

文章编号 1004-924X(2015)01-0230-07

用改进的快速傅里叶变换法 评估一维标准样板线节距数据

李同保¹, 翁浚婧^{1*}, 雷李华^{1,2}, 李源², 蔡潇雨², 马艳¹

(1. 同济大学物理科学与工程学院, 上海 200092;

2. 上海市计量测试技术研究院, 上海 201203)

摘要: 由于利用快速傅里叶变换(FFT)法定量测量标准样板的平均节距时会因为频谱分辨率 Δf 有限而在数据分析过程中丢失信息, 故本文对常用的 FFT 法进行了改进。首先在 FFT 的频谱中得到最大振幅值对应的频率分量 f_{\max} , 使用二分法缩小 f_{\max} 附近的频率范围; 然后利用连续傅里叶变换法寻找更大的振幅值与更精确的 f'_{\max} 以求得更接近真实值的线节距。为了验证该方法的可行性, 利用 Matlab 软件仿真被测标准样板(TGD1)的轮廓图, 比较了 FFT 与改进后的 FFT 对不同扫描长度下数据的评估结果, 并展示了改进 FFT 法评估时部分数据的运算过程。同时, 通过计量型原子力显微镜实测 $20\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$ 内的 TGD1 形貌。两种评估法下的数据比对结果显示: 改进 FFT 评估后的线节距为 $(277.84 \pm 0.39)\ \text{nm}$, 符合标称值 $(278 \pm 1)\ \text{nm}$, 验证了改进后 FFT 方法对线节距求解的准确性与合理性。

关键词: 快速傅里叶变换法; 线节距; 一维线间隔标准样板; 微纳米计量

中图分类号: TB92; O438.2 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20152301.0230

Evaluation of data for one-dimensional gratings by improved fast Fourier transform method

LI Tong-bao¹, WENG Jun-jing^{1*}, LEI Li-hua^{1,2}, LI Yuan², Cai Xiao-yu², MA Yan¹

(1. School of Physics Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China;

2. Shanghai Institute of Measurement and Testing Technology, Shanghai 201203, China)

* Corresponding author, E-mail: registerc@163.com

Abstract: An improved Fast Fourier Transform(FFT) method was proposed to solve the lack of information resulted from frequency resolution limitation of the FFT. Firstly, a frequency component f_{\max} which is corresponding to the maximum value of amplitude $F(f_{\max})$ was searched with FFT method, and the frequency scope around f_{\max} was reduced by the dichotomy. Then, the inverse Fourier transform was used to seek a larger value of amplitude in the extent scope including the f'_{\max} as the center. The frequency scope will be bisected every iteration until smaller than the target uncertainty. To prove the validity of the improved FFT method, a measured object (TGD01) was simulated with software Matlab. The data from the different acquisition ranges were evaluated by FFT and improved FFT respectively, meanwhile the evaluating progress was illustrated. Moreover,

收稿日期: 2014-04-02; 修订日期: 2014-05-28.

基金项目: 上海市科委纳米专项基金资助项目(No. 11nm0506800)

the topography of grating within $20\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$ was scanned with a metrological atomic force microscope. The results of two kinds of data evaluation were compared with each other. It shows that the pitch of the grating under the improved FFT is $(277.84 \pm 0.39)\ \text{nm}$, which is consistent to the nominal value $(278 \pm 1)\ \text{nm}$ very well. The simulation and experiment both prove the validity of improved FFT method in analyzing pitches of gratings.

Key words: Fast Fourier Transforms(FFT) method; pitch; one dimensional grating; micro-nano scale metrology

1 引言

近几年,随着微纳技术的迅速发展,人们对精密测量仪器提出了更高的要求,通过测量微纳标准样板进行校准也具有更加重大的意义^[1-3]。例如:一维或二维的横向标准样板可用于校准各种显微镜下观察到的图像放大或畸变情况;作为纵向标准样板的台阶高度或深度样板可用于校准扫描仪、扫描探针显微镜 Z 轴方向的磁滞、蠕动、非线性等机械效应。针对商用或国家纳米领域的基础水平要求,各国的计量研究所对标准样品各种特征结构项目进行了长期的研究。美国国家标准与技术研究院(NIST)在 2007 发布了可校准常用测量仪器的标准样本 SRM5000^[4];俄罗斯 NT-MDT 公司生产了系列光栅 TGZ1, TGZ2, TGZ3,用于校准扫描探针显微镜 Z 轴与测量中非线性;日本国家计量院(NMIJ)利用由微纳加工技术刻蚀出各种纳米结构制备的一种由 Si/SiO₂ 组成的 25 nm 的特殊一维线间隔,扩展不确定度优于 0.1 nm;同济大学李同保院士带领的原子光刻课题组利用激光冷却原子沉积原理,制备了溯源性的 213 nm 周期性结构光栅^[5-6]。因此,标准样板作为微纳几何量值传递中的关键组成部分,需要准确地进行校准评价。

文中研究的线间隔长度标准样板是一种等间距平行刻线的表面结构,被广泛用于精密加工领域。在定量测量标准样板的平均节距时,测量方法与数据评估是影响标准样板表征与测量精度的重要因素。目前,重心法和傅里叶变换法是最为常用的数据评估方法^[7-10]。其中重心法原理简单,可通过某一阈值筛选出符合条件的所有特征

结构,计算出结构的重心位置,再通过线性拟合求出结构的周期。由于该方法主要依据轮廓的形貌判断重心位置,因此对轮廓的光滑性与完整性要求高。如果特征结构受到杂质的污染,其形貌变换的干扰信息极易导致重心位置的偏移。因此,在实际测量时对测量环境的要求较高。相较于重心法,傅里叶变换法对结构表面形貌的要求较低,目前该分析方法已通过快速傅里叶变换(FFT)得到实现,利用该方法可快速计算出具有周期性结构的一维线间隔的线节距值,因此使用广泛。

本文针对 FFT 提出一种改进方法,在保证分析速度的同时提高线节距的精度,通过分别评估 Matlab 模拟数据和实验测量数据来验证 FFT 改进后的可行性与合理性。

2 基于 FFT 提高线节距精度的原理及算法

2.1 FFT 对线间隔样板数据处理的基本原理及实现

傅里叶变换法作为复杂波形分解与合成的有力分析工具,其基本思想是把复杂的振动现象分解成许多不同频率、不同振幅的谐波叠加。考虑到线间隔的周期复现性,这里利用傅里叶变换将标准样板的周期结构由空间域转换到频域进行分析:

$$F(f) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-j2\pi fx) dx, \quad (1)$$

其中: x 代表探头(或是平台)移动时相对于起始点的横向坐标; $f(x)$ 是原子力测头与标准样品之间通过原子间的相互作用后,在 Z 轴方向振动得到表面形貌的高度信号,指数中的 f 是与坐标 x 相对应的频率。通过傅里叶连续变换,在频域中寻找到最大的幅值 $F(f_{\max})$,其所对应频率分量 f_{\max} 的倒数即为线节距 $P=1/f_{\max}$ 。理论上,傅里

叶变换是对无限长的扫描范围内的数据进行处理,但实际测量的数据总是有限的,且处理庞大数据过于耗时,因此根据离散傅里叶公式(2),已在 Matlab 上实现了快速傅里叶变换(FFT):

$$F(f_m) = \Delta x \sum_{n=0}^{N-1} f(n\Delta x) \exp(-j2\pi f_m n\Delta x)$$

$$F(f_m) = \Delta x \sum_{n=0}^{N-1} f(n\Delta x) \exp(-j2\pi mn/N), \quad (2)$$

$m=1, 2, 3, \dots, N, n=1, 2, 3, \dots, N$.

其中: $F(f_m)$ 是频率 $f_m = m/(N\Delta x)$ 对应的幅值; Δx 为信号采集横向间隔值; N 为信号采样点数。

2.2 FFT 的不足与改进方法

由于信号采集的离散化,FFT 的频率分辨率为有限的 $\Delta f = f_s/N = 1/L$,其中 Δf 是频率分辨率, f_s 是采样频率, L 是横向扫描长度。也就是说,在快速傅里叶变换后的频谱中,无法获取 Δf 频率之间的振幅信息^[11]。FFT 只是对 f_{\max} 进行了粗略搜索,在变换后的频谱中, Δf 频率之间的振幅信息总有缺失。针对该问题,本文在 FFT 的基础上,结合连续傅里叶变换,通过在 f_{\max} 周围逐步缩小频率搜索范围,寻找到了更精确的频率分量和线节距。图 1 给出了该方法的运算步骤。首先,把 FFT 求得的频率分量 f_{\max} 赋值给 f_0 ,通过公式(3)的连续傅里叶变换,得到 $f_0 - \frac{\Delta f}{2^i}, f_0, f_0 + \frac{\Delta f}{2^i}$ 相应的振幅值 $F(f_{0-}), F(f_0), F(f_{0+})$,比较三者的大小后,找到新的最大振幅及其对应的频率分量,重新代入公式(3)进行迭代。该过程中频率搜索范围以 $1/2$ 的速度减小,逼近实测数据中最大的振幅值 $F(f'_{\max})$ 和与其对应的精确频率 f'_{\max} ,直到 $\Delta f/2^i$ 小于指定的精度 U_c 。该迭代过程即在信息缺失的 Δf 之间进行高效有序的目标频率搜索。

$$F(f_{m-}) = \sum_{n=0}^{N-1} f(n\Delta x) \exp[-j2\pi(m+1/2^i) \times n/N]$$

$$F(f_{m+}) = \sum_{n=0}^{N-1} f(n\Delta x) \exp[-j2\pi(m-1/2^i) \times n/N],$$

$$F(f_{m0}) = \sum_{n=0}^{N-1} f(n\Delta x) \exp[-j2\pi(m) \times n/N] \quad (3)$$

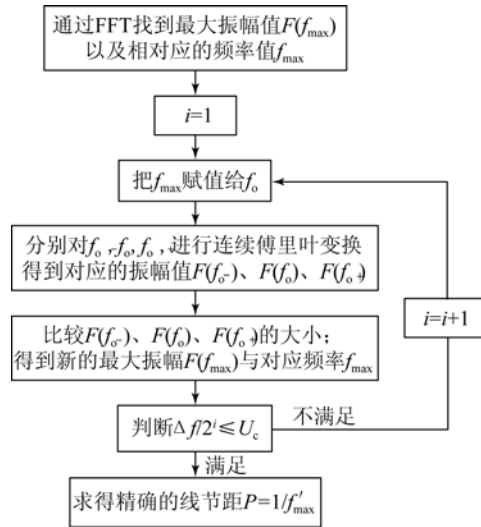


图 1 提高 FFT 评估精度的流程图

Fig. 1 Flow chart of improving evaluation accuracy of FFT

3 实验装置

3.1 装置

本实验采用的测量设备是计量型原子力显微镜,其中的纳米测量平台(NMM)可实现 $25 \text{ mm} \times 25 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ 的大尺度移动,三维定位与测量的分辨率为 0.1 nm ^[12-13]。NMM 采用精密测长激光干涉仪,三轴内置激光的正交位置与样品被测点重合,实时反馈的信息对平台位置进行精密调整,使阿贝误差达到最小。因为 NMM 内置干涉仪的激光波长为长度标准 633 nm ,故可直接溯源到米的定义。图 2 是原子力测头结合纳米测量平台后的计量型原子力显微镜。

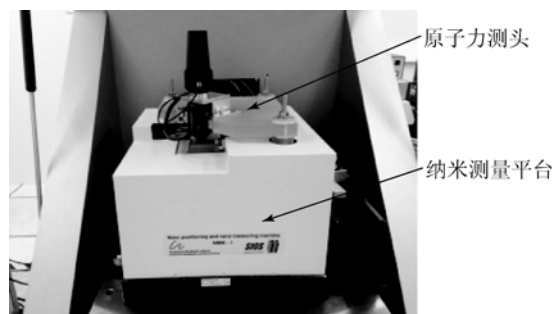


图 2 计量型原子力显微镜照片

Fig. 2 Photograph of metrological atomic force microscope

3.2 被测样品

实验中被测的一维横向标准样板是由俄罗斯 NT-MDT 生产的光栅 TDG01,在有效直径为

9 mm 的玻璃基底上形成硫化玻璃光栅,顶部镀铝,光栅结构横向平行隆起,标称值为(278±1) nm,主要用于亚微米尺度下扫描探针显微镜 x 或 y 方向的校准。图 3 为被测线间隔样板的实物图。



图 3 NT-MDT 生成的一维线间隔标准样板

Fig. 3 Standard model with one dimensional grating manufactured by NT-MDT

4 Matlab 仿真

利用 Matlab 软件产生振幅为 25 nm 的理想正弦剖面如图 4 所示,为了便于实验验证,设置正弦周期与样板 TDC01 的标称值相同,都为 278 nm。

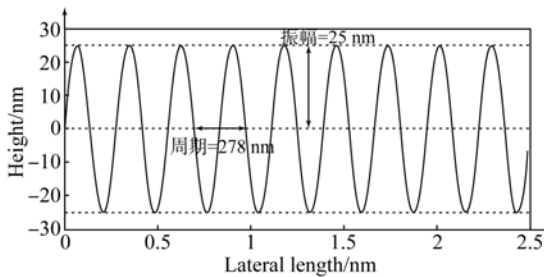


图 4 周期为 278 nm 的理想正弦截面

Fig. 4 Ideal sinusoidal profile with pitch of 278 nm

分别使用 FFT 与改进后的 FFT 对长度 L 分别为 2, 5, 10 μm 时的数据进行评估。表 1 展示了两种数据评估的结果:FFT 评估法下,2 μm 内的结构周期值为 285.71 nm,远远偏离理论值,这主要是由于测量长度过小导致测量数据有限,因此当 L 增大为 5 μm 后,节距值精确至 277.78 nm,此时的理想频率与 FFT 搜索到的频率值已经十分接近;当仿真范围仅增加至 10 μm 时,FFT 分析下的周期值没有变化;只有当 L 足够大时,才能进一步使计算所得的频率接近理论值。用改进后的 FFT 进行评估时,随着 L 的增

大,剖面周期值逐渐逼近 278 nm,在小范围 (2 μm) 时,周期值为 278.30 nm,虽然与理论值仍在 0.3 nm 的偏差,但明显好于同样情况下的 FFT 分析值。可见改进后的 FFT 算法在数据不足时,对测量结果有一定的改善作用。在 10 μm 时,用改进后的 FFT 算得的节距为 278.02 nm,与理论值仅差 0.02 nm。

表 1 FFT 与改进后 FFT 对不同扫描范围内数据的评估结果

Tab. 1 Evaluation results of FFT and improved FFT for data in different scanning ranges (nm)

评估法	仿真范围/ μm		
	2	5	10
FFT	285.71	277.78	277.78
改进后 FFT	278.30	278.11	278.02

5 实验测量与数据评估

5.1 正交角提取

由于标准样板 TDC01 的表面没有循迹标识,需要通过提取正交角来确定测量时的扫描方向,以确保扫描方向与光栅结构垂直^[14-15]。如图 5 所示。

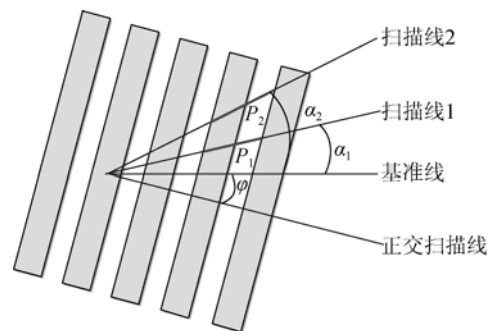


图 5 一维横向线间隔正交角提取示意图

Fig. 5 Schematic of correction angle extraction of orthogonality for one-dimensional transverse grating

在样品表面寻找到合适的扫描区域,沿基准线(0° 角)逆时针旋转 α_1, α_2 , 2 次的横向扫描距离相同,对采样曲线进行快速傅里叶变换,以求出线间隔的周期值 P_1, P_2 ,根据公式(4)求得基准线与正交扫描线的夹角 φ 。本实验中的扫描角度分别

为 $\alpha_1 = 10^\circ, \alpha_2 = 20^\circ$, 求得两条扫描线的结构周期值分别为 382.23 nm, 465.91 nm, 带入公式(4)进行计算可知以基准线为起始点, 顺时针旋转 33.4° 的方向就是此次测量的正交角。

$$\varphi = \arctan \left[\frac{P_1 \times \cos(\alpha_1) - P_2 \times \cos(\alpha_2)}{P_1 \times \sin(\alpha_1) - P_2 \times \sin(\alpha_2)} \right]. \quad (4)$$

表 2 为所提取正交角的实验数据与计算结果。

表 2 正交角度修正结果

Tab. 2 Correction results of orthogonality

计算扫描角度	周期/nm	φ
$\alpha_1 = 10^\circ$	$P_1 = 382.23$	33.4°
$\alpha_2 = 20^\circ$	$P_2 = 465.91$	

5.2 FFT 与改进后 FFT 对数据评估的比对

在 $20 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ 的范围内横向扫描 5 次, 以 10 nm 为间隔共采集 200×5 个数据点。以第一条扫描线的测量数据为例: 通过最小二乘法进行调平后, 先用 FFT 对其进行傅里叶变换得到的最大振幅为 20.720 nm, 对应的频率为 $3.600 0 (\mu\text{m}^{-1})$, 周期为 277.78 nm (见图 6)。在粗略搜索后, 以 $f_0 = 3.600 0 (\mu\text{m}^{-1})$ 为精确搜索的初始频率, 使用改进后的快速傅里叶变换法, 多次迭代搜索直到 $\Delta f/2^i < 10^{-6} (\mu\text{m}^{-1})$ 。表 3 显示了频率值, 节距值与振幅值在迭代过程中的变化情况。最后求得更理想的频率值 $3.597 6 (\mu\text{m}^{-1})$, 其对应着更大的振幅值 $F(f'_{\max}) 20.799 \text{ nm}$, 周期为 277.96 nm, 比 FFT 评估下的节距值更接近标称值, 从而证明了信息缺失的相邻采集频率间确实存在更理想的数据, 而改进后的 FFT 可以快速精准地对其进行搜索。

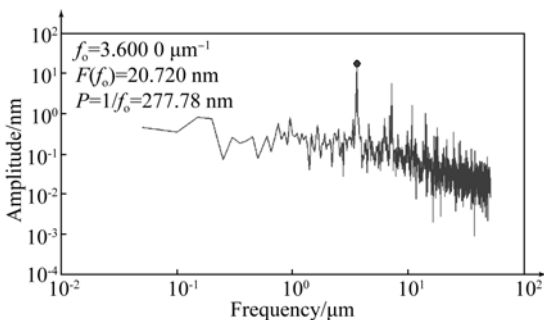


图 6 使用 FFT 后的数据评估图

Fig. 6 Data evaluation map after using FFT

表 3 迭代中的数据评估过程

Tab. 3 Evaluation process of data in iteration

循环次数	$U_c = 10^{-6}$		
	频率值/ μm^{-1}	振幅值/nm	线节距/nm
1	3.600 00	20.720 0	277.778
2	3.600 00	20.720 0	277.778
3	3.600 00	20.720 0	277.778
4	3.596 87	20.790 0	278.019
5	3.596 87	20.790 0	278.019
⋮	⋮	⋮	⋮
16	3.597 58	20.798 9	277.965
17	3.597 58	20.798 9	277.965
18	3.597 58	20.798 9	277.965
19	3.597 58	20.798 9	277.965
20	3.597 58	20.798 9	277.965

5.3 不同评估方法下的数据比对

对实验测得的 5 条扫描线, 分别使用 FFT 和改进后的 FFT 对 5 组数据进行线节距评估, 表 4 为两种方法的评估结果。在 FFT 评估下的第 1 列线节距, 均为 277.78 nm, 考虑到实际生产中存在的均匀性误差以及实验环境对被测标准样板造成的杂质污染, 5 条曲线的横向结构必存在细微差别, 因此, FFT 评估对结构的细微变化不敏感; 而改进 FFT 的节距值则有细微变化, 其中第 4 条扫描线的周期明显变小, 最后的线节距值是 $(277.84 \pm 0.39) \text{ nm}$, 其在标准样板标称值的允许误差范围内。相较 FFT 法, 改进 FFT 评估下的数据较稳定, 对结构的细微变化敏感, 更接近标称值 $(278 \pm 1) \text{ nm}$, 从而再次验证了改进 FFT 是分析线间隔标准样板线节距的有效数据评估方法。

表 4 两种方法对 $20 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ 范围的数据评估结果

Tab. 4 Results of data evaluation for scanning scope of $20 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ by two kinds of evaluation methods (nm)

序号	评估法	
	FFT	改进 FFT
1		277.96
2		277.97
3	277.78	277.90
4		277.57
5		277.80
节距值	277.78	277.84 ± 0.39

6 结 论

本文在分析线间隔标准样板线节距的快速傅里叶变换法的基础上,考虑到FFT数据处理过程中频率分辨率有限的缺陷,提出了改进方法。首先在FFT的频谱中寻找对对应最大振幅 $F(f_{\max})$ 的频率分量 f_{\max} ,并将其作为初始值 f_0 ,利用连续傅里叶变换法,在以 f_0 为中心的 $\Delta f/2^i$ 频率范围内开始迭代计算,寻找更大的振幅值与对应频率分量,直到满足一定的精度。文中展示了在

精确迭代过程中,一组扫描数据频率,振幅,节距值逐渐逼近真实值的数值变化过程,从而证明了在最小频率间缺失的信息中确实存在有用信息,改进后的方法可以高效准确地计算出更接近理论值的节距287.02 nm。通过实际测量的一维标准样板,应用FFT和改进FFT分别对实测数据进行评估比对。结果显示,改进FFT评估的节距值为 (277.84 ± 0.39) nm,比FFT更接近标准样板的出厂标称值,再次有力地验证了该方法对线节距求解的准确性与合理性。

参考文献:

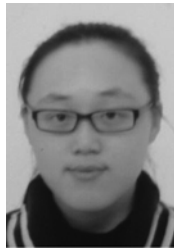
- [1] 李同保. 纳米计量与传递标准 [J]. 上海计量测试, 2005, 32(1): 8-13.
LI T B. Nano scale measurement and transfer standard system [J]. *Shanghai Measurement and Testing*, 2005, 32(1): 8-13. (in Chinese)
- [2] 姚骏恩. 纳米测量仪器和纳米加工技术 [J]. 中国工程科学, 2003, 5(1): 33-37.
YAO J E. Nano-measuring instruments and nanomachining technology [J]. *Engineering Science*, 2003, 5(1): 33-37. (in Chinese)
- [3] 吴俊杰, 李源, 李东升, 等. MEMS 电容式三维微触觉测头设计及校准 [J]. 光学精密工程, 2013, 21(12): 3087-3094.
WU J J, LI Y, LI D SH, *et al.*. Design and calibration of 3D micro tactile probe based on MEMS capacitance sensor [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2013, 21(12): 3087-3094. (in Chinese)
- [4] LIPSCOMB III W P, ALLGAIR J A, BUNDAY B D, *et al.*. Calibrating optical overlay measurements [C]. *International Society for Optics and Photonics*, 2006: 615211-615211-15.
- [5] 张萍萍, 马艳, 李同保. 蒙特卡罗方法数值模拟二维原子光刻 [J]. 同济大学学报: 自然科学版, 2012, 40(8): 1270-1275.
ZHANG P P, MA Y, LI T B. Numerical simulation of 2D atom lithography via Monte Carlo method [J]. *Journal of Tongji University: Natural Science*, 2012, 40(8): 1270-1275. (in Chinese)
- [6] ZHANG W J, MA Y, LI T B, *et al.*. Structured mirror array for two-dimensional collimation of a chromium beam in atom lithography [J]. *Chinese Physics B*, 2013, (2): 228-231.
- [7] 张敏, 唐锋, 王向朝, 等. 二维快速傅里叶变换干涉图相位提取误差分析 [J]. 中国激光, 2013, 40(3): 179-184.
ZHANG M, TANG F, WANG X CH, *et al.*. Phase retrieval errors analysis of interferogram using two dimensional fast fourier transfer method [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2013, 40(3): 179-184 (in Chinese)
- [8] 张志会, 王华英, 刘佐强, 等. 基于快速傅里叶变换的相位解包裹算法 [J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49(12): 59-65.
ZHANG ZH H, WANG H Y, LIU Z Q, *et al.*. Phase unwrapping algorithms based on fast fourier transform [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, 49(12): 59-65. (in Chinese)
- [9] MISUMI I, DAI G L, LU M Z, *et al.*. Bilateral comparison of 25 nm pitch nanometric lateral scales for metrological scanning probe microscopes [J]. *Measurement Science and Technology*, 2010, 21(3): 035105.
- [10] MISUMI I, KITTA J, FUJIMOTO H, *et al.*. 25 nm pitch comparison between a traceable x-ray diffractometer and a metrological atomic force microscope [J]. *Measurement Science and Technology*, 2012, 23(1): 015002.
- [11] 高西全, 丁玉美. 数字信号处理 [M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2008.
GAO X Q, DING Y M. *Digital Signal Processing* [M]. Xi'an: Xidian University Press, 2008. (in Chinese)
- [12] DAI G, POHLENZ F, DANZEBRINK H U, *et al.*. Metrological large range scanning probe microscope [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2004, 75(4): 962-969.

- [13] 黄强先, 余夫领, 宫二敏, 等. 零阿贝误差的纳米三坐标测量机工作台及误差分析 [J]. 光学精密工程, 2013, 21(3): 664-671.
HUANG Q X, YU F L, GONG E M, *et al.*. Nano-CMM stage with zero Abbe error and its error analysis [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2013, 21(3): 664-671. (in Chinese)
- [14] 李源, 雷李华, 高婧, 等. 纳米尺度标准样片光学表征方法的研究 [J]. 微纳电子技术, 2012, 49(6): 406-412.
LI Y, LEI L H, GAO J, *et al.*. Research of the optical characterization method on the nano dimension standard sample [J]. *Micronanoelectronic Technology*, 2012, 49(6): 406-412. (in Chinese)
- [15] LEI L H, LIU Y, CHEN X, *et al.*. Fast and accurate calibration of 1D and 2D gratings [J]. *Advanced Materials Research*, 2011, 317: 2196-2203.

作者简介:



李同保(1942—),男,河南温县人,教授,院士,1963年毕业于上海同济大学应用物理专业,长期从事光辐射测量技术与标准研究,目前从事大面积原子光刻纳米栅节距标准样品的研究。E-mail: tbli@tongji.edu.cn



翁浚婧(1989—),女,浙江宁波人,硕士研究生,2012年于同济大学获得学士学位,主要从事微纳标准样板的测量与表征。E-mail: registerc@163.com

(本栏目编辑:马 健)

(版权所有 未经许可 不得转载)