ΝΑΝΟΜΕΤΡΟΛΟΓΙΑ : ΠΡΟΚΛΗΣΕΙΣ ΚΑΙ ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ

Β. Κωνσταντούδης [1,2], Γ. Παπαβιέρος[1,2,3], Ε. Γογγολίδης[1,2]
[1]Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Αγία Παρασκευή, Ελλάδα
[2] Nanometrisis p.c., Αγία Παρασκευή Ελλάδα
[3] Τμήμα Φυσικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Ελλάδα
e-mail: v.constantoudis@inn.demokritos.gr

Περίληψη

Η νανοτεχνολογία αποτελεί έναν από τους πιο εκρηκτικά αναπτυσσόμενους κλάδους της σύγχρονης τεχνολογίας. Το ιδιαίτερο χαρακτηριστικό της, όπως φανερώνει και το όνομά της, είναι η ικανότητα της να νανοδομεί με ελεγχόμενο τρόπο την επιφάνεια αλλά και το εσωτερικό των υλικών δημιουργώντας δομές με διαστάσεις μικρότερες των 100nm. Οι δομές αυτές προσδίδουν στα υλικά και τις διατάξεις νέες ιδιότητες και λειτουργίες με ταυτόχρονη εξοικονόμηση ενέργειας και ποσότητας χρησιμοποιημένου υλικού. Η περαιτέρω ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας τόσο προς την κατεύθυνση των εφαρμογών της όσο και της θεωρητικής κατανόησής της αλλά και ο έλεγχος των επιπτώσεών της στην υγεία και το περιβάλλον απαιτεί τον όσο το δυνατόν ακριβέστερο χαρακτηρισμό των ιδιοτήτων των νανοδομών και ιδιαίτερα των διαστάσεων και των γεωμετρικών/μορφολογικών χαρακτηριστικών τους, δηλ. απαιτεί την ανάπτυξη της νανομετρολογίας.
Αυτό που διαφοροποιεί τη νανομετρολογία σχετικά με τους υπόλοιπους κλάδους της μετρολογίας είναι οι νέες προκλήσεις που αναδύονται από την πολύ μικρή κλίμακα των προς μέτρηση δομών. Σε αυτή την εργασία, θα ξεκινήσουμε με μία σύντομη αναφορά στη νανοτεχνολογία και τη νανομετρολογία και στη συνέχεια θα εστιάσουμε στις προκλήσεις της τελευταίας και θα ξεχωρίσουμε δύο από αυτές. Η πρώτη αφορά στην ακρίβεια των μετρήσεών της και σχετίζεται με την αυξανόμενη λόγω νανομεγέθους επίδραση της μετρητικής διάταξης στο αποτέλεσμα των μετρήσεων. Η δεύτερη, από την άλλη πλευρά, σχετίζεται με το πρόβλημα της πληρότητας στον χαρακτηρισμό των νανοδομών και πηγάζει από την πολύπλοκη μορφολογία που συχνά εμφανίζουν οι νανοδομές λόγω του στοχαστικού χαρακτήρα των μηχανισμών σχηματοποίησής τους.
Για την αντιμετώπιση αυτών των προκλήσεων, έχουν προταθεί οι λύσεις α) της υβριδικής νανομετρολογίας όπου διαφορετικές τεχνικές συνδυάζονται ώστε να αξιοποιηθούν με συνεργατικό τρόπο τα πλεονεκτήματα τους και β) της ανάπτυξης προχωρημένων μαθηματικών και υπολογιστικών μεθόδων για την μοντελοποίηση της μετρητικής διαδικασίας, της ανάλυσης των μετρήσεων αλλά και του ορισμού νέων μετρικών κατάλληλων για την περιγραφή των στοχαστικών χαρακτηριστικών των νανοδομών. Στην εργασία αυτή θα σκιαγραφήσουμε αυτές τις λύσεις και θα συζητήσουμε τις προοπτικές της νανομετρολογίας και τις διαφαινόμενες κατευθύνσεις περαιτέρω ανάπτυξής της.

Λέξεις-Κλειδιά: νανοτεχνολογία, νανομετρολογία, νανοδομές υβριδική νανομετρολογία, υπολογιστική νανομετρολογία

Abstract

Nanotechnology is one of the most rapidly emerging modern technologies. As its name suggests, nanotechnology enables the controlled nanostructuring of both surface and interior of materials at dimensions less than 100nm. These structures endow materials and devices

with new properties and functions while saving energy and quantity of used material. It is obvious that the further development of nanotechnology towards both its applications and its theoretical understanding but also the control of its effects on health and the environment requires accurate and complete characterization of nanostructure properties and in particular their dimensions and geometrical / morphological characteristics, i.e. it requires the development of nanometrology.
What differentiates nano-metrology with respect to the other branches of metrology is the new challenges emerging from the very small scale of the structures to be measured. In this work, we will begin with a brief overview of nanotechnology and nano-metrology and then we will focus on the challenges of nanometrology paying more attention on two of these. The first concerns the accuracy of its measurements and is related to the increasing nodal effect of the metering device on the measurement result. The latter relates to the problem of completeness in the characterization of nanostructures and stems from the complex morphology that nanostructures often exhibit due to the complicated multiscale nature of the nanostructuring mechanisms.
To address these challenges, we will outline two solutions (a) the hybrid nanometrology where different techniques are combined to exploit their advantages in a synergetic way; and (b) the computational nanometrology where advanced mathematical and computational methods are elaborated for the analysis of measurement data, the modeling of the measurement process and the definition of new metrics suitable for describing the stochastic features of nanostructures. In the work, we discuss these solutions as well as the current trends and future prospects of nanometology.

Keywords: nanotechnology, nanometrology, nanostructures, hybrid nanometrology, computational nanometrology

1. Νανοτεχνολογία και Νανομετρολογία

Αν κάποιος αναρωτηθεί τι γνωρίζουμε για τα πράγματα γύρω μας γρήγορα θα διαπιστώσει ότι το μεγαλύτερο μέρος των πληροφοριών που έχουμε για αυτά προέρχεται από την επιφάνεια τους. Για παράδειγμα το χρώμα τους ή γενικότερα οι οπτικές τους ιδιότητες καθορίζονται από τον τρόπο που το προσπίπτον φως αλληλοεπιδράει με την επιφάνειά τους. Το ίδιο ισχύει για την οσμή τους ή την αίσθηση που αποκτούμε για αυτά με την αφή μας.

Επίσης, η ίδια παρατήρηση για την αυξημένη σημασία της επιφάνειας των πραγμάτων μπορεί να γίνει στο ερώτημα για το πώς τα αντικείμενα αισθάνονται το ένα το άλλο ή γενικότερα για το πώς επικοινωνούν και αλληλοεπιδρούν. Και εδώ η επιφανειακή μορφολογία και σύσταση τους παίζει σημαντικό ρόλο. Κλασικά παραδείγματα αποτελούν η τριβή ενός αντικειμένου με ένα άλλο όταν έρχονται σε επαφή ή η αλληλοεπίδραση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας οποιουδήποτε φάσματος με ένα αντικείμενο, ενός αερίου με ένα στερεό ή μιας υγρής σταγόνας με την επιφάνεια που έχει τοποθετηθεί. Η αυξημένη σημασία της επιφάνειας ενός αντικειμένου στην αλληλοεπίδραση του με το περιβάλλον του και τα άλλα αντικείμενα γύρω του (ακτινοβολία, αέρια, υγρά ή στερεά) είναι γνωστή από παλιά κυρίως στους χώρους της οπτικής και της τριβολογίας (Stower 2012, Bhushan 2000). Πιο πρόσφατα, τονίσθηκε η σημασία της επίσης στη διεργασία διαβροχής ενός αντικειμένου από ένα υγρό όπως επίσης και της αλληλοεπίδρασης βιολογικής ύλης με το στερεό (ανόργανο ή οργανικό) που έχει τοποθετηθεί (Wenzel 1936, Chen 1997).

Ωστόσο, παρότι η επίγνωση του καίριου ρόλου της επιφάνειας στις ιδιότητες ενός αντικειμένου, όπως επίσης και του γεγονότος ότι οι επιφάνειες συχνά διαμορφώνονται σε

πολλές κλίμακες μέχρι και το μοριακό επίπεδο υπάρχουν από παλιά, έλειπε η συστηματική γνώση και η δυνατότητα ελέγχου των επιφανειακών αλληλοεπιδράσεων ιδίως όταν σε αυτές εμπλέκεται η νανοκλίμακα. Αυτό το κενό ήλθαν τις τελευταίες δεκαετίες να καλύψουν η νανοεπιστήμη και νανοτεχνολογία, οι οποίες προέκυψαν από τις προσπάθειες της επιστημονικής κοινότητας και των σχετικών βιομηχανιών να αναπτύξουν τεχνικές κατασκευής αλλά και χαρακτηρισμού της ελεγχόμενης διαμόρφωσης των επιφανειών μέχρι και τη νανοκλίμακα και να κατανοήσουν τις νέες ιδιότητες και συμπεριφορές που αναδύονται σε αυτή την κλίμακα. Σε αυτές τις προσπάθειες συμπεριλαμβάνεται και ο έλεγχος της διεπιφάνειας δύο υλικών όταν συνυπάρχουν σε ένα νέο σύνθετο υλικό με το ένα υλικό να είναι η μήτρα υποδοχής του δεύτερου που έχει τη μορφή εμφυτευμένων νανοδομών διαφόρου σχήματος (νανοσωματίδια, ίνες ή μεμβράνες). Τα τελευταία χρόνια έχει συμφωνηθεί να ονομάζουμε νανοτεχνολογία τον κλάδο της τεχνολογίας που ασχολείται με την ελεγχόμενη κατασκευή και χαρακτηρισμό νανοδομών στην επιφάνεια ή στο εσωτερικό υλικών όπως επίσης και τη χρήση τους σε διατάξεις όταν μία από τις διαστάσεις των νανοδομών είναι μικρότερη των 100 νανομέτρων. Η γνώση των ιδιοτήτων και της συμπεριφοράς τέτοιου είδους νανοδομημένων υλικών όπως επίσης και των διατάξεων στις οποίες αυτά χρησιμοποιούνται συγκροτεί τη νανοεπιστήμη.

Όπως είναι φανερό από τα παραπάνω, η βάση της νανοτεχνολογίας είναι η νανοδόμηση των υλικών σε συγκεκριμένες διαστάσεις και μέγεθος και η εκμετάλλευση των νέων ιδιοτήτων και συμπεριφορών που δημιουργούνται από αυτή τη σμίκρυνση. Κατά συνέπεια η ακριβής και πλήρη μέτρηση των διαστάσεων των νανοδομών όπως επίσης και των ιδιοτήτων τους αποτελεί απαραίτητη προϋπόθεση για την επιτυχία της νανοτεχνολογίας και την ανάπτυξη της νανοεπιστήμης. Ονομάζουμε νανομετρολογία το σύνολο των τεχνικών και μεθόδων ανάλυσης, διακρίβωσης και προτυποποίησης που χρησιμοποιούνται στη μέτρηση και τον χαρακτηρισμό νανοδομών σε επιφάνειες ή στο εσωτερικό υλικών. Ο λόγος για τον ορισμό ενός διαφορετικού πεδίου μετρολογίας οφείλεται στις ιδιαίτερες μετρολογικές απαιτήσεις που δημιουργεί το πολύ μικρό μέγεθος των προς μέτρηση δομών. Η περιγραφή των σημαντικότερων από αυτές είναι το αντικείμενο της επόμενης (δεύτερης) παραγράφου της εργασίας μας. Στην τρίτη και τέταρτη παράγραφο θα συζητήσουμε δύο λύσεις που έχουμε προταθεί για την αντιμετώπιση των προκλήσεων της νανομετρολογίας. Η πρώτη λύση είναι η υβριδική νανομετρολογία στην οποία μετρήσεις και δεδομένα από διαφορετικές μετρητικές τεχνικές συνδυάζονται με συνεργατικό τρόπο ώστε να παραχθεί η καλύτερη δυνατή μέτρηση που θα επωφελείται από τα θετικά των εμπλεκόμενων τεχνικών (βλ. τρίτη παράγραφο). Η δεύτερη λύση είναι η υπολογιστική νανομετρολογία (βλ. τέταρτη παράγραφο) στην οποία προχωρημένες μαθηματικές και υπολογιστικές μέθοδοι εφαρμόζονται στην προτυποποίηση της μετρητικής διαδικασίας αλλά και της ανάλυσης των αποτελεσμάτων της μέτρησης ώστε να αντιμετωπιστούν οι νανοπροκλήσεις που περιγράφονται στη δεύτερη παράγραφο.

2. Οι προκλήσεις της νανομετρολογίας

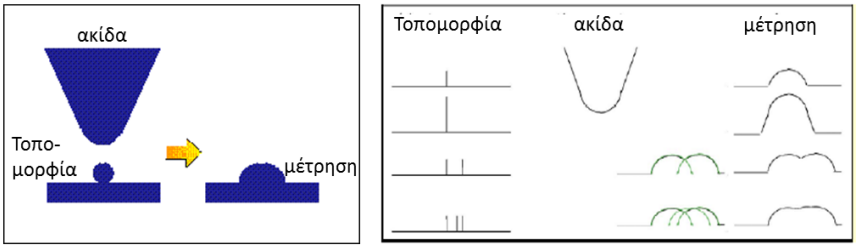
α) Επίδραση της μετρητικής διαδικασίας

Όπως είναι γνωστό, το αποτέλεσμα κάθε μέτρησης είναι σύνθεση της πραγματικής ιδιότητας που μετριέται και της μετρητικής διαδικασίας που ακολουθούμε. Όταν η κλίμακα της μετρούμενης ιδιότητας είναι πολύ μεγαλύτερη της επίδρασης της μέτρησης, τότε η τελευταία μπορεί να αγνοηθεί και να θεωρήσουμε το αποτέλεσμα της μέτρησης πολύ κοντά στην πραγματική τιμή της μετρούμενης ιδιότητας. Ωστόσο, όπως είναι φανερό, δεν είναι αυτή η περίπτωση της νανομετρολογίας. Καθώς οι διαστάσεις των προς μέτρηση δομών

σμικρύνονται στη νανοκλίμακα, η επίδραση της μετρητικής διαδικασίας αυξάνεται και δεν μπορεί να αγνοηθεί εύκολα.
Ένα παράδειγμα φαίνεται στο σχήμα 1, όπου δείχνεται η επίδραση του μεγέθους και του σχήματος της ακίδας ενός Μικροσκοπίου Ατομικής Δύναμης στη μέτρηση της διαμέτρου ενός νανοσωματιδίου τοποθετημένου σε μία επιφάνεια. Υποθέτοντας σφαιρικό σχήμα τόσο για την άκρη της ακίδας όσο και για το νανοσωματίδιο εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι η διάμετρος του νανοσωματιδίου στην επιφάνεια εκτιμάται:

$$w_{meas} = 2\sqrt{w_{tip} w_{np}} \qquad (1)$$

με w_{tip} και w_{np} το εύρος (η διάμετρος) της άκρης της ακίδας και του νανοσωματιδίου αντίστοιχα. Για $w_{tip}=w_{sample}$ η μετρούμενη διάμετρος θα είναι διπλάσια της πραγματικής. Δεδομένου ότι το μέγεθος της ακίδας είναι 5-30nm, είναι φανερό ότι το σφάλμα που εισάγεται στη μέτρηση δεν μπορεί να αγνοηθεί. Επιπλέον, εκτός από την επίδραση στη μέτρηση της διαμέτρου κάθε νανοσωματιδίου χωριστά, το εύρος της ακίδας επηρεάζει επίσης και την ανάλυση της μέτρησης αφού δύο ή περισσότερα αντικείμενα που βρίσκονται μέσα στην περιοχή της επίδρασης του μεγέθους ακίδας απεικονίζονται στην εικόνα AFM ώς μία ενιαία δομή (βλ. σχ. 1β).



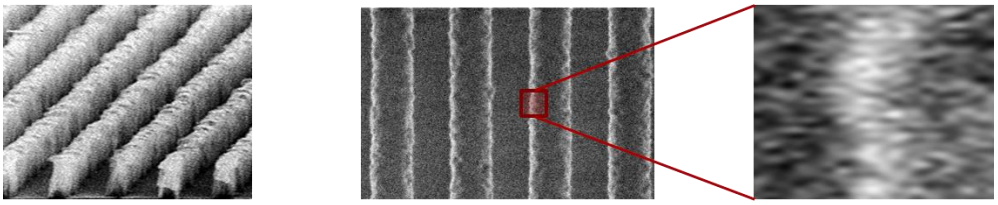
(α) (β)

Σχήμα 1. Επίδραση του μεγέθους της ακίδας του AFM στη μέτρηση μιάς επιφανειακής απομονωμένης προεξοχής με σχήμα νανοσωματιδίου (α) και μιάς ομάδας γειτνιαζόντων νανοαντικειμένων (β).

β) Θόρυβος

Μία από τις ευρύτερα χρησιμοποιούμενες τεχνικές στη νανομετρολογία είναι η ηλεκτρονική μικροσκοπία (σάρωσης και διέλευσης) (Scanning and Transmission Electron Microscopy) αφού η διακριτική ικανότητά της είναι πολύ καλύτερη της οπτικής μικροσκοπίας και η ταχύτητα λήψης εικόνων στην περίπτωση τουλάχιστον της ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης μεγαλύτερη των ατομικών μικροσκοπίων. Γι'αυτό το λόγο, η ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης έχει καθιερωθεί και χρησιμοποιείται ευρύτατα σχεδόν σε όλους τους κλάδους της νανοτεχνολογίας και ιδιαίτερα στην κατασκευή των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων στη βιομηχανία των ημιαγωγών που είναι ο εμπορικότερος κλάδος της σήμερα.
Ωστόσο, όπως σε κάθε εικόνα, έτσι και στην εικόνα των ηλεκτρονικών μικροσκοπίων παρεισφρέει θόρυβος κατά τη διάρκεια του σχηματισμού της που προέρχεται από τα ηλεκτρονικά κυκλώματα του μικροσκοπίου (Gaussian θόρυβος) αλλά και από τον πεπερασμένο αριθμό των προσπιπτόντων ηλεκτρονίων σε κάθε σημείο που γίνεται η μέτρηση, ο οποίος λόγω της τυχαίας παραγωγής τους ακολουθεί τη στατιστική Poisson (θόρυβος Poisson).
Η επίδραση του θορύβου στα εικονοστοιχεία των εικόνων είναι σημαντική όταν μας ενδιαφέρει να ορίσουμε με ακρίβεια του σχήματος μίας δομής που στην δισδιάστατη εικόνα κάτοψης ορίζεται από τις φωτεινές ακμές της εικόνας (βλ. σχήμα 2). Ιδιαίτερα, το θέμα αυτό έχει μελετηθεί στο χώρο της κατασκευής λιθογραφικών δομών για ολοκληρωμένα

κυκλώματα και συγκεκριμένα στις επιπτώσεις που έχει ο θόρυβος στην μέτρηση της πλευρικής τραχύτητας γραμμικών δομών όπως αυτή απεικονίζεται στην τραχύτητα των ακμών τους.

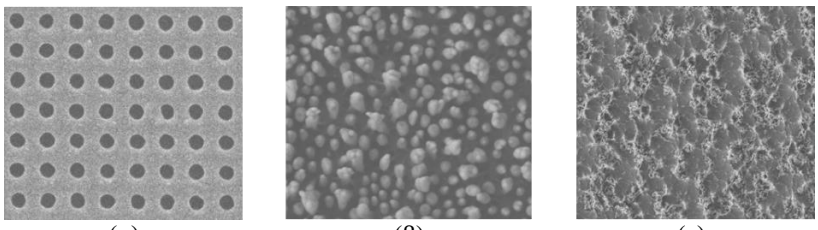


(α) (β) (γ)

Σχήμα 2. Μία λιθογραφική δομή γραμμών και διάκενων (α) και η εικόνα κάτοψής της όπως λαμβάνεται από ένα μικροσκόπιο σάρωσης ηλεκτρονικής δέσμης. Η μεγέθυνση που φαίνεται στο (γ) δείχνει την εμπλοκή του θορύβου της εικόνας στην ανίχνευση της ακμής που καθορίζει το όριο μιας γραμμής.

γ) Μορφολογική πολυπλοκότητα

Όπως αναφέραμε στη εισαγωγή, μία από τις βασικές ιδέες της νανοτεχνολογίας είναι η ανάδυση νέων ιδιοτήτων ή η ενίσχυση υπαρχουσών σε μία επιφάνεια όταν αυτή νανοδομείται και αυξάνεται η ενεργός επιφάνειά της. Στη βιβλιογραφία εύκολα κάποιος μπορεί να διαπιστώσει ότι η νανοδόμηση μπορεί να έχει πολλούς αναβαθμούς μορφολογικής πολυπλοκότητας: από την οργανωμένη με σχεδόν ευκλείδεια σχήματα που προκύπτει κυρίως από λιθογραφικές τεχνικές μέχρι την τυχαία και περίπλοκη που προκύπτει από τεχνικές εναπόθεσης, ελεύθερης εγχάραξης ή ατμού-υγρού-στερεού. Αντιπροσωπευτικά παραδείγματα φαίνονται στο σχήμα 3.
Στην πρώτη περίπτωση των λιθογραφικών δομών, οι προς μέτρηση παράμετροι που ενδιαφέρουν αφορούν τις διαστάσεις των ευκλείδειων νανοδομών (διάμετρος στην περίπτωση νανοοπών και νανοσωματιδίων). Η πολυπλοκότητα είναι περιορισμένη (αν και σε μερικές περιπ΄τωσεις εξαιρετικά κρίσιμη) στην τραχύτητα των ακμών των νανοδομών και τη διασπορά των μεγεθών τους στο υμένιο που σχηματίζονται. Στις δύο άλλες περιπτώσεις με την εντονότερη πολυπλοκότητα, πρέπει πρώτα να οριστούν οι παράμετροι γεωμετρικού/μορφολογικού χαρακτηρισμού των νανοδομημένων επιφανειών και στη συνέχεια να προσδιορισθεί το πρωτόκολλο μέτρησή τους.



(α) (β) (γ)

Σχήμα 3. Παραδείγματα εικόνων ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης που απεικονίζουν νανοδομές που προέρχονται από λιθογραφία ηλεκτρονικής δέσμης (α) και εγχάραξη πολυμερούς σε πλάσμα οξυγόνου με διαφορετικούς χρόνους (β και γ).

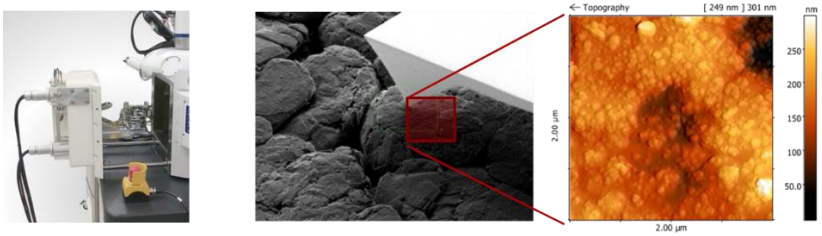
δ) Ανάλυση και πεδίο μέτρησης

Οι νανοδομές συνήθως καλύπτουν ένα μεγάλο εύρος της επιφάνειας του υλικού με μεγάλη πυκνότητα ώστε να γίνεται η βέλτιστη αξιοποίηση των προτερημάτων τους. Ο στόχος των νανοκατασκευαστών είναι να σχηματισθούν δισεκατομμύρια νανοδομές με ελεγχόμενες διαστάσεις και χωρική ομοιομορφία. Από μετρολογικής απόψεως, αυτό σημαίνει ότι οι

μετρήσεις πρέπει ταυτόχρονα να γίνονται με πολύ μεγάλη ανάλυση ώστε να εξασφαλίζεται ακριβής μέτρηση της κάθε μιας νανοδομής και να πραγματοποιούνται σε μεγάλο πεδίο ώστε να συμπεριλαμβάνεται σε αυτό ικανοποιητικός αριθμός νανοδομών για ασφαλή στατιστικά συμπεράσματα σχετικά με την ομοιομορφία τους.
Η απαίτηση αυτή μπορεί να υπάρχει και σε άλλους κλάδους της μετρολογίας, αλλά είναι πολύ έντονη στη νανομετρολογία λόγω της πολύ μικρής κλίμακας των νανοδομών και των μεγάλων επιφανειών που καλύπτουν σε πολλές εφαρμογές τους.
Για την αντιμετώπιση των παραπάνω προκλήσεων, τα τελευταία χρόνια έχουν δοκιμασθεί διάφορες προσεγγίσεις.

3. Υβριδική νανομετρολογία

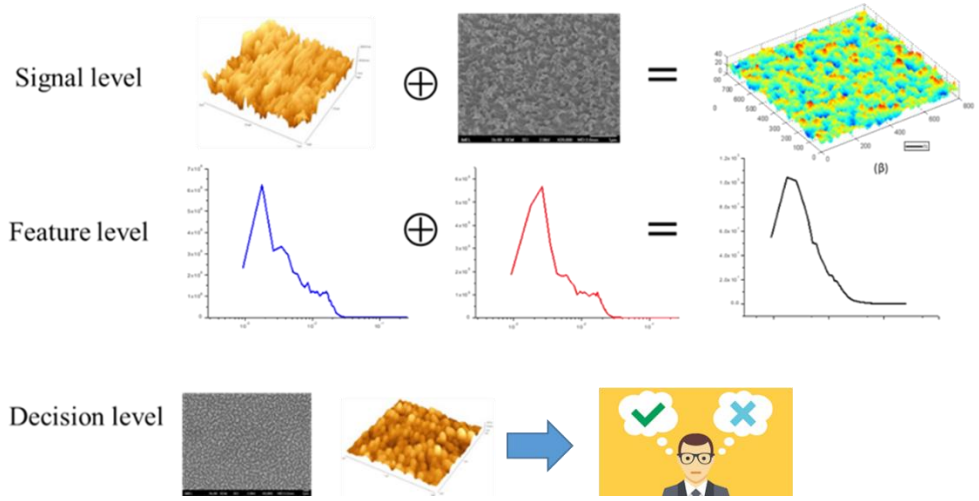
Με τον όρο υβριδική νανομετρολογία εννοούμε τον συνδυασμό δύο ή περισσοτέρων μετρολογιών στην μέτρηση μιας νανοδομημένης επιφάνειας ή υλικού ώστε να αξιοποιηθούν τα πλεονεκτήματα τους με συνεργατικό τρόπο και να ελαχιστοποιηθεί η επίδραση των μειονεκτημάτων τους. Για παράδειγμα, μπορούμε να αναφέρουμε σχετικά με την τέταρτη πρόκληση που αναφέραμε παραπάνω τον υβριδικό συνδυασμό της συμβολομετρίας λευκού φωτός με την ατομική μικροσκοπία ώστε η πρώτη να εξασφαλίσει το μεγάλο πεδίο μέτρησης ενώ η δεύτερη την ανάλυση όπου αυτή χρειάζεται.
Οι εφαρμογές της υβριδικής μετρολογίας χωρίζονται σε δύο κατηγορίες. Στην πρώτη περιλαμβάνονται οι συνδυασμοί μετρολογικών συσκευών σε μία νέα υβριδική μετρητική διάταξη που θα μπορεί να υλοποιεί και τις δύο εμπλεκόμενες λιθογραφίες. Ένα τέτοιο παράδειγμα φαίνεται στο Σχήμα 4 όπου Μικροσκόπιο Ατομικής Δύναμης έχει ενσωματωθεί σε Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο για να εξασφαλίσει τοπογραφική μέτρηση της επιφάνειας σε εντοπισμένα σημεία αυξημένου ενδιαφέροντος.



Σχήμα 4. Παράδειγμα υβριδικής μετρολογίας σε επίπεδο μετρολογικής διάταξης όπου Μικροσκόπιο Ατομικής Δύναμης έχει ενσωματωθεί σε Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο για να εξασφαλίσει τοπογραφική μέτρηση της επιφάνειας σε εντοπισμένα σημεία αυξανομένου ενδιαφέροντος (DME, Zeiss).

Στη δεύτερη κατηγορία περιλαμβάνονται οι υβριδοποιήσεις σε επίπεδο μετρητικών δεδομένων που προέρχονται από διαφορετικές μετρολογικές προσεγγίσεις με τεχνικές που συχνά αναφέρονται ως τεχνικές σύντηξης δεδομένων (data fusion techniques). Η υβριδοποίηση μπορεί να γίνει σε τρία επίπεδα που σχηματικά φαίνονται στο Σχήμα 5 για την περίπτωση της μετρολογίας τραχύτητας επιφανειών [Wang et al. 2015].
Στο πρώτο και πιο σύνηθες, συνδυάζονται άμεσα τα αποτελέσματα των μετρήσεων από διαφορετικές μετρολογίες είτε με τεχνικές σύντηξης δεδομένων [Chen 2016] είτε με τη βοήθεια μεθόδων προτυποποίησης των επιφανειών ώστε να προκύψουν πληρέστερες αναπαραστάσεις των προς μέτρηση δομών (επιφανειών στην περίπτωσή μας) [Constantoudis 2015]. Από την επεξεργασία των άμεσων μετρητικών αποτελεσμάτων προκύπτουν χαρακτηριστικά των επιφανειών, όπως ο μετασχηματισμός Fourier και το προκύπτον από αυτό φάσμα ισχύος που δείχνει το συχνοτικό αποτύπωμα της επιφάνειας στο χώρο. Η υβριδοποίηση μπορεί να γίνει στο επίπεδο αυτών των χαρακτηριστικών όπως για παράδειγμα του φάσματος ισχύος όπως αυτό υπολογίζεται από διαφορετικές τεχνικές. Το τελευταίο επίπεδο συνδυασμού των μετρητικών επιλογών μας είναι αυτό

των αποφάσεων που προκύπτουν από την ανάλυση των μετρήσεων και το οποίο είναι επίσης αρκετά συνηθισμένο.
Ιδιαίτερη μνεία οφείλουμε να κάνουμε στις εφαρμογές της υβριδικής μετρολογίας στο χώρο της κατασκευής ημιαγωγικών διατάξεων όπου μία μετρητική διάταξη ορίζεται ως κύρια και η άλλη ως δευτερεύουσα. Η δευτερεύουσα παρέχει στην κύρια τα κατάλληλα δεδομένα για την βελτιώση της ακρίβειας αλλά και της ταχύτητας των μετρήσεων της κύριας μετρολογίας. Τέτοια σχήματα υβριδικής μετρολογίας έχουν χρησιμοποιηθεί με επιτυχία στην μέτρηση των κρίσιμων διαστάσεων σε 3D νανοδομές ηλεκτρονικών διατάξεων [Vaid 2014].



Σχήμα 5. Είδη υβριδοποίησης μετρητικών δεδομένων ξεκινώντας από το πρώτο επίπεδο που η υβριδοποίηση γίνεται στο πρώτο επίπεδο του σήματος που λαμβάνεται από τις μετρήσεις (μετρητικών δεδομένων), περνώντας στο δεύτερο στο οποίο συνδυάζονται χαρακτηριστικά που προκύπτουν από την ανάλυση των μετρήσεων και φθάνοντας στο τρίτο όπου ο συνδυασμός γίνεται στο επίπεδο των αποφάσεων για την αξιολόγηση των επιφανειών ως προς την επιδιωκόμενη εφαρμογή.

4. Υπολογιστική νανομετρολογία

Με τον όρο υπολογιστική νανομετρολογία εννοούμε την ανάπτυξη μαθηματικών και υπολογιστικών εννοιών και μεθόδων που χρησιμοποιούνται στην επιστήμη της μετρολογίας για την επίτευξη ακριβέστερων και καλύτερων μετρήσεων. Όπως αναφέραμε και στην εισαγωγή, η ανάπτυξη τέτοιων μεθόδων υφίσταται και στην μετρολογία μεγαλύτερης κλίμακας, ωστόσο στη νανοκλίμακα ο ρόλος της αποδεικνύεται κρισιμότερος λόγω της εξαιρετικά μικρής κλίμακας των προς μέτρηση αντικειμένων και των εξαυτής προκλήσεων.
Όπως φαίνεται στο Σχήμα 6, στην υπολογιστική νανομετρολογία μπορούμε να διακρίνουμε τρεις ομάδες μεθόδων που αναφέρονται σε διαφορετικές προκλήσεις της νανομετρολογίας:
α) Στην πρώτη κατηγορία συμπεριλαμβάνονται οι μέθοδοι και αλγόριθμοι για την προτυποποίηση και προσομοίωση της διαδικασίας μέτρησης και μικροσκοπίας. Η προτυποποίηση της μετρητικής διαδικασίας βοηθάει στην καλύτερη κατανόησή της επίδρασης που έχει στο μετρούμενο αποτέλεσμα και κατά συνέπεια μπορεί να χρησιμοποιηθεί αντίστροφά στην αφαίρεση αυτής της επίδρασης όπου αυτό είναι δυνατό (πρόκληση της ακρίβειας). Επίσης, βοηθάει στη εφαρμογή της μετρολογίας με χρήση βιβλιοθήκης προσομοιομένων μετρήσεων, όπου η προσομοίωση δημιουργεί μία βιβλιοθήκη ζευγών αληθινών (προσομοιωμένων) δομών και μετρητικού σήματος ώστε από το μετρούμενο σήμα να μπορούμε να ανακτήσουμε την πραγματική δομή.

Σχήμα 6. Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας της μέτρησης: Η μετρητική τεχνική εφαρμόζεται στο μετρούμενο αντικείμενο για να μας παρέχει τα αποτελέσματα της μέτρησης. Οι τρεις κατηγορίες της υπολογιστικής νανομετρολογίας (YNM) αντιστοιχούν σε κάθε μία από τις τρείς συνιστώσες της μέτρησης: α) Προτυποποίηση της τεχνικής (YNM1), β) Ορισμός νέων μετρικών και παραμέτρων (YNM2) και γ) Ανάλυση των δεδομένων της μέτρησης (YNM3).

β) Στη νανοτεχνολογία οι προς μέτρηση νανοδομές έχουν συχνά πολύπλοκη μορφολογία όπως αναφέραμε στην τρίτη πρόκληση της 2ης παραγράφου. Κατά συνέπεια, δεν είναι σαφές ποιο είναι το μέγεθος που θέλουμε να μετρήσουμε. Η ασάφεια επιτείνεται στην περίπτωση που η μορφολογία έχει στοχαστικά χαρακτηριστικά με έντονη τυχαιότητα αλλά και παρουσία χωρικών συσχετίσεων. Επομένως, είναι απαραίτητο πρώτα να ορισθούν οι παράμετροι που πρέπει να μετρηθούν, η μαθηματική/φυσική σημασία τους αλλά και ο τρόπος μέτρησής τους και τα τυχόν σφάλματα σε αυτά. Σε αυτό το σημείο, η νανομετρολογία συναντά πολλούς κλάδους των μαθηματικών που ασχολούνται με στοχαστικές δομές όπου η κανονικότητα συνυπάρχει με την τυχαιότητα (στοχαστική γεωμετρία, χωρική στατιστική, γεωστατιστική, ανάλυση εικόνας, μορφοκλασματική γεωμετρία, ανάλυση πολύπλοκων συστημάτων, όραση υπολογιστών κ.α.) και μπορεί να δανειστεί και εμπνευσθεί από αυτές δημιουργώντας το δικό της μαθηματικό υπόβαθρο που θα μπορούσε να ονομασθεί Νανομαθηματικά.
γ) Τα αποτελέσματα των μετρήσεων στη νανομετρολογία είναι συχνά εικόνες από μικροσκόπια ή φάσματα ακτινοβολίας που έχουν αλληλοεπιδράσει με τις νανοδομημένες επιφάνειες που θέλουμε να μετρήσουμε. Για να εξαχθεί χρήσιμη μετρολογική πληροφορία από αυτά, εφαρμόζονται μέθοδοι ανάλυσής τους που δέχονται ως δεδομένα εισόδου τα μετρητικά αποτελέσματα και δίνουν ως έξοδο τα μεγέθη που θέλουμε να μετρήσουμε. Οι μέθοδοι ανάλυσης των αποτελεσμάτων μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν κατάλληλα για να αυξήσουν την ακρίβεια των μετρήσεων αντιμετωπίζοντας την πρόκληση του θορύβου στις εικόνες ηλεκτρονικής μικροσκοπίας. Μία τέτοια εφαρμογή της ανάλυσης των μετρητικών δεδομένων με τον μετασχηματισμό Fourier για την αφαίρεση της επίδρασης του θορύβου έχει γίνει τα τελευταία χρόνια στο πρόβλημα της μέτρησης της τραχύτητας ακμών γραμμικών λιθογραφικών νανοδομών με εντυπωσιακά αποτελέσματα [Lorusso 2018, Papavieros 2018].

5. Σύνοψη και συμπεράσματα

Ο σκοπός αυτής της εργασίας είναι να εξοικειώσει τον αναγνώστη της με την αναγκαιότητα της νανομετρολογίας, τις κύριες προκλήσεις της και με μερικές από τις ενδιαφέρουσες λύσεις που προτείνονται. Γι’αυτό το λόγο, ξεκίνησαμε με μία σύντομη αναφορά στην νανοτεχνολογία και την ανάγκη ποσοτικοποίησης των νανοδομών και των ιδιοτήτων τους που επιχειρεί να καλύψει η νανομετρολογία. Η ποσοτικοποίηση είναι απαραίτητη για την κατανόηση και τον έλεγχο της δημιουργίας των νανοδομών και της εξάρτησής τους από τις συνθήκες και τα υλικά κατασκευής τους όπως και της σύνδεσής τους με τις επιθυμητές

λειτουργίες των διατάξεων που ενσωματώνονται. Επιπλέον, η θέσπιση κανόνων ασφάλειας στη χρήση των νανουλικών και νανοδομών προϋποθέτει τη δυνατότητα μέτρησης των γεωμετρικών και άλλων χαρακτηριστικών τους ώστε να είναι δυνατή η αξιολόγησή τους με βάση τις επιπτώσεις στην υγεία των χρηστών τους αλλά και του ευρύτερου περιβάλλοντος. Οι εξαιρετικά μικρές διαστάσεις των νανοδομών οδηγούν την μετρολογία στα όριά της θέτοντας νέες προκλήσεις ή επιτείνοντας παλαιότερες. Ενδεικτικά στην εργασία αυτή εστιάσαμε σε τέσσερις προκλήσεις της νανομετρολογίας και τους λόγους που τις δημιουργούν: α) η ακρίβεια των μετρήσεων λόγω της αυξημένης επίδρασης της μετρητικής μεθόδου στο αποτέλεσμα της μέτρησης, β) ο θόρυβος στις μετρήσεις λόγω της εκτεταμένης χρήσης εικόνων μικροσκοπίας στη νανομετρολογία, γ) η πληρότητα στην περιγραφή των νανοδομών λόγω της πολύπλοκης μορφολογίας που εμφανίζουν πολύ συχνά και δ) η διελκυστίνδα μεταξύ ανάλυσης και ικανοποιητικού πεδίου μέτρησης λόγω της μεγάλης έκτασης που καταλαμβάνουν συχνά οι νανοδομές στις επιφάνειες και της πυκνής δόμησής τους.

Στη συνέχεια, περιγράφουμε δύο κατευθύνσεις στη νανομετρολογία που έχουν αναπτυχθεί τα τελευταία χρόνια για την αντιμετώπιση των παραπάνω προκλήσεων.

Η πρώτη είναι η υβριδική νανομετρολογία στην οποία επιχειρείται η συνδυαστική χρήση μετρολογιών με συνεργατικό τρόπο ώστε να μετρηθούν οι νανοδομές με μεγαλύτερη ακρίβεια και πληρότητα αξιοποιώντας τα πλεονεκτήματα των εμπλεκόμενων μετρολογιών και μειώνοντας την επίδραση των μειονεκτημάτων τους. Η υβριδοποίηση μπορεί να γίνει είτε σε επίπεδο διατάξεων είτε στα δεδομένα που παράγει κάθε μετρολογία. Στη δεύτερη περίπτωση, έχουν αποδειχθεί εξαιρετικά χρήσιμες οι αλγοριθμικές τεχνικές σύντηξης δεδομένων.

Η δεύτερη κατεύθυνση που έχει ενισχυθεί στη νανομετρολογία είναι η ανάπτυξη μαθηματικών και υπολογιστικών μεθόδων για την προτυποποίηση της μέτρησης, την ανάλυση των αποτελεσμάτων της και την εισαγωγή κατάλληλων μαθηματικών παραμέτρων για την περιγραφή των νανοδομών. Η κατεύθυνση αυτή που συνοπτικά καλούμε υπολογιστική νανομετρολογία χρησιμοποιείται εκτεταμένα τα τελευταία χρόνια και μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει δημιουργήσει μία βάση μαθηματικών εννοιών και μεθόδων εξειδικευμένων στην ανάλυση των νανοδομών που μπορεί να χαρακτηρισθούν ως νανομαθηματικά.

Ποια θα είναι η επόμενη μέρα της νανομετρολογίας; Πώς αναμένουμε να εξελιχθεί; Παρότι κάθε σκέψη περί του μέλλοντος είναι επισφαλής, μπορούμε με βάση τις τρέχουσες εξελίξεις να κάνουμε κάποιες εκτιμήσεις και σκέψεις.

α) Η περαιτέρω βελτίωση των μετρητικών διατάξεων και οργάνων θα συνεχισθεί προς την κατεύθυνση της αύξηση της ανάλυσης σε όλο και μικρότερη κλίμακα ενώ οι υβριδικές λύσεις θα εξελιχθούν και θα ωριμάσουν ακόμη περισσότερο.

β) Η ανάπτυξη της νανομετρολογίας θα γίνεται σε στενή σχέση με τις ανάγκες της νανοτεχνολογίας η οποία θα προσδιορίζει τις στοχεύσεις και προτεραιότητες της πρώτης. Είναι όλο και πιο αποδεκτό, ότι σκοπός της νανομετρολογίας είναι η κατανόηση και ο έλεγχος των νανοκατασκευών για τη μεγιστοποίηση της απόδοσής τους. Οι μετρητικές διατάξεις θα αντιμετωπίζονται ως αισθητήρες που μεταφέρουν συγκεκριμένα σήματα για την ποιότητα και τα χαρακτηριστικά των νανοδομών που κατασκευάζονται.

γ) Τα σήματα αυτά πρέπει να αναλυθούν ώστε η εξαγόμενη πληροφορία να επιστρέψει στη νανοκατασκευαστική διαδικασία βελτιώνοντάς την. Κρίσιμο βήμα σε αυτό είναι η επιτυχημένη και εκτενής ανάλυση των συλλεχθέντων μετρητικών δεδομένων. Σε αυτό το σημείο, έρχεται η εφαρμογή μεθόδων μηχανικής και βαθιάς μάθησης (machine and deep learning) να δώσει τη δική της ώθηση και να προτείνει λύσεις. Τα τελευταία χρόνια μέθοδοι μηχανικές μέθοδοι έχουν αρχίσει να δοκιμάζονται στη νανομετρολογία και ιδιαίτερα στην μετρολογία των δομών ημιαγωγικών διατάξεων με ενδιαφέροντα αποτελέσματα.

Αναμένεται ότι η κατεύθυνση αυτή της εισόδου τεχνικών τεχνητής νοημοσύνης τα επόμενα χρόνια θα διευρυνθεί ακόμη πιο πολύ όσο θα συγκεντρώνονται περισσότερα δεδομένα και οι διαστάσεις και πολυπλοκότητα των νανοδομημένων υλικών θα αυξάνεται.
δ) Στη νανοκλίμακα των νανοδομών δεν μπορούν να αγνοηθούν τα στοχαστικά φαινόμενα που εκδηλώνονται στις νανοδομές με τυχαίες και πολύπλοκες μορφολογίες. Θα χρειαστεί η ανάπτυξη νέων μετρικών και μεθόδων για τη μετρολογία των στοχαστικών νανοδομών. Ήδη στο χώρο της μετρολογίας ημιαγωγικών νανοδομών άρχισε να χρησιμοποιείται ο όρος στοχαστική νανομετρολογία. Αυτή μπορεί να υποβοηθηθεί από άλλες περιοχές των μαθηματικών και της επιστήμης γενικότερα που έχουν ασχοληθεί στο παρελθόν με στοχαστικές διεργασίες και δομές (στοχαστική γεωμετρία, χωρική ανάλυση, ανάλυση χρονοσειρών, γεωστατιστική κ.α.).
Συνοψίζοντας τα γ) και δ) αναμένεται όλο και εντονότερη ανάπτυξη των μαθηματικών και υπολογιστικών μεθόδων για την προτυποποίηση της μετρητικής διαδικασίας, την εισαγωγή νέων μετρικών και την εξυπνότερη και πληρέστερη ανάλυση των μετρητικών δεδομένων.
Με βάση τα παραπάνω, μπορούμε να σκιαγραφήσουμε τα χαρακτηριστικά της νανομετρολογίας του μέλλοντος: τη φανταζόμαστε να εμπνέεται και να είναι σε στενή αλληλεπίδραση με τη νανοτεχνολογία αφουγκραζόμενη τις ανάγκες της και τις μετρολογικές απαιτήσεις της, να συνδυάζει με συνεργατικό τρόπο μετρολογίες και να χρησιμοποιεί όλο και ακριβέστερες διατάξεις με μεγαλύτερη ευαισθησία στη νανοκλίακα, να ενσωματώνει προχωρημένες μαθηματικές και υπολογιστικές μεθόδους που θα δανείζεται από τη νανοφυσική, τα στοχαστικά νανομαθηματικά αλλά και από την τεχνητή νοημοσύνη δημιουργώντας ένα περιβάλλον έξυπνης αλλά και σοφής νανομετρολογίας. Τέλος, και αυτό είναι εξίσου σημαντικό, θα πρέπει να είναι ευαίσθητη στις ανησυχίες της κοινωνίας για νανο-ασφάλεια τόσο σε θέματα υγείας των χρηστών των νανοπροϊόντων όσο και σε θέματα ρύπανσης του περιβάλλοντος.

6. Βιβλιογραφία

Bushan B., "*Modern Tribology Handbook*", 2000, CRC Press
Chen C.S., Mrksich M, Huang S, Whitesides G.M., Ingber D.E. "*Geometric control of cell life and death*" Science 276, 1425-1428, 1997
Chen Y., "*Data fusion for accurate microscopic rough surface metrology*", Ultramicroscopy 165, p.p. 15-25, 2016
Constantoudis, V., Boulousis, G., Ellinas, K., Gogolides, E., "*Model-aided hybrid metrology for surface roughness measurement fusing AFM and SEM data*", Proceedings of 17th International Congress of Metrology, CIM 2015, art. no. 14005, 2015
Lorusso, G.F., Rutigliani, V., Van Roey, Mack, C.A., "*Unbiased roughness measurements: Subtracting out SEM effects*" Microelectronic Engineering, 190, p.p. 33-37, 2018
Papavieros et al., "*Allowable SEM noise for unbiased LER measurement*" Proc. SPIE, 10585, 10585-114. 2018
Stover J.C., "*Optical Scattering Measurement and Analysis*", 2012, SPIE Books
Vaid, A. et al.,"*Hybrid metrology: from the lab into the fab*" *J. Micro/Nanolith. MEMS MOEMS.* 13 p.p.041410 2014
Wang J., Leach R.K., and Jiang X,"*Review of the mathematical foundations of data fusion techniques in surface metrology*", *Surf. Topogr.: Metrol. Prop.* 3 023001, 2015
Wenzel R.N., "*Resistance of Solid Surfaces to Wetting by Water",* Ind. Eng. Chem., 28 (8), pp 988–994, 1936