

UNIVERZITA PALACKÉHO v OLOMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
KATEDRA OPTIKY

Diplomová práce

Metoda Phase retrieval pro objektivy a
projekční optiku s vyšší numerickou aperturou



Vypracoval:
Studijní program:
Studijní obor:
Forma studia:
Vedoucí diplomové práce:
Termín odevzdání práce:

Bc. Michal Peterek
N1701 Fyzika
1702R001 Optika a optoelektronika
Prezenční
Mgr. Bohumil Stoklasa, Ph.D.
Červen 2020

Bibliografická identifikace

Jméno a příjmení autora

Název práce

Typ práce

Pracoviště

Vedoucí práce

Rok obhajoby práce

Abstrakt

Bc. Michal Peterek

Metoda Phase retrieval pro objektivu a projekční optiku s vyšší numerickou aperturou

Magisterská

Katedra optiky

Mgr. Bohumil Stoklasa, Ph.D.

2020

Měření vlnových aberací objektivů a projekční optiky s vyšší numerickou aperturou ($NA > 0.3$) je problematické díky systematickým chybám pomocné optiky měřícího zařízení. Metoda Phase retrieval z intenzitních skenů fokálního regionu nevyžaduje pomocnou optiku a tudíž tento problém překonává. Je ovšem závislá na použitém difrakčním modelu, který u vyšších numerických apertur nabývá na složitosti a vektorové povahy. Obsahuje též parametry závislé na samotné měřené optické soustavě. Cílem práce je stanovení difrakčního modelu pro tuto metodu při $NA > 0.3$ a praktická implementace algoritmu, jakož i stanovení vlivu systematických chyb na výsledek. Další výhodou, kterou by měla práce zkoumat, je možnost simultánního měření několika polních bodů najednou, což je vlastnost velmi výhodná pro praktickou justáž optických soustav, kde postupné proměřování jednotlivých polních bodů vede na neprakticky dlouhé justážní časy. Práce by měla adresovat možnost dosažení co nejvyšší rychlosti Phase retrieval metody s cílem alespoň 1 Hz.

Klíčová slova

Phase retrieval, bodová rozptylová funkce, Debye-Wolfův integrál, Nijboer-Zernike teorie, litografie

Počet stran

41

Počet příloh

1

Jazyk

Český

Bibliographical identification

Autor's first name and surname	Bc. Michal Peterek
Title	Phase retrieval method for higher NA objectives and projection optics.
Type of thesis	Master
Department	Department of optics
Supervisor	Mgr. Bohumil Stoklasa, Ph.D.
The year of presentation	2020
Abstract	Measurement of wave aberrations of lenses and projection optics on higher numerical aperture ($NA > 0.3$) is problematic due to systematic errors of the auxiliary optics of the measuring device. The Phase retrieval method from intensity scans of the focal region does not require auxiliary optics and therefore overcomes this problem. However, it strongly depends on the diffraction model used, which acquires complexity and vector nature at higher numerical apertures. The aim of the thesis is to determine the diffraction model for this method at $NA > 0.3$ and the practical implementation of the algorithm, as well as to determine the effect of systematic errors on the result. Another advantage that the work should examine is the possibility of simultaneous measurement of several field points at once, which is a very advantageous feature for practical adjustment of optical systems. The work should address the possibility of achieving the highest possible speed of the Phase retrieval method with a goal of at least 1Hz.
Keywords	Phase retrieval, point spread function, Debye-Wolf integral, Nijboer-Zernike theory, lithography
Number of pages	41
Number of appendices	1
Language	Czech

Prohlašuji, že jsem předloženou diplomovou práci vypracoval samostatně pod vedením Mgr. Bohumila Stoklasy, Ph.D. a že jsem použil zdrojů, které cituji a uvádím v seznamu použitých zdrojů.

V dne

Podpis autora

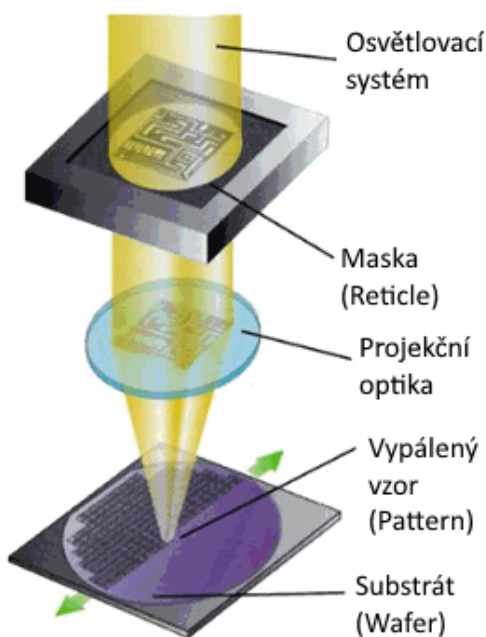
Tímto bych chtěl poděkovat vedoucímu své diplomové práce za trpělivost a cenné rady.
Kolegům z Meopty za plodnou diskuzi a připomínky.

Obsah

1	Úvod	1
2	Phase retrieval v optické metrologii	3
2.1	Měření kvality optických systémů	3
2.2	Zobrazovací model	5
3	Nijboer-Zernikova teorie pro Phase retrieval	10
3.1	Reprezentace pupilové funkce Zernikeho polynomy	10
3.2	Analytický model PSF - Nijboer-Zernikova teorie (NZ)	11
3.3	Analytický model PSF - Rozšířená Nijboer-Zernikova teorie (ENZ)	12
4	Phase retrieval v prostředí Wolfram Mathematica	16
4.1	Rozvoj funkce V_n^m pomocí Besselových řad	17
4.2	Řešení inverzního problému: Rekonstrukční algoritmy	22
4.3	Analýza nejistot	27
5	Závěr	36
6	Přílohy	40

1 Úvod

V dnešní společnosti se běžně setkáváme s nejrůznějšími optickými systémy (OS), které jsou stále považovány za „high-tech”. Kamerové systémy v mobilních telefonech, CD přehrávače nebo přenos internetu optickými kabely neodrážejí současnou úroveň pokroku optického průmyslu. V kontextu pokročilých optických technologií můžeme zmínit systémy obrovských teleskopů namířených ke vzdáleným hvězdám nebo naopak mikroskopů, které jsou využity při zobrazení těch nejmenších detailů. I tak je možné nalézt oblast ještě náročnější na kvalitu OS, polovodičový průmysl [1].



Obrázek 1: Proces fotolitografického vypalování struktur na substrát. Fotolitografie s maskou. Převzato z [2], upraveno.

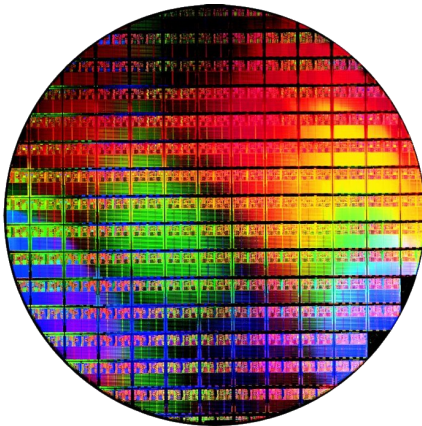
Proces nazývaný optická litografie [1][3] se využívá k přenesení geometrického vzoru masky (nejčastěji integrovaného obvodu) pomocí litografického objektivu na vrstvu fotocitlivého materiálu, tzv. rezistu. Následným chemickým leptáním se vytváří požadovaná struktura na křemíkovém substrátu (viz obrázek 1).

Zvyšování výkonu počítačů v uplynulých letech bylo spojeno se zmenšováním integrovaných obvodů. Snaha tento trend zachovat i v budoucnu neustále tlačí výrobce mikročipů k používání stále dokonalejších a přesnějších technik výroby. A tím i výrobce optiky k vytváření dokonalejších litografických objektivů schopných zobrazovat stále menší struktury.

Rozlišení objektivů [3] závisí přímo na vlnové délce λ a nepřímo na numerické apertuře NA. Nejnovější generace litografických objektivů proto směřují pracovní vlnovou délku hluboko do UV oblasti [4] se zvyšující se numerickou aperturou. Cílem této diplomové práce je vývoj měřicí metody pro kontrolu kvality projekční optiky, především litografických a jiných objektivů s vyššími NA.

V úvodní části druhé kapitoly bude představen koncept metody Phase retrieval (PR) pro měření kvality OS v optické metrologii. Bude popsán zobrazovací model a odvozen Debye-Wolfův difrakční integrál ve skalární aproximaci a jeho význam pro metodu PR. Ve třetí kapitole bude prezentována Nijboer-Zernikova teorie a její využití pro metodu PR. K získání analytického řešení Debye-Wolfova difrakčního integrálu se využije rozkladu do Besselových řad. Čtvrtá kapitola je věnována formulaci a řešení inverzního problému rekonstrukce fáze. Prezentovány jsou tři algoritmy pro řešení inverzního problému, jež byly implementovány v programu Wolfram Mathematica. Dále je diskutována analýza nejistot a provedena simulace reálného OS s důrazem na metodu globální optimalizace.

Výsledky, aplikační potenciál a budoucí vývoj metody PR jsou shrnuty v závěru. V příloze lze nalézt přehled Zernikových polynomů a katalogový list kamery použité při simulaci reálného OS.



Obrázek 2: Výsledek fotolitografického procesu: Integrované obvody na křemíkovém substrátu. Převzato z [5], upraveno.

Tato diplomová práce vznikla ve spolupráci s oddělením vývoje měřicích metod ve firmě Meopta - optika, s.r.o. Výsledky budou implementovány při vyhodnocování kvality a při justáži fotolitografických objektivů nové generace.

2 Phase retrieval v optické metrologii

V této kapitole bude shrnut historický vývoj vyhodnocování kvality OS. Představen koncept rekonstrukce fáze metodou Phase retrieval a použitý zobrazovací model. Dále popsán vhodný difrakční integrál, který umožní výpočet modelu rozložení intenzity v obrazové ohniskové oblasti a stanovíme limity jeho platnosti.

2.1 Měření kvality optických systémů

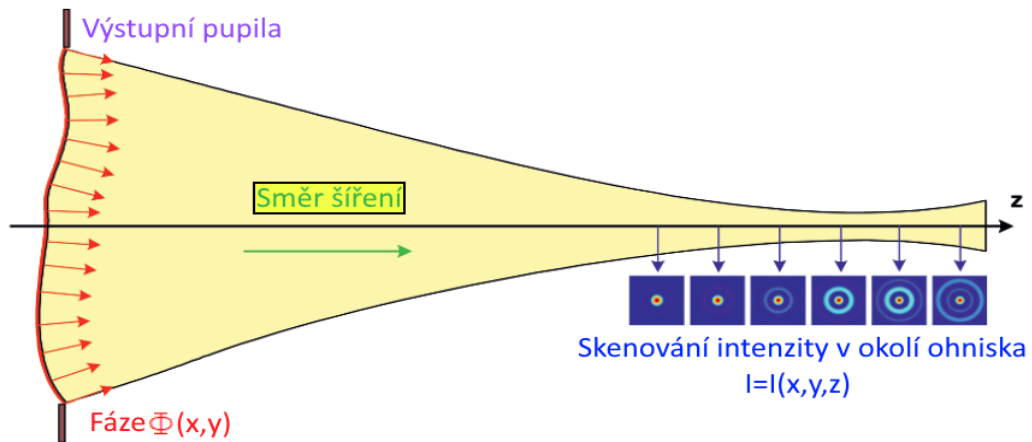
První snahy o rigorózní měření kvality OS vznikaly již na konci 19. století [6]. S rostoucími požadavky na kvalitu OS pro observatoře bylo zapotřebí vývoje sofistikovanějších měřících metod. První model, který zohlednil vlnový popis světla spolu s difrakcí na apertuře konečné velikosti, představil Airy v roce 1835 [7]. Tento model dále rozšířil Rayleigh [8] o zobrazování v nekoherentním světle, které vedlo na kritérium minimální separace hvězd v astronomii. Metoda nazývaná „Star test“ [9] využívala vzdálených hvězd jako dokonalých bodových zdrojů¹ a kvalita OS byla vyhodnocena z tvaru bodové rozptylové funkce (PSF) [10]. Pokrok učinil Lommel [6], který přišel s analytickým modelem PSF v oblasti mimo obrazovou rovinu. Poprvé do analýzy zahrnul podélnou souřadnici z (viz obrázek 3).

Významným milníkem se stal vynález laserového zesilovače v 50. letech a konstrukce prvních laserů [11] v 60. letech 20. století, které daly vzniknout oboru interferometrie [12]. Fáze, respektive vlnoplocha², ve výstupní pupile nese informaci o kvalitě OS. Až na výjimky se interferometrie na další desetiletí stala dominantní měřící metodou.

Jako zajímavost zmiňme Hubbleův vesmírný teleskop, který po uvedení do provozu trpěl vlivem špatně vybroušeného zrcadla optickými aberacemi [13]. Charakterizace těchto aberací nebyla možná pomocí interferometru. Při řešení se uplatnily algoritmy pro rekonstrukci fáze [14][15], které měřeními PSF vzdálených hvězd přesně určily aberace zrcadla.

¹Koncem 19. století neexistovaly zdroje záření, které máme k dispozici dnes (lasery, LED, atp.).

²Plocha konstantní fáze.



Obrázek 3: Propagace pole podél optické osy z v obrazové rovině. Série intenzitních skenů v obrazovém ohniskovém prostoru. Převzato z [16], upraveno.

Současné způsoby vyhodnocení kvality OS se nejčastěji opírají o měření vlnoplochy s využitím interferometru nebo Shack-Hartmannova senzoru vlnoplochy (SHS) [17]. V obou případech se jedná o měření relativní. Nutnost přesného kalibru, vazba na konkrétní vlnovou délku, pravidelná kalibrace a robustnost optického systému jsou limitujícími faktory interferometru. Algoritmy posunu fáze [18] jsou časově náročnější a znesnadňují použití interferometru při justáži. Problém specifické vlnové délky překonává SHS. Vyhodnocení založené na těžišťovém algoritmu a modální rekonstrukci vlnoplochy [19] umožňuje rychlé měření dosahující přesnosti srovnatelné s interferometrem [20].

S rostoucí NA se začínají projevovat limity interferometru i SHS. Je nutné použití dodatečné optiky. Snižuje se přesnost měření. Měření je nutné provést v případě projekční optiky pro každý polní bod zvlášť, a je tak časově velmi náročné. Kvalita dnešních fotolitografických objektivů a projekční optiky s vysokými NA a vysokým zvětšením dosahuje úrovně, kdy je výhodnější analyzovat přímo PSF [21][22] a navázat na metody typu „Star test”. Phase retrieval [23] představuje souhrnný název pro metody rekonstrukce fáze. V této diplomové práci tak budeme označovat metody využívající intenzitních skenů v obrazovém prostoru (viz obrázek 3). Přímý vztah mezi fází $\Phi(x, y)$ a rozložením intenzity v obrazovém prostoru $I(x, y)$ popisuje rovnice transportu intenzity (TIE) a v paraxiální aproximaci platí [6]

$$-k \frac{\partial I(x, y)}{\partial z} = \nabla I(x, y) \nabla \Phi(x, y) + I(x, y) \Delta \Phi(x, y), \quad (1)$$

kde k je vlnový vektor. Jedná se o parciální diferenciální rovnici 2. řádu. Řešení není možné nalézt pro Φ explicitně. Řešení takového inverzního problému začneme v další kapitole volbou vhodného zobrazovacího modelu.

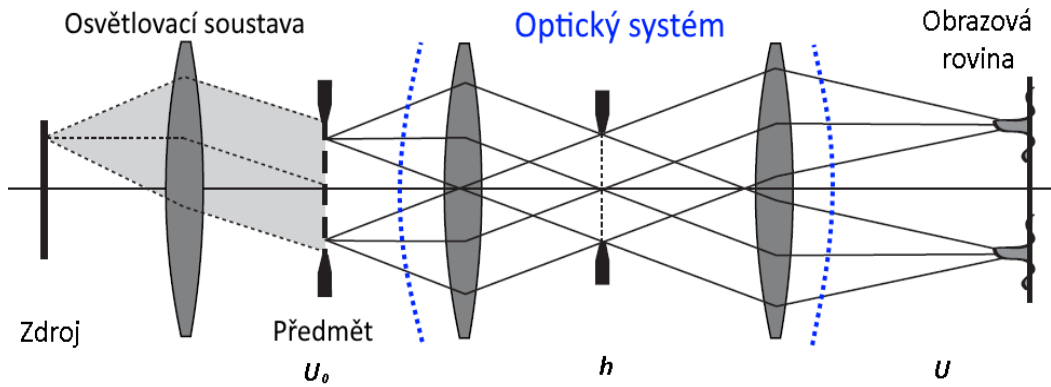
2.2 Zobrazovací model

Propagaci záření lze studovat v plné obecnosti pomocí Maxwellových rovnic [24]. Přímé použití je komplikované a těžko uchopitelné. Proto se s výhodou využívá zjednodušených modelů pro popis OS.

Konvoluce bodové rozptylové funkce

Pro účely vyhodnocení kvality projekční optiky, tedy optických systémů z konečna do konečna, je zobrazovací model založený na impulsním přístupu více přímočarý oproti frekvenčnímu přístupu [10]. Impulsní přístup je založen na konvoluci pole komplexní amplitudy předmětu U_0 a impulsní odezvy h optického systému (viz obrázek 4). Každý bod předmětu vytváří v obrazové rovině bodovou rozptylovou funkci (PSF). Výsledný obraz je vytvořen koherentním sčítáním pole komplexní amplitudy U . V případě nekoherentního zdroje se tento postup opakuje pro každý bod předmětu a sčítají se intenzity.

Komplexní amplituda v obrazovém prostoru se získá výpočtem vhodného difrakčního integrálu.



Obrázek 4: Měřící schéma založené na konvoluci bodové rozptylové funkce. Bod nekoherentního zdroje záření vytvoří koherentní prosvícení předmětu. Obraz je vytvořen koherentní sumací všech PSF bodových zdrojů tvořících předmět. Praktická realizace metody PR založená na modelu konvoluce bodové rozptylové funkce nevyžaduje další pomocnou optiku. Modře naznačeny hranice optického systému. Převzato z [25], upraveno.

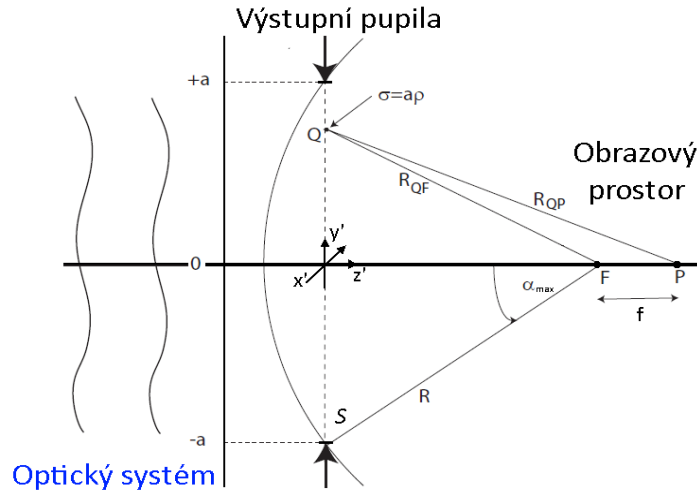
Difrakční model

Vhodná volba difrakčního integrálu je klíčová pro přesnost metody PR. Nepřesný model generuje systematickou chybu³.

Kladení hraničních podmínek na prostředí a prostor, ve kterém řešíme Maxwellovy rovnice [24] nám umožní odvodit vlnovou rovnici. Za předpokladu zanedbání jevů vektorové povahy (polarizace, dvojlom, ...) je možné vektor popisující jednotlivé složky pole (E_x, E_y, E_z) nahradit skalární veličinou: komplexní amplitudou U . Platnost skalární vlnové rovnice je omezena vlnovou délkou záření λ . V případě monochromatického záření dále redukuje skalární vlnovou rovnici na časově nezávislou rovnici Helmholtzovu. Využitím Greenova teorému a vhodnou volbou Greenovy funkce G je možné odvodit Kirchhoffův difrakční integrál [9] ve tvaru

$$U(x, y) = \frac{1}{4\pi} \iint_S \left(\frac{\partial U}{\partial n} G - U \frac{\partial G}{\partial n} \right) ds, \quad (2)$$

kde U je pole komplexní amplitudy na ploše S a n vektor kolmý na plochu S . Přestože Kirchhoffův difrakční integrál dává přesné výsledky, jeho hraniční podmínky nejsou v souladu s teorií potenciálů [24].



Obrázek 5: Difrakce na kruhové apertuře S . Pozice obecného bodu Q na kruhové apertuře o poloměru a má normované souřadnici $a\rho$. Geometrická numerická apertura je definována jako $NA = \sin(\alpha_{max}) = a/R$, kde R je poloměr křivosti sférické vlny. Vzdálenost f mezi ohniskovou rovinou a libovolnou další rovinou vyjadřuje míru defokusu. Převzato z [26], upraveno.

³Z pohledu interferometrie je metoda phase retrieval metodou relativní a difrakční model představuje formu kalibru.

Rayleigh-Sommerfeldův difrakční integrál

Rešením (2) je výběr Greenovy funkce ve tvaru sférické vlny, která vede na difrakční integrál Rayleigh-Sommerfeldova typu. S využitím Huygens-Fresnelova principu je možné psát Rayleigh-Sommerfeldův integrál I typu⁴

$$U_{RS1}(x, y, z; z') = -\frac{z - z'}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} U_S(x', y', z') \frac{e^{ikR_{QP}}}{R_{QP}^3} (ikR_{QP} - 1) dx' dy', \quad (3)$$

kde k je vlnový vektor a R_{QP} vzdálenost libovolného bodu Q ve výstupní pupile a libovolného bodu P [26]. Komplexní amplituda se sférickou fází ve výstupní pupile má tvar

$$U_S(x', y', z') = |U_S(x', y')| \frac{e^{-ikR_{QF}}}{R_{QF}}, \quad (4)$$

kde R_{QF} je vzdálenost libovolného bodu Q ve výstupní pupile a osového ohniskového bodu F (viz obrázek 5). V mnoha případech platí ($kR_{QP} \gg 1$) což umožňuje zanedbat člen (-1) v $(ikR_{QP} - 1)$. Hovoříme o nekompletním Rayleigh-Sommerfeldově integrálu $RS1_{inc}$ [26], který není dostatečně přesnou aproximací pro velmi blízká pole ($z \rightarrow z'$).

Debye-Wolfův difrakční integrál

Další aproximace, která zjednoduší integrál $RS1_{inc}$ a umožní jeho analytické řešení, vyplývá z rozkladu do spektra rovinných vln [10]. Úhlové spektrum \tilde{U} se vypočítá Fourierovou transformací

$$\begin{aligned} \tilde{U}(z'; k_x, k_y) &= \iint_S U_S(x', y', z') e^{-i(k_x x' + k_y y')} dx' dy' = \\ &\begin{cases} \frac{2\pi}{ik_z} |U_S| \left(x - \frac{k_x}{k_z}(z - z'), y - \frac{k_y}{k_z}(z - z') \right) e^{-i[k_x x + k_y y + k_z(z - z')]}, & v \quad \Omega \\ 0, & mimo \quad \Omega, \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

kde Ω je prostorový úhel definovaný numerickou aperturou $\sin \alpha_{max}$ (viz obrázek 5). Tato Debyeova aproximace omezí spektrum na frekvence, které jsou geometricky určeny velikostí výstupní pupily OS a zavede ostré hraniční podmínky.

Po provedení inverzní Fourierovy transformace a převodu do polárních souřadnic se nejčastěji uvádí Debye-Wolfův difrakční integrál (DW) v paraxiální aproximaci (za splnění podmínky $k_z^2 \gg (k_x^2 + k_y^2)$) ve tvaru [6]

$$U_D(r, \phi, f) \approx \frac{-i(NA)^2}{\lambda} e^{i\frac{2f}{(NA)^2}} e^{i\frac{\pi\lambda r^2}{R(NA)^2}} \iint_{\Omega} e^{-if\rho^2} P(\rho, \theta) e^{-i2\pi r\rho \cos(\theta - \phi)} \rho d\rho d\theta, \quad (6)$$

⁴Volíme Rayleigh - Sommerfeldův integrál prvního typu, protože pracuje s polem komplexní amplitudy, nikoliv s jeho derivací. Integrál lze také formulovat konvolučním teorémem a chápat jako propagaci úhlového spektra.

kde f představuje defokus (viz obrázek 5), (ρ, ϕ) normované polární souřadnice podle (10) a $P(\rho, \theta)$ pupilovou funkci.

Rozšíření DW (6) za paraxiální aproximaci je možné [6] korekcí podélné souřadnice

$$e^{ik_z(z-z_f)} = e^{ik(z-z_f)} \sqrt{1 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2}} = e^{ik(z-z_f)} \sqrt{1 - \rho^2 (NA)^2}. \quad (7)$$

Podélná souřadnice je s ohledem na numerickou aperturu normována

$$z - z_f = -\frac{f}{ku_0}, \quad (8)$$

kde $u_0 = 1 - \sqrt{1 - (NA)^2}$. Dostáváme finální vztah pro DW ve skalární aproximaci

$$U_D(r, \phi, f) \approx \frac{-i(NA)^2}{\lambda} e^{-i\frac{f}{u_0}} e^{i\frac{\pi\lambda r^2}{R(NA)^2}} \iint_{\Omega} e^{if\frac{1 - \sqrt{1 - (NA)^2\rho^2}}{u_0}} P(\rho, \theta) e^{-i2\pi r\rho \cos(\theta - \phi)} \rho d\rho d\theta. \quad (9)$$

Normování souřadnic v (9) je provedeno podle

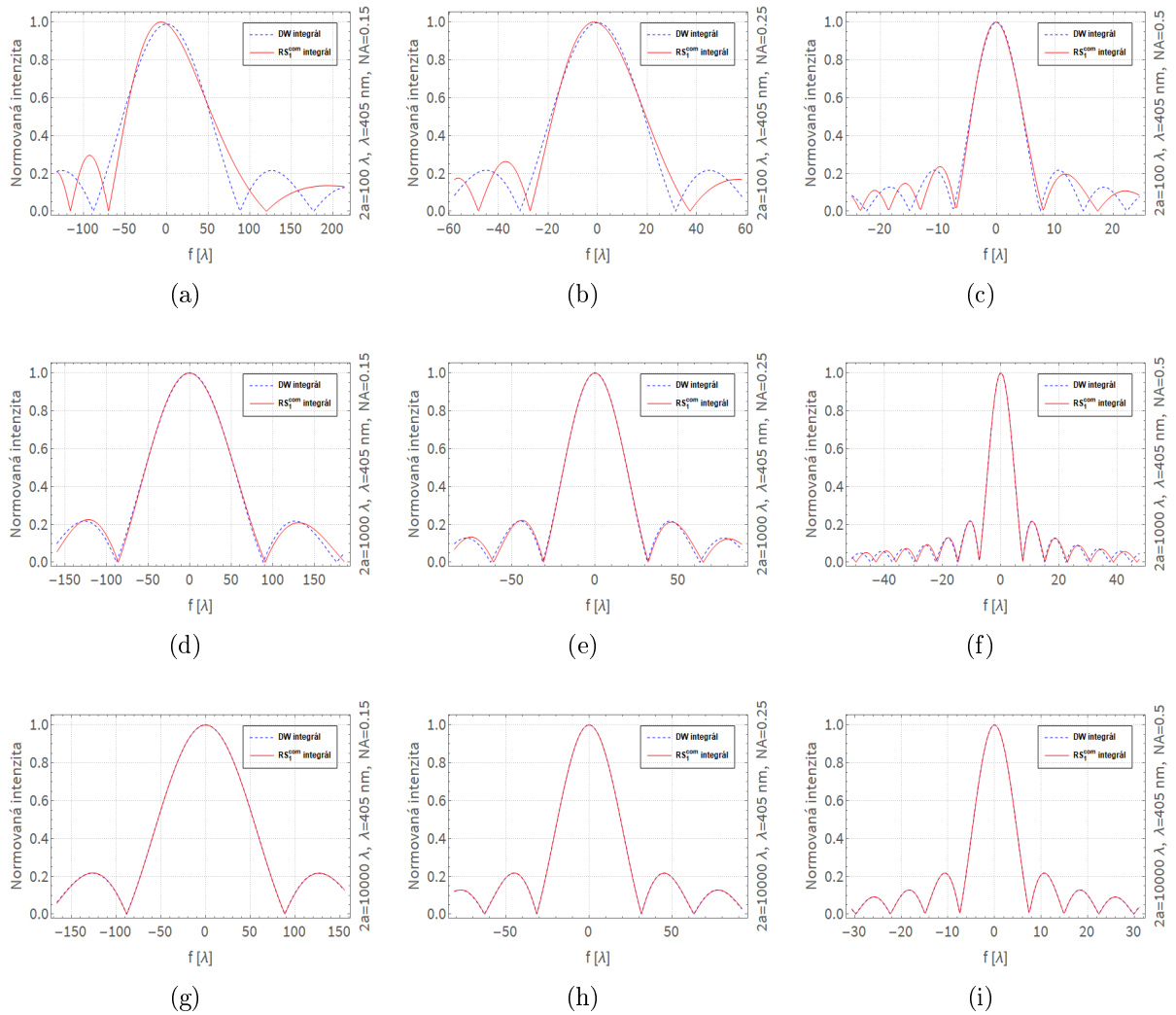
$$\begin{aligned} x &= X \frac{NA}{\lambda}, & y &= Y \frac{NA}{\lambda} \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2}, & (x, y) &= (r \cos \phi, r \sin \phi), \\ f &= \frac{2\pi}{\lambda} Z(1 - \sqrt{1 - NA^2}) \end{aligned} \quad (10)$$

kde (X, Y) jsou reálné axiální souřadnice a Z reálná vzdálenost od ohniskové roviny. Zavedením ostrých hraničních podmínek při odvození DW vede na odchylky od Rayleigh-Sommerfeldova difrakčního integrálu, které jsou analyzovány v další podkapitole.

Porovnání difrakčních integrálů

Porovnání difrakčních integrálů (viz obrázek 6) stanovuje limity analyticky uchopitelného Debye-Wolfova difrakčního integrálu (DW). DW vede na řešení symetrické vůči ohnisku a nepostihuje tak nesymetrii difrakčního pole [27]. Pro blízká pole a malé průměry výstupní pupily není DW dobrou aproximací Rayleigh-Sommerfeldova difrakčního integrálu. S těmito případy se v optice běžně nesetkáváme (velmi blízká pole, mikro-apertury, ...) a většinu zobrazovacích OS je proto možné řešit metodou Phase retrieval s využitím Debye-Wolfova difrakčního integrálu jako přesného modelu.

V této diplomové práci uvažujeme komplexní amplitudu U jako skalární veličinu. V případech zobrazovacích systémů s vysokou numerickou aperturou nelze zanedbat jevy vektorové povahy (polarizaci, dvojlom materiálu, ...). Pokud není možné tyto jevy zanedbat, je nutné použít odlišný zobrazovací model.



Obrázek 6: Porovnání Rayleigh-Sommerfeldova difrakčního integrálu (3) a Debye-Wolfova difrakčního integrálu (9) na optické ose v okolí ohniska pro různé velikosti průměru výstupní pupily $2a$ (směrem dolů: 40.5 μm , 405 μm , 4.05 mm) na vlnové délce 405 nm. Numerická apertura NA (zleva: 0.15, 0.25, 0.5). Intenzita normována na Rayleigh-Sommerfeldův difrakční integrál. Pro velikosti apertury v řádu milimetrů a větší (g,h,i) je Debye-Wolfovův difrakční integrál velmi přesnou aproximací Rayleigh-Sommerfeldova difrakčního integrálu.

3 Nijboer-Zernikova teorie pro Phase retrieval

Vhodným difrakčním integrálem pro metodu Phase retrieval se jeví DW (9). Poskytuje přímý vztah mezi výstupní pupilou a obrazovým ohniskovým prostorem. Pomocí Nijboer-Zernikovy teorie představíme v této kapitole jeho analytické řešení.

B. Nijboer již ve 40. letech přišel s jeho analytickým řešením [28] pro speciální případy, například ohniskovou rovinu ($f = 0$). Nedostatek výpočetního výkonu a fakt, že analytické řešení bylo známo pouze pro velmi blízkou oblast ohniska, zpozdilo praktické využití této teorie o desítky let. V roce 2002 byla představena práce [29], která posunula původní Nijboer-Zernikovu teorii (NZ). Hovoříme o rozšířené Nijboer-Zernikově teorii (ENZ), která umožňuje nalezení analytického řešení DW difrakčního integrálu mimo ohniskovou rovinu ($f \neq 0$) pro OS vykazující optické aberace.

Hlavní ideou je reprezentace pupilové funkce pomocí Zernikových polynomů a výpočet PSF pomocí Besselových řad, kterými aproximujeme DW. V následujících podkapitolách představíme základní vztahy pro výpočet PSF v obrazovém ohniskovém prostoru založený na NZ a ENZ teorii.

3.1 Reprezentace pupilové funkce Zernikeho polynomy

Pro výpočet PSF potřebujeme znát pole komplexní amplitudy ve výstupní pupile. Pupilovou funkci zdefinujeme jako

$$P(\rho, \theta) = A(\rho, \theta)e^{i\Phi(\rho, \theta)}, \quad (11)$$

kde A představuje nezápornou funkci propustnosti a Φ reálnou fázovou funkci. Funkci Φ je možné reprezentovat sadou polynomů, které lze následně interpretovat jako optické aberace. Bodový zdroj zobrazený dokonalým OS bez aberací má uniformní rozložení amplitudy a sférickou fázi ve výstupní pupile.

Pro reprezentaci Φ se v teorii Seidelových aberací [6] využívalo mocninného rozvoje, který nabýval tvaru

$$\Phi(\rho, \theta) = \sum_{kl} a_{kl} \rho^k \cos^l(\theta). \quad (12)$$

Aberace vyšších řádů ztrácely význam kvůli neortogonalitě v ρ a θ .

Průlomem pro teorii aberací se stala práce F. Zernika a odvození kruhových polynomů [30]. Rozvoj Φ pomocí Zernikových polynomů lze psát

$$\Phi(\rho, \theta) = \sum_{n,m} \alpha_n^m N_n^m Z_n^m(\rho, \theta), \quad (13)$$

kde

$$Z_n^m(\rho, \theta) = R_n^m(\rho) \cdot \begin{cases} \cos(m\theta), & m \geq 0, \\ \sin(m\theta), & m < 0 \end{cases} \quad (14)$$

je Zernikův polynom radiálního stupně n a azimutálního stupně m . Radiální polynom $R_n^m(\rho)$ má tvar

$$R_n^m(\rho) = \sum_{k=0}^{\frac{n-m}{2}} \frac{(-1)^k (n-k)!}{k! \left(\frac{n+m}{2} - k\right)! \left(\frac{n-m}{2} - k\right)!} \rho^{n-2k} \quad (15)$$

pro $n, m \geq 0$ a sudé $n - m$.

$$N_n^m = \begin{cases} \sqrt{n+1}, & m = 0, \\ \sqrt{2(n+1)}, & m \geq 1 \end{cases} \quad (16)$$

je normovací funkce.

Zernikovy polynomy jsou ortogonální na jednotkovém kruhu a představují ideální nástroj pro analýzu kruhově symetrických OS⁵. V této práci používáme vlastní značení Zernikových polynomů (viz příloha A), které vychází ze standardu ANSI [31]. S takto zavedenými Zernikovými polynomy je možné řešit DW pomocí rozkladu do nekonečných řad Besselových funkcí a získat analytický model PSF.

3.2 Analytický model PSF - Nijboer-Zernikova teorie (NZ)

Vztah mezi Zernikovými polynomy ve výstupní pupile OS a příspěvkem k PSF v obrazovém prostoru analyzujeme nejprve pro fázovou ($A = 1$) pupilovou funkci $P(\rho, \theta) = e^{i\Phi(\rho, \theta)}$. Vyjdeme z DW (9), kde pro přehlednost vynecháváme členy před integrálem a předpokládáme skalární aproximaci podle (7-9)

$$U(r, \phi; f) = \int_0^1 \int_0^{2\pi} e^{-if\rho^2} e^{i\Phi(\rho, \theta)} e^{-i2\pi r \rho \cos(\theta - \phi)} \rho d\rho d\theta. \quad (17)$$

Taylorovým rozvojem $e^{i\Phi(\rho, \theta)}$ získáme

$$U(r, \phi; f) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \exp^{if\rho^2} \Phi^k(\rho, \theta) \exp^{i2\pi r \rho \cos(\theta - \phi)} \rho d\rho d\theta. \quad (18)$$

Rozvoj $\Phi(\rho, \theta)$ do Zernikových polynomů podle (13) a integrace (18) podle θ s použitím elementárních Besselových funkcí [32] vede po vynechání členu ($k = 0$) a za předpokladu malých aberací (zanedbání členů řady $k > 1$) na vztah

$$U(r, \phi; f) = 2 \int_0^1 \exp^{if\rho^2} J_0(2\pi r \rho) \rho d\rho + 2 \sum_{n,m}^{\prime} i^{m+1} \alpha_{nm} \cos m\phi \int_0^1 \exp^{if\rho^2} R_n^m(\rho) J_m(2\pi r \rho) \rho d\rho. \quad (19)$$

J_m je Besselova funkce prvního druhu, m -tého řádu. Apostrof nad sumou vynechává člen ($n = m = 0$). Vztah (19) je uveden pouze pro sudé členy ($m \geq 0$). Analogicky bychom postupovali při odvození lichých členů ($m < 0$). K dalšímu zjednodušení (19) dojde použitím identity

$$\int_0^1 \rho R_n^m(\rho) J_m(2\pi r \rho) d\rho = (-1)^{\frac{n-m}{2}} \frac{J_{n+1}(2\pi r)}{2\pi r}, \quad (20)$$

⁵Většina optických systémů.

kteřá představuje hlavní výsledek původní práce Nijboera [28] a umožňuje analyticky spočítat PSF v obrazové ohniskové rovině ($f = 0$)

$$U(r, \phi; f = 0) = \frac{J_1(2\pi r)}{\pi r} + \sum_{n,m} i^{n+1} \frac{J_{n+1}(2\pi r)}{2\pi r} \alpha_n^m \cos m\phi. \quad (21)$$

Výsledkem je Airyho funkce⁶ [9]

$$U_{airy}(x, y) = \frac{J_1(2\pi r)}{\pi r}, \quad (22)$$

kde J_1 je Besselova funkce prvního druhu a prvního řádu. V přítomnosti aberací se načítají jednotlivé příspěvky k Airyho funkci (22). Aproximace, které k tomuto výsledku vedou ($f = 0$), znemožňují jeho další využití pro rekonstrukci fáze.

3.3 Analytický model PSF - Rozšířená Nijboer-Zernikova teorie (ENZ)

V předešlé části byl analyzován výpočet PSF pomocí NZ teorie v blízkosti ohniskové roviny (19-21). V této části je představen výpočet PSF obecné pupilové funkce v obrazovém prostoru s využitím mocninné-Besselovy a Bessel-Besselovy řady.

Zobecněná pupilová funkce

Zavedení zobecněné pupilové funkce nám umožní studovat vliv amplitudy i fáze ve výstupní pupile na tvar PSF. Zobecněnou pupilovou funkci definujeme pomocí komplexních koeficientů β_n^m

$$P(\rho, \theta) = A(\rho, \theta) e^{i\Phi(\rho, \theta)} = \sum_{n,m} \beta_n^m N_n^m Z_n^m(\rho, \theta), \quad (23)$$

kde

$$Z_n^m(\rho, \theta) = R_n^{|m|}(\rho) e^{im\theta} \quad (24)$$

představuje zobecněný Zernikův polynom. Parametrizace pupilové funkce β_n^m koeficienty je efektivní a kompaktní pro výpočet. Vztah mezi příspěvkem jednotlivých koeficientů k amplitudě a fázi vyžaduje dodatečnou transformaci [25]

$$\beta_n^m = \frac{\beta_{n,c}^m}{2} - i \frac{\beta_{n,s}^m}{2}, \quad \beta_n^{-m} = \frac{\beta_{n,c}^m}{2} + i \frac{\beta_{n,s}^m}{2}, \quad (25)$$

kteřou lze v případě pouze fázových aberací zavést jako

$$\beta_n^m = i \frac{\alpha_{n,c}^m}{2} + \frac{\alpha_{n,s}^m}{2}, \quad \beta_n^{-m} = i \frac{\alpha_{n,c}^m}{2} - \frac{\alpha_{n,s}^m}{2}, \quad (26)$$

kde

$$\beta_{n,c}^m = i\alpha_{n,c}^m, \quad \beta_{n,s}^m = i\alpha_{n,s}^m, \quad \beta_0^0 = 1. \quad (27)$$

Čistě imaginární část koeficientu β_n^m je ekvivalentním zápisem pupilové funkce v NZ teorii (17) pomocí Zernikových koeficientů α_n^m (13) a popisuje fázové aberace. Naopak reálná část zahrnuje neuniformitu amplitudy ve výstupní pupile.

⁶Někdy se hovoří o Jinc funkci. První minimum této funkce pak určuje tzv. Rayleighovu rozlišovací mez [9].

Analytický model - mocnná Besselova řada

Po dosazení (23) do (18) a provedení integrace podle θ dostáváme vztah pro výpočet PSF [33]

$$U(r, \phi; f) = 2 \sum_{n,m} \beta_n^m i^{|m|} V_n^m(r, f) e^{im\phi}, \quad (28)$$

kde

$$V_n^m(r, f) = \int_0^1 e^{if\rho^2} R_n^{|m|}(\rho) J_m(2\pi r\rho) \rho d\rho. \quad (29)$$

Řešení (29) pomocí nekonečné mocnné-Besselovy řady budeme značit levým horním indexem ${}^{pb}V_n^m(r, f)$

$${}^{pb}V_n^m(r, f) = \epsilon_m e^{if} \sum_{l=1}^{\infty} (-2if)^{l-1} \sum_{j=0}^p v_{lj} \frac{J_{|m|+l+2j}(2\pi r)}{l(2\pi r)^l}, \quad (30)$$

kde $\epsilon_m = -1$ pro liché $m < 0$, jinak $\epsilon_m = 1$ a

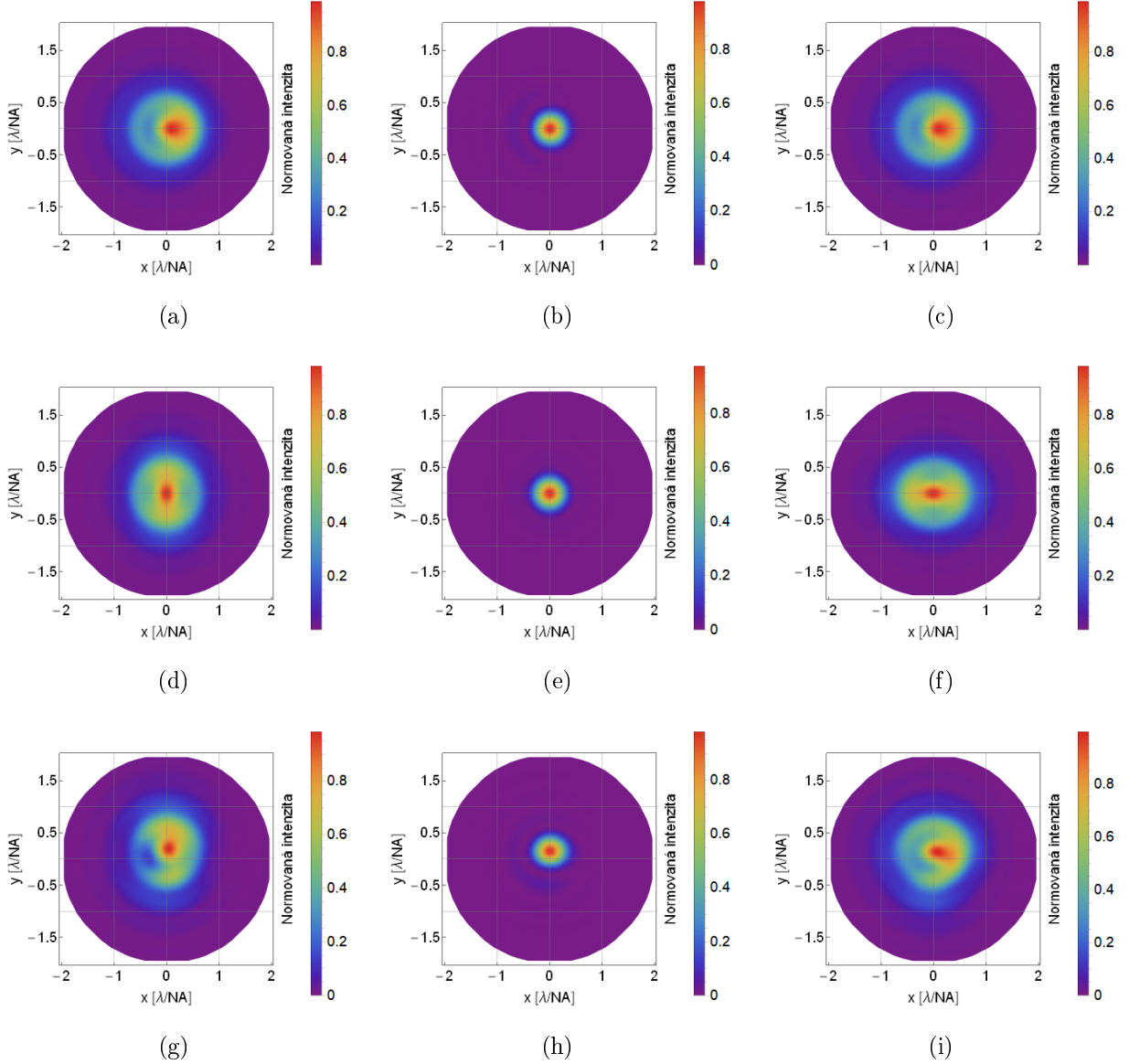
$$v_{lj} = (-1)^p (|m| + l + 2j) \binom{|m| + j + l - 1}{l - 1} \binom{j + l - 1}{l - 1} \binom{l - 1}{p - j} / \binom{q + l + j}{l}, \quad (31)$$

kde $l = 1, 2, \dots$, $j = 0, 1, \dots, p$ se vztahem k Zernikovým indexům n, m

$$p = \frac{n - |m|}{2}, \quad q = \frac{n + |m|}{2}. \quad (32)$$

Ekvivalentní vztah pro v_{lj} , který připomíná Lommelovu řadu pro případ bez aberací lze nalézt v [25].

V případě dokonalého OS je výsledkem (28) pole komplexní amplitudy $U(r, \phi; f) = {}^{pb}V_0^0(r, f)$ s jedinným nenulovým členem $\beta_0^0 = 1$. Pro případ ($f = 0$) opět dostáváme Airyho funkci (22). Výpočet PSF pomocí (28) a mocnné-Besselovy řady (30) pro vybrané optické aberace je na obrázku 7.



Obrázek 7: Výpočet PSF (28) pomocí ${}^{pb}V_n^m(r, f)$. Vliv aberací na rozložení normované intenzity v okolí ohniska pro OS s $NA = 0.5$ a $\lambda = 405\text{nm}$. Zleva intenzita pole $0.96\ \mu\text{m}$ před ohniskem, v ohnisku a $0.96\ \mu\text{m}$ za ohniskem. (a,b,c) - Vliv komy 3. řádu ($\alpha_3^1 = 0.5\ \lambda$), (d,e,f) - Vliv astigmatismu 3. řádu ($\alpha_2^2 = 0.5\ \lambda$), který se projevuje typickou rotací o 90° před a za ohniskem. (g,h,i) - Mix aberací (α_3^1, α_2^2) = ($0.5\ \lambda, 0.5\ \lambda$) s vertikálním náklonem $\alpha_1^{-1} = 1.5\ \lambda$.

Analytický model - Bessel-Besselova řada

Jedno z možných řešení V_n^m (29), které výrazně rozšíří platnost analytického modelu PSF, lze nalézt v [33]. Využívá Bauerovy identity

$$e^{if\rho^2} = e^{i\frac{f}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n j_n\left(\frac{f}{2}\right) R_{2n}^0(\rho), \quad (33)$$

kde

$$j_k(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{k+\frac{1}{2}}(x) \quad (34)$$

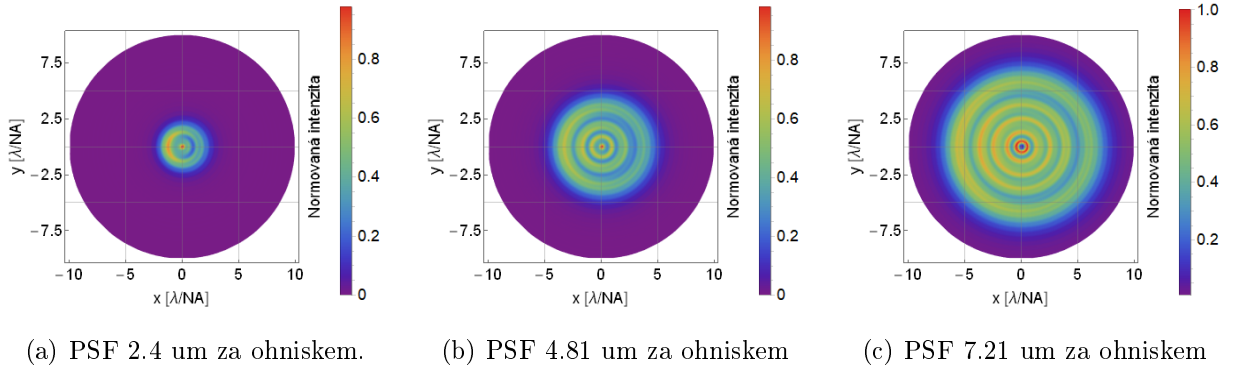
je sferická Besselova funkce [32]. Výsledek vede po linearizaci součinu radiálních Zernikových polynomů na Bessel-Besselovu řadu, kterou budeme značit $^{bb}V_n^m(r, f)$, ve tvaru

$$^{bb}V_n^m(r, f) = e^{\frac{1}{2}if} \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1) i^k j_k\left(\frac{1}{2}f\right) \sum_{l=\max(0, k-q, p-k)}^{k+p} (-1)^l w_{kl} \frac{J_{m+2l+1}(2\pi r)}{(2\pi r)}, \quad (35)$$

kde

$$w_{kl} = \sum_{s=0}^p \sum_{t=0}^{\min(k,s)} f_{ps}^m b_{kst} g_{k+s-2t, l}^m \quad (36)$$

Funkce f, b, g lze nalézt v [25]. $^{bb}V_n^m(r, f)$ zůstává v platnosti i pro komplexní hodnoty parametru f .



Obrázek 8: Výpočet PSF (28) pomocí $^{bb}V_n^m(r, f)$ (35) lze narozdíl od $^{pb}V_n^m(r, f)$ použít pro výpočet PSF ve větších vzdálenosti od ohniska. Zleva PSF 2.4 um, 4.81 um a 7.21 um za ohniskem. Zobrazen vliv komy 3. řádu ($\alpha_3^1 = 0.5 \lambda$) na tvar PSF pro OS s $NA = 0.5$ a $\lambda = 405$ nm.

Analytické řešení Debye-Wolfova integrálu pomocí rozkladu do mocninné-Besselovy $^{pb}V_n^m(r, f)$ nebo Bessel-Besselovy $^{bb}V_n^m(r, f)$ řady použijeme jako přesného modelu pro účely rekonstrukce fáze. Podrobnou analýzu a implementaci do prostředí Wolfram Mathematica provedeme v následující kapitole.

4 Phase retrieval v prostředí Wolfram Mathematica

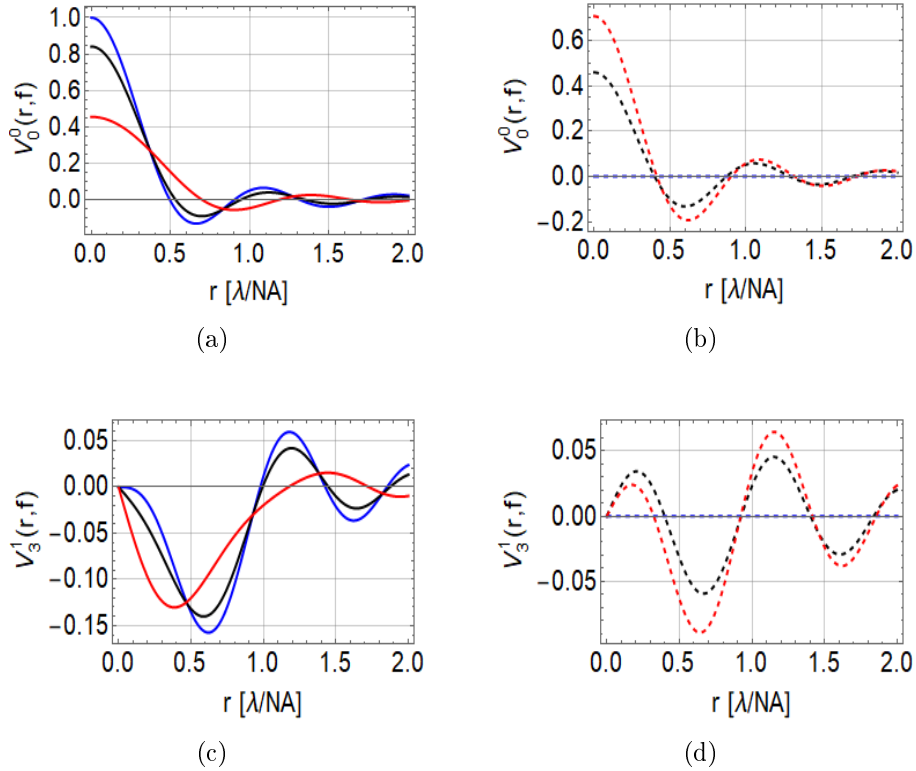
V prostředí Wolfram Mathematica 12.0. byly implementovány algoritmy pro přesný výpočet modelu PSF pomocí Debye-Wolfova difrakčního integrálu (9) a pro řešení inverzního problému rekonstrukce fáze z intenzitních skenů.

V následujících podkapitolách se nejprve zaměříme na analýzu Besselových řad (30) a (35) pro výpočet modelu PSF. Stanovíme mezní počet členů pro dosažení požadované přesnosti při akceptovatelném výpočetním čase. Dále představíme tři řešení inverzního problému, které byly implementovány v prostředí Wolfram Mathematica. Důraz klademe na metodu globální optimalizace, které věnujeme největší pozornost. Na závěr analyzujeme nejistoty, se kterými se můžeme během experimentu potýkat: šum kamery, konečná velikost bodového zdroje a nepřesnosti vnitřních parametrů systému (f, NA) na rekonstrukci. Při simulacích používáme vlnovou délku 405 nm⁷, pokud není uvedeno jinak.

⁷Vlnovou délku do analýzy nejistot nezahrnujeme. Předpokládáme velmi dobře stabilizovaný zdroj.

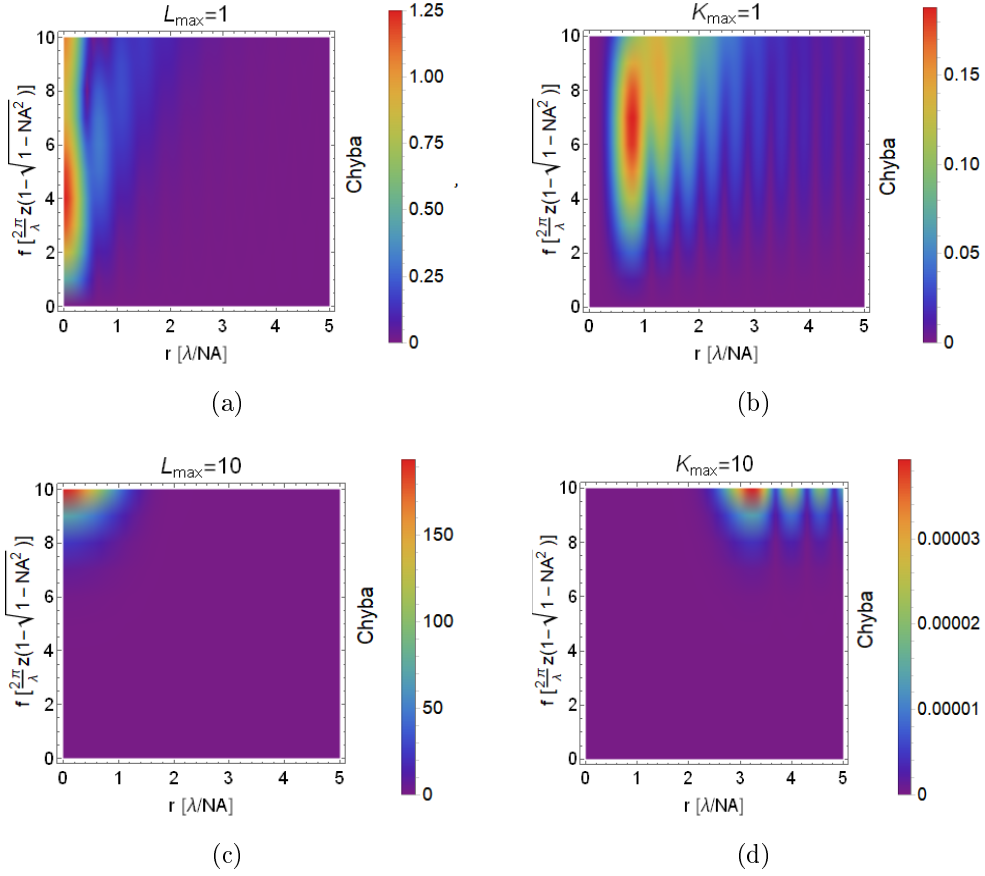
4.1 Rozvoj funkce V_n^m pomocí Besselových řad

Podle vztahu (30) lze provést rozvoj funkce $V_n^m(r, f)$ v nekonečnou mocninnou-Besselovu řadu ${}^{pb}V_n^m$ nebo podle (35) v nekonečnou Bessel-Besselovu řadu ${}^{bb}V_n^m$. Na obrázku 9 je znázorněn průběh reálné a imaginární části ${}^{bb}V_n^m$ a normované intenzity pro případ bez aberací ($n = 0, m = 0$) a pro komu 3. řádu ($n = 3, m = 1$). V případě $f = 0$ je imaginární část nulová a výpočet se značně zjednodušuje.



Obrázek 9: Reálná část (a, c) a imaginární část (b, d) funkce ${}^{bb}V_n^m$ pro $K_{max} = 35$. Nahoře případ bez aberací ($n = m = 0$), dole pro komu 3. řádu ($n = 3, m = 1$). V případě $f = 0$ (modře) je imaginární část podle (35) rovna nule.

Nyní provedeme porovnání a stanovíme limity pro výpočet Besselových řad s konečným počtem členů L_{max} řady ${}^{pb}V_n^m$ v rovnici (30) a počtu členů K_{max} řady ${}^{bb}V_n^m$ v rovnici (35). Jako referenci použijeme numericky vypočítanou funkci $V_n^m(r, f)$ z rovnice (29). Na obrázku 10 je znázorněna chyba vypočítaných řad v obrazovém prostoru (r, f) normovaných souřadnic pro malý počet členů řad.



Obrázek 10: Chyba podle (38) mocninné-Besselovy ${}^{pb}V_n^m$ (vlevo) a Bessel-Besselovy ${}^{bb}V_n^m$ (vpravo) řady pro $L_{max} = \{1, 10\}$ a $K_{max} = \{1, 10\}$ v obrazovém ohniskovém prostoru (r, f) . Chyba ${}^{pb}V_n^m$ pro větší hodnoty f v porovnání s ${}^{bb}V_n^m$ značí, že nebude vhodnou volbou pro výpočet PSF ve větších vzdálenostech od ohniska. Naproti tomu ${}^{bb}V_n^m$ vykazuje odchylky v proměnné r , ale s výrazně nižší amplitudou.

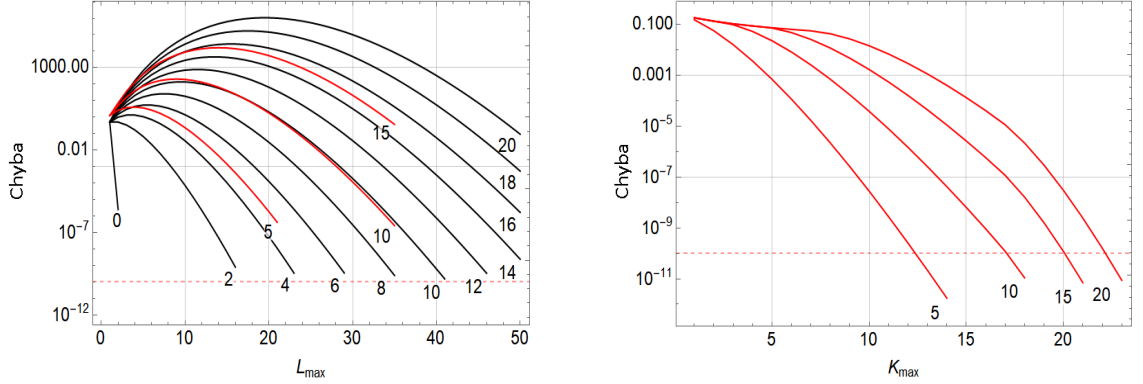
Mocninná Besselova řada ${}^{pb}V_n^m$ dobře aproximuje funkci $V_n^m(r, f)$ v souřadnici r . Její amplituda závisí na hodnotě souřadnice f přibližným vztahem [33]

$$\approx \frac{1}{2l!} |f|^{l-1}. \quad (37)$$

Analýza potřebného počtu členů řady pro konkrétní f je na obrázku 11. Je tak možné odhadnout minimální počet členů řad pro maximální chybu definovanou jako

$$\max_{r \leq 5, f \leq 10} \left| |2^{pb}V_n^m(r, f)| - |2V_n^m(r, f)| \right|, \quad (38)$$

shodně pro $^{bb}V_n^m(r, f)$, kde $V_n^m(r, f)$ je vypočteno numericky.

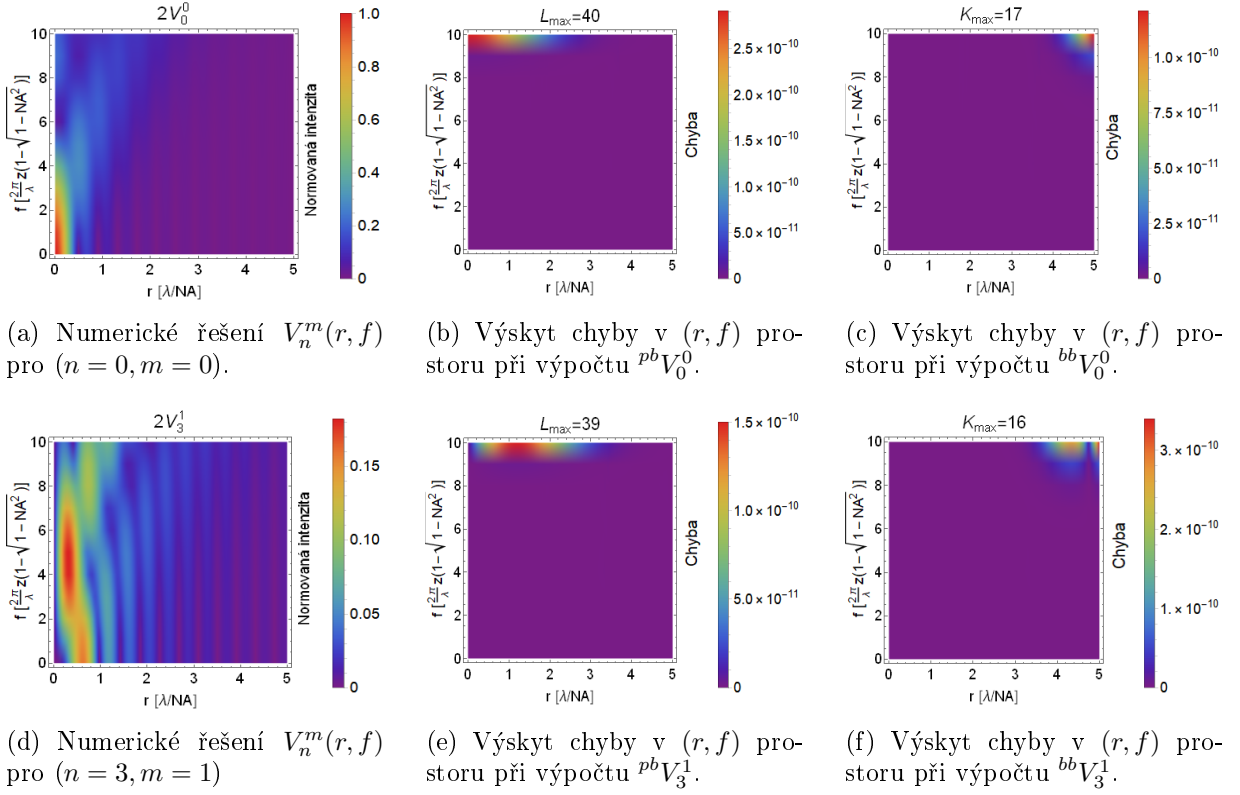


(a) Černě teoretická přesnost $^{pb}V_0^0$ podle počtu členů L_{max} (37). Červeně simulace pro ověření. Mocninná-Besselova řada má problémy s konvergencí. Je nutný velký počet členů řady. I tak nemusí být konvergence zaručena.

(b) Provedená simulace $^{bb}V_0^0$. Bessel-Besselova řada dobře konverguje.

Obrázek 11: Vykreslení chyby (38) oproti numerickému řešení V_n^m pro $^{pb}V_n^m$ (vlevo) a $^{bb}V_n^m$ (vpravo) v závislosti na parametru defokusu f (číslování u křivek) a příslušném počtu členů řady L_{max} nebo K_{max} . Červeně čárkovaně vyznačena hladina 10^{-10} .

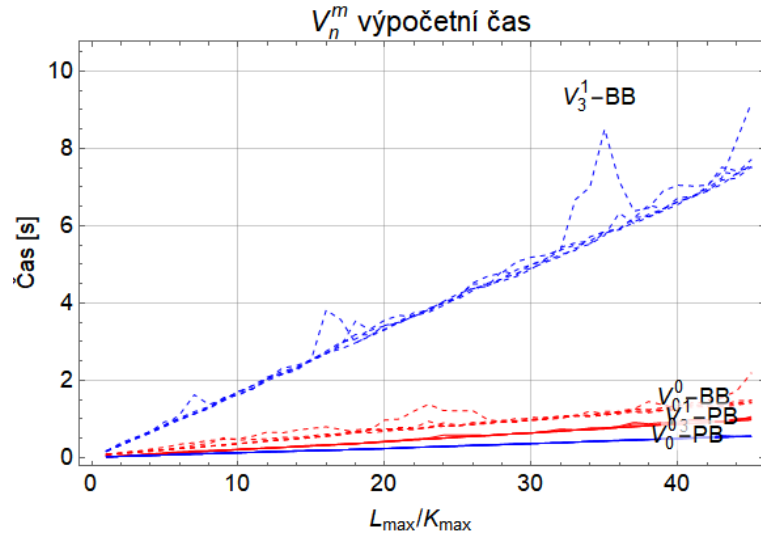
Numerický výpočet $V_n^m(r, f)$ v prostoru (r, f) je na obrázku 12 spolu s porovnáním $^{pb}V_n^m$ a $^{bb}V_n^m$. Pro dosažení přesnosti $\sim 10^{-10}$ v intervalu $r = (0, 5)$ a $f = (0, 10)$ definované v (38) je minimální počet členů řady $^{pb}V_n^m$ dobře reprezentován vztahem (37). Tímto způsobem lze při výpočtu PSF korigovat počet členů řady a pro roviny blízké ohnisku výrazně zkrátit výpočetní čas.



Obrázek 12: (a,d) - Numerické řešení $V_n^m(r, f)$ pro $(n = 0, m = 0)$ a pro komu 3. řádu $(n = 3, m = 1)$. (b,e) - Výskyt chyby pro případ $^{pb}V_n^m$ je převážně podél optické osy s parametrem f . (c, f) - V případě $^{bb}V_n^m$ je chyba spíše v radiální souřadnici.

Časové nároky na výpočet $^{pb}V_n^m$ a $^{bb}V_n^m$ se pohybují řádově v jednotkách sekund pro každý Zernikův polynom Z_n^m v (24), viz obrázek 13. Celkový výpočet modelu PSF pro 36 Zernikových polynomů trvá několik minut podle použitého vzorkování.⁸). Výpočet modelu není limitujícím faktorem, protože jeho platnost se zachovává pro daný OS. Model tak stačí vypočítat pouze jednou. Výpočetní čas modelu lze zrychlit paralelizací výpočtu nebo kontrolou počtu členů řady pro dané f .

⁸Procesor Intel(R) Core(TM) i5-10210U CPU @ 2.1 GHz



Obrázek 13: Výpočetní čas funkce $V_n^m(r, f)$ v závislosti na počtu členů řady L_{max} pro $^{pb}V_n^m$ červeně a K_{max} pro $^{bb}V_n^m$ modře. Výpočet proveden pro $(n = 0, m = 0)$ a $(n = 3, m = 1)$ a opakován 5X pro každý člen. Výpočetní čas závisí na navzorkování proměnné r (pro potřeby simulace použit krok $0.02 \lambda/NA$). Celkový výpočetní čas modelu pak závisí na počtu Zernikových polynomů použitých pro reprezentaci výstupní pupily v (23). Pro 36 Zernikových polynomů zabere řádově minuty.

Pro praktické výpočty je mocninná-Besselova řada použitelná v rozsahu cca $|f| < 10$ [33]. Ve větších vzdálenostech od ohniskové roviny dochází k výrazné ztrátě přesnosti a neúnosným výpočetním časům. Tyto limity překonává Bessel-Besselova řada, která umožňuje výpočet i pro $f \sim 100$ v rozumném čase.

Limit pro Bessel-Besselovu řadu není způsoben problémy s konvergencí v f jako v případě mocninné-Besselovy řady, ale pouze praktickým výpočetním časem a nároky na paměť [33].

4.2 Řešení inverzního problému: Rekonstrukční algoritmy

K řešení inverzního problému rekonstrukce fáze z intenzitních skenů existuje nespočet přístupů, například [14],[15],[23],[34]. V následujících podkapitolách se zaměříme na metody, které byly v rámci diplomové práce implementovány a testovány v prostředí Wolfram Mathematica.

Nelineární globální optimalizace

Optimalizační algoritmy obvykle vytvářejí lokální model problému. Mnoho takových algoritmů je založeno na zmenšování meritní funkce, tj. obecná funkce s hraničními podmínkami, jejíž globální minimum hledáme [35]. Meritní funkce zahrnuje další omezení a hraniční podmínky tak, aby se zajistila konvergence iteračního procesu. Takové algoritmy, pokud konvergují, najdou pouze lokální optima (odtud název lokální optimalizace). V Mathematice lze lokální optimalizaci vyřešit například použitím funkce *FindMinimum*. Wolfram Mathematica obsahuje také knihovnu s algoritmy pro globální nelineární optimalizaci s podmínkami [36]. Tyto algoritmy můžeme rozdělit do dvou kategorií: Metody přímého hledání a gradientní metody.

Gradientní metody počítají první (gradienty) nebo druhé (Hessiány) derivace meritní funkce. Do této kategorie spadají například metody Lagrangeových multiplikátorů, sekvencí kvadratické programování a jiné. Metody přímé, které jsou implementovány ve funkci *NMinimize* v Mathematice, nepočítají derivace meritní funkce. Patří zde *Nelder-Mead*, *genetic algorithm*, *differential evolution* a *simulated annealing* metody. Obecně lze říci, že tyto metody konvergují pomaleji, jsou náročnější na výpočetní čas, ale méně citlivé na přítomnost šumu.

Formulace optimalizační úlohy je následující:

Každá měřená rovina obsahuje právě X_p pixelů podle rozlišení kamery⁹. Měření je provedeno v X_f rovinách podél optické osy. Data jsou uspořádána do vektoru $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^X$, kde $X = X_p X_f$. Každý prvek I_k vektoru \mathbf{I} představuje naměřenou intenzitu se souřadnicemi (r_k, ϕ_k) v defokusované rovině f_k . Vektor $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^X$ má pro každý prvek g_k tvar $g_k = I_k - |U(r_k, \phi_k, f_k; \beta_n^m)|^2$. Řešení inverzního problému je nalezeno minimalizací meritní funkce

$$\min_{\beta_n^m \in \mathbb{C}^X} \|\mathbf{g}\|, \quad (39)$$

metodami globální optimalizace s podmínkami.

Nelder Mead

Metoda Nelder-Mead [36][37] vytváří pro funkci g s N proměnnými sadu $N+1$ bodů, které tvoří v N rozměrném prostoru mnohostěn, tzv. simplex. Každá iterace algoritmu se skládá z těchto kroků:

1. Uspořádání a výpočet těžiště

Body jsou uspořádány $g(x_1) \leq g(x_2) \leq \dots \leq g(x_{N+1})$. Je spočítáno těžiště c ze všech bodů vyjma $g(x_{N+1})$.

⁹Případně z podoblasti, ve které se nachází měřená PSF.

2. Reflexe

Výpočet reflexního bodu x_r podle $x_r = c + \alpha(c - x_{N+1})$, kde $\alpha > 0$ je koeficient reflexe. Pokud je splněna podmínka $g(x_1) \leq g(x_r) \leq g_{N+1}$, pak je nejhorší bod x_{N+1} nahrazen x_r a cyklus pokračuje krokem 1.

3. Expanze

Pokud x_r splňuje $g(x_r) < g(x_1)$, byla reflexe úspěšná a algoritmus vypočte expanzní bod $x_e = c + \beta(c - x_r)$, kde β je koeficient expanze. Při splnění podmínky $g(x_e) < g(x_r)$ je bod x_{N+1} nahrazen x_e . V opačném případě je bod x_{N+1} nahrazen x_r . V obou případech cyklus pokračuje krokem 1.

4. Kontrakce

Jestliže reflexní bod splňuje $g(x_r) \geq g(x_N)$, je simplex považován za příliš velký a následuje výpočet kontrakčního bodu

$$x_c = \left\{ \begin{array}{ll} c + \gamma(x_{N+1} - c), & g(x_r) \geq g(x_{N+1}), \\ c + \gamma(x_r - c), & g(x_r) < g(x_{N+1}) \end{array} \right\},$$

kde γ reprezentuje kontrakční koeficient. Za podmínky $g_{x_c} < \min(g(x_{N+1}), g(x_r))$ je kontrakce úspěšná a x_c nahrazuje x_{N+1} . V opačném případě se kontrakce opakuje.

5. Zmenšení

Nahrazení všech bodů $x_i = x_1 + \delta(x_i - x_1)$ s koeficientem zmenšení δ .

V programu Wolfram Mathematica jsme vytvořili numerickou fázi ve výstupní pupile s koeficienty $(Z3, Z4, Z8) = (0.05, 0.01, -0.05)$ λ , kterou se pokusíme rekonstruovat.

Nastavení koeficientů metody Nelder-Mead volíme $(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = (2, 1, 0.5, 0.5)$ s počtem iterací 100. Volbu počátečních bodů x_i volí algoritmus se započítáním hraničních podmínek a omezení automaticky. Předpokládáme řešení, které je reálné¹⁰ a výchozí hodnoty Z_i jsou rovny nule (předpoklad perfektně korigovaného OS). Parametrem, který určuje kvalitu rekonstrukce, volíme RMS (*Root mean square*) vypočtené z normovaných Zernikových koeficientů [31] definované vztahem

$$RMS = \sqrt{\sum_{i=0}^{\prime} Z_i^2}, \quad (40)$$

kde apostrof značí vynechání konstanty, lineárních složek a defokusu ($Z0, Z1, Z2, Z4$) z výpočtu. Na obrázku 15 je výsledek rekonstrukce fáze ve výstupní pupile OS metodou PR s využitím Nelder-Mead metody globální optimalizace.

¹⁰Komplexní při rekonstrukci koeficientů β_n^m pro popis výstupní pupily (23).

"Koefficient"	"ANSI Index"	"Model"	"Rekonstrukce"	"Diference"
Z0	0	0.	-0.0000104761	0.0000104761
Z1	1	0.	1.12895 × 10 ⁻⁷	1.12895 × 10 ⁻⁷
Z2	-1	0.	-2.15037 × 10 ⁻⁷	2.15037 × 10 ⁻⁷
Z3	1	0.05	0.0500001	1.32053 × 10 ⁻⁷
Z4	-2	0.01	0.00999974	2.61976 × 10 ⁻⁷
Z5	2	0.	5.51092 × 10 ⁻⁷	5.51092 × 10 ⁻⁷
Z6	2	0.	-1.97177 × 10 ⁻⁶	1.97177 × 10 ⁻⁶
Z7	3	0.	5.97435 × 10 ⁻⁷	5.97435 × 10 ⁻⁷
Z8	-3	-0.05	-0.0500015	1.4594 × 10 ⁻⁶
Z9	1	0.	1.90827 × 10 ⁻⁶	1.90827 × 10 ⁻⁶
Z10	3	0.	7.7203 × 10 ⁻⁶	7.7203 × 10 ⁻⁶
Z11	-4	0.	2.15886 × 10 ⁻⁶	2.15886 × 10 ⁻⁶
Z12	4	0.	-1.74805 × 10 ⁻⁶	1.74805 × 10 ⁻⁶
Z13	0	0.	1.51179 × 10 ⁻⁶	1.51179 × 10 ⁻⁶
Z14	4	0.	2.54485 × 10 ⁻⁷	2.54485 × 10 ⁻⁷

Obrázek 14: Výsledky rekonstrukce modelu fáze metodou Nelder-Mead.

Parametry OS:

NA=0.5,

$\lambda = 405 \text{ nm}$,

Model fáze (Z3, Z4, Z8)=(0.05, 0.01, -0.05) λ ,

RMS modelu 0.0276 λ .

Rekonstrukce provedena pro nastavení:

Rozlišení 41x41 pixelů,

Velikost pixelu 40.5 nm

Tři intenzitní skeny ve vzdálenostech od geometrického ohniska (-0.48 μm , 0 μm , 0.48 μm).

Uspořádání Zernikových polynomů podle přílohy A. Pro lepší kontrolu výsledku zvýrazněna hranice 10 m λ u rekonstruovaných koeficientů červeně. Pro přehlednost zobrazeno pouze prvních 15 Zernikových polynomů v jednotkách λ .

IFTA

Tato skupina algoritmů je založena na propagaci mezi obrazovou rovinou a výstupní pupilou OS. Propagace využívá algoritmů rychlé Fourierovy transformace (FFT) [38] ve Fraunhoferově nebo Fresnelově aproximaci (odtud název IFTA - *Iterative Fourier Transform Algorithm*). Při každé iteraci dochází k minimalizaci chyby mezi numerickým modelem PSF a měřenou intenzitou. První iterační algoritmus byl představen na konci roku 1971 [14]. Sofistikovanější algoritmy překonávají některé z původních problémů, například stagnaci nebo optimalizují vstupy algoritmu [15].

Společným cílem těchto algoritmů zůstává rekonstrukce fáze na středních a vysokých frekvencích. Pro optickou metrologii je naopak zajímavá rekonstrukce nízkých frekvencí, ve smyslu optických aberací. Numerická povaha řešení vede při vyšších NA na problémy s podzorkováním, které není možné numericky překonat. Z toho důvodu jsme od tohoto přístupu

upustili. Zůstává však cennou alternativou například pro měření OS korigovaných do neko-
nečna nebo jako optimalizační nástroj při návrhu difraktivních prvků.

ENZ-spektrální přístup

Možným řešením inverzního problému je využití Fourierovy transformace a ENZ teorie pro výpočet analytického modelu PSF pomocí vztahu (28). Pro malé hodnoty aberací je možné problém linearizovat a řešit jako soustavu lineárních rovnic [39].

Naměřená intenzita $I = |U^2|$ je funkcí kartézských souřadnic a parametru defokusu $I(x, y; f)$. Prvním krokem je převod do polárních souřadnic $I(x, y; f) \rightarrow I(\rho, \phi; f)$. Linearizaci modelu intenzity je pro sudé členy¹¹ ($m \geq 0$) v (28) možné psát ve tvaru

$$I \approx 4|V_0^0|^2 + 8 \sum_{n,m} \alpha_{nm} \text{Re}\{i^{m+1}V_0^{0*}V_n^m\} \cos m\phi, \quad (41)$$

kde * označuje komplexní sdružení. Dalším krokem je rozklad signálu po jednotlivých azi-
mutálních složkách m . Zavedeme azimutální funkci $\Psi^m(r, f)$, která výpočtem Fourierovy transformace tento rozklad provede

$$\Psi^m(r, f) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} I(r, \phi, f) \cos m\phi d\phi. \quad (42)$$

Dále zavedeme skalární součin dvou funkcí v (r, f) prostoru

$$(\Psi, \chi) = \int_0^R \int_{-F}^F r \cdot \Psi(r, f) \cdot \chi(r, f) drdf, \quad (43)$$

a dále báze funkce

$$\Psi_n^m(r, f) = \gamma_m \text{Re}\{i^{m+1}V_0^{0*}V_n^m\}, \quad (44)$$

kde $\gamma_m = 4, m = 1, 2, \dots, \gamma_0 = 8$, které nám umožní zkonstruovat soustavu lineárních rovnic

$$\sum_n \alpha_{nm} \Psi_n^m(r, f) = \Psi^m(r, f). \quad (45)$$

Využití spektrálního přístupu umožňuje podle [36] vynechat kvadratický člen, který plyne ze vztahu $I = |U|^2$. Kvadratický člen je ortogonální na lineární složku [21] podle proměnné f a zkonstruovaná soustava lineárních rovnic (45) je dobře definovaná.

V prostředí Wolfram Mathematica se podařilo pomocí výše posaného algoritmu rekonstruovat numerická data. Přesná rekonstrukce na obrázku 15a svědčí o možnosti využití tohoto přístupu pro účely rekonstrukce fáze.

¹¹Analogicky by se postupovalo pro liché členy

$$\begin{pmatrix} 0.0345856 \alpha_{11} & -0.00579214 \alpha_{31} & -0.000953258 \alpha_{51} & -0.000220992 \alpha_{71} \\ -0.00579372 \alpha_{11} & 0.0073916 \alpha_{31} & -0.00159835 \alpha_{51} & -0.000230825 \alpha_{71} \\ -0.000961685 \alpha_{11} & -0.00159936 \alpha_{31} & 0.00219826 \alpha_{51} & -0.000518333 \alpha_{71} \\ -0.000210366 \alpha_{11} & -0.000232893 \alpha_{31} & -0.000505645 \alpha_{51} & 0.000792459 \alpha_{71} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.00385271 \\ 0.00209765 \\ 0.00140132 \\ -0.00062372 \end{pmatrix}$$

(a) Vstupní hodnoty Zernikových koeficientů: $(\alpha_1^1, \alpha_3^1, \alpha_5^1, \alpha_7^1) = (0, 0.5 \lambda, 1 \lambda, 0)$.
 Rekonstrukce: $(\alpha_1^1, \alpha_3^1, \alpha_5^1, \alpha_7^1) = (0, 0.5 \lambda, 1 \lambda, 0)$

$$\begin{pmatrix} 0.0345856 \alpha_{11} & -0.00579214 \alpha_{31} & -0.000953258 \alpha_{51} & -0.000220992 \alpha_{71} \\ -0.00579372 \alpha_{11} & 0.0073916 \alpha_{31} & -0.00159835 \alpha_{51} & -0.000230825 \alpha_{71} \\ -0.000961685 \alpha_{11} & -0.00159936 \alpha_{31} & 0.00219826 \alpha_{51} & -0.000518333 \alpha_{71} \\ -0.000210366 \alpha_{11} & -0.000232893 \alpha_{31} & -0.000505645 \alpha_{51} & 0.000792459 \alpha_{71} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.00385208 \\ 0.00209687 \\ 0.0014019 \\ -0.000624344 \end{pmatrix}$$

(b) Vstupní hodnoty Zernikových koeficientů: $(\alpha_1^1, \alpha_3^1, \alpha_5^1, \alpha_7^1, \alpha_2^2) = (0, 0.5 \lambda, 1 \lambda, 0, 0.5 \lambda)$.
 Rekonstrukce: $(\alpha_1^1, \alpha_3^1, \alpha_5^1, \alpha_7^1, \alpha_2^2) = (0, 0.4998 \lambda, 0.9999 \lambda, -0.0008)$.

Obrázek 15: Rekonstrukce fáze spektrálním přístupem pro OS s $NA=0.5$ a $\lambda=405\text{nm}$. (a) - Rekonstrukce pro vstupní vlnoplochu tvořenou pouze koeficienty s azimutální složkou ($m = 1$). (b) - Rekonstrukce se vstupní vlnoplohou tvořenou dvěma azimutálními složkami ($m = 1, m = 2$). Hodnoty skalárního součinu závisí na vzorkování v (r, f) prostoru. Pro účely rekonstrukce použita velikost pixelu 16.2 nm , rozlišení 101×101 s počtem sedmi měřených rovin symetricky rozposunutých v okolí ohniska o vzdálenosti $(0.48 \text{ um}, 0.96 \text{ um}, 1.44 \text{ um})$.

Platnost provedené linearizace (41) a omezení malých aberací vyžadují hlubší studium, neboť se podařilo rekonstruovat koeficienty s hodnotou až 1λ . Rekonstrukce fáze s více azimutálními složkami na obrázku 15b začíná také vykazovat chyby. V rámci této práce se metodě dále nevěnujeme, ale uvádíme ji zde pro její potenciál do budoucna. Zvláště v kombinaci s algoritmy lineární konvexní optimalizace [35].

4.3 Analýza nejistot

Nyní analyzujeme vliv nejistoty jednotlivých systémových parametrů, šumu a odchylek od designu OS. Pro analýzu budeme vycházet z OS, který se podařilo přesně rekonstruovat metodou globální optimalizace (viz obrázek 14) s těmito parametry:

$NA = 0.5$,

$\lambda = 405 \text{ nm}$,

Model fáze $(Z3, Z4, Z8) = (0.05 \lambda, 0.01 \lambda, -0.05 \lambda)$,

RMS modelu 0.0276λ .

Rozlišení 41×41 pixelů,

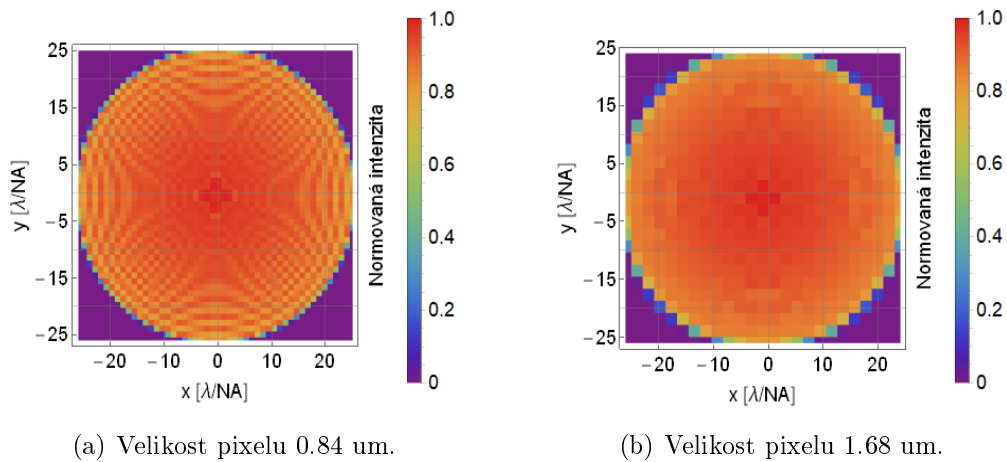
Velikost pixelu 40.5 nm

Základní uspořádání intenzitních skenů ve vzdálenostech od geometrického ohniska $(-0.48 \text{ um}, 0 \text{ um}, 0.48 \text{ um})$. Při analýze s jiným počtem rovin se předpokládá symetrické uspořádání okolo ohniska.

Vzorkování

Nejmenší velikosti pixelu kamer se dnes pohybují okolo 1.5 um . Při měření kamerou se vždy dopustíme podvzorkování, aliasingu [40] (viz obrázek 16). Tato chyba začíná převládat s rostoucí NA a potřebou měřit stále menší PSF. Iterativní algoritmy pro rekonstrukci fáze (IFTA) založené na FFT a numerickém výpočtu modelu PSF nejsou schopny tento problém překonat [14].

ENZ teorie tento problém překonává. Analytický model PSF lze předpočítat pro konkrétní velikost pixelu kamery integrací intenzity přes velikost pixelu. Pokud se chceme vyhnout časově náročné integraci, zvolíme velikost pixelu dostatečně malou tak, že celková intenzita v dané oblasti se nemění. Integraci pak lze nahradit sumací.



Obrázek 16: Efekt podvzorkování při měření PSF ve vzdálenosti 36.08 um od ohniska, pro $NA = 0.5$ a rozdílné velikosti pixelu kamery. Tento efekt se zahrne již při výpočtu analytického modelu PSF pomocí ENZ teorie.

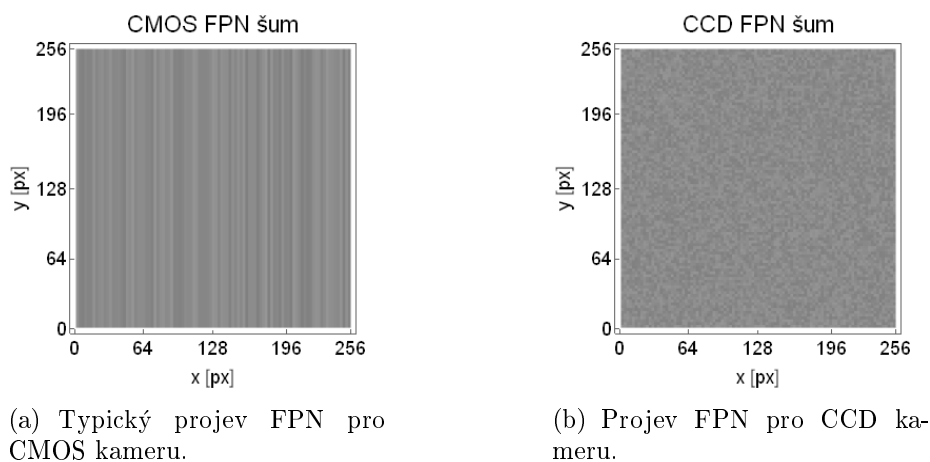
Vliv šumu

V této podkapitole analyzujeme vliv šumů kamery [41]. Zaměříme se na statický šum kamery a detekční šum. Pro modelaci využijeme parametrů z katalogového listu kamery (viz příloha B).

Statický šum kamery

Statický šum (FPN - *Fixed pattern noise*) je variace výstupu každého pixelu při uniformním osvětlení. Někdy se proto nazývá neuniformita. Výsledkem je prostorová variace, která zůstává pro konkrétní kameru časově neměnná. Okolní podmínky (teplota,...) ovlivňují amplitudu tohoto šumu, a proto je nutné provádět měření za kontrolovaných vnějších podmínek. FPN se skládá ze dvou komponent: Aditivní (*offset*) a multiplikační (*gain*), kterou budeme považovat za nulovou a do modelu nezahrnovat.

Typický projev FPN kamery CMOS je na obrázku 17a. V případě CCD kamery je variace náhodná, ale statická.

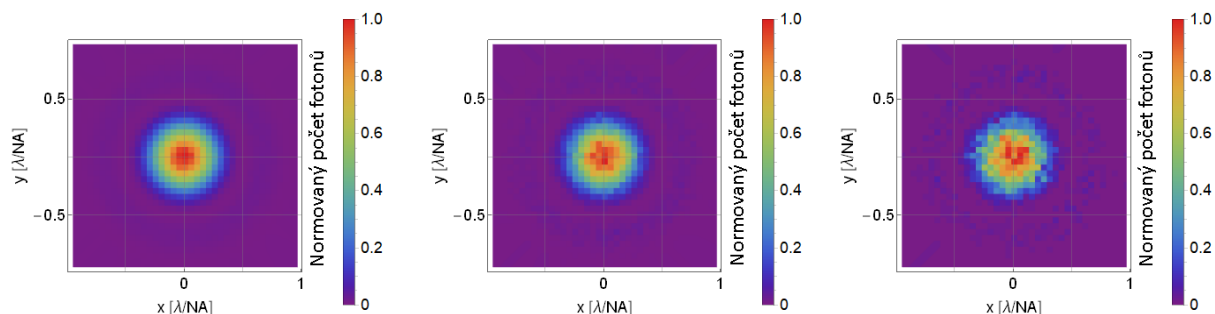


Obrázek 17: Simulace FPN pro CMOS (a) a CCD (b) kameru s rozlišením 256x256 pixelů.

Bylo vygenerováno 5 modelů FPN podle hodnot parametru DNSU z katalogového listu kamery (viz příloha D) a provedena rekonstrukce fáze metodou Nelder Mead pro OS popsany na obrázku 14. Potlačení FPN je možné s větším počtem měřených rovin (viz obrázek 19a).

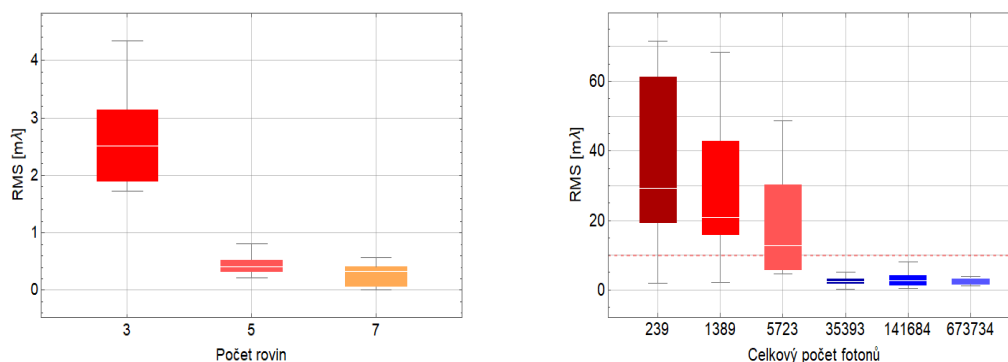
Detekční šum

Detekce každého fotonu podléhá výstřelovému šumu, který se řídí Poissonovým rozdělením se střední hodnotou rovnou počtu fotonů v daném pixelu. Simulace je pro různý celkový počet fotonů v obraze provedena na obrázku 18. Pro minimalizaci chyby způsobenou detekčním šumem (viz obrázek 19b) je vhodné volit kameru s dostatečnou saturační kapacitou (viz příloha B) a dobrým odstupem signálu od šumu.



(a) Celkový počet fotonů 673734. (b) Celkový počet fotonů 35393. (c) Celkový počet fotonů 5723.

Obrázek 18: Simulace detekčního šumu kamery pro různé hodnoty celkového počtu fotonů v obraze. PSF modelována v ohnisku s parametry OS popsáno v úvodu kapitoly.



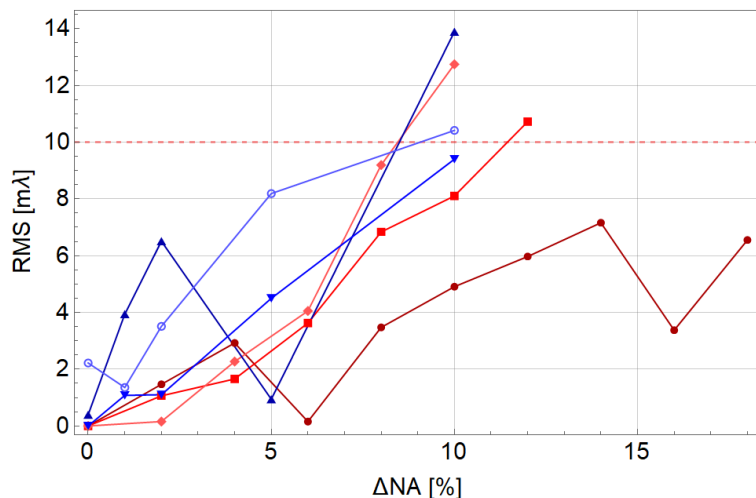
(a) Rekonstrukce pro 7 rovin provedena ve vzdálenostech od ohniska (-1.44 μm , -0.96 μm , -0.48 μm , ohnisko, 0.48 μm , 0.96 μm , 1.44 μm). Při rekonstrukci pro pět rovin vynechány krajní dvě pozice.

(b) Vliv detekčního šumu na rekonstrukci ve třech skenovaných rovinách.

Obrázek 19: Simulace vlivů šumů na přesnost rekonstrukce fáze. (a) - Chyba statického šumu kamery lze redukovat větším počtem měření. Analýza provedena pro OS popsány v úvodu kapitoly. (b) - Lze najít hranici minimálního počtu fotonů v obraze, při které se detekční šum příliš neprojeví na chybě rekonstrukce.

Numerická apertura

Numerická apertura se může lišit od designu OS. Spolehlivé určení NA reálného OS se pohybuje v jednotkách procent. Pro analýzu použijeme dvě hodnoty $NA = (0.3, 0.5)$.



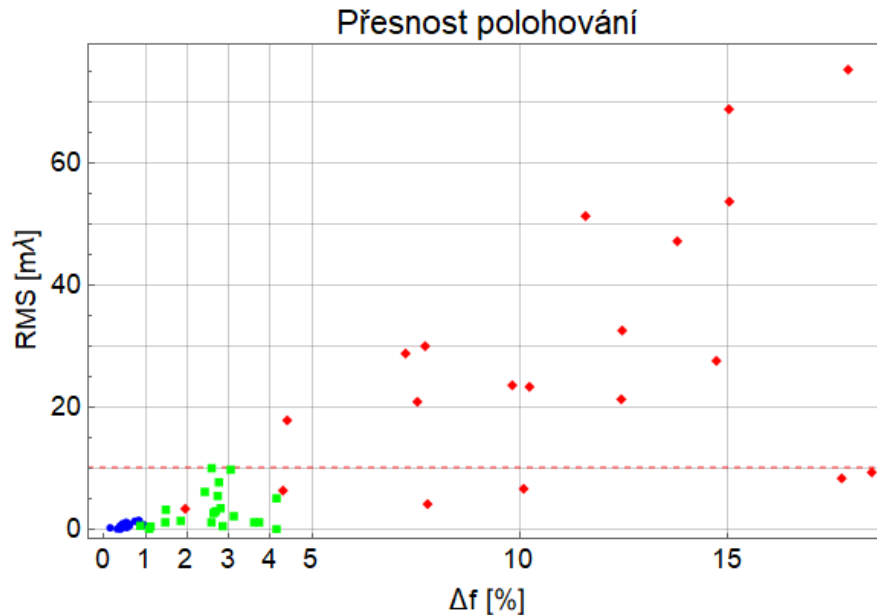
Obrázek 20: Chyba numerické apertury. Simulace provedeny pro $NA = 0.5$ (odstíny červené) a $NA = 0.3$ (odstíny modré). Uvažována odchylka numerické apertury ΔNA [%] nad a pod nominální hodnotu modelu, v grafu vykreslen průměr. Tmavší odstíny barev představují více skenovaných rovin v rekonstrukci v tomto pořadí: (3, 5, 7).

Výslednou chybu RMS se daří držet pod úroveň $10m\lambda$ i při poměrně velké odchylce (5%) od nominální hodnoty NA (viz obrázek 20). Naopak pokud jsou v systému přítomny jiné zdroje nejistot, měla by být snaha držet tento systémový parametr v co největší možné shodě s nominálním designem OS.

Umístění senzoru

Z obrázku 21 je zřejmé, že ke skenování intenzity v obrazovém prostoru je nutné použití velmi přesných posuvů v řádu jednotek nanometrů. Takto jemné posuvy lze realizovat pomocí piezo posuvu s uzavřeným cyklem, které dosahují těchto přesností. Absolutní posun, například vůči ohniskové rovině přesto zůstává v praxi těžko realizovatelný.

Jak vyplývá z obrázku 22, je zde možnost využít přímo metodu PR k přesnému polohování. V první fázi určit relativní pozici ohniska a ve druhé skenovat intenzitu pro účely rekonstrukce fáze. Člen $Z4$ (defokus) se většinou do výpočtu RMS nezahrnuje.



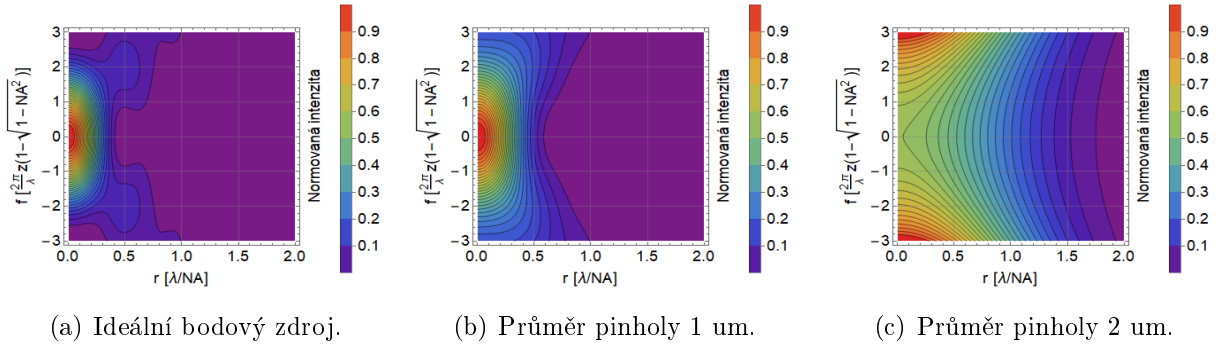
Obrázek 21: Chyba RMS při nepřesném polohování během skenování intenzity v obrazovém prostoru. Simulace provedeny pro náhodnou odchylku každého skenu v maximální výši: modře-(1%, při $NA = 0.5 \sim 5$ nm), červeně-(5%, při $NA = 0.5 \sim 24$ nm) a zeleně-(20%, při $NA = 0.5 \sim 0.1$ μ m).

"Koefficient"	"ANSI Index"	"Model"	"Rekonstrukce"	"Diference"
Z0	0	0.	0.00394834	0.00394834
Z1	1	0.	5.43169×10^{-6}	5.43169×10^{-6}
Z2	-1	0.	-0.0000201523	0.0000201523
Z3	1	0.		
Z4	2	0.05	0.0499987	1.3014×10^{-6}
Z5	-2	0.01	-0.000396328	0.0103963
Z6	0	0.	0.0000106912	0.0000106912
Z7	2	0.	0.0000106912	0.0000106912
Z8	3	0.	-0.0000420473	0.0000420473
Z9	-3	0.	0.0000328546	0.0000328546
Z10	3	0.	0.0000328546	0.0000328546
Z11	-1	-0.05	-0.050052	0.0000520087
Z12	3	0.	-0.0000238716	0.0000238716
Z13	3	0.	-0.0000238716	0.0000238716
Z14	4	0.	0.0000666846	0.0000666846
Z15	-4	0.	0.0000666846	0.0000666846
Z16	4	0.	0.000131928	0.000131928
Z17	-2	0.	0.000131928	0.000131928
Z18	4	0.	0.0000142563	0.0000142563
Z19	0	0.	0.0000142563	0.0000142563
Z20	4	0.	0.0000764372	0.0000764372
Z21	2	0.	0.0000764372	0.0000764372
Z22	4	0.	6.78203×10^{-6}	6.78203×10^{-6}
Z23	4	0.	6.78203×10^{-6}	6.78203×10^{-6}

Obrázek 22: Absolutní poloha jednotlivých intenzitních skenů není známa. První skenovaná rovina umístěna ve vzdálenosti 0.01λ před ohniskem. Rekonstrukce fáze při relativní chybě polohování $\Delta f = 1\%$, pro OS popsány v úvodu kapitoly. Z rekonstrukce je patrné, že koeficient Z4 je vychýlen přesně o vzdálenost 0.01λ , ve které jsme začali se skenováním první roviny.

Bodový zdroj konečné velikosti

Doposud jsme předpokládali, že OS vytváří PSF z dokonalého bodového zdroje. Takový zdroj je nerealizovatelný. Dostatečně malý otvor, tzv. pinhole, propustí zlomek intenzity. Větší pinhole a její komplexní tvar má negativní vliv na tvar PSF. Pinhole ve tvaru kruhu o poloměru a se projeví poklesem intenzity a rozšířením PSF v dané rovině (viz obrázek 23). Předpokládáme, že poloměr a je malý v porovnání s poloměrem prostorové koherence [21][42]. Tento předpoklad je prakticky vždy splněn.



Obrázek 23: Vliv konečné velikosti bodového zdroje na tvar PSF v okolí obrazové ohniskové roviny pro OS s $NA = 0.5$ a $\lambda = 405\text{nm}$. (c) - Velikost průměru kruhového bodového zdroje přesáhla poloměr prostorové koherence.

ENZ teorie dovoluje zahrnout efekt konečné velikosti bodového zdroje do modelu PSF. Vynásobíme pupilovou funkci vynásobíme Fourierovou transformací kruhu, normovanou Jinc funkcí [9]

$$\frac{J_1(2\pi a\rho)}{\pi a\rho}, \quad (46)$$

kde a je normovaný průměr a J_1 Besselova funkce prvního druhu. Dále využijeme aproximace

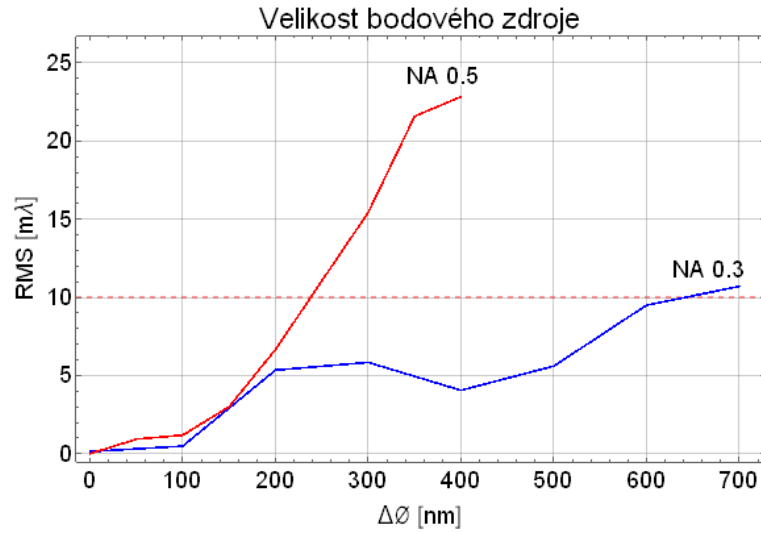
$$\frac{J_1(2\pi a\rho)}{\pi a\rho} \approx e^{c-d\rho^2}, \quad (47)$$

a $V_n^m(r, f)$ v rovnici (28) nahradíme funkcí

$$V_n^m(r, \tilde{f}) = e^c V_n^m(r, f + id). \quad (48)$$

Optimální hodnoty parametrů c a d lze nalézt v [42] a podrobnou analýzu v [39]. Na obrázku 24 je znázorněn vliv průměru kruhové masky na přesnost rekonstrukce fáze.

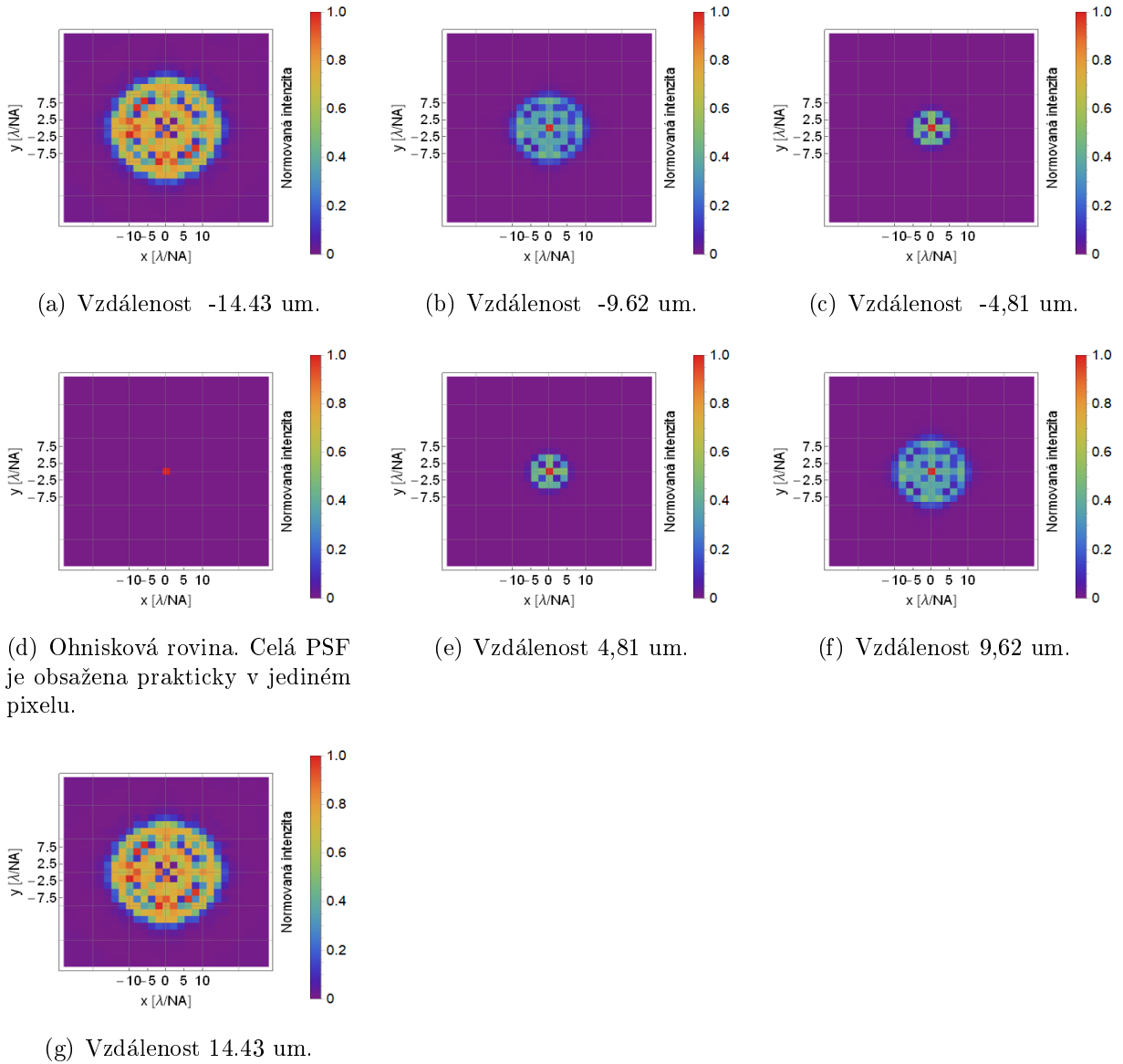
Nároky na přesný průměr uvažované kruhové pinholy jsou větší s rostoucí NA. Analýza tvaru pinholy (odchylky od ideálního kruhu) nebyla provedena.



Obrázek 24: Vliv nenulové velikosti kruhové masky na rekonstrukci fáze. Uvažujeme model ideálního bodového zdroje a skenování intenzity při použití zdroje s nenulovým průměrem kruhové pinholy $\Delta\phi$. Červeně čárkovaně označena hranice $10 m\lambda$.

Simulace reálného optického systému

V předchozích částech jsme se zabývali jednotlivými nejistotami, které mohou ovlivnit přesnost rekonstrukce fáze metodou globální optimalizace. Předpokládejme nyní reálný OS, jeho parametry neznáme přesně. Uvažujeme OS s $NA = 0.5$ (chyba 2%) a $\lambda = 405$ nm (známe dostatečně přesně). Pro měření využijeme parametrů kamery z katalogového listu kamery (viz. příloha B). Kruhový bodový zdroj realizujeme pinholí s designovaným průměrem 400 nm. Vyrobit pinholi lze velmi přesně litograficky (pro účely simulace předpokládáme chybu 1%). Kameru umístíme na lineární piezo posuvy s uzavřeným cyklem (přesnost ~ 1 nm). Vynecháme zde krok nalezení absolutní pozice na ose z . Simulaci FPN provedeme podle parametru kamery DSNU, a pro simulaci detekčního šumu využijeme saturační kapacitu pixelu kamery. Záznam intenzity v obrazovém prostoru je na obrázku 25.



Obrázek 25: Simulace normované intenzity pro rekonstrukci reálného OS v 6 defokusovaných rovinách a v ohnisku. $NA = 0.5$ (chyba 2%), $\lambda=405$ nm, pinhole s průměrem 400nm (chyba 1%), velikost pixelu 1.67 um a přesnost pozicování 1 nm. Do modelu nebyl zahrnut šum.

Jak se ukazuje, provedení skenů v blízkosti ohniska s kamerou o velikosti pixelu 1.67 um nevede k dostatečně přesné rekonstrukci fáze. Na obrázku 25 je proveden záznam PSF v šesti defokusovaných rovinách a v ohnisku. Ve velkých vzdálenostech od ohniska (~ 5) um, musíme použít pro výpočet PSF (28) Bessel-Besselovu řadu (35). S větší vzdáleností od ohniska začíná dominovat detekční šum (intenzita klesá s kvadrátem vzdálenosti). Detekční šum znehodnotí výsledek rekonstrukce. Proto na obrázku 25 uvažujeme záznam bez vlivu šumu. Výsledek rekonstrukce fáze je na obrázku 26.

"Koefficient"	"ANSI_Index"	"Model"	"Rekonstrukce"	"Diference"
Z0	0	0.	0.00141132	0.00141132
Z2	1	0.	-0.0131971	0.0131971
Z4	2	0.01	0.0100808	0.0008807796
Z5	2	0.05	0.0319428	0.0180572
Z8	3	-0.05	-0.0408776	0.00912238
Z9	3	0.	0.000557977	0.000557977
Z12	4	0.	0.000796974	0.000796974
Z13	4	0.	0.00673242	0.00673242
Z14	4	0.	-0.00105036	0.00105036
Z18	5	0.	-0.0021137	0.0021137
Z19	5	0.	0.000399621	0.000399621
Z20	5	0.	-0.00044698	0.00044698
Z24	6	0.	0.000787226	0.000787226
Z25	6	0.	-0.00214645	0.00214645
Z26	6	0.	0.000551078	0.000551078
Z27	6	0.	0.00286273	0.00286273

Obrázek 26: Výsledek rekonstrukce reálného OS. $NA = 0.5$ (chyba 2%), $\lambda=405$ nm, pinhole s průměrem 400nm (chyba 1%), velikost pixelu 1.67 μm a přesnost pozicování 1 nm. Do modelu nebyl zahrnut šum. Výsledná chyba $RMS = 7.1 \text{ m}\lambda$

Dosažená chyba rekonstrukce fáze metodou Nelder-Mead při 100 iteracích je $RMS = 7.1 \text{ m}\lambda$. Tato chyba je však bez započtení vlivu šumu. Demonstruje dosažitelnou se započtením vlivů těchto parametrů: Numerická apertura, vzorkování, konečná velikost kruhové pinholy a nejistota pozicování skenovaných rovin (viz obrázek 26).

5 Závěr

Trendy současného vývoje optiky si žádají vývoj stále sofistikovanějších měřících metod. Tato práce představuje metodu Phase retrieval jako zajímavou alternativu k tradičním způsobům vyhodnocování kvality optických systému.

Model PSF popsáný Debye-Wolfovým difrakčním integrálem (kap. 2.2) a analyticky řešený s využitím rozšířené Nijboer-Zernikovy teorie (kap. 3) je dostatečně flexibilní pro praktické použití metody Phase retrieval v optické metrologii. Pro řešení inverzního problému rekonstrukce fáze (kap. 4.2) byly prezentovány tři algoritmy: IFTA, ENZ-spektrální přístup a Phase retrieval s využitím globální optimalizace. Jak analytický model PSF založený na rozkladu do Besselových řad (kap. 3.3), tak rekonstrukční algoritmy byly implementovány v prostředí Wolfram Mathematica.

Výsledek na obrázku 14 ukazuje téměř perfektní rekonstrukci fáze metodou globální optimalizace. Tento výsledek zatím není v praxi realizovatelný. Proto byla provedena analýza nejistot a šumu pro numericky nasimulovaný optický systém pro $NA = 0.5$ (kap. 4.3). Obrázek 26 demonstruje v praxi dosažitelnou přesnost rekonstrukce fáze optického systému 7.1 m λ . Limitujícím faktorem je detekční šum. Připouštíme, že existuje takové nastavení skenovaných rovin a volba parametrů optimalizace, které umožní přesnější rekonstrukci i se započtením vlivu šumu. Optimalizace procesu skenování intenzity, stejně tak tvar meritní funkce poskytují prostor pro další práci.

Za pozornost stojí možný vedlejší výsledek práce: Metoda pozicování detektoru v obrazové rovině metodou Phase retrieval (viz obr. 22).

Přednosti metody Phase retrieval založené na ENZ teorii lze shrnout následovně:

- Měřící schéma nevyžadující dodatečnou optiku.
- Rekonstrukce fáze na nižších frekvencích (rekonstrukce 36 Zernikových polynomů) v kontrastu k metodám IFTA určených k rekonstrukci vyšších frekvencí.
- Analytický model PSF a překonání problému se vzorkováním v případě metod IFTA.
- Umožnění simultánní rekonstrukce fáze několika polních bodů.

Nedostatky se vážou především na získávání dat. Dále na rychlost celého procesu, která se nyní pohybuje v řádu desítek sekund.

Rozvoj metody Phase retrieval v současnosti směřuje k praktické realizaci. Ve spolupráci s firmou Meopta - optika, s.r.o. se rozvíjí metody submikronového skenování PSF, které zvýší přesnost a posunou aplikovatelnost této měřící metody do praxe.

Reference

- [1] MACK, Chris. Fundamental principles of optical lithography: the science of microfabrication. John Wiley & Sons, 2008.
- [2] *Dostupné ke dni 1.5.2020 z:*
https://willson.cm.utexas.edu/Research/Sub_Files/Immersion/index.php
- [3] MACK, Chris A. The new, new limits of optical lithography. In: Emerging Lithographic Technologies VIII. International Society for Optics and Photonics, 2004. p. 1-8.
- [4] BAKSHI, Vivek. EUV lithography. Spie Press, 2009.
- [5] *Dostupné ke dni 1.5.2020 z:*
https://favpng.com/png_view/wafer-wafer-integrated-circuits-chips-semiconductor-silicon-flash-m
- [6] BRAAT, Joseph JM, et al. Assessment of optical systems by means of point-spread functions. Progress in Optics, 2008, 51: 349-468.
- [7] AIRY, George Biddell. On the diffraction of an object-glass with circular aperture. Transactions of the Cambridge Philosophical Society, 1835, 5: 283.
- [8] RAYLEIGH, Lord. On the Optics of Spectroscopes. Philos Mag, 1879, 8: 403-407.
- [9] BORN, Max; WOLF, Emil. Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light. Elsevier, 2013.
- [10] GOODMAN, Joseph W. Introduction to Fourier optics. Roberts and Company Publishers, 2005.
- [11] MAIMAN, Theodore H. Stimulated optical radiation in ruby. nature, 1960, 187.4736: 493-494.
- [12] MALACARA, Daniel (ed.). Optical shop testing. John Wiley & Sons, 2007.
- [13] WYANT, James C.; CREATH, Katherine. Basic wavefront aberration theory for optical metrology. Applied optics and optical engineering, 1992, 11.part 2: 28-39.
- [14] GERCHBERG, Ralph W. A practical algorithm for the determination of phase from image and diffraction plane pictures. Optik, 1972, 35: 237-246.
- [15] FIENUP, James R. Phase-retrieval algorithms for a complicated optical system. Applied optics, 1993, 32.10: 1737-1746.
- [16] BOEHME, B.; GROSS, H. Characterization of complex optical systems based on wavefront retrieval from point spread function. In: Optical Fabrication, Testing, and Metrology II. International Society for Optics and Photonics, 2005. p. 596515.
- [17] PRIMOT, Jérôme. Theoretical description of Shack–Hartmann wave-front sensor. Optics Communications, 2003, 222.1-6: 81-92.

- [18] SERVIN, Manuel; QUIROGA, J. Antonio; PADILLA, Moises. Fringe pattern analysis for optical metrology: theory, algorithms, and applications. John Wiley & Sons, 2014.
- [19] MOCHI, Iacopo; GOLDBERG, Kenneth A. Modal wavefront reconstruction from its gradient. *Applied Optics*, 2015, 54.12: 3780-3785.
- [20] CHERNYSHOV, Alexander, et al. Calibration of a Shack–Hartmann sensor for absolute measurements of wavefronts. *Applied Optics*, 2005, 44.30: 6419-6425.
- [21] DIRKSEN, Peter, et al. Aberration retrieval using the extended Nijboer-Zernike approach. *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*, 2003, 2.1: 61-69.
- [22] DIRKSEN, Peter, et al. Characterization of a projection lens using the extended Nijboer-Zernike approach. In: *Optical Microlithography XV*. International Society for Optics and Photonics, 2002. p. 1392-1399.
- [23] BERND, D., et al. (ed.). *Handbook of Optical Systems, Volume 5: Metrology of Optical Components and Systems*. John Wiley & Sons, 2012.
- [24] ČECHOVÁ, Marie. *Teorie elektromagnetického pole: Určeno pro posl. 2. roč. odborného studia BCHF, OP, AF, 3. roč. učitelství oborů MF, FVT, TV*. Univerzita Palackého, 1992.
- [25] VAN HAVER, Sven. *The extended Nijboer-Zernike diffraction theory and its applications*. 2010.
- [26] AARTS, R., et al. Analytic expressions and approximations for the on-axis, aberration-free Rayleigh and Debye integral in the case of focusing fields on a circular aperture. *Journal of the European Optical Society-Rapid Publications*, 2008, 3.
- [27] LI, Yajun; WOLF, Emil. Three-dimensional intensity distribution near the focus in systems of different Fresnel numbers. *JOSA A*, 1984, 1.8: 801-808.
- [28] NIJBOER, Bernard Roelof Andries. The diffraction theory of optical aberrations: part II: diffraction pattern in the presence of small aberrations. *Physica*, 1947, 13.10: 605-620.
- [29] JANSSEN, Augustus JEM. Extended Nijboer–Zernike approach for the computation of optical point-spread functions. *JOSA A*, 2002, 19.5: 849-857.
- [30] ZERNIKE, von F. *Beugungstheorie des schneidenverfahrens und seiner verbesserten form, der phasenkontrastmethode*. *physica*, 1934, 1: 689-704.
- [31] THIBOS, Larry N., et al. Standards for reporting the optical aberrations of eyes. *Journal of refractive surgery*, 2002, 18.5: S652-S660.
- [32] ABRAMOWITZ, Milton; STEGUN, Irene A. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical table*. In: US Department of Commerce. National Bureau of Standards Applied Mathematics series 55, 1965.

- [33] JANSSEN, A. J. E. M.; BRAAT, J. J. M.; DIRKSEN, P. On the computation of the Nijboer-Zernike aberration integrals at arbitrary defocus. *journal of modern optics*, 2004, 51.5: 687-703.
- [34] ANTONELLO, Jacopo; VERHAEGEN, Michel. Modal-based phase retrieval for adaptive optics. *JOSA A*, 2015, 32.6: 1160-1170.
- [35] BOYD, Stephen; BOYD, Stephen P.; VANDENBERGHE, Lieven. *Convex optimization*. Cambridge university press, 2004.
- [36] *Dostupné ke dni 1.5.2020 z:*
<https://reference.wolfram.com/language/tutorial/ConstrainedOptimizationGlobalNumer>
- [37] NELDER, John A.; MEAD, Roger. A simplex method for function minimization. *The computer journal*, 1965, 7.4: 308-313.
- [38] PRESS, William H., et al. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [39] VAN DER AVOORT*, C., et al. Aberration retrieval from the intensity point-spread function in the focal region using the extended Nijboer-Zernike approach. *Journal of Modern Optics*, 2005, 52.12: 1695-1728.
- [40] SHANNON, Claude Elwood. Communication in the presence of noise. *Proceedings of the IRE*, 1949, 37.1: 10-21.
- [41] KONNIK, Mikhail; WELSH, James. High-level numerical simulations of noise in CCD and CMOS photosensors: review and tutorial. *arXiv preprint arXiv:1412.4031*, 2014.
- [42] CHARNOTSKII, Mikhail. Optimal beam focusing through turbulence. *JOSA A*, 2015, 32.11: 1943-1951.

6 Přílohy

A Zernikovy polynomy

ANSI Z_n^m	ANSI index	Meopta	Zernikův polynom
Z_0^0	1	Z0	1
Z_1^{-1}	2	Z1	$\rho \sin[\phi]$
Z_1^1	3	Z2	$\rho \cos[\phi]$
Z_2^{-2}	4	Z3	$\rho^2 \sin[2\phi]$
Z_2^0	5	Z4	$-1 + 2\rho^2$
Z_2^2	6	Z5	$\rho^2 \cos[2\phi]$
Z_3^{-3}	7	Z6	$\rho^3 \sin[3\phi]$
Z_3^{-1}	8	Z7	$-2\rho \sin[\phi] + 3\rho^3 \sin[\phi]$
Z_3^1	9	Z8	$-2\rho \cos[\phi] + 3\rho^3 \cos[\phi]$
Z_3^3	10	Z9	$\rho^3 \cos[3\phi]$
Z_4^{-4}	11	Z10	$\rho^4 \sin[4\phi]$
Z_4^{-2}	12	Z11	$-3\rho^2 \sin[2\phi] + 4\rho^4 \sin[2\phi]$
Z_4^0	13	Z12	$1 - 6\rho^2 + 6\rho^4$
Z_4^2	14	Z13	$-3\rho^2 \cos[2\phi] + 4\rho^4 \cos[2\phi]$
Z_4^4	15	Z14	$\rho^4 \cos[4\phi]$
Z_5^{-5}	16	Z15	$\rho^5 \sin[5\phi]$
Z_5^{-3}	17	Z16	$-4\rho^3 \sin[3\phi] + 5\rho^5 \sin[3\phi]$
Z_5^{-1}	18	Z17	$3\rho \sin[\phi] - 12\rho^3 \sin[\phi] + 10\rho^5 \sin[\phi]$
Z_5^1	19	Z18	$3\rho \cos[\phi] - 12\rho^3 \cos[\phi] + 10\rho^5 \cos[\phi]$
Z_5^3	20	Z19	$-4\rho^3 \cos[3\phi] + 5\rho^5 \cos[3\phi]$
Z_5^5	21	Z20	$\rho^5 \cos[5\phi]$
Z_6^{-6}	22	Z21	$\rho^6 \sin[6\phi]$
Z_6^{-4}	23	Z22	$-5\rho^4 \sin[4\phi] + 6\rho^6 \sin[4\phi]$
Z_6^{-2}	24	Z23	$6\rho^2 \sin[2\phi] - 20\rho^4 \sin[2\phi] + 15\rho^6 \sin[2\phi]$
Z_6^0	25	Z24	$-1 + 12\rho^2 - 30\rho^4 + 20\rho^6$
Z_6^2	26	Z25	$6\rho^2 \cos[2\phi] - 20\rho^4 \cos[2\phi] + 15\rho^6 \cos[2\phi]$
Z_6^4	27	Z26	$-5\rho^4 \cos[4\phi] + 6\rho^6 \cos[4\phi]$
Z_6^6	28	Z27	$\rho^6 \cos[6\phi]$
Z_7^{-7}	29	Z28	$\rho^7 \sin[7\phi]$
Z_7^{-5}	30	Z29	$-6\rho^5 \sin[5\phi] + 7\rho^7 \sin[5\phi]$
Z_7^{-3}	31	Z30	$10\rho^3 \sin[3\phi] - 30\rho^5 \sin[3\phi] + 21\rho^7 \sin[3\phi]$
Z_7^{-1}	32	Z31	$-4\rho \sin[\phi] + 30\rho^3 \sin[\phi] - 60\rho^5 \sin[\phi] + 35\rho^7 \sin[\phi]$
Z_7^1	33	Z32	$-4\rho \cos[\phi] + 30\rho^3 \cos[\phi] - 60\rho^5 \cos[\phi] + 35\rho^7 \cos[\phi]$
Z_7^3	34	Z33	$10\rho^3 \cos[3\phi] - 30\rho^5 \cos[3\phi] + 21\rho^7 \cos[3\phi]$
Z_7^5	35	Z34	$-6\rho^5 \cos[5\phi] + 7\rho^7 \cos[5\phi]$
Z_7^7	36	Z35	$\rho^7 \cos[7\phi]$

Obrázek 27: Prvních 36 Zernikových polynomů (maximální radiální stupeň $n = 7$). Řazení podle ANSI s použitím radiálního stupně n a azimutálního stupně m , podle odpovídajícího indexu a označení které je využíváno ve společnosti Meopta-Optika.

B Katalogový list CMOS kamery Basler acA3800-10gm

Basler acA3800-10gm				
Item	Symbol	Typ. ¹	Unit	Remarks
Temporal Noise Parameters				
Total Quantum Efficiency (QE)	η	46	%	$\lambda = 545 \text{ nm}$
Inverse of Overall System Gain	$\frac{1}{K}$	0.7	$\frac{e^-}{DN}$	
Temporal Dark Noise	σ_{d_0}	5.6	e^-	
Saturation Capacity	$\mu_{e.sat}$	2800	e^-	
Derived Parameters				
Absolute Sensitivity Threshold	$\mu_{p.min}$	12	$p\sim$	$\lambda = 545 \text{ nm}$
Dynamic Range	$DYN_{out.bit}$	8.9	bit	
Maximum SNR	$SNR_{y.max.bit}$	5.7	bit	
	$SNR_{y.max.dB}$	34.4	dB	
Item	Symbol	Typ.	Unit	Remarks
Spatial Noise Parameters				
Spatial Offset Noise, $DSNU_{1288}$	σ_o	1.7	e^-	
Spatial Gain Noise, $PRNU_{1288}$	S_g	2.2	%	

Obrázek 28: Parametry z katalogového listu jsou použity pro modelaci šumu (kapitola 4.3.). Velikost pixelu kamery 1.67 μm .