

Projektpartner: JCMwave GmbH (JCMwave), Hochschule Aalen (HS Aalen),
Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB)
FKZ: 01 IS 20 080
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 – 31.12.2023
Berichtszeitraum: 01.01.2021 – 31.12.2023
Autoren: Philipp-Immanuel Schneider (JCMwave), philipp.schneider@jcmwave.com
Jan Krüger (PTB), jan.krueger.ext@ptb.de
Bernd Bodermann (PTB), bernd.bodermann@ptb.de
Andreas Heinrich (HS Aalen), andreas.heinrich@hs-aalen.de

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 01IS20080 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

1. Stellungnahme zu den Ergebnissen der einzelnen Aufgabenpakete

Im Folgenden werden die Arbeiten und Ergebnisse aus den jeweiligen Aufgabenpaketen (AP) von SiM4diM vorgestellt. Die einzelnen APs wurden entsprechend ihres jeweiligen thematischen Schwerpunkts in vier Gruppen eingeordnet:

Systemmodellierung und -simulation

AP 1: Charakterisierung und Modellierung des optischen Systems

Die Erweiterung der Systemsimulation zur quantifizierbaren Modellierung realer Messsysteme beinhaltet die Erfassung spektraler und räumlicher Beleuchtungs-, und Abbildungseigenschaften, sowie die Untersuchung der Simulationssoftware an sich. Dies wurde für ein UV-Mikroskop der PTB durchgeführt, das für den weiteren Verlauf des Projektes als experimentelles System eingesetzt worden ist.

Dafür wurde unter anderem ein neues und bisher einzigartiges Verfahren für die gleichzeitige Charakterisierung der Numerischen Apertur (NA) des Beleuchtungsstrahlenganges und des Abbildungsstrahlenganges optischer Mikroskope entwickelt. Diese sind wichtige Parameter eines jeden optischen Mikroskops, die maßgeblich die Abbildungsgüte in der Bildebene bestimmen. Demnach müssen sie charakterisiert und in den Simulationen berücksichtigt werden. Sie beschreiben den maximalen Winkel, für ein gegebenes Umgebungsmedium, unter dem das System in der Lage ist Licht auf die Probe zu fokussieren, bzw. unter dem das gestreute Licht von der Probe durch das Objektiv wieder aufgesammelt werden kann. Basierend auf *Abbe's Sinus Bedingung* konnten die Projektpartner im Rahmen dieses APs ein einfaches in-situ Verfahren entwickeln das beide Werte gleichzeitig bestimmen kann. Diese ist in Abbildung 1 dargestellt.

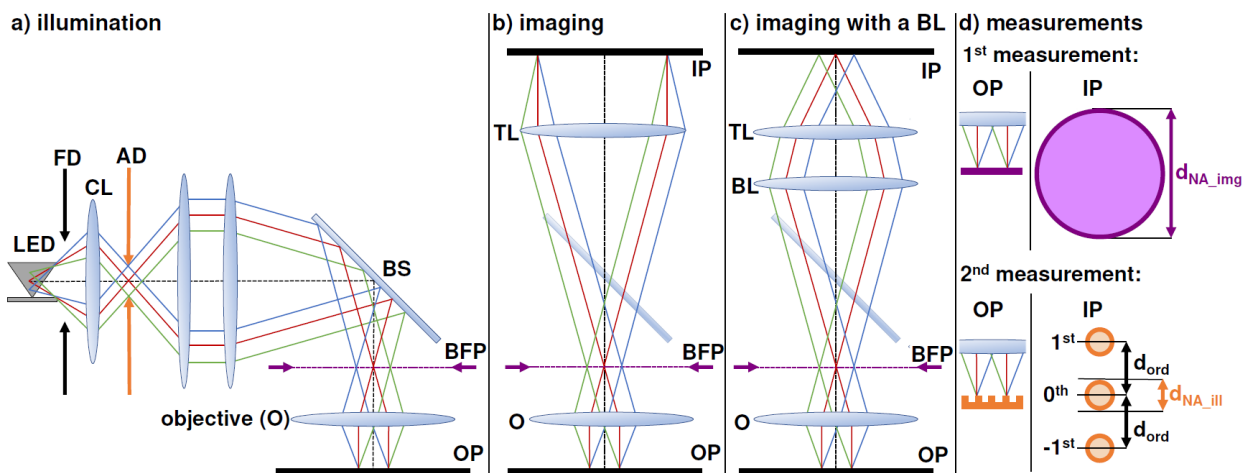


Abbildung 1: Schematische Zeichnung eines optischen Auflichtmikroskops mit und ohne Bertrand-Linse, sowie die beiden für die Auswertung notwendigen Messungen in der hinteren Objektivbrennebene (eng. BFP). Entnommen aus [1]

Notwendig hierfür sind zwei aufeinanderfolgende Messungen, die durchgeführt werden, während die hintere Objektivbrennebene mit Hilfe einer sogenannten Bertrand-Linse beobachtet wird. Eine erste Messung auf einem Spiegel ermöglicht die Bestimmung der Abbildungs-NA in Pixelkoordinaten als Durchmesser der vollständig ausgefüllten Pupille. Die Beleuchtungs-NA entspricht dem Durchmesser der Beugungsordnungen in Pixelordnungen, die in der zweiten Messung sichtbar werden, wenn ein Liniengitter in der Objektebene platziert wird. Die Übersetzung der Durchmesser in NA Werte erfolgt über die Auswertung der Abstände der Mittelpunkte der einzelnen Beugungsordnungen der zweiten Messung. Diese folgt der allgemeinen *Gittergleichung* und wurde in der open-access Veröffentlichung [1] mit Hilfe eines einfachen Polynoms gelöst.

Erstmals können mit diesem Verfahren die Herstellerangaben unabhängig überprüft werden. Abbildung 2 zeigt die Ergebnisse des Verfahrens für ein kommerzielles Objektiv mit einer nominalen NA von 0.9. Hier wurde die Auswertung mit verschiedenen Konfigurationen von Aperturblende und Liniengitterperiode durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen eindeutig im Rahmen einer erweiterten Messunsicherheit (4 Standardabweichungen σ), dass der tatsächlich NA -Wert von dem nominalen NA-Wert deutlich abweicht.

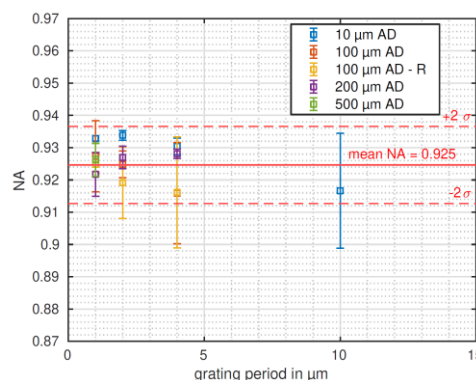


Abbildung 2: Ergebnisse der Abbildungs-NA Bestimmung für ein kommerzielles Objektiv mit einer nominalen NA von 0.9. Entnommen aus [1]

In der hochgenauen dimensional Mikroskopie sind modellbasierte Auswertungen auf Basis von Modellrechnungen erforderlich. Dies gilt insbesondere für die quantitative Mikroskopie und dementsprechend auch für das Projekt SiM4diM. Der hier verwendete rigorose Simulationsprozess sieht die Lösung der *Maxwell Gleichungen* in dem durch den Anwender definierten

Simulationsvolumen vor. Hierfür gibt es viele etablierte Verfahren, die unterschiedliche Annahmen eingehen und von unterschiedlichen Instituten und Firmen implementiert worden sind. Im Rahmen von SiM4diM wird die Finite Elemente Methode (FEM) in Form der Simulationssoftware JCMSuite des Projektpartners JCMwave GmbH für die mikroskopische Bildsimulation verwendet. Um auszuschließen, dass etwaige Simulationsungenauigkeiten in der JCMSuite vorliegen, wurde gleich zu Beginn des Projektes ein Vergleich von verschiedenen Simulationstools durchgeführt. Hierbei wurden die Parameter für ein theoretisches UV-Transmissionsmikroskop festgelegt und 24 verschiedenen Liniengitter auf einer gewöhnlichen Photomaske definiert, die sich nur hinsichtlich ihres *Linien-Zwischenraum-Verhältnisses* unterscheiden. Sämtliche Beleuchtungs-, und Abbildungsparameter des theoretischen Mikroskops, sowie die optischen und geometrischen Parameter der Liniengitter stellen eine Testsuite da, die in [2] noch detaillierte dargestellt ist.

Neben der JCMSuite wurden auch die Simulationstools MicroSim¹ und Dipog² auf diese Testsuite angewandt, die jeweils vom Institut für technische Optik der Universität Stuttgart und des Weierstraß-Instituts entwickelt worden sind. Die bei diesen Tools implementierten Algorithmen für die mikroskopische Bildsimulation sind die Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA) im Fall von MicroSim und ebenfalls FEM bei Dipog. Als Vergleichsmetrik für alle Simulationstool wurde ein Intensitätsschwellenwert definiert. Dieser beschreibt das Level im simulierten Intensitätsprofil, das an der vorher definierten geometrischen Kantenposition des Liniengitters vorliegt. Die Annahme ist hier wie gesagt, dass die drei verwendeten Simulationstools aufgrund verschiedener Softwareimplementierung und verschiedener verwendeter Algorithmen zur Lösung der *Maxwell Gleichungen* zu Unterschieden in der Bildsimulation, also dem Schwellenwert, führt. Die Ergebnisse des Vergleiches sind in Abbildung 3 dargestellt. Dort sind die bestimmten Schwellenwerte aller drei Simulationstools für alle 24 Liniengitter der Testsuite aufgeführt. Für eine bessere Übersicht sind die Schwellenwertpunkte für Liniengitterkonfigurationen mit der gleichen Linienbreite immer verbunden.

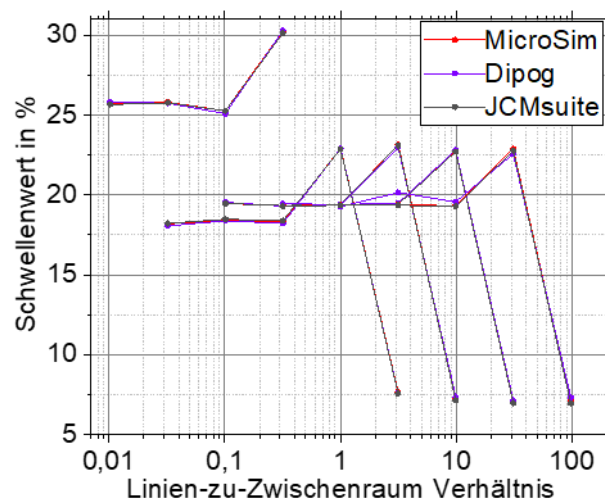


Abbildung 3: Schwellenwertergebnisse der drei untersuchten Simulationstools über alle 24 Liniengitter

Insgesamt stimmen die Schwellenwerte aller 24 Simulationstools sehr gut überein. Auffällig hierbei ist die erste Gruppe von Liniengittern mit den insgesamt kleinsten Linien-zu-Zwischenraumverhältnissen. Deren Schwellenwerte liegen zwischen 25 % und etwas mehr als 30 %, während die Schwellenwerte der Liniengitter der vier anderen Gruppen, für die hier angewandten Simulationsparameter, ungefähr zwischen 6 % und 24 % liegen. Die Linienbreite der Gitter in der ersten Gruppe beträgt nur ca. ein Drittel der für diese Simulation verwendeten Wellenlänge, weshalb

¹ <https://www.ito.uni-stuttgart.de/forschung/gruppe-hms/software/microsim/>

² <https://wias-berlin.de/software/index.jsp?id=DiPoG&lang=1>

diese Gruppe an Liniengittern einen deutlichen Grenzfall der mikroskopischen Auflösung darstellen. Die sehr dünnen Linien dieser Gitter können dementsprechend mit dem hier angenommenen, virtuellen/simulierten System nur bedingt gut aufgelöst werden. Dies führt zu den höheren Schwellenwerten. Trotzdem stimmen die Schwellenwervergebnisse der drei Simulationstools auch für diese Liniengitter sehr gut überein. In Abbildung 4 sind darüber hinaus auch die fokalen simulierten Profile eines Liniengitters mit einer Linienbreite und einem Zwischenraum von jeweils 1 μm dargestellt. Dort wird deutlich, dass auch die Übereinstimmung über die gesamte Gitterperiode für alle drei Softwarelösungen sehr gut ist. Unterschiede werden erst in Abbildung 4 rechts deutlich, wo die Differenzen der drei Profile miteinander verglichen werden. Diese sind immer vernachlässigbar.

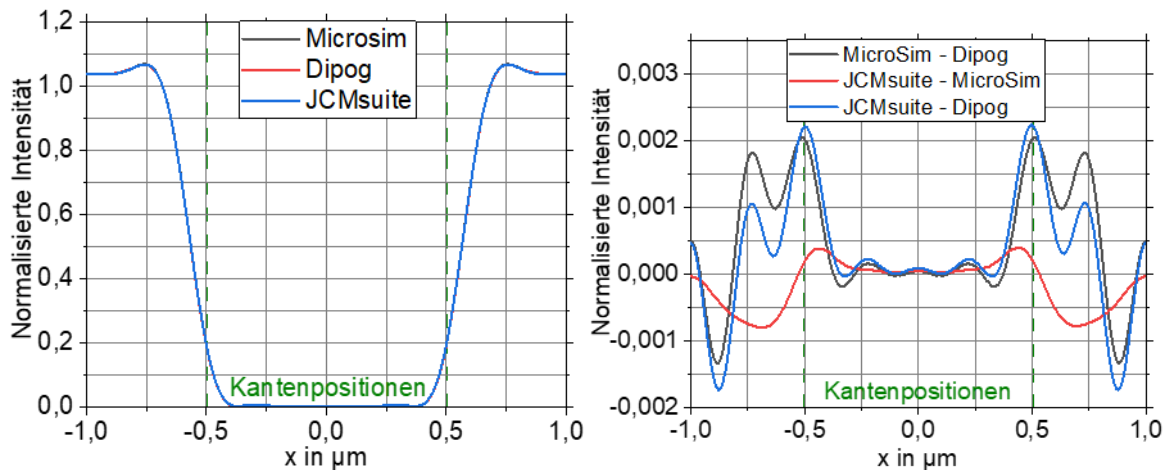


Abbildung 4: Darstellung der Simulationsergebnisse der drei Simulationstools für das gesamte simulierte Intensitätsprofil (links) und die jeweiligen Residuen der drei Softwarelösungen (rechts)

Die Schlussfolgerung war hier, dass drei Simulationstools vergleichbare Ergebnisse für die Lösung der Maxwell-Gleichungen im Rahmen der mikroskopischen Bildsimulation liefern. An dieser Stelle konnte im Projekt dann der Schritt in Richtung des Vergleiches mit experimentellen Daten gegangen werden.

Neben diesen Aufgaben wurden auch andere Charakterisierungsschritte an den untersuchten PTB-Messsystemen durchgeführt. Beispielsweise wurde die Wellenlänge, die Polarisation des Lichtes im Mikroskop, die Vergrößerung und etwaige Verzeichnungen untersucht und für die spätere Verwendung in den Simulationen bereitgestellt.

AP 2: Erweiterung Simulationsvolumina

Ziel dieses APs ist eine präzise wellenoptische Simulation realer Messsysteme bei einem Rechengebiet von ca. 1 mm x 1 mm x 1 mm. Die Größe dieses Volumens stellte bis vor kurzem eine enorme rechen-technische Aufwand dar, da das Volumen ein Vielfaches der verwendeten Wellenlänge entsprach. Jedoch konnte diese Aufgabe nun durch eine geschickte Anpassung der transparenten Randbedingungen, insbesondere der Perfectly Matched Layer Methode, bewältigt werden. Diese Erweiterung basiert auf einer Zerlegung des Rechengebiets in Sub-Gebiete, deren Lösungen durch Kopplungsbedingungen zusammengeführt werden. Die algorithmische Umsetzung dieses Verfahrens ist anspruchsvoll und erfordert Validierung durch Simulationen und Messungen, die im Verlauf von SiM4diM durchgeführt werden konnte. In *Abbildung 5* und *Abbildung 6* wird dieses Modell mit Ergebnissen von aufwendigen, großen Simulationsgebieten verglichen. Sowohl im Nahfeld als auch im Fernfeld wird eine sehr gute Übereinstimmung erreicht. Ergebnisse hierzu wurden im Rahmen von [3] vorgestellt.

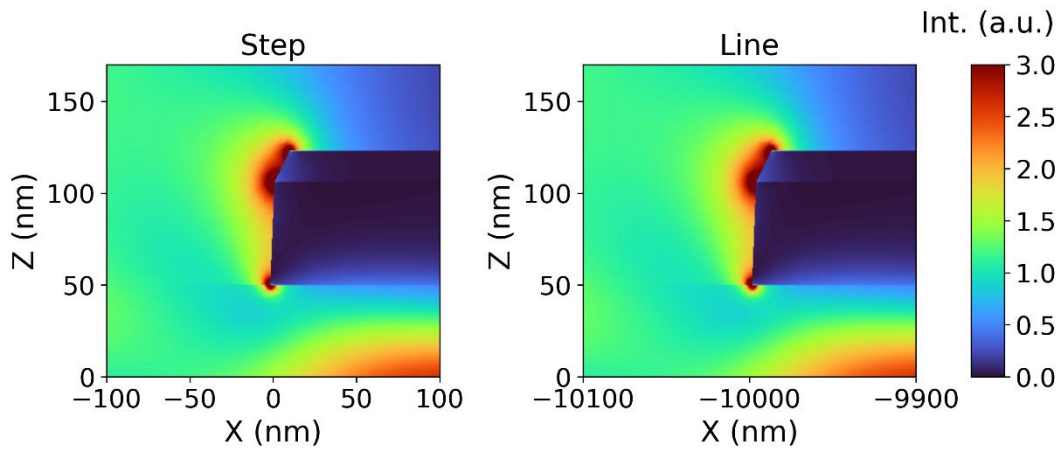


Abbildung 5 Intensität in der Nähe von einer Kante mit zwei verschiedene Simulationsverfahren. Links: Nur die stufenartige Kante wird simuliert, Rechts: ein kleiner Ausschnitt von einem sehr großen Simulationsgebiet, in dem die komplette Linienbreite simuliert wurde.

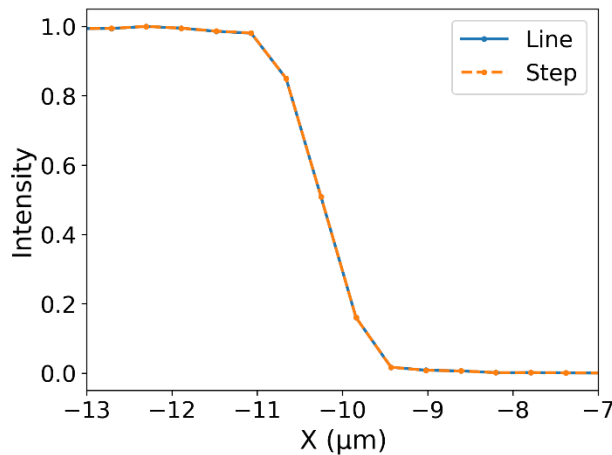


Abbildung 6 Simulation von Intensität einer Kante in der Bildebene mit zwei verschiedene Simulationsverfahren. Es wird Simulationen der stufenartigen Kante mit Simulationen von einem sehr großen Simulationsgebiet, in dem die komplette Linienbreite simuliert wurde, verglichen

AP 3: Parametrisierung realer Messobjektgeometrien und Materialien

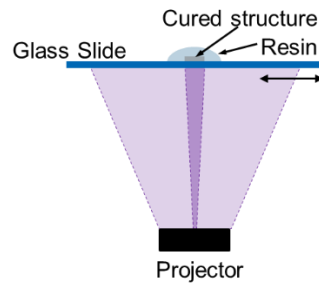
Die wesentlichen Schwerpunkte der Arbeiten der Hochschule Aalen (Zentrum für Optische Technologien) waren in diesem AP angesiedelt. Hierbei stand die die Realisierung von Mikro- und Sub-Mikrostrukturen, basierend auf der UV-Polymerisation von Acrylaten, sowie deren Charakterisierung mit dem hier entwickelten Verfahren und in Kombination mit unterschiedlichsten weiteren zur Verfügung stehenden Methoden im Vordergrund.

Für die Realisierung der Mikro- und Nanostrukturen wurden 4 Verfahren [4,5] untersucht und gegeneinander bewertet. Dabei basierten alle Verfahren auf der UV-Polymerisation von Acrylaten.

Verfahren 1: Realisierung und Untersuchung von Strukturen basierend auf dem Verfahren des double-patterning:

Für die Realisierung von Strukturen auf μm Skala wurde ein bereits vorhandenes eigen entwickeltes System basierend auf einer DLP³ Projektion von UV-Licht in Kombination mit einer Doppelbelichtung weiterentwickelt. Mit diesem konnten erfolgreich Strukturen bis zu einer minimalen Strukturbreite im einstelligen μm Bereich realisiert werden.

³ Digital Light Processing



Prinzip Projektor-basierter 3D-Druck

Abbildung 7: Projektionsschema des Doppelbelichtungsverfahrens. Ein Projektor belichtet Pixelweise kleine Segmente in einem UV-Polymer. Diese Härten durch die Belichtung aus.

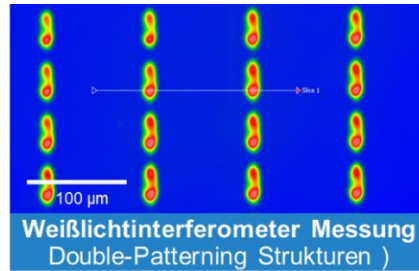


Abbildung 8: Weißlichtinterferometer-Messungen der Strukturen die durch das Doppelbelichtungsverfahren hergestellt wurden. Die Strukturen weisen Breiten im unteren Mikrometerbereich auf.

Verfahren 2: Realisierung und Untersuchung von Strukturen mit Hilfe Ink-Jet basierter Maskenprojektion:

Als zweites Verfahren wurde ein neuartiges Maskenprojektionssystem entwickelt. Dieses zeichnet sich dadurch aus, dass statt kostspieliger Chrom Masken Ink-Jet gedruckte Folien für die Abbildung verwendet werden können. Das System wurde dabei bewusst so ausgelegt, dass die Ränder der abzubildenden Strukturen mit einer gewissen „blurring-Funktion“ auf den Photolack abgebildet werden. Dadurch wird die Kante der abgebildeten Struktur bewusst im Lack defokussiert, d.h. verschwommen abgebildet. In Kombination mit einem nichtlinearen Photolack, welcher erst oberhalb eines bestimmten Schwellwertes polymerisiert, sind so deutlich schärfere Randstrukturen möglich, als es mit einer Ink-Jet gedruckten Maske zu erwarten wäre.

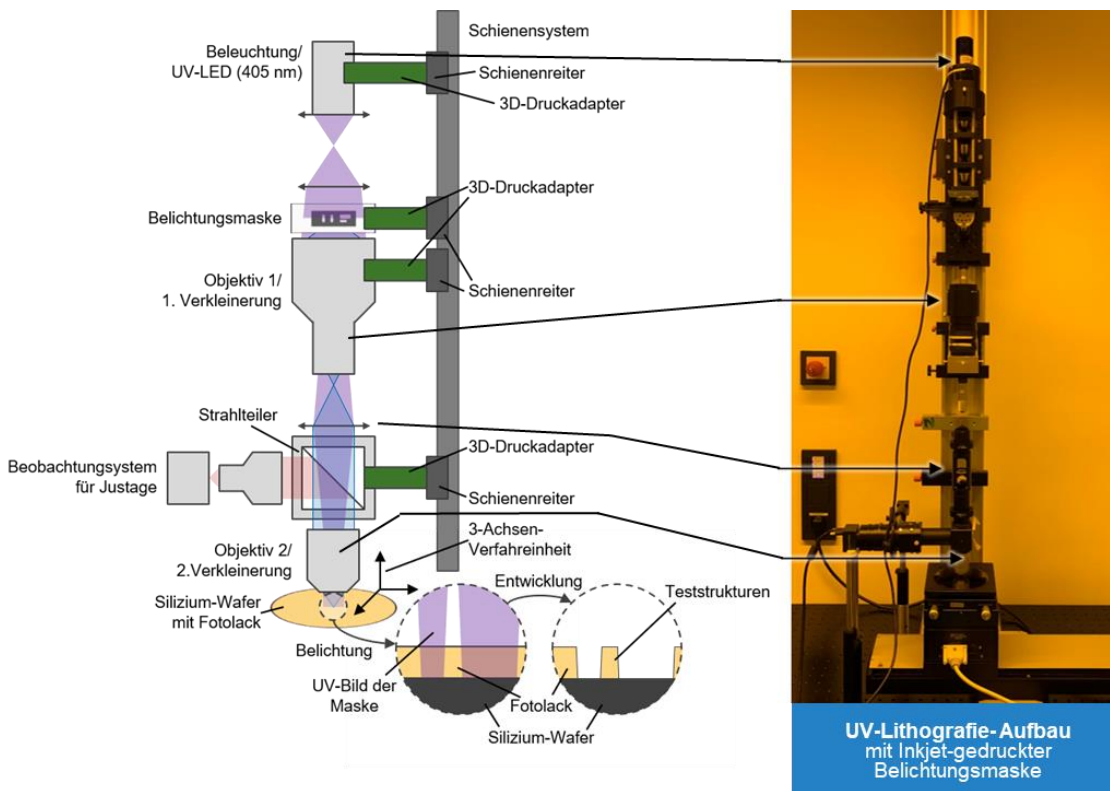


Abbildung 9: Aufbau zur Herstellung von Proben mittels UV-Maskenprojektion. Links ist eine Skizze des Versuchsaufbaus gezeigt, bei dem eine UV-Lichtquelle die teilweise transparente Belichtungsmaske homogen ausleuchtet. Das Bild der Belichtungsmaske wird über zwei Objektive als verkleinertes Bild im Fotolack abgebildet. Im Bild rechts ist der reale Aufbau zu sehen.

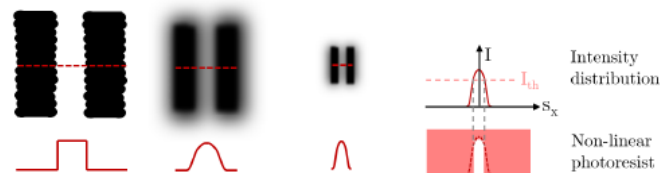


Abbildung 10: Prinzip der Abbildung von Ink-jet-Masken. Die undefinierten Kanten der Ink-jet-Maske (Links) werden bewusst unscharf und verkleinert im Fotolack abgebildet (Mitte). Durch das nicht-lineare Verhalten des Fotolacks wird nur ab einem Schwellwert entwickelt. So entsteht idealerweise wieder eine klar definierte Kante ohne Fehlerbilder des Ink-jet-Drucks.

Verfahren 3: Realisierung und Untersuchung von Strukturen mit Hilfe der 2-Photonen-Polymerisation:

Als drittes Fertigungsverfahren wurde die 2-Photonen-Polymerisation untersucht. Diese ermöglicht eine Strukturauflösung auf der 100nm Skala. Zusätzlich kann sie dazu verwendet werden, bewusst Defekte bzw. Abweichungen von der Referenzstruktur auf Nanometerskala in die Polymerproben einzubringen. Die Erkennung solcher Defekte mit Hilfe einer dimensionellen Messung, wie sie hier im Projekt betrachtet wurde, ist von hohem anwendungsorientiertem Interesse.

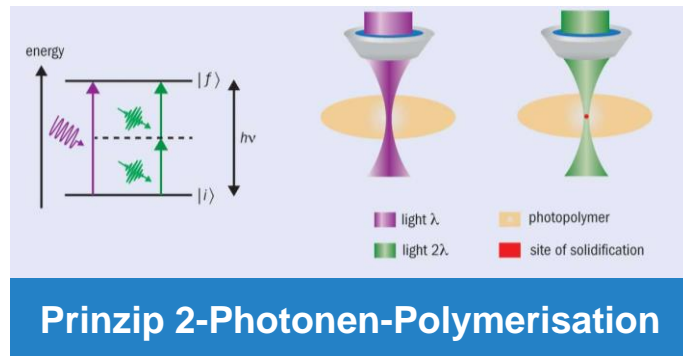


Abbildung 11: Kommerzielles Drucksystem für 2-Photonen-Polymerisation (Links) der Firma Nanoscribe. Schema der 2-Photonen-Polymerisation (Rechts). Durch einen Laser mit hoher Leistungsdichte werden zwei Photonen zeitgleich absorbiert. Die entsprechende Anregung im UV-Polymer entspricht nun der halben Wellenlänge (doppelte Energy). Da nur bei der halben Wellenlänge das Material aushärtet und die Wahrscheinlichkeit nur in einem sehr kleinen Bereich geben ist, können so Strukturen im Nanometerbereich hergestellt werden.

Verfahren 4: Realisierung und Untersuchung von Strukturen mit Hilfe der Nano-Imprint Lithographie

Als viertes Verfahren fand die Nanoimprint-Lithographie ihre Anwendung. Mit dieser können Kleinserien von 3dimensional geformten Elemente -wie sie z.B. für optische Anwendungen wichtig sind- realisiert werden. Ausgangspunkt bildet dabei ein Master, welcher mit den drei oben erwähnten Verfahren hergestellt wurde. Dieser wird dann mit Hilfe der Imprinting Lithographie vervielfältigt. Aber auch dieses Verfahren bringt inhärente Fertigungsfehler mit sich, so dass auch hier eine entsprechende Messtechnik notwendig ist, um diese zu detektieren.

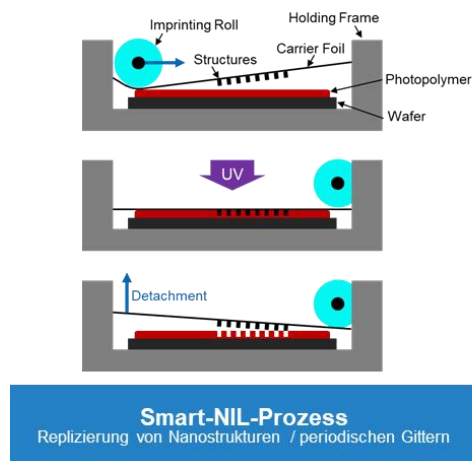
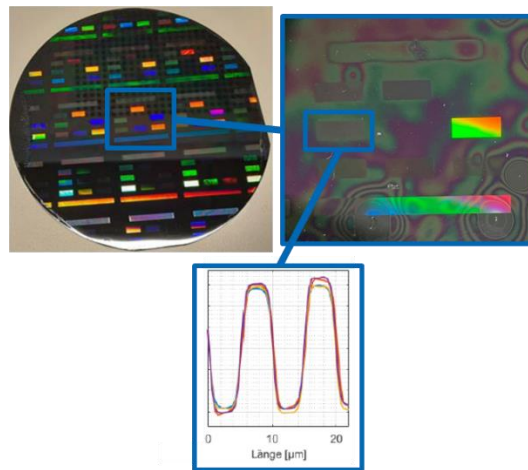


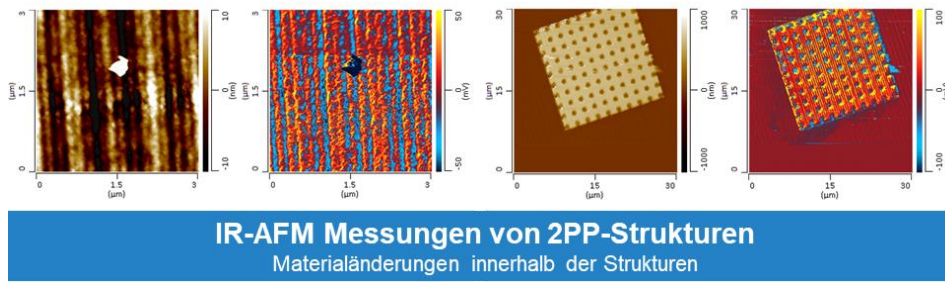
Abbildung 12: Schema der Replizierung von Nanostrukturen mittels (Smart-)NIL (Links). Mittels einer Walze werden Strukturen auf einer flexiblen Folie in flüssiges UV-Polymer gedrückt. Mittels UV-Belichtung wird das flüssige Polymer ausgehärtet. Nach abziehen der Folie bleiben die eingepprägten Strukturen als Negativ zurück. Lichtbild der Anlage mit der nanoskalige Strukturen repliziert wurden (Rechts).



Periodisch Teststrukturen
Repliziert durch Nanaimprint-Lithografie

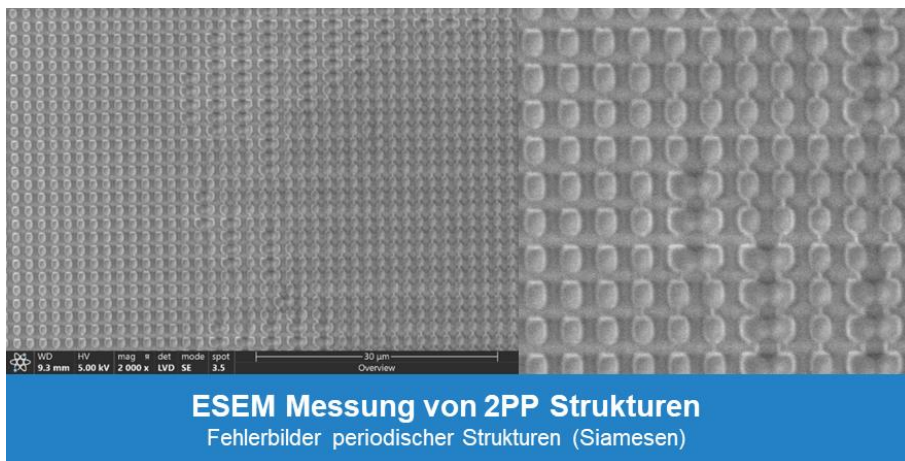
Abbildung 13: Lichtbild von replizierten Teststrukturen die mit dem NIL-Verfahren gefertigt wurden (Oben Links). Eine Teststruktur besteht aus Gittern mit konstanter Höhe und variierenden Gitterperioden (Oben Rechts). Die Profilmessung einer dieser Gitterstrukturen (Unten Mitte) zeigt Strukturbreiten im unteren Mikrometerbereich. Die Höhe der Strukturen beträgt 100 nm.

Beispiel Vergleich verschiedener Messverfahren:



IR-AFM Messungen von 2PP-Strukturen
Materialänderungen innerhalb der Strukturen

Abbildung 14: IR-AFM Messungen an Strukturen die mittels 2-Photonen-Polymerisation hergestellt wurden. In den beiden linken Bildern ist die Messungen an einer planen Fläche gezeigt. Es sind die einzelnen Schreibleinien im Abstand von 200 nm des Drucksystems zu erkennen. Die gemessene Oberfläche ist im ersten Bild zu sehen. Im zweiten Bild sind die Unterschiede in des Polymerisationsgrad zu sehen. In den zwei Rechten Bilder ist die Messung einer Teststruktur gezeigt. Die Struktur besteht aus einem Rechteck mit periodisch angeordneten Löchern, mit einem Durchmesser von 1 µm.



ESEM Messung von 2PP Strukturen
Fehlerbilder periodischer Strukturen (Siamesen)

Abbildung 15: ESEM-Aufnahmen von Strukturen die mittels 2-Photonen-Polymerisation hergestellt

wurden. Die Soll-Struktur war ein regelmäßiges Gitter aus zylindrischen Pfeilern. In den Messungen ist zu erkennen, dass die Strukturen zum einen oval sind. Zum anderen ist zu erkennen, dass im Zentrum des Schreibfeldes die Strukturen aufgrund des „Proximity-Effekts“ sich verbinden.

Tabelle 1: Tabellarischer Vergleich der angewandten Messverfahren zur Probenparametrisierung. Dargestellt sind die experimentell ermittelte Auflösung in lateraler und gegebenenfalls in axialer Richtung, sowie der maximale Messbereich bei der entsprechenden Auflösung.

	AFM	ESEM	WLI	OCT	μ CT
Auflösung lateral (/ axial) [nm]	4 / <1	24	162 / 1	538	183
Messbereich [μ m]	2	36	165	161	317

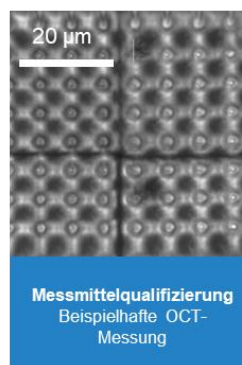
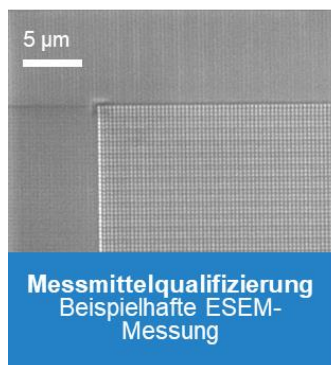
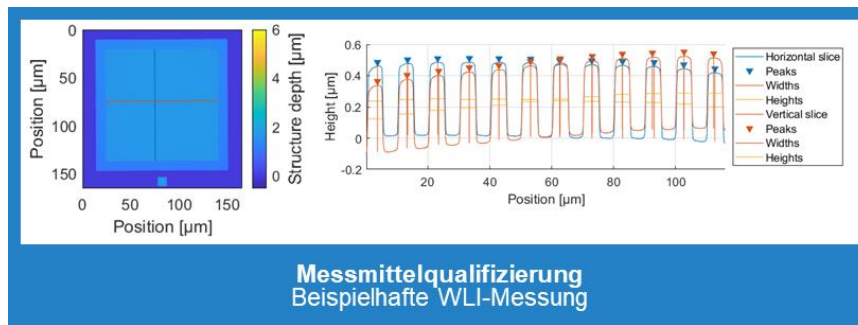
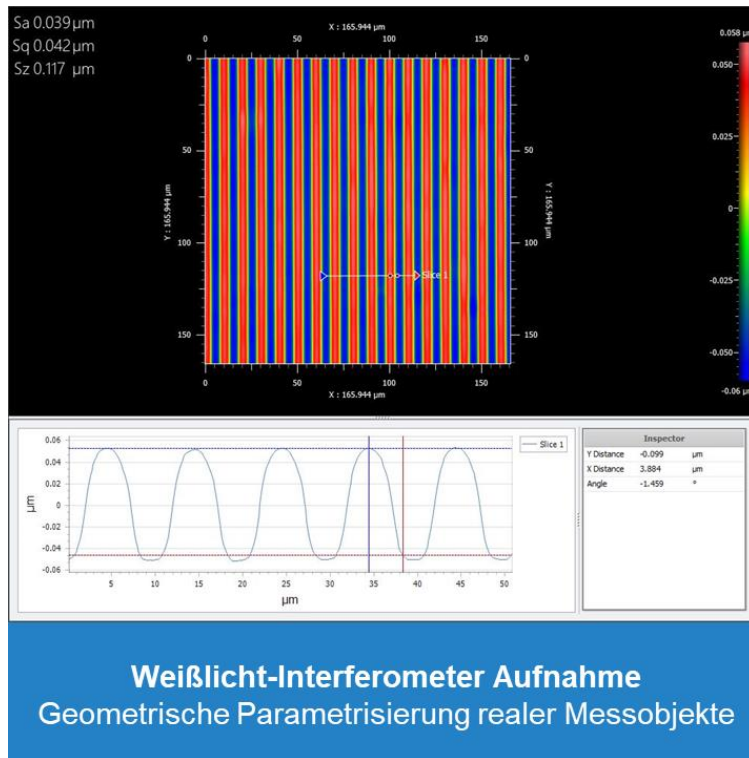


Abbildung 16: 2D- und Profil-Weißlichtinterferometer-Messungen (Oben) an Strukturen die mittels 2-Photonen-Polymerisation hergestellt wurden. Typisches Fehlerbild von ESEM-Aufnahmen (Unten Links) die sich aufgrund von Ladungsträgeransammlung an Ecken als Oberflächenabweichung zeigen. Die OCT-Messung (Unten Rechts) misst indirekt die Materialdichte innerhalb der Probe. Hier zeigt sich, dass der „Proximity-Effekt“ sich nicht nur in einer Formabweichung, sondern auch als variierender Polymerisationsgrad innerhalb der Struktur zeigt.



Weißlicht-Interferometer Aufnahme
Geometrische Parametrisierung realer Messobjekte

Abbildung 17: Weißlichtinterferometer-Aufnahmen für die Parametrisierung periodischer Messobjekt. Das Messobjekt ist hierbei ein regelmäßiges Gitter mit einer Höhe von 100 nm und einer Periode von 5 μm .

Beispiel Auswertung einer Einzelstruktur:

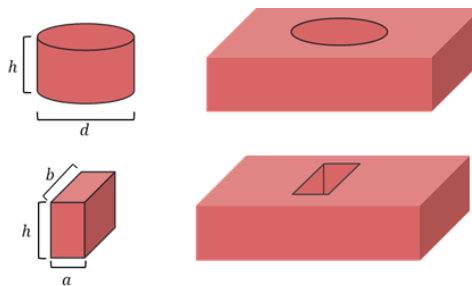


Abbildung 18: Messobjektdesign realer aperiodischer Strukturen. Als Messobjekte wurden Zylinder aufgrund der Rotationssymmetrie und Quader aufgrund der simplen Parametrisierung gewählt. Beide Objekttypen wurden als Positiv- wie auch als Negativ-Form hergestellt.

Tabelle 2: Dimensionen der aperiodischen Messobjekte aus Abbildung 16 & Abbildung 17. Von jedem Geometrietyp wurden drei Größen gefertigt. Die Zylinder unterscheiden sich hierbei im Durchmesser d und die Quader in der Länge b .

	h [μm]	d [μm]	b [μm]	a [μm]
#1	5	56	56	7
#2	5	26	28	7
#3	5	12	7	7

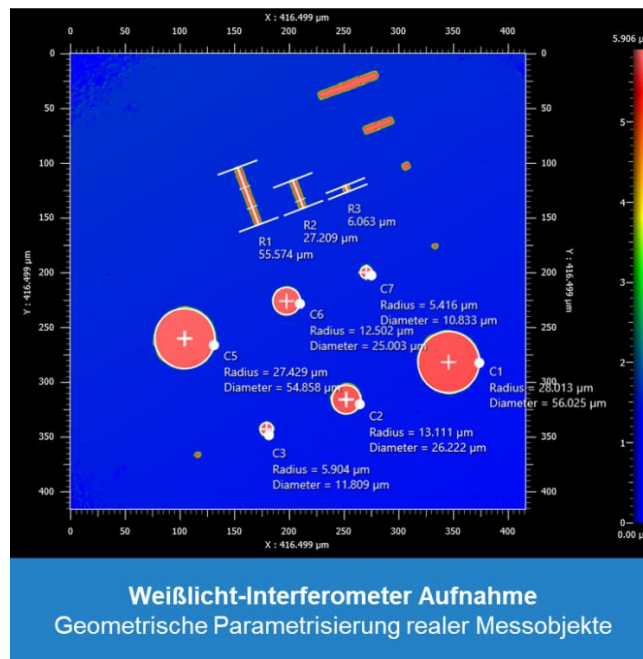


Abbildung 19: Weißlichtinterferometer-Messung der aperiodischen Messobjekte. Die Messobjekte wurden im mit dem Ink-Jet-Maskenbelichtungsverfahren gefertigt.

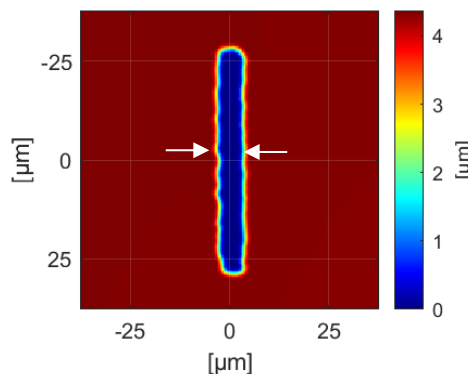


Abbildung 20: Extrahierte Geometrie aus den Weißlichtinterferometer-Messungen. Mittels dieser extrahierten Daten kann eine ausreichend genaue Parametrisierung der Linienbreite erstellt werden. Die ermittelte Halbwertsbreite in diesem Beispiel liegt bei $6.11 \pm 0.4 \mu\text{m}$.

Die realisierten Proben wurden in enger Zusammenarbeit mit den Projektpartner definiert. Des Weiteren wurden sie sowohl an dem in der PTB entwickelten Demonstrator, als auch beim industriellen Partner Carl Zeiss analysiert. Ebenso dienen die Modellstrukturen als Vorlage für die Simulationen bei JCMwave [6].

AP 4: Fokussierkriterien und -algorithmen

Im Rahmen des Projekts wurde eine modellbasierte Auswertung durchgeführt, um die Linienbreite der untersuchten Probenstruktur zu bestimmen. Diese Auswertung basierte auf einem Vergleich der experimentell gemessenen Bilder mit den rigorosen Simulationen, die mit der JCMsuite durchgeführt wurden. Die z-Ebene, in der das schärfste Bild der Probe gemessen werden kann, wird als das fokale Bild bezeichnet. Die Identifikation des fokalen Bildes ist für die Auswertung von entscheidender Bedeutung, da sie eine Schnittstelle zwischen der Messung und der Simulation darstellt. Denn sowohl in der Messung als auch in der Simulation werden immer Bilderstapel erzeugt, die entlang der z-Achse gleichmäßig verteilt sind. Und in beiden Bilderstapeln, die auch als Fokussierien bezeichnet werden, liegt auch immer jeweils ein fokales Bild vor.

Die Identifikation des fokalen Bildes in den Fokussierien kann entsprechend vieler verschiedenen

mathematischen Vorschriften erfolgen. Hier bieten sich umfangreiche Algorithmen an, wie die maximale Entropie, Varianzen, oder Gradientenverfahren, um nur ein paar wenige aufzuzählen. Diese Verfahren werden häufig in der Untersuchung von komplizierten biologischen Proben eingesetzt. Da im Rahmen dieses Projektes aber fast ausschließlich relativ simple Linienstrukturen untersucht worden sind, konnte auch mit dem relativ einfachen Fokuskriterium der Standardabweichung konsistent sehr gute Ergebnisse erzeugt werden. In Abbildung 19 wird eine gemessene Fokussiererei einer 1 μm breiten Linie entlang der xz-Achse dargestellt. Die einzelnen Bilder entlang der z-Achse sind hier in Abstände von 50 nm aufgenommen worden. Insgesamt sind 81 Bilder in der Fokussiererei über einen z-Bereich von 4 μm . Durch die Anwendung der Standardabweichung konnte das fokale Bild bestimmt werden, das mit $z = 0 \mu\text{m}$ bezeichnet wurde. Weitere Ebenen sind in gleichmäßigen Abständen markiert und werden in den folgenden APs 5, 7, 8 und 12 weiter beschrieben.

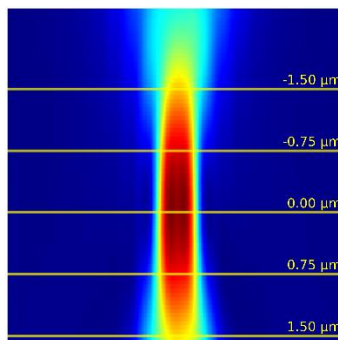


Abbildung 21: Darstellung einer gemessenen Fokussiererei einer 1 μm breiten Linie entlang der xz-Achse mit dem fokalen Bild bei $z = 0 \mu\text{m}$. Entnommen aus [7]

Rekonstruktionsmethoden zur Bestimmung der Messobjektparameter

AP 5: Aufbereitung der Bilddaten

Der bisherige Stand der Technik bei der optischen modellbasierten Bestimmung von Linienbreiten sieht ein Schwellenwertverfahren vor, wie es bei dem Vergleich zu den verwendeten Simulationstools in AP 1 beschrieben worden ist. Der simulierte Schwellenwert wird hierbei auf das gemessene Intensitätsprofil übertragen und ermöglicht dadurch eine Bestimmung der Linienbreite. Im Rahmen von SiM4diM wurde dieses Verfahren weiterentwickelt. Anstelle einer Auswertung an nur zwei Intensitätsniveaus im gemessenen Linienprofil, wurde im Verlauf es Projektes ein wesentlich stabileres Verfahren entwickelt, das die Simulationen über das gesamte gemessene Profil anfährt und dabei neben der fokalen Ebene auch afokale Ebenen berücksichtigt.

AP 6: Optimierungsalgorithmen auf Basis von Methoden des Maschinellen Lernens

Für die hochgenaue Kantenlokalisation müssen simulierte Bilddaten an die gemessenen und aufbereiteten Daten iterativ angepasst werden, indem Systemparameter gezielt variiert werden. Klassische Methoden benötigen meist sehr viele Vorwärtssimulationen, um den besten Parametersatz zu bestimmen. Daher wurden im Rahmen dieses Projektes die *Bayesian Target vector Optimization (BTVO)* für die Optimierung der Simulationen an die Messung ausgewählt. BTVO hat sich bei vergangenen Untersuchungen des Partners JCMwave mehrfach gegen konkurrierenden Verfahren für optische Probleme als schnellstes und genauestes Optimierungsverfahren durchgesetzt.

Fokussierenauswertungen

AP 7: Charakterisierung von Systemaberrationen

Optische Aberrationen sind Abweichungen von idealen optischen Eigenschaften, die in optischen

Mikroskopen auftreten und die Bildqualität beeinträchtigen. Diese Aberrationen können verschiedene Formen annehmen und entstehen aus einer Vielzahl von Ursachen, einschließlich der Komplexität und Justage von Linsensystemen und den Eigenschaften von Licht. Diese Aberrationen können geeignete Justagemaßnahmen reduziert werden, aber nie vollständig entfernt werden. Dementsprechend wurde in Rahmen von SiM4diM ein Verfahren entwickelt, das in der Lage ist optische Aberrationen eines optischen Mikroskops mit einer inversen Verfahrens zu bestimmen. Dieses Vorgehen ist in der Veröffentlichung [8] näher beschrieben.

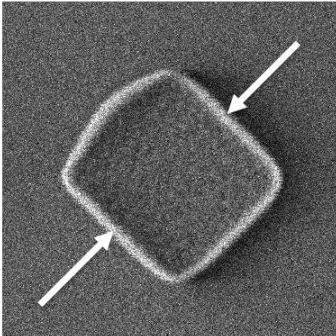


Abbildung 22:
Rasterelektronenmikroskop-
messung des verwendeten
Chrompunktes

Das grundlegende Prinzip beruht auf der Messung einer Punktquelle in der Objektebene. Wenn dieses Objekt ausreichend klein ist und eine Näherung als Punktquelle zutrifft, kann davon ausgegangen werden, dass das gemessene Intensitätsbild hauptsächlich durch die *Punktspreifunktion (PSF)* des abbildenden Systems beeinflusst ist. Diese PSF beschreibt wiederum den Einfluss optischer Aberrationen des abbildenden Systems. Wenn Simulationen an die gemessenen Bilder einer Punktquelle angepasst werden, wobei ausschließlich die optischen Aberrationen im Abbildungssystem des optischen Mikroskops variiert werden, liefern die Aberrationsparameter, die zum besten Anpassungsergebnis dieser Optimierung fhren, einen Ausdruck fr die optischen Aberrationen des Messsystems. Die Bercksichtigung der optischen Aberrationen in der JCMSuite erfolgt in Form von *Zernike Polynomen*. Fr dieses Verfahren wurde ein kleiner ca. 180 nm breiter Chrompunkt mit dem PTB-Messsystem vermessen.

Der Chrompunkt ist in Form einer Rasterelektronenmikroskopmessung (engl. SEM) in Abbildung 22 dargestellt, whrend die 5 fr die Auswertung verwendeten z-Ebenen in Abbildung 23 gezeigt sind. Die z-Ebenen haben einen Abstand von 1 μm zueinander. Unter den Messungen in der oberen Reihe sind Simulationen des Chrompunktes aufgefhrt, die ohne den Einfluss von optischen Aberrationen durchgefhrt worden sind. Die Asymmetrien der Messungen sind in den Simulationen darunter nicht vorhanden und sind auf optische Aberrationen zurckzufhren.

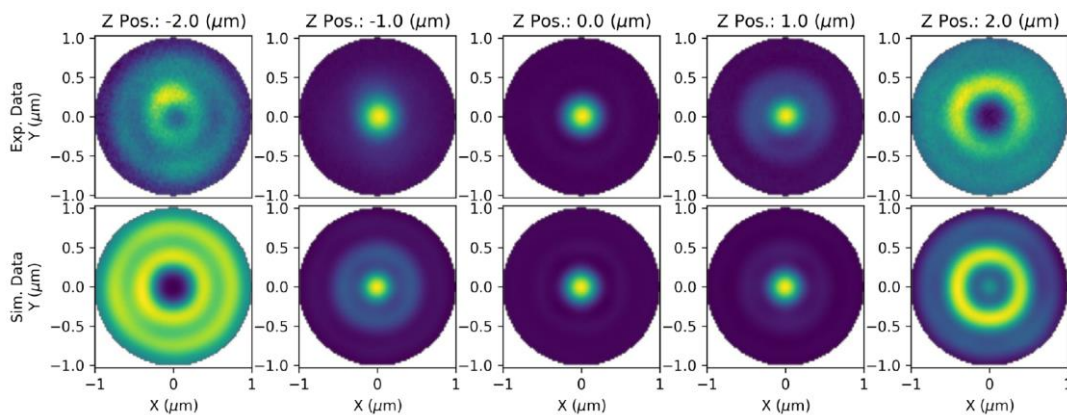


Abbildung 23: Gegenberstellung der 5 gemessenen und (aberrationsfrei) simulierten Bilder der Chrompunktes

Durch die Anwendung dieses inversen Verfahrens zur Bestimmung der optischen Aberrationen konnten Zernike-Koeffizienten ermittelt werden. Die Bercksichtigung dieser Koeffizienten in der Bildsimulation fhrt zu Intensittsbildern, wie sie in Abbildung 24 dargestellt sind. Bei diesen zweidimensionalen Simulationen erwies sich die angewandte BTVO als uerst effizient. Die Ergebnisse der Simulationen zeigen nun die gleichen Asymmetrien wie die Messungen auf. Die Schlussfolgerung daraus ist, dass mit diesem Verfahren die optischen Aberrationen des PTB-Messsystems erfolgreich charakterisiert wurden.

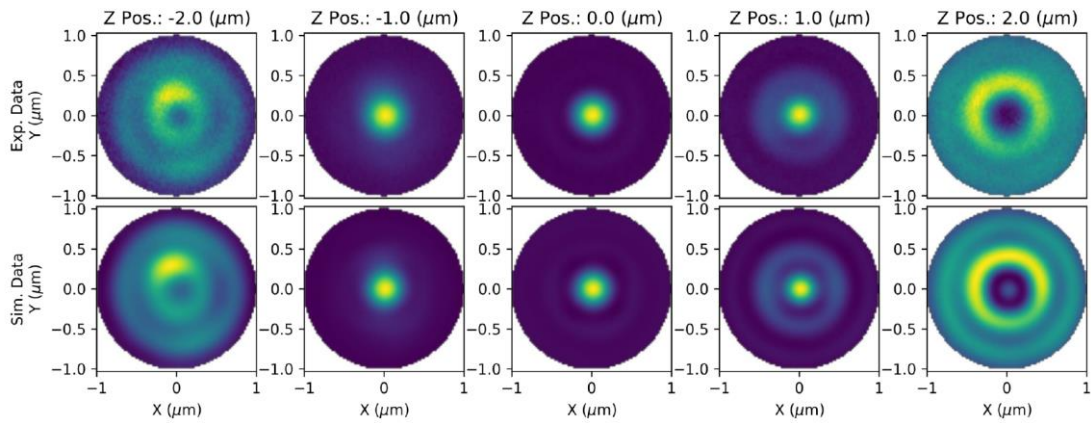


Abbildung 24: Gegenüberstellung der gemessenen und der aberrierten simulierten Bilder des Chrompunktes. Entnommen aus [8]

Nach der erfolgreichem Implementation dieses Verfahrens wurde festgestellt, dass die Asymmetrien in den afokalen Bildebenen allerdings nicht nur durch optische Aberrationen hervorgerufen werden können, sondern auch durch Asymmetrien der Geometrie des Chrompunktes. Dies ist in Abbildung 25 näher veranschaulicht. Dort wird durch einen direkten Vergleich deutlich, dass eine Asymmetrie in der Geometrie des Chrompunktes in afokalen Bildebenen zu einer Asymmetrie des Intensitätsprofils führen kann. Diese Erkenntnis steht nicht im Widerspruch zu dem voran beschriebenen Verfahren. Mit diesem kann weiterhin ein Ausdruck für die optischen Aberrationen ermittelt werden. Allerdings ist nun eine hoch genaue Charakterisierung der Chrompunktgeometrie absolut notwendig.

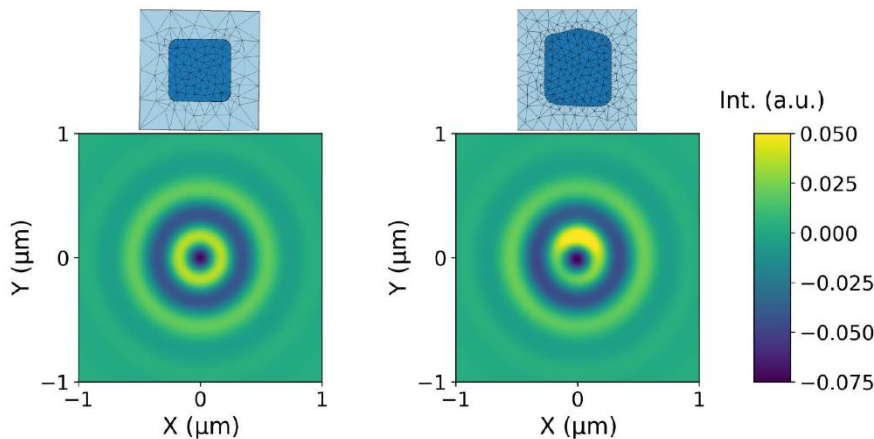


Abbildung 25: Visualisierung des Einflusses von asymmetrischen Objektgeometrien auf die Intensitätsverteilung von afokalen simulierten Mikroskopbildern

AP 8: Algorithmen zur Nutzung afokaler Bildinformationen

Die Nutzung afokaler Ebenen wurde bereits in vorherigen Abschnitten besprochen (AP 5) und in späteren Abschnitten (AP 7) angewendet. Die Einbeziehung dieser zusätzlichen Ebenen erhöht das Vertrauen in die Ergebnisse der Optimierung. Darüber hinaus werden die hier zusätzlich berücksichtigten z-Ebenen bereits für die Bestimmung des fokalen Bildes erfasst. Folglich nutzt die modellbasierte Auswertung von Sim4diM Bilddaten, die nicht gesondert erfasst werden müssen und anderweitig bei früheren Verfahren möglicherweise einfach ignoriert worden wären.

Aufbau eines Demonstrators

AP 9: Konzeption des gesamten modellbasierten Messverfahrens

Im Rahmen dieses APs wurden alle Parameter des PTB-Mikroskops und einer passenden Photomaske

zusammengetragen. Die Parameter umfassen die Beleuchtungs-, und Abbildungseigenschaften des verwendeten Mikroskops und die geometrischen und optischen Eigenschaften einer Probe mit unterschiedlich breiten Chromlinien auf einem Glassubstrat. Aufgrund der Erkenntnisse der APs 7 und 8 wurde hier für einen ersten Test von einem vollständig aberrationsfreien Messsystem ausgegangen.

Diese Daten stellen Eingangsparameter für die Auswertung der Messung an den einzelnen Linienstrukturen der modellbasierten Auswertung dar. Eine schematische Darstellung des Messablaufes ist in Abbildung 26 gezeigt. Der durch die modellbasierte Auswertung zu bestimmenden Strukturparameter ist die Linienbreite (engl. CD).

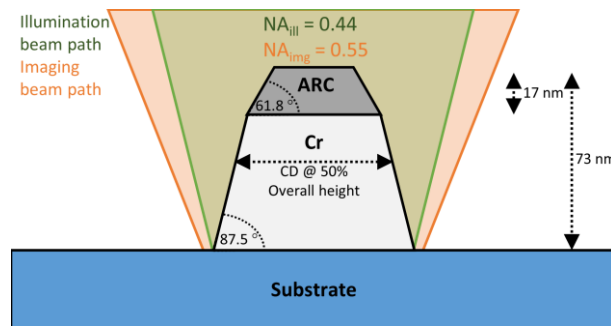


Abbildung 26: Darstellung einiger Mikroskop-, und Probenparameter am Beispiel eines Einzellinienquerschnitts. Entnommen aus [7]

AP10: Implementierung des Software-Demonstrators

In Abbildung 25 ist der gesamte Workflow der modellbasierten Auswertung dargestellt. Eine ausführliche Beschreibung des gesamten Prozesses ist in [7] gegeben. Prinzipiell beruht die Auswertung auf der BTVO, indem die gemessenen Fokussierungen und simulierten Fokussierungen in jeder Iteration der Optimierung miteinander verglichen werden. Hierbei werden statistische Auswahlmethoden namens Gauß-Prozessen verwendet, die für jede Iteration, auf Basis aller vorherigen Iterationen geeignete Parameter auswählen. Um das Verfahren grundlegend zu testen, wurde es auf das PTB-Mikroskop und die wohl definierte Probe aus AP 9 angewandt. Die Ergebnisse folgend in den APs 11 und 12.

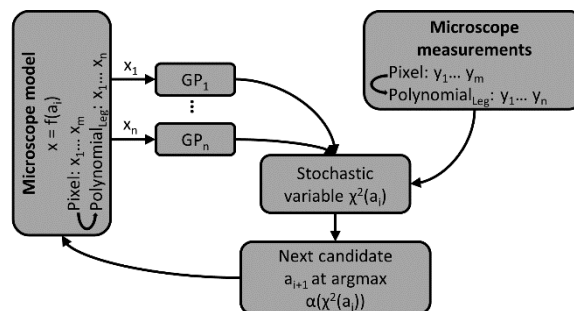


Abbildung 27 Workflow der modellbasierten Auswertung von optischen bidirektionalen Messungen

AP11: Test und Validierung der Systemmodellierung und Parameterrückführung

Am Beispiel einer nominal 1 µm breiten Chrom Linie und unter den Parametern die in AP 9 und in der Veröffentlichung [7] definiert sind wird in diesem AP das Verfahren demonstriert. Der Workflow entspricht hierbei der Beschreibung in AP [10]. Die BTVO optimiert das Simulationsmodell über einen vorher festgelegt Anzahl an Iterationen. Der Optimierungsalgorithmus ist in der Lage einige wenige Parameter des Simulationsmodells anzupassen, um eine bestmögliche Übereinstimmung mit den Messungen zu erhalten. Einige dieser Optimierungsparameter beziehen sich auf die Normierung der simulierten Fokussierungen, einen Versatz entlang der z-Achse, um die gemessenen und simulierte

Fokussiererei zueinander abzustimmen, und die Linienbreite. Die allgemeine Schlussfolgerung ist hier, dass das beste Optimierungsergebnis den richtigen Linienbreitenwert verwendet hat.

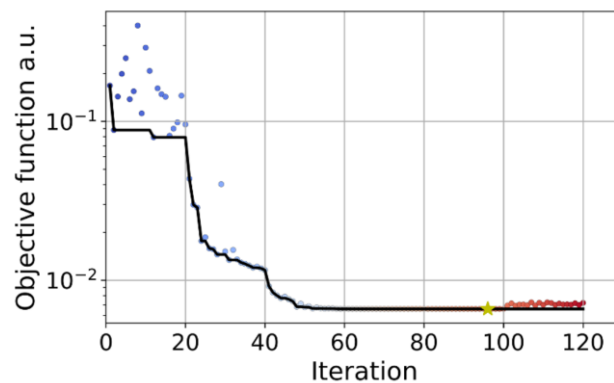


Abbildung 28: Optimierungsverlauf der BTVO für die nominal 1 µm breite Einzellinie. Entnommen aus [7]

Der Fortschritt der Optimierung ist in Abbildung 28 aufgezeigt. Dort ist zu sehen, wie die Differenz zwischen der Messung und der Simulation über die Iterationen minimiert wird. Der Stern markiert das beste Ergebnis der Optimierung und wurde nach ca. 90 Iterationen erreicht.

Bei dieser Auswertung wurden 5 gemessene z-Ebenen ausgewertet, die in Abständen von 0.75 µm aufgenommen worden sind und das fokale Bild bei z = 0 mm beinhalten. Ein Vergleich der jeweiligen Messebenen mit den dazugehörigen Optimierungsergebnissen und den jeweiligen Differenzprofilen ist in Abbildung 29 gegeben. Die Übereinstimmung ist über alle 5 z- Ebenen sehr gut. Die Residuen betragen nie mehr als 5 %.

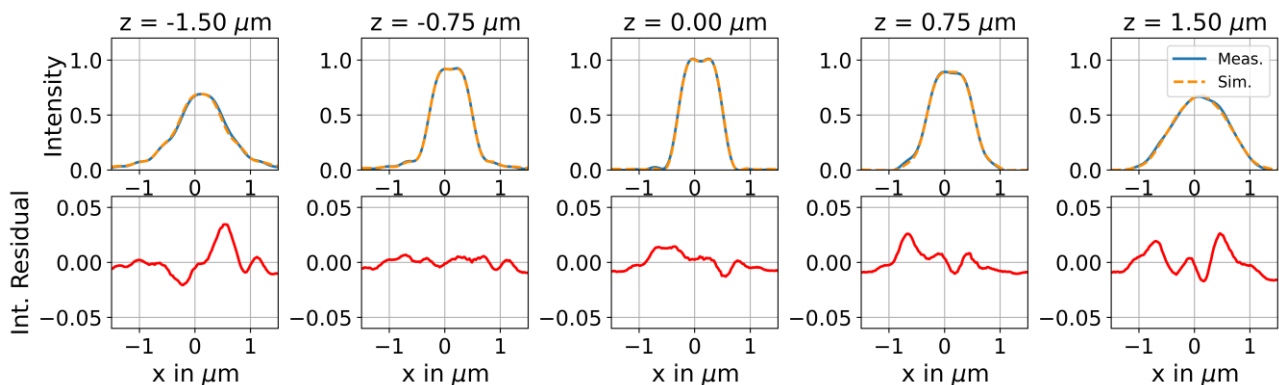


Abbildung 29: Optimierungsergebnisse. Entnommen aus [7]

AP 12: Test-Fokussiererienauswertung

Das Linienbreiten Ergebnis der vorangegangenen Untersuchung aus AP 11 ist zusammen mit den Ergebnissen für andere Linienbreiten zwischen 300 nm und 780 nm in Tabelle 3 aufgeführt. Dort findet ein Vergleich mit anderen metrologischen Messverfahren wie SEM, der Rasterkraftmikroskopie (engl. AFM) und einer schwellenwertbasierten optischen Mikroskopiemessung (OM) an einem anderen PTB-Mikroskop statt. Die Messungen wurden von der PTB oder dem National Institut of Technologies (NIST - USA) in einem vorherigen Vergleich durchgeführt. Im Rahmen von SiM4diM wurden Messungen an der gleichen Probe unternommen, um so eine Verknüpfung zu den bestehenden Ergebnissen herzustellen. Die bestehenden Ergebnisse zeichnen sich durch metrologische, erweiterte Unsicherheitsbudget ($k = 2$) aus. Ein solches Budget befindet sich noch in der Anfertigung für das PTB-Mikroskop im Rahmen von SiM4diM. Für eine bessere Einordnung der Ergebnisse von SiM4diM wurden hier die Standardabweichungen der Optimierungsparameters angegeben, der später auch in das Messunsicherheitsbudget einfließen

wird. Der letzte Vergleichswert basiert auf einer 50% Schwellenwertauswertung der im Rahmen von SiM4diM gemessenen fokalen Intensitätsbilder.

Die hervorragende Übereinstimmung der SiM4diM-Ergebnisse mit den bestehenden Werten validiert die vorgestellte Methode. In Bezug auf die vorangegangenen Mikroskopmessungen der PTB ist anzumerken, dass dort ein Messsystem mit einer sehr viel höheren Abbildungs-NA von 0.9 verwendet worden ist. Diese entspricht im Vergleich zu dem SiM4diM System mit einer Abbildungs-NA von 0.55 einem Auflösungsvorteil. Dieser Vorteil konnte allerdings anscheinend aufgrund der weiterentwickelten Auswertemethode ausgeglichen werden. Die naive Bestimmung der Linienbreite an dem Intensitätsniveau von 50% liefert für alle Linienbreiten grobe Fehler und schließt dadurch naive Auswertemethoden für die Bestimmung optischer bidirektionaler Messungen sofort aus.

Tabelle 3: Vergleich der Messergebnisse verschiedener Messmethoden. Das optische SiM4diM Verfahren erreicht für CD-Breiten > 580nm ähnlich genaue Ergebnisse wie aufwendige AFM und SEM Messungen. Entnommen aus [7]

Nominal CD in nm	300	400	500	580	780	1000
NIST, CD-AFM	269.0 ± 3.0	367.1 ± 3.5	470.6 ± 6.5	546.1 ± 3.9	746.3 ± 3.6	965.1 ± 3.9
PTB, CD-AFM	264.2 ± 2.5	362.1 ± 2.5	463.3 ± 2.5	543.0 ± 2.6	743.7 ± 2.8	961.8 ± 3.1
PTB, CD-SEM	263.3 ± 5.7	362.9 ± 5.8	463.6 ± 6.0	543.2 ± 6.1	743.3 ± 6.4	962.3 ± 6.9
PTB, UV-OM	270 ± 20	372 ± 20	470 ± 20	552 ± 20	747 ± 20	966 ± 20
SiM4diM	252 ± 16	354 ± 16	462 ± 8	539 ± 6	743 ± 4	962 ± 4
Threshold _{Int} at 50 %	303	327	373	420	630	817

2. Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Im Folgenden sind die wichtigsten Positionen der Projektausgaben inklusive Overheadkosten für die geförderten Projektpartner aufgelistet.

	Personalkosten in T€	Reisekosten in T€	Verbrauchsmaterial in T€
JCMwave	543,6	4,0	0,0
PTB	188,7	7,3	0,0
HS Aalen	109,1	2,9	14

3. Notwendigkeit/ Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Im Rahmen des Projekts SiM4diM wurden konkrete Ziele formuliert, die darauf abzielten, die Simulationsfähigkeiten für den Einsatz von digitalen Zwillingen von optischen Mikroskopen in der Messtechnik zu verbessern. Dabei wurden verschiedene Herausforderungen identifiziert, darunter die Adaption von erweiterten Simulationsvolumina, die Produktion von Messobjekten, und die Optimierung von Simulationsmodellen. Um diese Ziele zu erreichen, wurden innovative Methoden wie maschinelles Lernen und parallele Rechenverfahren in Kombination mit Messungen von höchst genauen optischen Instrumenten eingesetzt. Hierbei wurden Messstrukturen sowohl auf gut definierte Photomasken sowie auf Prototypen von Polymermasken untersucht.

Während der Laufzeit des Projekts wurden signifikante Fortschritte erzielt, darunter die Entwicklung neuer Simulationsmodelle und die Validierung dieser Modelle anhand experimenteller Daten. Darüber hinaus wurde eine benutzerfreundliche Simulationsumgebung geschaffen, die es Forschern

ermöglicht, komplexe Materialsysteme effizient zu untersuchen.

Die geleisteten Projektarbeiten erwiesen sich als notwendig und angemessen, da sie maßgeblich zur Erreichung der Projektziele beitrugen. Sie trugen nicht nur dazu bei, das Verständnis von Materialverhalten zu vertiefen, sondern legten auch den Grundstein für zukünftige Entwicklungen im Bereich der digitalen Materialmodellierung.

4. Verwertbarkeit der Ergebnisse/ Verwertungsplan

Die wirtschaftliche Verwertung der Projektergebnisse liegen bei den industriellen Projektpartnern. Seitens der Hochschule steht vor allem die wissenschaftlich-technische Verwertung im Vordergrund. Hier ist zunächst einmal die Stärkung der Profilierung der Arbeitsgruppe im Bereich der additiven Fertigung von Polymeren zu nennen. Eine Differenzierung der Arbeitsgruppe ist dabei vor allem durch die Entwicklung eigener individuelle Drucksysteme möglich. Dazu konnte einerseits durch das Projekt das Themenfeld der Doppelbelichtung weiter vorangetrieben werden. Andererseits wurde ein neues maskenbasiertes System basierend auf kostengünstigen Ink-Jet Folien entwickelt. Beide Verfahren sollen für bereits aktuell laufende und zukünftige Projekte eingesetzt werden.

Ein weiteres Projektergebnis ist auch die Ermöglichung der Ausbildung von Studierenden. So konnte z.B. Frau Selina Burkert ihren Forschungsmaster durch das Projekt absolvieren (Entwicklung des Ink-Jet Masken Druckverfahrens). Ein weiteres Beispiel ist die Verwendung der Projektergebnisse für die Promotion von H. Eder.

Im Verlauf von SiM4diM konnten die bestehenden Kapazitäten der PTB im Rahmen der Strukturbreitenmessung analysiert und schrittweise erweitert werden. Dies gilt sowohl für experimentelle Charakterisierungen der Messsysteme als auch für fortgeschrittene Auswertemethoden. Die Ergebnisse von SiM4diM werden langfristig in die Kalibrierdienstleistungen der PTB integriert. Im Bereich der Strukturbreitenkalibrierung für PTB-Kunden stehen nun sowohl neu entwickelte experimentelle Techniken wie die NA-Bestimmung der eingesetzten Messgeräte, als auch weiterentwickelte Auswertemethoden, unter Verwendung der *Bayesian Target Vector Optimization*, zur Verfügung. Die vielen Ergebnisse und Erkenntnisse des Projektes fließen weiterhin in die Dissertation des PTB- Doktoranden Jan Krüger ein.

Die in SiM4diM entwickelte Verbesserungen der Software JCMSuite machen die Software für Kunden von JCMwave im Bereich Mikroskopie und Nanotechnologie attraktiver. Die neue Funktionalität, mittels derer man das Simulationsgebiet erheblich erweitern kann (AP2), ist zurzeit ein Alleinstellungsmerkmal im Gebiet der Nanooptik. Weil dieses Verfahren allgemein anwendbar ist, kann es sowohl in die Metrologie als auch für die Entwicklung von neuen optischen Bauteilen eingesetzt werden. Gleichzeitig ist das numerische Modell des kompletten Mikroskopievorgangs inklusiver der Lichtwechselwirkung an einer nanoskaligen Probe für viele Kunden relevant, und eignet sich, um die Vielseitigkeit der Simulationssoftware zu demonstrieren. Obwohl ein solches Modell mit anderen Softwarepaketen rein theoretisch erreichbar wäre, minimiert die tatsächliche Umsetzung in SiM4diM die Hürde für neue Anwender der Software erheblich. Ein wichtiger Aspekt des Projektes war auch der Einsatz von Maschinellern Lernen für die Rekonstruktion von Geometrieparametern. Weil es aktuell viele Anbieter für Lösungen auf Basis Maschinellem Lernverfahren gibt, ist es essentiell zu zeigen, dass die ML-Werkzeuge in JCMSuite auch für schwierige Probleme wie der Parameter-Rekonstruktion hervorragend funktionieren.

Für die Firma JCMwave war die Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern von herausragender Bedeutung. Ein wesentlicher Aspekt des Softwareangebots von JCMwave ist die hohe Genauigkeit der Rechnungen, weswegen eine Kooperation mit akademischen und industriellen Partnern, für die dieser Aspekt besonders wichtig ist, wichtige zukünftige Marktperspektiven eröffnet. Nationale

Metrologie-Institute wie z.B. PTB, NIST (USA) oder NMI (Japan) haben durch SiM4diM ein griffbereites Beispiel für die Anwendung der Software sowohl in der hochgenauen Mikroskopie als auch für die ML-basierte Parameterrekonstruktion. Die Zusammenarbeit mit Zeiss als einen führenden Anbieter von hochgenauen optischen Bauteilen demonstriert zudem die Relevanz der Software für andere Hochtechnologieanbieter im Bereich der Optik wie z.B. ASML, Leica, Nikon.

5. Fortschritte der Thematik bei projektfremden Gruppen

Während der dreijährigen Laufzeit des Projekts SiM4diM wurden von den Projektteilnehmern regelmäßig nationale und internationale Konferenzen besucht. Auf diesen Veranstaltungen wurde von Seiten anderer Besucher Interesse an den Fortschritten und Ergebnissen des Projekts bekundet. Dennoch wurde festgestellt, dass es keine signifikanten Überschneidungen mit Forschungsarbeiten oder Projekten anderer Gruppen gab. Basierend auf dem heutigen Kenntnisstand sind keine Forschungsergebnisse von projektexternen Gruppen bekannt, die sich stark mit den Fortschritten von SiM4diM überschneiden.

6. Veröffentlichungsliste

Die im Rahmen des Projektes erzielten Ergebnisse wurden kontinuierlich während des gesamten Projektzeitraums durch die Veröffentlichung von Zeitschriftenartikeln und Konferenzbeiträgen mit der wissenschaftlichen Gemeinschaft geteilt. Die Projektpartner präsentierten dabei gemeinsam oder individuell verschiedene Aspekte des Projektes.

In diesem Abschnitt listen wir die wichtigsten wissenschaftliche Beiträge der Projektpartner auf, die im Rahmen von nationalen Konferenzen vorgetragen worden sind:

- [1] Krüger, J., Bergmann, D., Köning, R., Bodermann, B., & Manske, E., "In situ, back-focal-plane-based determination of the numerical apertures in optical microscopes," Appl. Opt. 62,756-763 (2023). <https://doi.org/10.1364/AO.472223>
- [2] Krüger, J., Köning, R., & Bodermann, B. 2021. "Vergleich rigoroser Simulationstools anhand von modellbasierten Kantendetektionen in der optischen Mikroskopie." https://www.dgao-proceedings.de/download/122/122_b16.pdf
- [3] Manley, P., Krüger, J., Bodermann, B., Köning, R., Heinrich, A., Eder, C., Goehnermeier, A., Zeiser, U., Hammerschmidt, M., Zschiedrich, L., & Schneider, P-I. (2023). "Efficient simulation of microscopic imaging for reconstruction of nanostructures." Proc. SPIE PC12619, Modeling Aspects in Optical Metrology IX, PC126190B. <https://doi.org/10.1117/12.2673077>
- [4] S. Burkert, A. Heinrich, "Non-destructive multi-parameter investigation of nanoimprinted structures", SPIE Photonics West 2024, Advanced Fabrication Technologies for Micro/Nano Optics and Photonics XVII, 12898-53, 2024
- [5] Burkert S, Eder C, Heinrich A. Investigation of Inkjet-Printed Masks for Fast and Easy Photolithographic NIL Masters Manufacturing. Micromachines. 2023; 14(8):1524. <https://doi.org/10.3390/mi14081524>
- [6] J. Krüger, et. Al, "Efficient simulation of microscopic imaging for reconstruction of nanostructures", Modeling Aspects in Optical Metrology IX, DOI: 10.1117/12.2673077, 2023
- [7] Krüger, J., Manley, P., Bergmann, D., Köning, R., Bodermann, B., Eder, C., Heinrich, A., Schneider, P-I., Hammerschmidt, M., Zschiedrich, L., & Manske, E. (2024). "Introduction and application of a new approach for model-based optical bidirectional measurements.", *Meas.*

- Sci. Technol.* **35** 085014. <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6501/ad4b53>
- [8] Schneider, P.-I., Manley, P., Krüger, J., Zschiedrich, L., Köning, R., Bodermann, B., & Burger, S. (2022). "Reconstructing phase aberrations for high-precision dimensional microscopy." *Proc. SPIE 12137, Optics and Photonics for Advanced Dimensional Metrology II*, 121370I. <https://doi.org/10.1117/12.2620762>

Projektpartner:	JCMwave GmbH, Hochschule Aalen, Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB)
FKZ:	01 IS 20 080
Laufzeit des Vorhabens:	01.01.2021 – 31.12.2023
Berichtszeitraum:	01.01.2021 – 31.12.2023

1. Wissenschaftlicher Stand der Technik & Aufgabenstellung

In vielen Industriebereichen werden optische Mikroskope zur Vermessung von Strukturbreiten eingesetzt, da sie eine zerstörungsfreie und schnelle Überprüfung von Fertigungsprozessen ermöglichen. Durch wellenoptische Effekte, wie die Lichtbeugung an Objektkanten oder unvermeidbare Abbildungsfehler des optischen Systems, werden die Objekte immer in einem gewissen Maß verschwommen dargestellt. Um die Position von Objektkanten zu bestimmen, werden stark vereinfachte Schwellwertverfahren genutzt, die somit zu Messunsicherheiten von mehr als $1\ \mu\text{m}$ führen. Durch die fortschreitende Miniaturisierung werden höhere Genauigkeiten notwendig, die derzeit meist nur mit wesentlich aufwendigeren Verfahren, wie taktilen Messungen oder Rasterelektronenmikroskopen, erreicht werden können.

Das SiM4diM-Projekt setzt darauf, diesen Stand zu überwinden und die Genauigkeit der optischen Messverfahren erheblich zu steigern. Hierzu wird der gesamte optische Abbildungsprozess des Mikroskops am Rechner simuliert. Auf Basis des Simulationsmodells werden verschiedene Probenparameter – z.B. Kantenposition und -höhe oder Brechungsindex des Messobjekts – bestimmt, die am besten zu den gemessenen Mikroskopie-Bildern passen. Mit diesem Ansatz soll die Messunsicherheit von $>1\ \mu\text{m}$ auf unter $0,1\ \mu\text{m}$ reduziert werden

2. Projektablauf

Der erste Schritt im Vorhaben befasste sich mit der akkuraten numerischen Modellierung des Mikroskopieprozesses. Hierzu gehörten die Vermessung und Modellierung der Beleuchtungseigenschaften (z.B. deren Winkelverteilung und Kohärenz) sowie deren effiziente numerische Simulation. Weiterhin wurde das Abbildungssystem inklusive seiner Störeffekte (Aberrationen) vermessen, modelliert und simuliert. In einem weiteren Schritt wurde ein neues Simulationsverfahren entwickelt, welches die Lichtstreuung an Stufengeometrien wesentlich effizienter bestimmen kann. Dies ist notwendig, da eine Vielzahl von Stufengeometrien simuliert werden muss, um die passenden Probenparameter zu bestimmen. Für die Validierung des neuen Messverfahrens wurden reale Proben unterschiedlicher Topologie (Kanten, Gräben, Zylinder) hergestellt und für die Vermessung parametrisiert. Hierfür wurden unterschiedliche Herstellungsverfahren (Double Patterning, Ink-Jet Maskenprojektion, 2-Photonen-Polymerisation, Nanoimprint-Lithographie) verglichen und optimiert. Für die Proben wurden Messserien aufgenommen, die insbesondere sowohl fokussierte Bilder als auch afokale Bilder umfassten. Um die Anzahl notwendiger Simulationen für die Vermessung der Proben zu reduzieren, wurden Verfahren des Maschinellen Lernens entwickelt. Schließlich wurden die entwickelten Simulations- und Rekonstruktionsverfahren anhand von bestehenden und im Vorhaben hergestellten Proben erfolgreich validiert.

3. Kooperation & wesentliche Ergebnisse

Das Vorhaben wurde in enger Kooperation zwischen den geförderten Projektpartnern JCMwave GmbH, Physikalisch Technische Bundesanstalt (PTB) und Hochschule Aalen unterstützt von der Carl Zeiss IMT GmbH durchgeführt. Die PTB hat sich dabei auf die Vermessung der Mikroskopieaufbauten fokussiert. Gemeinsam mit JCMwave wurden Mikroskopiemodelle entwickelt und implementiert. Durch den Vergleich mit anderen Simulationsverfahren und Messungen konnte die korrekte Modellierung und Simulation gezeigt werden. JCMwave hat zudem das erweiterte Simulationsverfahren für Stufengeometrien sowie die Maschinellen Lernverfahren für die Parameterrekonstruktion entwickelt. Dabei konnte eine wesentliche Beschleunigung gegenüber dem Stand der Technik erreicht werden. Die Hochschule Aalen hat unterschiedliche Probenmuster hergestellt und unabhängig vermessen. Ein Demonstrator an kommerziell erhältlichen Messsystemen wurde beim assoziierten Projektpartner Carl Zeiss IMT umgesetzt.

Das wichtigste Projektziel einer Verbesserung der Genauigkeit unterhalb von $0,1\mu\text{m}$ wurde erreicht. Es konnte sogar gezeigt werden, dass sich bestimmte Probengeometrien mit einer Genauigkeit von weniger als 10 Nanometern rekonstruieren lassen. Es konnte somit demonstriert werden, dass sich die Leistungsfähigkeit optischer Mikroskope zur Koordinatenmessung mit den entwickelten Verfahren erheblich verbessern lässt. In vielen industriellen Bereichen, wie der Fertigung optoelektronischer Baugruppen oder der Herstellung präziser Schneidewerkzeuge für die zerspanende Fertigung, in denen eine immer höhere Genauigkeit erforderlich ist, kann das Verfahren somit eingesetzt werden, um schnell und genau Prozessfehler zu erfassen und zu korrigieren.