источников света. Программная реализация проводилась с использованием технологии объектно-ориентированного программирования на языке C++.

Входными данными для моделирования дифракционного распределения света в дальней зоне за источником субдлинноволновых размеров являются: длина волны излучения (в нанометрах), угол охвата (в градусах), который определяется числовой апертурой микрообъектива, а также геометрические параметры выходной апертуры зонда.

Восстановление параметров апертуры производится по предварительно рассчитанному распределению интенсивности в дальней зоне. Возможно также восстановление параметров субдлинноволновой апертуры по реально измеренным данным, которые должны быть записаны в специальном формате.

Среднее время восстановления на персональном компьютере с оперативной памятью объемом 128 мегабайт и процессором Intel Pentium II, работающем на частоте 266 мегагерц, составляет 2 минуты.

Глава 5. Численные эксперименты по исследованию метода и программы

В пятой главе приводятся результаты восстановления апертур различных размеров и формы, выполненные на основе двухступенчатого алгоритма сверхразрешения, представленного в второй главе. Также приводятся результаты исследования устойчивости метода восстановления к случайному шуму.

Приведены результаты исследования погрешности восстановления формы апертуры. Эллиптические апертуры независимо от размеров и ориентации эллипса восстанавливаются со среднеквадратической погрешностью меньше одного пиксела, что составляет около 10 нм.

Приводятся результаты исследования погрешности восстановления размеров апертуры. Нижний предел радиуса задаваемой апертуры

ограничивается пределом дискретизации (радиус апертуры 10 нм), верхний предел – приближается к длине волны излучения. При этом абсолютная ошибка восстановления размеров апертуры не превышает одного пиксела при любой величине апертуры.

Для исследования устойчивости метода восстановления к шуму проводились исследования восстановления зашумленных сигналов. При этом моделировался гауссовый шум, равномерный по всей области регистрации. Дисперсия шума задавалась в процентном соотношении от максимального значения регистрируемого сигнала. Для апертур, размером до 100 нм допустимый шум составляет около 0.5%. Однако для апертур больше 100 нм допустимый шум составляет от 5% до 10%.

Таким образом, на основании представленных в пятой главе результатов можно сделать вывод, что метод восстановления субдлинноволновых апертур корректно работает для апертур круглой и эллиптической формы, размеры которых находятся в пределах от 20 нм до 600 нм, независимо от ориентации эллипса и от разницы его размеров в различных направлениях. При этом ошибка восстановления размеров субдлинноволновых апертур составляет не больше одного пиксела, то есть 10 нм. Таким образом возможна уверенная реконструкция апертур наиболее часто используемых в оптических ближнепольных микроскопах зондов (от 50 до 200 нм). Для восстановления субдлинноволновых апертур больше 100 нм допустимый шум составляет около 5%, для апертур меньшего размера шум не должен превышать 0.5%.

Заключение

1. Разработана модель оптической аттестации субдлинноволновых апертур зондов для сканирующей ближнепольной микроскопии на основе регистрации распределения интенсивности излучения в дальней зоне;
2. Разработан многоступенчатый алгоритм оптического сверхразрешения для восстановления субдлинноволновых объектов;
3. Разработан пакет программ, который может использоваться для обработки измеренного распределения интенсивности в дальней зоне с целью восстановления субдлинноволновых апертур ближнепольных зондов.

По теме диссертации опубликованы следующие работы:

1. Veiko V.P., Voznessenski N.B., Domnenko V.M., Ivanova T.V., Rodionov S.A., Goussev A.E. *A new approach to optical measurements of small objects with superresolution*. In technical digest of XVI International Conference on Coherent and Nonlinear Optics (ICONO'98), June 29 – July 3 1998, Moscow, Russia.
2. Вейко В.П., Вознесенский Н.Б., Гусев А.Е., Иванова Т.В., Родионов С.А. *Возможность определения параметров вторичных источников света, меньших длины волны, по характеристикам дальнего поля*. Оптический журнал, Том 65, № 10, 1998 г, стр. 49-53.
3. Veiko V.P., Voznessenski N.B., Domnenko V.M., Ivanova T.V., Rodionov S.A., Goussev A.E. *New approach to analysis of subwavelength sized secondary light sources*. Proc. SPIE, Vol. 3467, 1998, p. 313-321, Far- and Near-Field Optics: Physics and Information Processing 19-24 July 1998, San Diego, California, USA.
4. Veiko V.P., Voznessenski N.B., Domnenko V.M., Ivanova T.V., Rodionov S.A., Goussev A.E. *New approach to optical measurements of small objects with superresolution*. Proc. SPIE, Vol. 3736, 1999, p. 341-350, ICONO '98: Quantum Optics, Interference Phenomena in Atomic Systems, and High-Precision Measurements.
5. Иванова Т.В. *Алгоритм сверхразрешения для восстановления размеров и формы субдлинноволновых апертур*. Тезисы международной конференции “Прикладная оптика-98”, 16-18 декабря 1998 года, Санкт-Петербург, Россия
6. Толстоба Н.Д., Иванова Т.В. *Доопределение двумерных функций с использованием ортогональных полиномов*. Тезисы международной конференции молодых ученых и специалистов “Оптика-99”, 19-21 октября 1999 года, Санкт-Петербург, Россия.
7. Иванова Т.В. *Аттестация ближнепольных зондов при помощи методов оптического сверхразрешения*. Тезисы международной конференции молодых ученых и специалистов “Оптика-99”, 19-21 октября 1999 года, Санкт-Петербург, Россия.
8. Иванова Т.В. *Компьютерное восстановление параметров субдлинноволновых апертур при аттестации ближнепольных зондов*. Тезисы международной конференции молодых ученых и специалистов “Оптика-99”, 19-21 октября 1999 года, Санкт-Петербург, Россия.