arXiv:2611.32664v1 [physics.optics] 24 Nov 2026

一种利用角分辨阴极发光对腔体深度进行逆向重建的基于库的方法

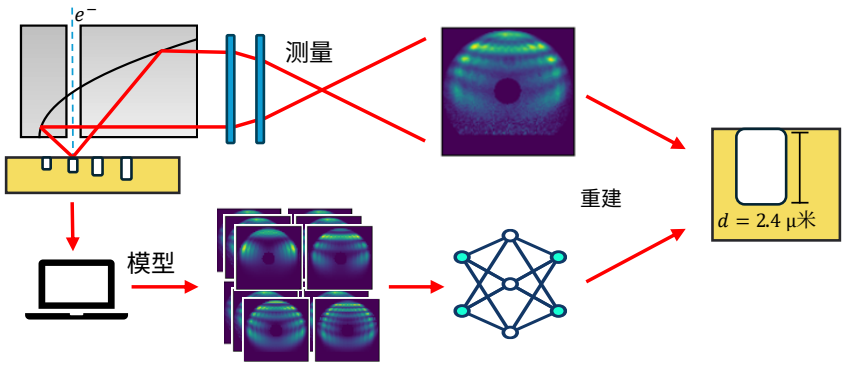
Sam T.P. B orman*[1,2], Daphne M. Dekker[2], Evelijn Akerboom[2], 和 Albert Polman[2]

[1]纳米光刻高级研究中心，1098 XG阿姆斯特丹，荷兰[2]NWO研究所AMOLF，1098 XG，阿姆斯特丹，荷兰

*电子邮箱：S.Borman@amolf.nl

摘要

在纳米加工工艺中，精确计量是控制器件所需关键尺寸的重要环节。传统上，扫描电子显微镜（SEM）用于高分辨率测量横向尺寸，但要获取厚样品的深度信息则更为复杂。在本研究中，我们采用角分辨阴极发光（AR-CL）光谱学来解析这一第三维度。利用扫描电子显微镜中的30 keV电子，在金表面铣削形成的微米尺度腔体底部产生阴极发光。我们表明，阴极发光经腔体侧壁反射后会产生干涉图，而干涉图能够灵敏地表征腔体几何结构。干涉图可通过有限差分时域法进行建模；我们还证明，基于这些模拟图样库训练的神经网络可用于重建腔体深度。这种方法为在指定几何结构内基于角分辨阴极发光进行深度重建提供了概念验证，并有望成为复杂纳米结构先进三维计量学的一种途径。



引言

半导体技术、集成光子学和光伏技术的发展催生了对先进表征技术的需求。这类器件的材料和几何结构对其速度、可靠性和功耗起着关键作用 [1], ，因此有必要研究探测其结构和尺寸的方法。光学显微镜和电子显微镜都是成熟的尺寸计量方法。散射计量广泛用于重建光栅几何形貌 [2] ，共焦轮廓测量术可用于绘制表面形貌、粗糙度和台阶边缘 [3]。与这些光学技术相辅相成，电子束方法能够提供器件几何结构和材料成分的局部信息。

扫描电子显微镜（SEM）利用高能（1–30 keV）电子束形成高度局域化的激发点，并在该处收集二次电子（SE），从而生成特征的形貌对比图[4]。SEM的亚纳米分辨率可精确提供横向尺寸信息，但获取特征深度信息则更为复杂[1, 5]。在工业应用中，高度专业化的关键尺寸（CD）扫描电子显微镜采用倾斜电子束，通过视差原理测量高度和侧壁角 [6, 7]。在更常规的扫描电子显微镜中，样品本身可以倾斜，并利用测角构造进行分析；但对于较大的样品，这并非总是可行，而且在倾斜样品台的同时保持严格的束对准也可能颇具挑战。纳米结构的完整三维（3D）重建可通过透射电子显微镜（TEM）断层成像实现[8], ，但这是一种高度专业化的方法，需要仔细制备薄片样品。另一种随着特征尺寸不断缩小而日益重要的计量学方法是原子力显微镜（AFM），它使用机械探针跟随表面形貌，以亚纳米分辨率对特征进行定量测绘 [9, 10]。然而，与这些方法相比，扫描电子显微镜测量值更快、更易于使用且更具可扩展性，这推动了在该平台上发展三维计量。

在扫描电子显微镜（SEM）中，电子束不仅会产生二次电子（SE），还会产生光（阴极发光，CL）。阴极发光光谱具有受激材料的特征，因此可作为探测材料成分、缺陷和结构特征的有力手段 [11]。因此，电子束可作为高度局域化的光源，提供与传统形貌二次电子图像互补的信息。这促使我们探究：无需倾转电子束或样品，CL 是否能够提供有关某一特征结构深度的额外信息。

已有研究表明，通过使用 CL [12] 和电子能量损失谱（EELS） [13]获取断层样品倾转序列，可以重建等离激元近场的三维结构。然而，这些方法测量的并非几何结构，而是光学近场；同时，它们还要求倾转样品，正如上文所述，这在实际操作中可能并不方便。其他研究则证明，角分辨（AR）CL[14, 15] 干涉测量可用于获取定量的几何结构信息。在 [16] Schilder 等人的研究中，他们通过分析跃迁辐射与散射表面等离激元极化激元（SPP）之间的干涉，获得了相位分布以及电子束与纳米散射体之间的横向距离。Akerboom 等人 [17] 通过将等离激元柱置于电子束路径中，将这一方法扩展到轴向尺寸的测量。通过分析尖端与基底之间的干涉，可以提取两次激发之间的时间差；结合已知的电子速度，即可测得尖端高度。Taleb 等人的相关研究 [18] 展示了电子产生的光与局域电子激发之间的光谱阴极发光干涉，从而能够获得样品辐射的相对相位和振幅。这些研究表明，阴极发光干涉测量能够提供几何和光学信息，但它们依赖于两个 CL 光源的相干激发，并且要求精确放置等离激元散射体或激发结构。

在本研究中，我们探讨能否利用角分辨阴极发光（AR-CL）提取多重散射几何结构的轴向尺寸。我们采用刻蚀在单晶金表面上的方形腔体作为模型系统。我们仅研究微米范围内相对较大的腔体，并记录30 keV 电子激发腔体底部金表面时产生的跃迁辐射（TR）中的干涉现象 [19, 20]。我们发现，这些干涉源于直接电子束诱发的辐射及其随后在腔体侧壁上的反射。条纹密度编码了激发位置与侧壁之间的横向间距，而条纹曲率和遮蔽效应则包含有关腔体深度的信息。这些特征对深度的依赖较为微妙，但我们发现，只要对几何结构作出正确的先验假设，就可以通过逆向分析从干涉图中推断出深度。

此前，基于库的机器学习方法已被用于从实验测得的 AR-CL 辐射图样中获取二维光源位置 [21]。在此，我们采用互补方法，将横向

源定位拓展至预设腔体几何结构中的深度重建：利用有限差分时域（FDTD）仿真方法，构建包含不同激发位置和腔体深度的模拟干涉图库。通过在该图库上训练卷积神经网络，我们推断出腔体深度；相对于通过倾斜扫描电子显微镜和原子力显微镜独立获得的参考测量值，均方根误差（RMSE）为 ~ 130 纳米。尽管由于参考深度存在不确定性，无法证明绝对重建精度，但本研究提供了概念验证，表明无需倾斜即可利用 AR-CL 测量三维几何结构深度的定量信息。未来研究可着重于通过增加侧壁角或表面粗糙度等参数来扩展推断的几何结构，并探究这些参数能否与深度区分开来。

结果与讨论

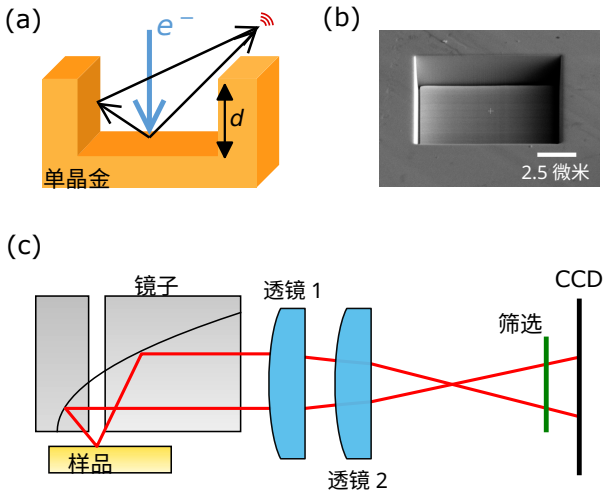


图1：样品几何结构与角分辨阴极发光设置。（a）实验示意图。一个能量为30 keV的电子在深度未知的腔体底部产生阴极发光， d，该发光从腔体中散射出来，并在远场发生干涉。（b）在 52° 倾斜角下成像的 10×10 μm腔体扫描电子显微镜图像。通过测量图像中投影的侧壁尺寸，可得到 ~ 2.4 μm的深度估计值。（c）角分辨阴极发光测量设置示意图。样品置于抛物面镜的焦点处，发射光经准直后通过 550 ± 25 nm光学滤光片投射到CCD相机上。利用抛物面镜已知的几何特性，可将每个像素映射到一组唯一的发射角 ϕ 和 θ。

图1a展示了所使用的样品几何结构，其中电子束在腔体底部激发跃迁辐射，跃迁辐射从侧壁散射，不同的散射分量在远场发生干涉。通过使用能量为30 keV的镓离子，以3.56 nC/μm²的总剂量进行聚焦离子束（FIB）铣削，制备了宽度为 10×10 μm、深度各不相同的腔体。在 52°倾斜角下成像的其中一个腔体如图1b所示。在此情况下，通过将样品倾斜 52° 并测量投影的侧壁，可将参考深度估计为约2.4 μm。用于收集阴极发光的设置如图1c所示。在角分辨测量中，CCD相机上的每个像素都与样品发出的极角（ϕ）和方位角（θ）存在唯一对应关系。使用光学滤光片在50 nm带宽内收集550 nm的光。

为研究角分辨阴极发光干涉图与腔体几何结构之间的关系，研究了深度分别为 0.9 和 2.4 μm 的两个腔体。图 2a 展示了通过二次电子成像获得的深度为 0.9 μm 的腔体俯视图。对于每个腔体，均将电子束置于腔体内垂直对称轴上的四个不同位置，并记录角分辨阴极发光图像；相应的角分辨阴极发光图像如图 2c 所示。从干涉图中可以观察到几个显著趋势。当电子束置于最靠近底部侧壁的位置时，在 $k_y > 0$处观察到角向发射极大值，其上叠加了沿精细干涉

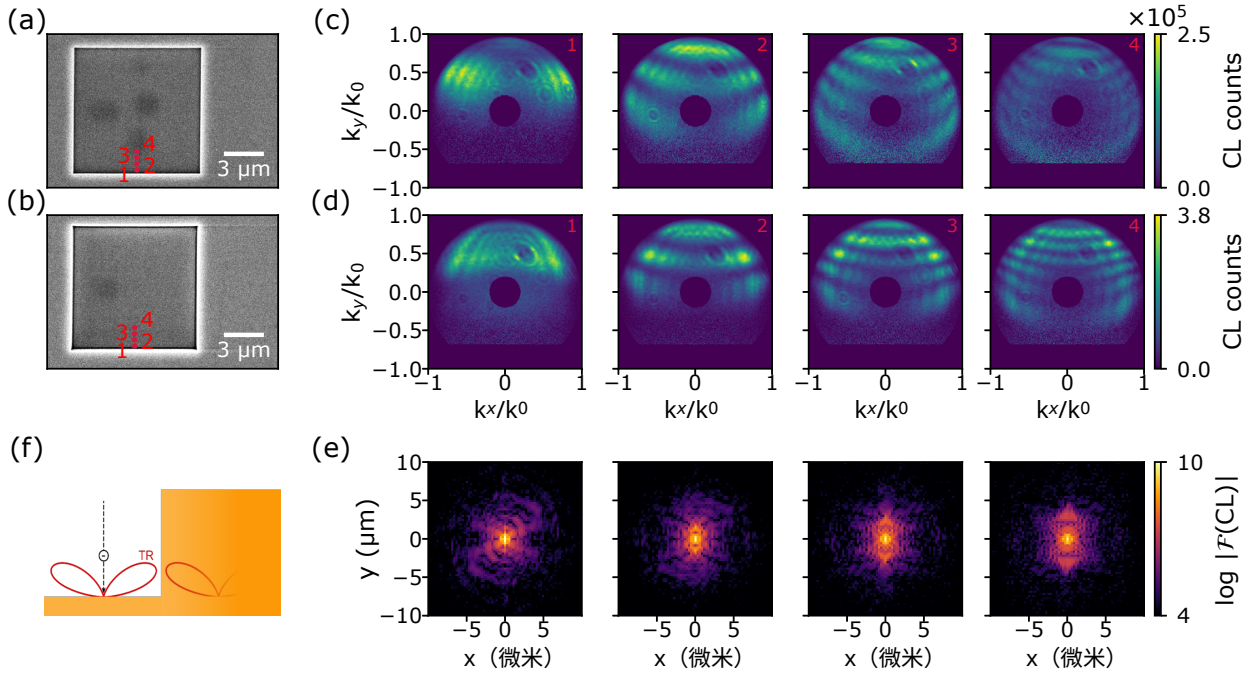


图2：两个深度不同的 10×10 μ微米腔体的阴极发光干涉测量数据。（a-b）深度分别为0.9 μ微米和2.4 μ微米的腔体扫描电子显微镜图像。在不倾斜成像时，仅凭SE图像无法推断出这一深度差异。红色标记表示采集角分辨阴极发光数据的电子束入射位置。（c-d）分别在腔体a和b中标记位置处采集的角分辨阴极发光干涉图。电子束位置会影响条纹密度，而深度差异会影响条纹曲率和遮蔽效应。（e）将（d）从倒易空间傅里叶变换到实空间的结果。偏心极大值的位置近似测量电子束位置与下侧壁之间距离的两倍。（f）腔体侧壁中的跃迁辐射及其镜像示意图。干涉条纹的起源可由初级跃迁辐射与其反射发生干涉来解释。

特征。对于沿 k_x方向的 $k_y < 0$ ，由于遮蔽效应阻挡了直接跃迁辐射发射，因此未观察到干涉。随着电子束进一步向内移动，垂直方向上的干涉条纹数量增加。沿 k_x 方向的精细特征频率似乎没有变化。此外，随着电子束逐渐远离边缘，遮蔽效应消失。

图 2(b,d) 展示了在深度为 2.4 μm 的腔体上进行相同实验所得的结果。与较浅的腔体相比，可以观察到几种趋势。首先，干涉条纹的曲率较小，而条纹数量保持不变。其次，我们观察到这个较深腔体的遮蔽效应更为显著。这些数据表明，AR-CL图样中的精细特征包含有关腔体几何结构的信息。

为了分析不同干涉带的成因，我们对图 2d 中的角分布图样进行傅里叶变换，结果如图 2e 所示。除中心峰外，我们还观察到一个二阶极大值；随着电子束与侧壁之间的间距增大，该极大值逐渐远离中心。通过这些傅里叶变换可以得出特征距离，其数值约为上述间距的两倍。这表明，干涉条纹源于初级产生的跃迁辐射及其在金侧壁上的反射，如图 2f 所示（参见补充信息第 1 节）。这一分析得益于跃迁辐射宽广的角分布：该分布由两个向上倾斜的角叶瓣组成，在我们的几何结构中，它们与侧壁发生强烈相互作用 [19]。遮蔽效应则归因于抛物面镜未能收集该角度范围内相当一部分的辐射；激发点与侧壁之间的距离越大，这部分辐射越少，而腔体深度越大，这部分辐射越多。这一点可通过比较图 2c 与图 2d 看出。

干涉条纹曲率和遮蔽效应都取决于腔体深度，这表明这些 AR-CL 测量包含可用于确定腔体深度的信息。然而，

直接从干涉图中提取这些信息颇具挑战，因为多种散射和干涉效应都会影响角分布。因此，我们采用逆向分析方法，使用一组模拟干涉图训练卷积神经网络。我们通过时域有限差分法（FDTD）模拟跃迁辐射的发射，构建正向模型：将跃迁辐射模拟为腔体底部的一个 z–取向点偶极源 [22] 。随后，使用近场到远场转换 k-空间监视器记录角发射分布。通过将实验和模拟中的激发位置限制在垂直对称轴上，我们只需模拟腔体一半区域内的电磁场，再利用镜像对称求得整个腔体的电磁场，从而降低模拟成本。为考虑实验中使用的带宽为 50 nm 的光学滤光片，我们对 525 至 575 nm 范围内的角发射分布进行模拟并取平均。这会在一定程度上抹平干涉条纹，降低其可见度。由于卷积神经网络能够从边缘和曲率等精细特征中提取信息，因此在正向模型中考虑这种对比度降低十分重要，以避免模拟干涉图与实验干涉图不匹配，进而降低深度重建的准确度或精度。

随后，我们构建了一个包含512种模拟角散射图样的模拟库，其中腔体深度在0.5 - 3.5 μm范围内变化，激发位置与腔体侧壁之间的距离在0.2至4.0 μm范围内变化。其余几何参数保持不变，假设腔体为具有垂直侧壁的理想 10×10 μm方形腔体。这降低了逆问题的维度，但也将重建限制在符合所设定几何结构的腔体范围内。

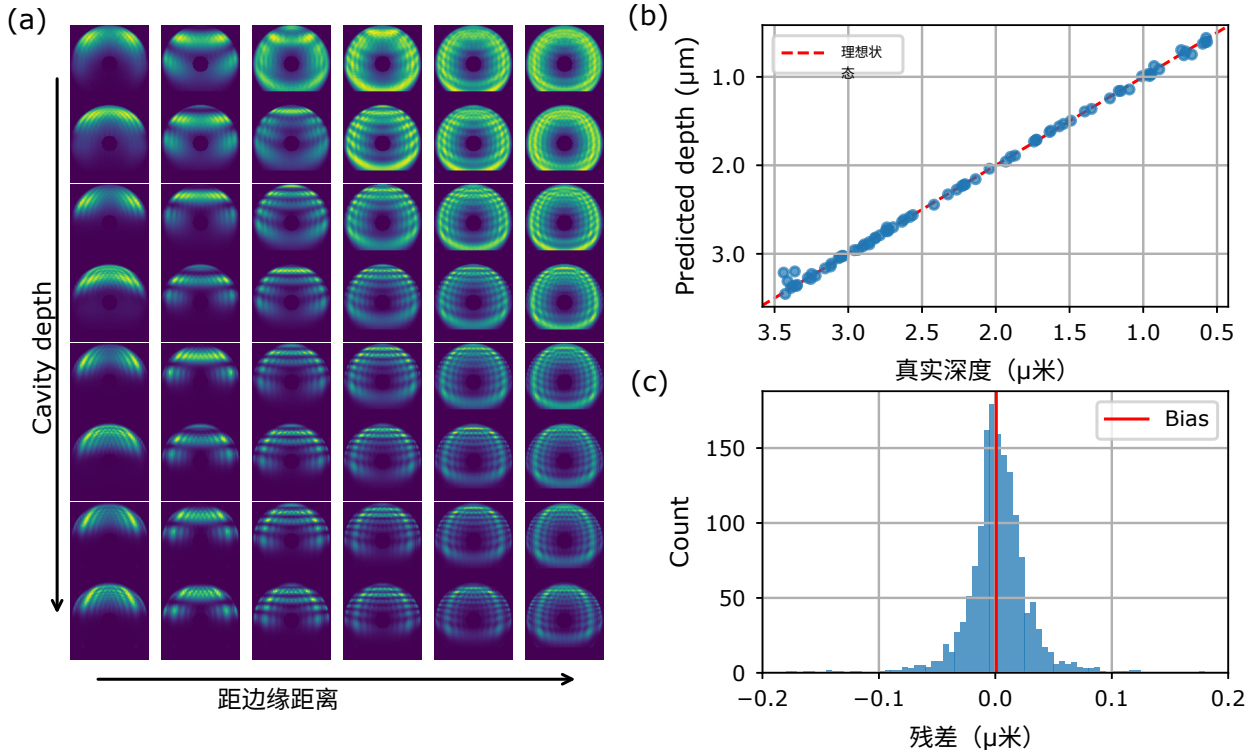


图3：基于模拟角分辨阴极发光干涉图库的神经网络训练与深度推断。（a）从总计512张模拟图像中选取的48张子集，这些图像具有不同的腔体深度，以及电子束与腔体侧壁之间不同的间距。模拟结果证实，条纹曲率和遮蔽效应会随深度变化，而条纹密度则随间距变化。（b）使用单个训练完成的网络（随机种子19）对一组测试图像进行深度推断。较强的相关性表明，该网络能够在训练数据的参数空间内进行插值。（c）汇总20个独立训练的网络所得测试残差的直方图；每个网络均使用不同的随机种子进行初始化。红线表示残差的均值，反映了网络分析的偏差。

图3a展示了其中部分模拟结果。在这一宽广的参数范围内，模拟库呈现出与上述实验结果相同的趋势；条纹密度随电子束位置变化，而条纹曲率和遮蔽效应随腔体深度变化。为了从角分辨阴极发光图像中推断腔体深度，我们利用模拟库训练卷积神经网络。所有图像均按其最大强度进行归一化，并将模拟库随机划分为70%的训练数据、15%的验证数据和15%的测试数据。我们在训练数据上训练ResNet-18神经网络 [23]，并使用验证数据跟踪其在50个训练轮次中的收敛情况（见补充信息第2节）。在这50个训练轮次中，随后将验证损失最低的模型应用于测试图像；这些图像在训练过程中始终未被使用。图3b绘制了一个训练完成的网络所得深度预测值与模拟输入真实值之间的比较结果。预测深度与真实深度之间的强相关性表明，对于模拟参数空间内此前未见过的角分辨阴极发光图像，该网络能够成功预测腔体深度。为评估重建性能，我们使用20个不同的随机种子重复训练，以初始化训练设置。对于测试集上的每个推理结果^，我们计算残差，其定义为 $d_{\mathrm{true}} - d_{\mathrm{pred}}$。所有网络初始化所得合并残差的直方图如图3c所示。根据这些合并残差，我们得到偏差 $b = 0.83$纳米，其定义为残差的均值；残差离散度为 $\sigma = 37.37$ 纳米。将偏差与残差离散度结合，得到均方根误差（RMSE $= \sqrt{b^2 + \sigma^2}$）37.38纳米，从而量化了该网络分析的整体重建性能。

接下来，我们在一个通过实验测量获得的数据集上测试经过模拟训练的模型。该数据集由对 4 个不同腔体进行的 16 次 AR-CL 测量组成，这些腔体的深度介于 0.9 和 2.5 μm 之间；对于每个腔体，均在垂直对称轴上的 4 个不同电子束位置处进行测量。由于该库是在归一化数据上训练的，因此这些图像也按照其最大强度进行了归一化。归一化后的干涉图如图 4a 所示。通过在 52° 倾斜角下获取的侧壁投影二次电子图像以及原子力显微镜（AFM）测量值，对这些腔体的参考深度进行了估算（见补充信息第 3 节）。随后，在全部 16 个实验干涉图上评估相同的 20 个独立训练的网络，共得到 320 个深度预测值。在图 4b 中，将这些单独的预测值及每个腔体的平均值分别与倾斜扫描电子显微镜和 AFM 的参考深度进行对比。重建得到的深度遵循参考测量值的趋势，为在指定几何结构内基于 AR-CL 进行深度重建提供了令人鼓舞的概念验证。

深度重建结果汇总于表1，其中列出了每个腔体的预测深度均值及其标准差，以及合并残差统计量。报告的腔体标准差包含腔体内变异和训练种子变异，对应图4b中的垂直误差条。表1针对每个腔体分别分解并报告了这两项贡献。为量化重建的腔体深度与参考深度之间的一致性，我们通过从相应的参考深度中减去每个单独的预测值来计算残差。以倾斜扫描电子显微镜为参考值时，偏差（平均残差）为96纳米，总体标准差为90纳米，均方根误差为132纳米。以原子力显微镜为参考值时，这些数值分别为−84纳米、99纳米和130纳米。

由于实验测量值仅来自四个不同腔体，且预测值还取决于神经网络训练种子，我们进一步将总残差方差分解为三个部分：腔体间变异、腔体内变异和训练种子变异。通过这一分解，我们得到训练种子标准差为63纳米，腔体内分量为50纳米；以倾斜扫描电子显微镜或原子力显微镜作为参考值时，腔体间分量分别为40或57纳米。这些数值共同解释了总体残差方差（统计框架的推导见补充信息第4节）。方差分解表明，训练种子分量是最大的单项贡献，说明重建深度对训练流程的变化较为敏感。50纳米的腔体内离散度描述了对训练种子取平均后，不同激发位置所重建深度之间的差异。训练种子和腔体内这两项贡献均与参考深度估算所用的方法无关。这些贡献共同凸显了角分辨阴极发光提取一致深度信息的潜力，但其量级也表明有必要提高重建的稳健性。

与训练种子和腔体内离散程度不同，平均残差和腔体间变异取决于参考深度估算值。倾斜SEM参考值的不确定度根据人工读取的最小值与最大值之差的一半确定。由于其数值（57–113 nm）与平均残差（96 nm）相当，因此无法将这种重建偏差与参考值中的系统误差区分开来。

由原子力显微镜测得的深度估算不确定度较小（2–10 nm），但其平均值系统性地小于倾斜SEM测得的值，差异范围为37至281 nm。这种差异可能源于纵横比较高，导致原子力显微镜探针难以触及空腔底部；也可能与在倾斜SEM图像中识别投影的侧壁边缘时存在的不确定性有关。这些系统性影响未必会反映在任一参考技术所报告的不确定度中。由于重建深度的平均值介于两种参考估算值之间，两种方法的均方根误差几乎相同。然而，这种相似性并不能证明重建的绝对精度，因为均方根误差反映的是与所选参考值的一致程度，而非真实的腔体深度。

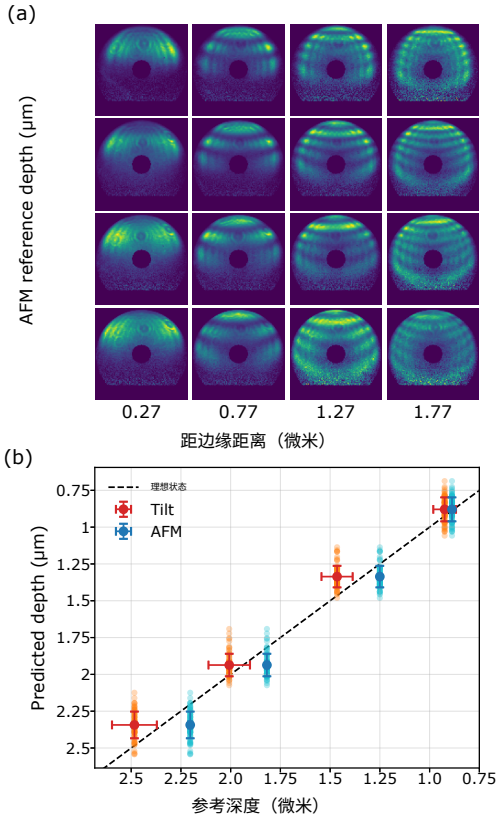


图 4：实验角分辨阴极发光数据的深度推断。（a）在 4 个不同深度的腔体内 4 个不同位置处采集的归一化角分辨阴极发光图像。参考深度根据原子力显微镜测量值估算得到。（b）实验角分辨阴极发光图像的深度推断结果，并与倾斜扫描电子显微镜和原子力显微镜这两种独立参考进行比较。橙色（倾斜扫描电子显微镜）和青色（原子力显微镜）数据点表示使用 20 个独立训练的网络，对 16 次测量进行评估所得的 320 个单独预测值；红色和蓝色数据点表示其平均值。垂直误差条表示每个腔体的标准差，其中包括激发位置和训练种子变异。水平误差条表示倾斜扫描电子显微镜人工最小值/最大值估计的半幅范围，或原子力显微镜高度剖面的变化范围。虚线表示预测深度与参考深度完全一致。

表1：所研究的四个腔体的深度重建结果。上半部分比较了不同腔体中重建的深度与倾斜扫描电子显微镜和原子力显微镜的参考测量值。下半部分汇总了所有预测值的合并残差统计量和方差分解。

腔体	倾斜扫描电子显微镜 深度（μm）	AFM 深度（μm）	预测均值 深度（μ米）	每个腔体 $\sigma_{\text{total},\,i}$（纳米）	每个腔体 $\sigma_{\text{within},\,i}$（纳米）	每个腔体 $\sigma_{\text{seed},i}$ (纳米)
I	0.924 ± 0.057	0.887 ± 0.002	0.879	81.3	41.4	70.0
II	1.465 ± 0.078	1.250 ± 0.002	1.336	73.1	42.0	59.9
III	2.007 ± 0.104	1.818 ± 0.006	1.937	76.5	53.2	54.9
IV	2.484 ± 0.113	2.203 ± 0.010	2.343	90.7	62.0	66.1

参考值	b (纳米)	σ_{total} (纳米)	均方根误差 (纳米)	σ_{between} (纳米)	σ_{within} (纳米)	σ_{seed} (纳米)
倾斜扫描电子显微镜	96	90	132	40	50	63
AFM	-84	99	130	57	50	63

除参考测量中的不确定性外，与模拟测试数据（37 纳米）相比，实验中观察到的更大残差离散度（90–99 纳米）也是可以预期的，因为实验干涉图包含了一些理想化 FDTD 库未能完全捕捉的影响因素。这些因素包括聚焦离子束诱导的侧壁倾斜和粗糙度、电子束定位不确定性、有限的信噪比、抛物面镜的对准误差以及收集不均匀性。本文尚未量化这些因素的相对贡献；在未来扩展推断几何结构的研究中，这些贡献可能值得进一步探讨。

为将我们的工作置于成熟的尺寸计量方法背景下，我们在表2中概述了引言中提到的方法，展示其在主要应用场景中的能力、性能和局限性。成熟方法在各自的应用领域内具有更高的准确度，而本工作的均方根误差为相对于任一参考值的 $\sim$ 130 纳米，这表明在将其用于要求高尺寸准确度的应用之前，仍需进一步改进。尽管如此，我们的结果展示了利用角分辨阴极发光获取定量深度信息的第一步，可作为扫描电子显微镜成像的补充。使用光学信息消除了扫描电子显微镜和透射电子显微镜三维成像中通常所需的电子束倾斜或样品台倾斜。该方法提供了一种非接触式解决方案；相比之下，在原子力显微镜中，探针几何形状可能构成限制。虽然共焦轮廓测量术能够实现较高的轴向分辨率，但其横向尺寸受到衍射限制；而角分辨阴极发光则可测量深度信息，从而补充扫描电子显微镜的高横向分辨率。本文提出的方法与散射计量一样具有基于模型的特征，包括需要预先作出几何假设，以及逆问题的非唯一性可能带来的复杂性。在此背景下，该方法为尺寸表征提供了一条结合光学技术与电子束技术的途径，并推动了对其稳健性以及对其他结构和材料适用性的进一步研究。

表2：用于对本文提出的AR-CL方法进行背景说明的尺寸表征方法概览。性能指标描述了与该方法预期应用相关的具体结果，并作为其能力的指示，而非定量比较。

方法	主要能力	代表性性能	主要局限性
（CD-）扫描电子显微镜	局部尺寸测量-量。通过形貌对比图进行对比。高度重-建使用载物台或束倾斜。	0.1 纳米分辨率，束倾斜达到栅极上的精度（3σ）为 0.81 纳米高度以及鳍高度上的 1.49 纳米，应用于一项 FinFET 计量研究 [7]。	束流定位精度、污染、束流损伤、充电 [1]。
透射电子显微镜（断层成像）	原子结构与纳米尺度三维表征。	0.05 纳米横向分辨率 [1]和 ∼1 断层倾转序列中的纳米级三维分辨率倾斜序列 [8]。	样品制备和厚度、倾斜范围限制、束流损伤 [5, 8]。
AFM	表面形貌测量维测量值通过局部探针-样品相互作-用。	完整三维测量，$<$ 1 纳米横向，$<$ 0.01 纳米垂直分辨率 [1, 10]。	扫描速度、探针几何形状可能会与测量 [24] 混淆。
共焦轮廓测量	非接触式表面形貌成像，高度由共焦强度峰值的轴向位置确定。	横向分辨率为 ∼150 纳米，轴向分辨率低至 10 纳米，配合高数值孔径和短波长照明。国家 [3]。	信噪比、与表面相关的光学响应、定位和像差控制 [3]。
光学散斑测量	基于模型的亚波长周期性结构光学计量学结构。	依赖模型的参数推断关于 ∼1 纳米的垂直和横向 [1].	逆问题的非唯一性散射问题、复杂建模、光学材料性质 [2]。
角分辨阴极发光，这一work	基于模型的深度重建通过电子诱导的光学信息，可补充扫描电子显微镜（SEM）imaging.	展示了深度重建作为概念验证，其均方根误差为 ∼130 纳米，具体取决于参考值方法。	仅限于规定的几何形状，正向模型的准确性，可扩展性。

结论与展望

角分辨阴极发光光谱学结合基于数据库的神经网络分析，可对单晶金表面方形空腔的深度提供详细信息。跃迁辐射具有宽广的角度范围，无论是直接辐射还是经由侧壁散射形成的辐射，都会产生具有精细角度特征的干涉图；这些特征均代表电子激发所引起的不同散射效应和干涉效应的组成要素。通过对包含512个模拟干涉图的数据库进行神经网络分析，我们展示了在预设腔体几何结构下，从测得的角分辨阴极发光数据中逆向重建腔体深度的方法；该方法无需样品倾转即可提供深度信息，作为传统扫描电子显微镜成像的补充。

将残差方差分解为训练随机种子、腔体内和腔体间的贡献后发现，观测到的变化大多源于 ResNet-18 训练流程（63 纳米），其次是同一腔体内不同激发位置造成的变化（50 纳米）。这两项贡献均与参考深度的选择无关。然而，腔体间贡献和平均残差取决于这些参考测量值。独立的原子力显微镜测量所得深度系统性地小于倾斜扫描电子显微镜估算值，因此，相对于任一参考值，$\sim$ 130 纳米的均方根误差反映的是与参考测量值的一致程度，而不能证明该方法具有绝对准确性。抛物面镜的光收集变化、电子束定位，以及正向模型中的缺陷（例如侧壁倾斜或表面粗糙度）都可能导致观测到的差异。若能在更多腔体上开展进一步验证，并更好地表征参考测量中的系统不确定性，将有助于评估本研究所展示的概念验证之外的定量性能。

当前正向模型描述的是具有垂直侧壁的理想方形空腔，其中仅改变腔体深度和激发位置。结果证明了在指定几何结构下进行深度重建的概念可行性，但尚未确定其方差是否能够与其他几何参数的变化区分开来。未来工作可着重改进正向模型，并研究能否独立重建其他参数。此外，扩充模拟训练库或采用不同的神经网络架构，或可提高重建的稳健性，并降低其对训练流程的敏感性。偏振和高光谱阴极发光图，以及偏离空腔对称轴的激发位置，也可能提供更多信息，从而约束逆问题。

结果表明，基于角分辨阴极发光的深度重建可用于微米级金属腔体结构，其中跃迁辐射和侧壁反射会在可见光谱范围内产生远场干涉。使用电子束诱导辐射的一个优势是，光在高度局域的点位产生，这促使我们进一步研究本文所述方法在重建亚波长尺寸方面的可扩展性。尽管波长不会对参数推断精度设定直接的下限，但散射和干涉物理过程可能发生显著变化，并且在腔体深度变化时未必会产生可区分的光学指纹。此时，可达到的深度分辨率将取决于角分辨图样中任何随深度变化的信号强度及其信噪比，以及能否通过恰当的正向模型对其进行捕捉。

类似的考量也适用于将该方法拓展至介电材料或半导体材料，这或许会成为未来研究的一个令人振奋的方向。对于这些材料，其主要的阴极发光产生、散射和对比机制可能与本文研究的金空腔系统存在显著差异。在此类系统中，相干跃迁辐射或可结合带隙或缺陷相关阴极发光所提供的光谱信息，前提是能够准确地对这些发射机制及其对几何结构的依赖关系进行建模。

方法

方形空腔的制备。 使用聚焦离子束铣削，在30 keV、0.26 nA电流以及1μ秒像素驻留时间下，以块体单晶金样品为材料，制备了这些腔体。深度为 ~ 0.9 μ米的最浅腔体经过300次扫描制成，并将扫描次数增加150次，以制备更深的腔体。

AR-CL测量。 阴极发光实验使用配备肖特基场发射电子源的ThermoFisher Apreo 2 扫描电子显微镜进行，电子源工作电压为30 keV，电子束电流为0.8 nA。阴极发光由置于样品与电子柱之间的铝制抛物面镜收集（接受角为1.47π sr）。通过将抛物面镜的焦点与金表面及电子束对准，可以获得角度信息。阴极发光信号的积分时间为90秒，并使用包含Newton 920 CCD 相机的Delmic SPARC 系统进行分析。通过光学带通滤光片（$\lambda = 550 \pm 25$ 纳米）选择波长。

数值模拟。 使用 Tidy3D v2.9.3（FlexCompute Inc）进行了 FDTD 仿真。单晶金的光学常数取自 Olmon 等人 [25] ，仿真区域的边界由八层完美匹配层定义。通过将一个单独的 z偏振偶极子源定位在真空-金界面上方 5 纳米处，模拟跃迁辐射，其发射范围为 $\lambda = 300$ 至 $\lambda = 900$ 纳米（有关此设置的更多详情，请参见补充信息第 5 节）。为限制模拟成本，将偶极子置于腔体的中心 y轴上，并在 $x = 0$平面应用 PMC 对称性。使用一个场投影 k空间监视器记录数据，该监视器定位在腔体上方数十纳米处，并将强度分布投影到距离仿真区域 500 μ米的远场处的 101×101像素网格上。根据收敛性测试选择 100 fs 作为仿真运行时间；该测试比较了后续图像的相对模拟成本与其均方根差（RMSE）和相关性（见补充信息第 6 节）。最后，对 $\lambda = 550 \pm 25$ 纳米范围内的结果取平均，以考虑实验中使用的带通滤波器。

使用神经网络进行深度推断。 为了从腔体的角分辨阴极发光图像推断腔体深度，使用安装于 Python v3.12.12 上的 PyTorch v2.9.0 框架训练了 ResNet-18神经网络。数据经过预处理，包括对每张图像的强度分布进行归一化，并将512张图像

模拟库中的数据划分为70%的训练数据、15%的验证数据和15%的测试数据。训练以每批10张图像进行，每个训练轮次包含35个训练步骤，共进行50个训练轮次。训练循环期间，使用平滑L1损失函数和学习率为 10^{-3} 的AdamW优化器更新网络权重。使用验证数据监控过拟合。训练流程使用20个不同的随机种子重复进行，这些随机种子用于初始化网络。

原子力显微镜测量。 使用在 PeakForce敲击模式下运行的 Bruker Dimension Icon 原子力显微镜进行腔体深度参考值测量。在腔体边缘周围选取约 1×3 μm 的扫描区域，以便获得上表面和空腔底部的充分数据。快速扫描方向相对于侧壁的方向为 $45°$，扫描速率为 ~ 0.2 行/秒。

注释

作者声明以下竞争性财务利益：Albert Polman 是 Delmic BV 的共同创办人和共同所有者。该公司生产商用阴极发光系统，例如本研究中使用的系统。

致谢

作者感谢 Jian Gao 协助进行原子力显微镜测量，并感谢 Wiebke Albrecht、Ethan Kensett、Timon Fliervoet 和 Hang-Kwang Nienhuys 提供富有见地的讨论。本研究属于荷兰研究委员会（NWO）的研究计划，并在 AMOLF 和 ARCNL 研究所开展。纳米光刻高级研究中心 ARCNL 是阿姆斯特丹大学、阿姆斯特丹自由大学、格罗宁根大学（RUG）、NWO 以及半导体设备制造商 ASML 之间的公私合作伙伴关系。本研究获得了欧洲研究委员会（ERC）资助（资助协议编号 101019932，QEWS），以及欧洲创新委员会（EIC）资助（资助协议编号 101017720，EBEAM）。

参考文献

(1) Orji, N. G.; Badaroglu, M.; Barnes, B. M.; Beitia, C.; Bunday, B. D.; Celano, U.; Kline, R. J.; Neisser, M.; Obeng, Y.; Vladar, A. E. 下一代半导体器件的计量学。*NatureElectronics* **2018年**，*1*，532–547，DOI：10.1038/s41928-018-0150-9。 (2) Bodermann, B.; Ehret, G.; Endres, J.; Wurm, M. Physikalisch-Technische Bundesanstalt（PTB）深亚波长纳米结构表面的光学尺寸计量。*Surface Topogra-phy: Metrology and Properties* **2016年**，*4*，024014，DOI：10.1088/2051-672X/4/2/024014。 (3) Kim, C.-S.; Yoo, H. 用于表面计量的三维共焦反射显微镜。*Mea-surement Science and Technology* **2021年**，*32*，102002，DOI：10.1088/1361-6501/ac04df。 (4) Seiler, H. 扫描电子显微镜中的二次电子发射。*Journal of Applied Physics***1983年**，*54*，R1–R18，DOI：10.1063/1.332840。 (5) De Goede, M.; Johlin, E.; Sciacca, B.; Boughorbel, F.; Garnett, E. 三维多能量反卷积电子显微术。*Nanoscale* **2017年**，*9*，684–689，DOI：10.1039/C6NR07991A。 (6) Valade, C.; Hazart, J.; Bérard-Bergery, S.; Sungauer, E.; Besacier, M.; Gourgon, C. 倾斜束扫描电子显微镜：面向工业的三维计量。*Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XXXIII,Proceedings of SPIE* **2019年**，*10959*，109590Y，DOI：10.1117/12.2514977。 (7) Zhang, X.; Zhou, H.; Ge, Z.; Vaid, A.; Konduparthi, D.; Osorio, C.; Ventola, S.; Meir, R.; Shoval, O.; Kris, R.; Adan, O.; Bar-Zvi, M. 使用倾斜束临界尺寸扫描电子显微镜应对 $1\times$ 节点中的 FinFET 计量挑战。*Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, andMOEMS* **2014年**，*13*，041407，DOI：10.1117/1.JMM.13.4.041407。 (8) Midgley, P. A.; Dunin-Borkowski, R. E. 材料科学中的电子断层成像与全息术。*Nature Materials* **2009年**，*8*，271–280，DOI：10.1038/nmat2406。

(9) Orji, N.; Martinez, A.; Dixson, R.; Allgair, J. 基于 CD-AFM 的参考测量系统实施进展。*Proceedings of SPIE, San Jose, CA* **2006年**。 (10) Giessibl, F. J. 原子力显微镜的进展。*Rev. Mod. Phys.* **2003年**, *75*, 949–983, DOI：10. 1103/RevModPhys.75.949。 (11) Ebel, S.; Lebsir, Y.; Yezekyan, T.; Mortensen, N. A.; Morozov, S. 阴极发光显微镜用光子与等离激元材料图谱。*Nanophotonics* **2025年**, *14*, 2647–2671, DOI：10.1515/ nanoph-2025-0135。 (12) Atre, A. C.; Brenny, B. J. M.; Coenen, T.; García-Etxarri, A.; Polman, A.; Dionne, J. A. 采用阴极发光光谱学进行纳米尺度光学断层成像。*Nature Nanotechnology* **2015年**, *10*, 429–436, DOI：10.1038/nnano.2015.39。 (13) Nicoletti, O.; de la Peña, F.; Leary, R. K.; Holland, D. J.; Ducati, C.; Midgley, P. A. 金属纳米颗粒局域表面等离激元共振的三维成像。*Nature* **2013年**, *502*, 80–84, DOI：10.1038/nature12469。 (14) Coenen, T.; den Hoedt, S. V.; Polman, A. 面向纳米尺度光学、材料科学和地质学的新型阴极发光系统。*Microscopy Today* **2016年**, *24*, 12–19, DOI：10.1017/S1551929516000377

(15) Coenen, T.; Vesseur, E. J. R.; Polman, A. 角分辨阴极发光光谱学。*AppliedPhysics Letters* **2011年**, *99*, 143103, DOI: 10.1063/1.3644985. (16) Schilder, N. J.; Agrawal, H.; Garnett, E. C.; Polman, A. 由阴极发光全息术探测的相位分辨表面等离激元散射。*ACS Photonics* **2020年**, *7*, 1476–1482, DOI: 10.1021/acsphotonics.0c00209. (17) Akerboom, E.; Sugimoto, H.; Fujii, M.; García de Abajo, F. J.; Polman, A. 等离激元与介电散射体的角分辨阴极发光干涉测量。 *Nano Letters* **2025年**, *25*, 14264–14269, DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c02952. (18) Taleb, M.; Hentschel, M.; Rossnagel, K.; Giessen, H.; Talebi, N. 无激光器的锁相光子–电子相互作用。 *Nature Physics* **2023年**, *19*, 869–876, DOI: 10.1038/s41567-023-01954-3. (19) García de Abajo, F. J. 电子显微镜中的光学激发。 *Reviews of Modern Physics* **2009年**,*82*, 209–275, DOI: 10.1103/RevModPhys.82.209. (20) Brenny, B. J. M.; Polman, A.; García de Abajo, F. J. 高能电子在金属或介电表面上激发的飞秒等离激元与光子波包。 *Phys. Rev. B* **2016年**, *94*, 155412, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.155412. (21) Buijs, R. D.; Schilder, N. J.; Wolterink, T. A. W.; Gerini, G.; Verhagen, E.; Koenderink, A. F. 无需成像的超分辨：利用纳米光子结构进行近场到远场转换的基于库的方法。 *ACS Photonics* **2020年**, *7*, 3246–3256, DOI: 10.1021/acsphotonics.0c01350. (22) Kuttge, M.; Vesseur, E. J. R.; Koenderink, A. F.; Lezec, H. J.; Atwater, H. A.; García de Abajo, F. J.; Polman, A. 由阴极发光探测的表面等离激元极化激元的局域态密度、光谱与远场干涉。 *Phys. Rev. B* **2009年**, *79*, 113405, DOI: 10.1103/PhysRevB.79.113405. (23) He, K.; Zhang, X.; Ren, S.; Sun, J. 面向图像识别的深度残差学习。 *2016*年*IEEE*计算机视觉与模式识别会议（*CVPR*）论文集 **2016年**, 770–778, DOI: 10.1109/CVPR.2016.90. (24) Hussain, D.; Ahmad, K.; Song, J.; Xie, H. 原子力显微镜在关键尺寸计量学中的进展。 *Measurement Science and Technology* **2016年**, *28*, 012001, DOI: 10.1088/0957-0233/28/1/012001. (25) Olmon, R. L.; Slovick, B.; Johnson, T. W.; Shelton, D.; Oh, S.-H.; Boreman, G. D.; Raschke, M. B. 金的光学介电函数。 *Phys. Rev. B* **2012年**, *86*, 235147, DOI: 10.1103/PhysRevB.86.235147

一种基于库的方法：利用角分辨阴极发光逆向重建腔体深度- **补充信息** -

Sam T.P. Borman*[1,2], Daphne M. Dekker[2], Evelijn Akerboom[2], 和 Albert Polman[2]

[1]纳米光刻高级研究中心，1098 XG阿姆斯特丹，荷兰[2]NWO研究所AMOLF，1098 XG，阿姆斯特丹，荷兰

*电子邮箱：S.Borman@amolf.nl

S1 角分辨阴极发光图像的傅里叶峰分析

图 S1 展示了用于确定干涉条纹来源的分析流程。在图 S1a 所示的扫描电子显微镜图像中，确定阴极发光（CL）激发点与腔体下侧壁之间的距离。针对每个激发点，记录角分辨（AR）CL 干涉图并计算其傅里叶变换。图 S1a 和图 S1c 分别展示了标记在图 S1a 中的激发位置对应的数据。该傅里叶图像中二阶极大值的坐标对应于两个干涉光源之间的间距。为准确追踪该极大值的位置，如图 S1d 所示，通过从窄（$\sigma = 1$）高斯滤波图像中减去宽高斯平滑（$\sigma = 5$）图像，增强图像。随后，使用 scipy.signal.find_peaks 函数，根据图 S1e 所示的 $x = 0$ 处线切片确定峰的 y 坐标。然后使用 scipy.signal.peak_widths 函数在半峰显著性处确定峰宽。由于峰可能展宽且不对称，因此我们不采用其极大值的 y 坐标，而是计算振幅加权质心，其定义为

$$\bar{y} = \frac{\sum_i^N w_i y_i}{\sum_i^N w_i}, \tag{S1}$$

其中， w_i 是线切片的背景扣除后的振幅，求和遍历峰宽范围内的 N 个数据点。随后，通过对正峰和负峰的质心位置取平均，得到傅里叶导出的间距。

对于记录了角分辨阴极发光数据的每个位置，都将通过傅里叶分析获得的这一特征距离与扫描电子显微镜图像中已知的尺寸进行比较，结果绘制于图 S1f 中。误差棒根据傅里叶峰的峰宽按照以下方式确定：

$$\sigma_{\mathrm{FFT}} = \sqrt{\frac{\sum_i^N w_i (y_i - \bar{y})^2}{\sum_i^N w_i}}. \tag{S2}$$

最靠近侧壁的点的数据被省略，因为无法将第二个傅里叶峰与中心极大值区分开来。将 CL 激发点与下侧壁之间的距离乘以 2 后，可以发现二者之间存在相关性；前面三个数据点呈现出线性行为，但随着光束进一步远离侧壁，这种线性行为开始偏离。

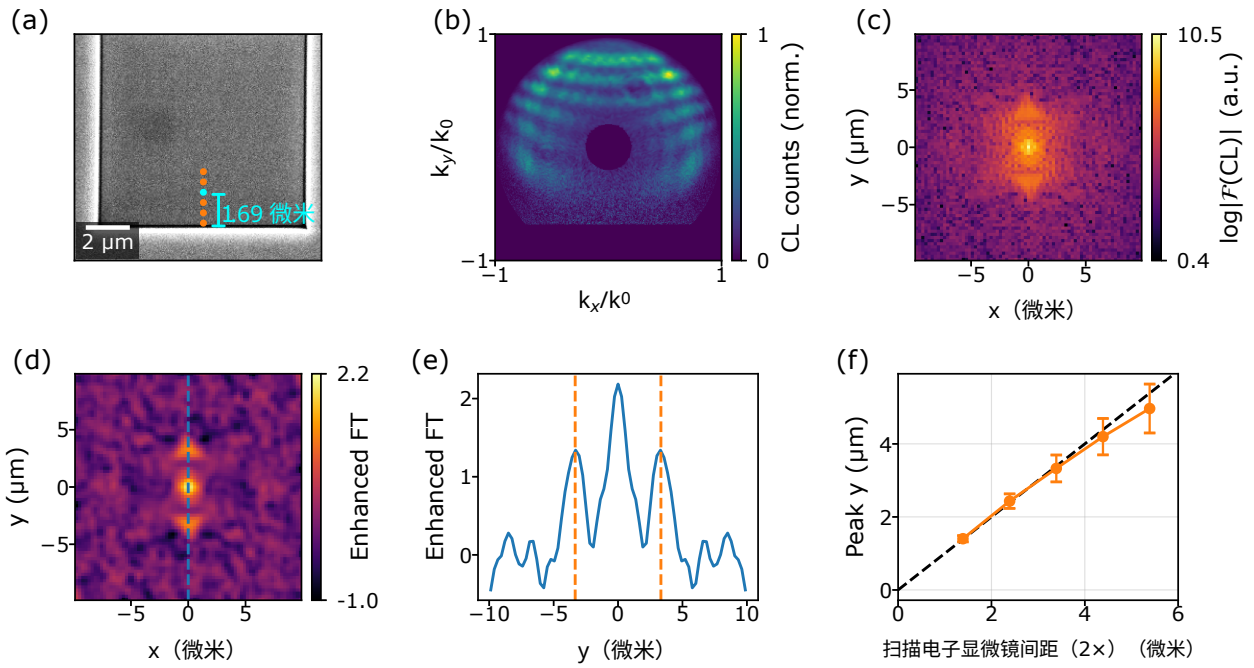


图 S1：（a）方形腔体的放大扫描电子显微镜图像。圆点表示采集角分辨阴极发光数据的位置，第一个位置距下侧壁 ~200 纳米，之后每个圆点均向内间隔 500 纳米。青色圆点对应的数据如图（b–e）所示。（b）在面板（a）中青色圆点所在位置采集的角分辨阴极发光干涉图像。（c）角分辨阴极发光图样的傅里叶变换。（d）使用高斯滤波增强后的（c）中傅里叶变换图像。额外峰的可见度得到增强，从而更便于算法识别其坐标。（e）沿 x=0 方向对（d）进行的线切片。橙色线表示位于 $y \approx \pm 3.4$ μ米处的峰质心。（f）显示由傅里叶变换推断的干涉源间距与扫描电子显微镜图像中测得的特征尺寸之间相关性的图表。扫描电子显微镜数据表示 2× 激发位置与下侧壁之间的距离。误差棒表示峰宽。

通过将初级跃迁辐射在侧壁处的反射确定为干涉源，可以解释这一线性趋势。如图 S2 所示的几何构造表明，光程差可以写成

$$\mathrm{OPD} = 2a\sin\theta, \tag{S3}$$

其中 a 表示电子束与腔体侧壁之间的距离。两条光线之间的相位差为 $\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda}$ 光程差；利用角分辨干涉图的归一化坐标系中$k_y = \sin\theta$这一事实，我们可以将相位差写为

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} 2ak_y. \tag{S4}$$

此外，干涉图的强度可以写为

$$I_{\mathrm{total}} = I_{\mathrm{TR}} + I_{\mathrm{refl}} + 2\sqrt{I_{\mathrm{TR}} I_{\mathrm{refl}}}\cos(\Delta\phi), \tag{S5}$$

这表明，理想反射会产生具有频率 $\frac{2a}{\lambda}$ 的干涉条纹。对干涉图进行傅里叶变换，并按光源波长缩放后，会在 $y = 2a$ 处出现一个峰值。

文献[1]中表明，速度为 v 的电子入射到两个介质之间的平面界面时所产生的跃迁辐射，其电场可表示为；两个介质的介电函数分别为 ϵ_1 和 ϵ_2 。

$$\mathbf{E}_{\mathrm{TR}}(r,\theta,\omega) = ik\cos\theta D\mu_1 \frac{e^{ikr}}{r}\hat{\theta}, \tag{S6}$$

with

$$D = \frac{2ieQ/c}{\epsilon_1 q_{z2} + \epsilon_2 q_{z1}} \tag{S7}$$

and

$$\mu_1 = \frac{\epsilon_1 q_{z2} - \epsilon_1 \omega/v}{q^2 - k^2\epsilon_2} - \frac{\epsilon_1 q_{z2} - \epsilon_2 \omega/v}{q^2 - k^2\epsilon_1}, \tag{S8}$$

其中， Q 是平行于界面的动量， q_{z1} 和 q_{z2} 分别是相应介质中的轴向动量。利用 (S6)，我们可以通过将两个电场源放置在相距 $2a$的位置，解析地计算跃迁辐射经无限平面镜反射后预期的远场干涉图。对波段 $\lambda \in [525, 575]$ 内不同波长的情形进行模拟，其中 $\delta\lambda = 2.5$ 纳米，得到相干和 $I(\lambda) = |E_{\mathrm{TR}}(\lambda) + r_{\mathrm{fresnel}} E_{refl}(\lambda)|^2$。随后，对整个带宽取非相干和，得到干涉图。图 S2b 显示了 $a = 1.69$ μ米时的结果。对于 $k_y > 0$ ，该干涉图的条纹数与图 S1b 中的实验干涉图相同，进一步支持了腔体侧壁反射导致干涉这一推断。图 S2c 显示了解析干涉图的高斯增强傅里叶变换。我们对实验中使用的每个距离 a重复此计算，并按照此前相同的步骤确定傅里叶峰的质心。图 S2(f) 中蓝色曲线显示了不同质心的 y–坐标。我们发现，尽管该曲线紧随设定曲线 $y = 2a$，仍存在一些偏差。这表明，即使在解析计算中，当傅里叶特征展宽或不对称时，提取出的质心也可能存在差异。

然而，这一解析计算仅通过将两个光源彼此相距 $2a$ 放置而完成。该计算假设腔体下方的侧壁是一面无限平面镜，因此未能捕捉由腔体完整三维几何结构引起的任何遮蔽效应、边缘散射或其他侧壁的反射。这些效应可能对实验干涉图有显著影响，因此有必要采用完整的 FDTD 仿真。图 S2d 展示了偶极子放置在腔体侧壁上方 1.69 μm 处时的 FDTD 结果。我们注意到，对于 $k_y > 0$ ，实验、解析法和 FDTD 仿真中的干涉条纹数量相似，但 FDTD 仿真更接近图 S1b 中观察到的条纹厚度和曲率变化。(d) 的增强傅里叶变换如图 S2e 所示。除我们之前一直追踪的二阶峰外，还显示了许多其他特征，这些特征可能与干涉图中更细的干涉条纹有关。然而，这些特征在实验数据中难以观察到，因为它们可能被背景噪声掩盖。

图 S2(f) 显示了解析法、时域有限差分法和实验干涉图中得到的傅里叶导出的间距。为清晰起见，仅标出了实验数据的峰宽，但在模拟数据集中也观察到了相当的峰宽。三条曲线大致遵循线性趋势，尽管理想状态（$2a$）仍存在小幅偏差。这促使我们认为，跃迁辐射从腔体侧壁反射可能是产生干涉的原因。然而，傅里叶峰宽度和不对称性使得难以将其质心位置解释为精确的源间距。此外，尽管简化镜面模型解释了条纹密度，但它无法捕捉有限腔体几何结构引入的其他特征，例如条纹曲率和阴影效应。正文中已 gnɪg明，这些特征与腔体深度相关，但很难将其直接关联到单个傅里叶分量。因此，我们选择采用一种数据驱动方法，即使用以图像处理能力著称的卷积神经网络，从角分辨阴极发光测量中提取腔体深度信息。

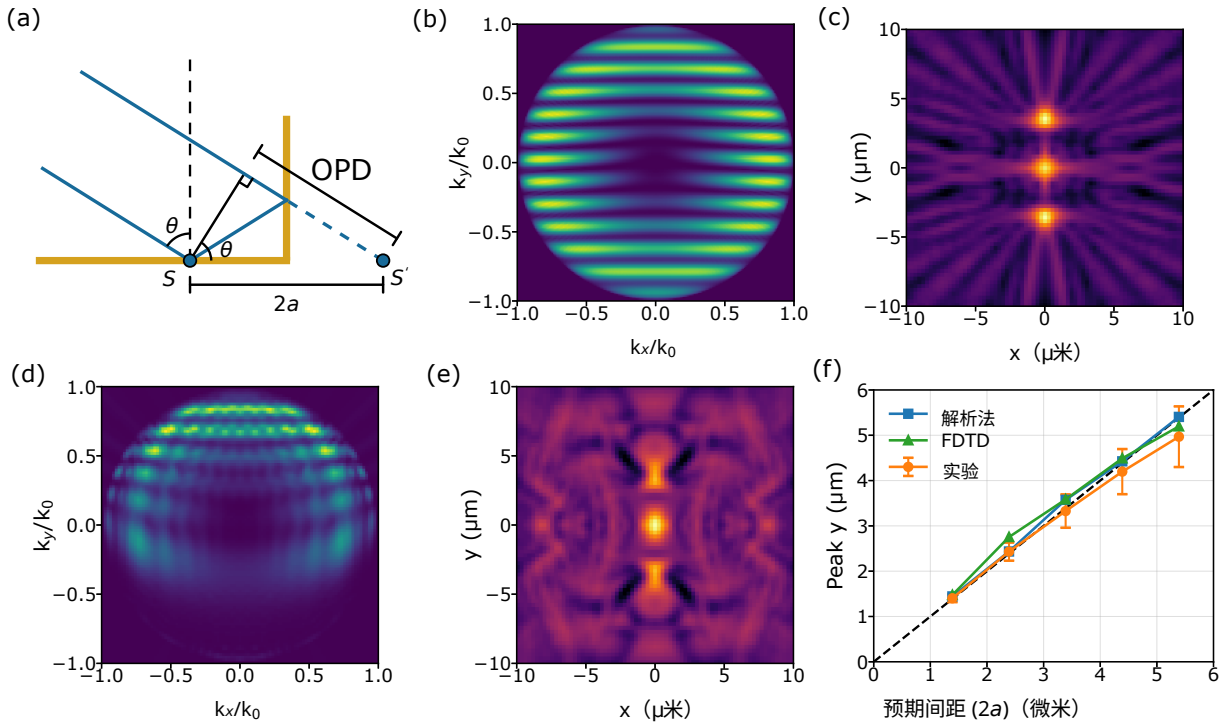


图 S2：（a）展示光源 S 与其虚拟镜像光源 S'之间干涉的示意图。在远场以角度 θ 记录的两条光线之间的光程差为 OPD $= 2a\sin\,\theta$。（b）两个相距 $2a$ 、且$a = 1.69$ 彼此间隔的跃迁辐射源的解析法计算干涉图。条纹数与实验中观察到的相似，但该模型无法捕捉条纹曲率、遮蔽效应和细微特征。（c）（b）的高斯增强傅里叶变换。（d）在距下侧壁 1.69 μ米处放置一个 z取向的偶极子，并在 $10 \times 10 \times 2.4$ μ米金腔中进行时域有限差分法模拟得到的干涉图。完整的三维模拟能够更准确地重建实验中观察到的细微特征。（e）（d）的高斯增强傅里叶变换。（a–d）中的所有图像均归一化至 0 和 1 之间。（f）第二个傅里叶峰的质心 y–位置与 $2\times$ 激发点和腔体侧壁之间距离的关系图。由于无法将第二个傅里叶峰与中央峰区分开，故省略 $a = 0.19$ 的数据。

S2 ResNet-18学习曲线

图 S3 显示了单个 ResNet-18神经网络在 50 个训练轮次中的学习曲线。训练损失在 33 个训练轮次内降至 $< 10^{-3}$ 以内。为防止网络过拟合，我们跟踪了验证数据集上的损失。随后使用验证损失最低的训练轮次，在模拟测试数据和实验数据上执行推理。

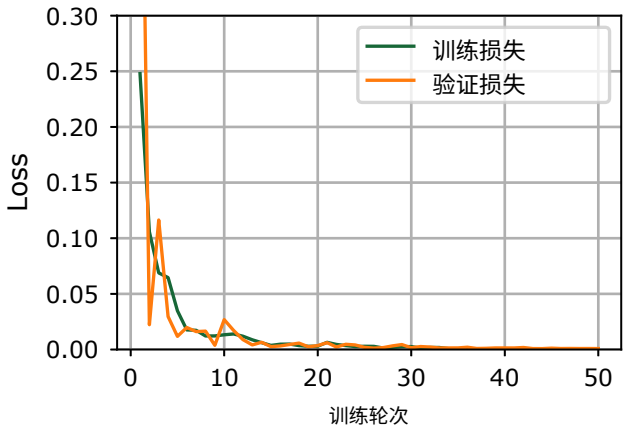


图 S3：使用随机种子 19 初始化的代表性 ResNet-18 神经网络在 50 个训练轮次中的训练损失和验证损失。

S3 参考深度表征

为获得用于评估基于库的 AR-CL 重建方法的参考深度估计值，我们使用倾斜扫描电子显微镜和原子力显微镜（AFM）对腔体进行了表征。在倾斜扫描电子显微镜成像中，通过观察腔体在 52° 倾斜角下的二次电子图像来估算深度。随后，深度与其投影之间的关系可表示为

$$d = L_{\mathrm{proj}} / \sin(52^\circ). \tag{S9}$$

对于每个腔体，我们根据二次电子图像估算最小和最大深度，其中一个示例见图 S4。这些测量是在距离阴极发光激发位置最近的腔体侧壁上进行的。为了正确估算侧壁顶部，测量需要在腔体的一个角落处进行。在两个角落中的每个角落处，均获得了两组最小值和最大值估算结果。正文图 4 中报告的参考值是这些测量结果的中心值，即 $d_{\mathrm{mean}} = \frac{\text{平均值}(d_{\max}) + \text{平均值}(d_{\min})}{2}$；而报告的误差为 $d_{\mathrm{error}} = \frac{\text{平均值}(d_{\max}) - \text{平均值}(d_{\min})}{2}$。表 S1 报告了各个腔体的测量值及其中心值和误差。所报告的误差表示人工估算的最小深度与最大深度之间的半程范围，因此应将其理解为识别侧壁边界时相关不确定性的估计，而不是统计标准差或置信区间。

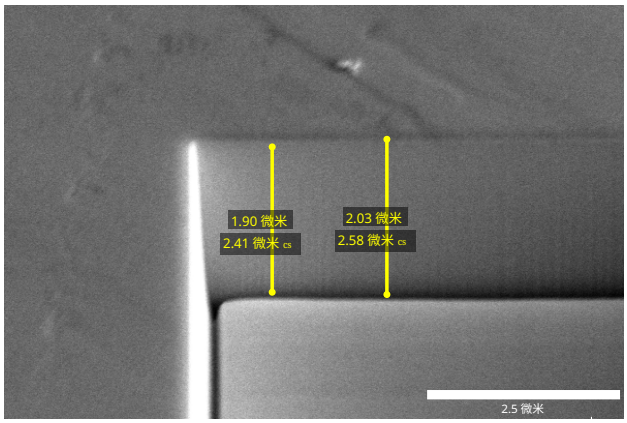


图 S4：在 52° 倾斜角下通过侧壁投影测量腔体深度。两条测量线分别表示最小和最大估计值，标注的数字则表示投影深度和经倾斜角校正后的深度。

表 S1：本实验中研究的四个腔体的倾角校正深度测量值。在侧壁的左、右角各进行两次最小值/最大值估计。报告了每个腔体最小值/最大值范围的中心值和误差。

腔体	I				II				III				IV			
角	L		R		L		R		L		R		L		R	
最小值 (μm)	0.87	0.89	0.85	0.87	1.35	1.42	1.38	1.40	1.92	1.87	1.88	1.94	2.35	2.35	2.37	2.41
最大值 (μm)	0.99	0.95	0.97	1.02	1.49	1.59	1.50	1.59	2.12	2.05	2.12	2.15	2.57	2.59	2.65	2.58
中心值 (μm)	0.92 ± 0.06				1.47 ± 0.08				2.01± 0.10				2.48 ± 0.11			

为了独立表征腔体深度并进一步评估基于扫描电子显微镜的估算值，我们在侧壁上进行了额外的原子力显微镜测量。由于这些腔体的侧壁对于原子力显微镜而言相对陡峭且较深，我们采用 0.2 lines/s 的低扫描速率，并将扫描区域限制在边缘周围的 $\sim 1 \times 3\mu m$ 范围内。为便于跟踪陡峭的高度变化，快速扫描方向相对于侧壁的方向为 $\sim 45^\circ$ 。所得形貌图见图 S5(a-d)。可以观察到一个宽阔的高度变化区域，其延伸范围超过 $1\ \mu m$；在相同腔体的扫描电子显微镜图像中并未观察到这一现象。因此，我们将这种展宽归因于原子力显微镜测量伪影，其产生原因是探针几何形状有限，以及在跟踪陡峭变化时反馈响应受限。此外，面板 (a) 和 (d) 中的图还显示，初始扫描线存在不规则性，这表明在跟踪陡峭侧壁时出现了反馈不稳定性。尽管如此，高度剖面最终达到了一个相对平坦的区域，我们将其识别为表观腔体底面。

利用周围的金表面进行平面调平后，从每张形貌图中提取了若干个（x，z）剖面，每个剖面均沿 y方向对相邻的 10 条扫描线取平均值。按照图 S5(e-h)所示，所选剖面均包含上方金表面和空腔底部。随后，通过对每个剖面中重叠的平台区域拟合一条水平线，并计算其差值来提取深度。我们测得的深度为 0.887，1.250、1.818 和 $2.203\ \mu m$，标准差分别为 1.7、1.6，6.0 和 9.7 纳米。这些标准差描述的是提取出的剖面之间的变化，而非不确定性的绝对测量值。

原子力显微镜测得的深度系统性地小于倾斜扫描电子显微镜估算值，差异介于 37 至 281 纳米之间。尽管原子力显微镜剖面显示，测得的阶跃高度变化相对较小，但仍不能排除边缘测量中高纵横比带来的系统不确定性。具体而言，有限的探针几何形状和反馈响应可能会影响对空腔底部的测量。同样，倾斜扫描电子显微镜测量依赖于手动识别侧壁边界，这会给测得的侧壁投影带来不确定性。目前尚无法确切确定差异的成因，因此，两种测量结果都应视为参考估算值，而非经过独立验证的真实深度。

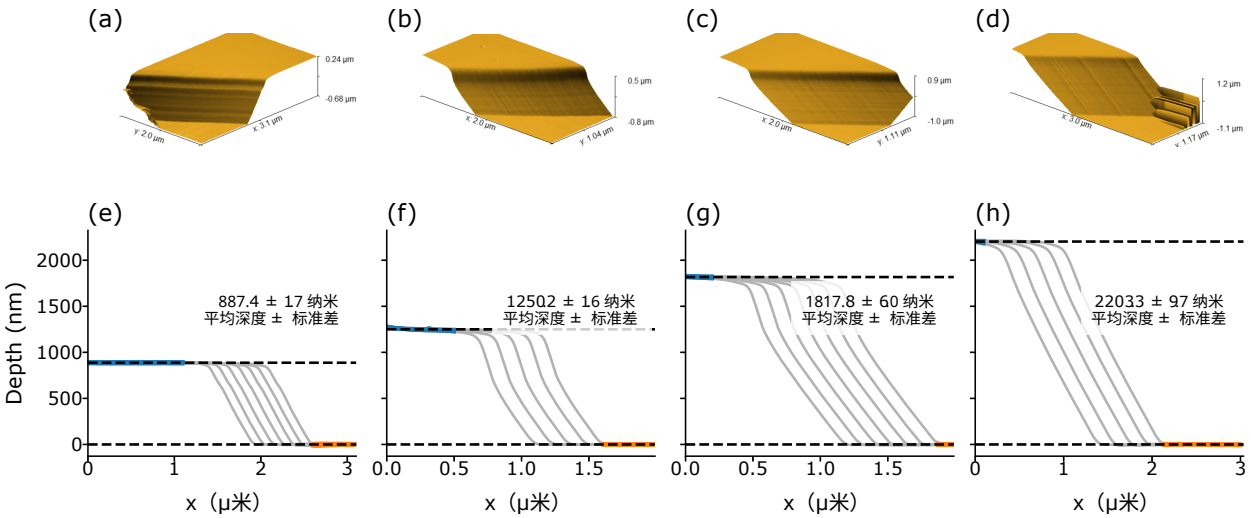


图 S5：腔体深度的原子力显微镜表征。（a-d）在跨越腔体侧壁的 $\sim 1 \times 3$ μm 区域内记录的原子力显微镜形貌图。宽阔的表观侧壁和底面的不规则性归因于测量伪影。（e-h）对应的高度剖面，对 10 条扫描线取平均，并以同时包含上表面和底面的方式提取。蓝色和橙色线段表示用于拟合平台区域的区段，虚线标示出这些平台区域，由此提取深度。

S4 实验深度重建的统计框架

为量化重建深度与参考深度之间的一致性，我们对实验预测值进行残差分析。由于同一腔体内的测量共用同一个参考深度，且每张图像均使用多个以不同随机种子初始化的独立训练神经网络进行评估，因此我们将变化分解为腔体内变化、腔体间变化和训练种子引起的变化。

将 $\hat{d}_{ijs}$ 定义为使用神经网络 s 从腔体 i 的干涉图 j 得到的预测值，将 d_i^{ref} 定义为腔体 i 的参考估计值，则残差可写为

$$r_{ijs} = d_i^{\mathrm{ref}} - \hat{d}_{ijs}. \tag{S10}$$

合并残差的平均残差和总方差分别为

$$b = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{n_i} \sum_{s=1}^{S} r_{ijs} \tag{S11}$$

and

$$\sigma_{\mathrm{total}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{n_i} \sum_{s=1}^{S} (r_{ijs} - b)^2, \tag{S12}$$

其中，S 为独立网络的数量，M 为不同腔体的数量，n_i 为腔体 i 内测量值的数量。每幅图像均使用相同的 S 个网络进行评估，因此预测值总数为 $N = S \sum_{i=1}^{M} n_i$。

为分解总方差，我们首先定义每个干涉图的平均残差，即对训练随机种子取平均，

$$\bar{r}_{ij} = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^{S} r_{ijs}, \tag{S13}$$

以及单个腔体内的平均残差，

$$\bar{r}_i = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}\bar{r}_{ij}. \tag{S14}$$

于是我们可以写成

$$r_{ijs} - b = (r_{ijs} - \bar{r}_{ij}) + (\bar{r}_{ij} - \bar{r}_i) + (\bar{r}_i - b) \tag{S15}$$

并将其平方代入（S12）。求和时交叉项将消失，因为

$$\sum_{s=1}^{S}(r_{ijs} - \bar{r}_{ij}) = 0 \quad \text{and} \quad \sum_{j=1}^{n_i}(\bar{r}_{ij} - \bar{r}_i) = 0. \tag{S16}$$

因此，总方差可以写为

$$\sigma^2_{\text{total}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{n_i}\sum_{s=1}^{S}(r_{ijs} - \bar{r}_{ij})^2 + \frac{S}{N}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{n_i}(\bar{r}_{ij} - \bar{r}_i)^2 + \frac{S}{N}\sum_{i=1}^{M} n_i(\bar{r}_i - b)^2. \tag{S17}$$

第一项表示由独立训练的神经网络对同一图像所作预测之间的变化。我们将其定义为训练种子方差，

$$\sigma^2_{\text{seed}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{n_i}\sum_{s=1}^{S}(r_{ijs} - \bar{r}_{ij})^2. \tag{S18}$$

第二项描述了同一腔体内不同激发位置之间的变化，该变化是在对训练随机种子取平均后得到的。我们将其定义为合并腔内方差，

$$\sigma^2_{\text{within}} = \frac{S}{N}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{n_i}(\bar{r}_{ij} - \bar{r}_i)^2. \tag{S19}$$

利用残差的定义，我们得到

$$\begin{aligned}\bar{r}_{ij} - \bar{r}_i &= (d_i^{\text{ref}} - \bar{\hat{d}}_{ij}) - (d_i^{\text{ref}} - \bar{\hat{d}}_i) \\ &= -(\bar{\hat{d}}_{ij} - \bar{\hat{d}}_i),\end{aligned} \tag{S20}$$

其中 $\bar{\hat{d}}_{ij}$ 是对所有训练随机种子取平均后得到的干涉图 j 的预测值，并且 $\bar{\hat{d}}_i$ 是腔体 i的平均预测值。

通过取平方，我们发现腔体内方差可以表示为

$$\sigma^2_{\text{within}} = \frac{S}{N}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{n_i}(\bar{\hat{d}}_{ij} - \bar{\hat{d}}_i)^2. \tag{S21}$$

同样，对于训练随机种子贡献，我们得到

$$r_{ijs} - \bar{r}_{ij} = -(\hat{d}_{ijs} - \bar{\hat{d}}_{ij}). \tag{S22}$$

因此，腔体内方差和训练种子方差均独立于参考深度估计值。这两项贡献共同描述了单个腔体内预测深度的变化，可写为

$$\sigma_i^2 = \sigma^2_{\text{within},i} + \sigma^2_{\text{seed},i} \tag{S23}$$

$$= \frac{1}{n_i S}\sum_{j=1}^{n_i}\sum_{s=1}^{S}(\hat{d}_{ijs} - \bar{\hat{d}}_i)^2. \tag{S24}$$

此处，方差分量仅针对腔体 i 进行评估，而非对所有腔体进行汇总。标准差 σ_i 用于正文中图4(b)的垂直误差条，表示不同激发位置和独立训练的网络所产生的综合变化。

最后，我们将第三项确定为腔体间方差，

$$\sigma^2_{\text{between}} = \frac{S}{N}\sum_{i=1}^{M} n_i(\bar{r}_i - b)^2. \tag{S25}$$

结合这三项贡献，得到最终分解式，

$$\boxed{\sigma^2_{\text{total}} = \sigma^2_{\text{within}} + \sigma^2_{\text{between}} + \sigma^2_{\text{seed}}.} \tag{S26}$$

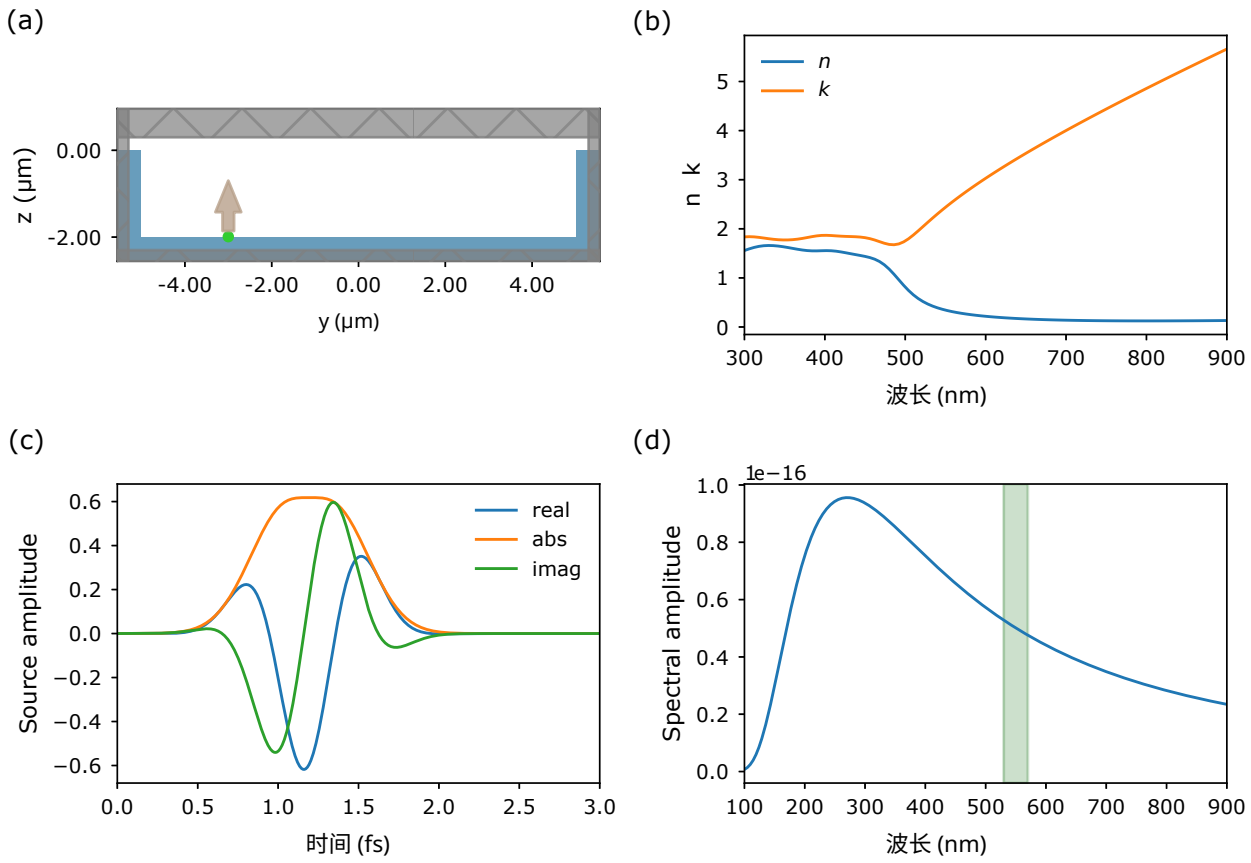
定量分解结果见正文。腔体内方差量化了不同激发位置处种子平均预测值之间的差异，而训练种子方差量化了对于同一干涉图，由独立训练的网络产生的预测值之间的变异性。后者同时包含网络预测值之间的系统性差异和图像相关变化。这两项贡献均与所选参考深度无关。相比之下，腔体间方差量化了腔体平均残差围绕总体平均残差的变化。平均残差和腔体间方差均取决于参考深度，因此可能受到倾斜SEM最小值/最大值估计或S3节所述AFM分析误差的影响。

S5 FDTD仿真设置

图S6展示了在Tidy3D中进行的时域有限差分（FDTD）仿真设置，该仿真用于构建角分辨阴极发光图像训练数据库。该数据库通过改变偶极子的y坐标和(a)中所示的腔体深度 z 来构建。由于单晶金是色散材料，用于求解麦克斯韦方程组的介电常数需要根据椭偏测量数据进行极点-残数拟合，具体如下

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \sum_k \left[\frac{c_k}{i\omega + a_k} + \frac{c_k^*}{i\omega + a_k^*}\right], \tag{S27}$$

其中，$\epsilon_\infty = 1$ 对于真空中的Drude金属，a_k 为极点位置，c_k 为其残数。取自Olmon 等人 [2]的椭偏测量数据所得到的色散关系如(b)所示。偶极子源在时域中由高斯脉冲激发，使其在频域中发射宽带光谱，类似于跃迁辐射，如图S6(c,d)所示。



图S6：FDTD仿真设置。(a) 一个沿 z 方向的偶极子置于腔体内部的 $(0, y)$ 轴上；该腔体尺寸为 $10\ \mu\text{m} \times \times 10\ \mu\text{m} \times z$。腔体上方数十纳米处放置了一个场投影 k 空间监视器，整个仿真区域由完美匹配边界层包围。(b) 根据文献[2]中的椭偏测量数据进行复极点-留数拟合得到的折射率色散，用于描述铣削出腔体的单晶金材料。腔体定义为真空介电常数 ($n = 1$)。(c) 用于激发偶极子源的高斯脉冲。(d) 由激发源定义的辐射光谱。绿色带表示实验光学滤波器 $550 \pm 25\text{nm}$ 范围内关注的波长。

S6 时域有限差分法仿真收敛性测试

由于我们正在模拟腔体内部的光散射，因此必须让时域有限差分法仿真运行足够长的时间，使光场完全衰减。然而，更长的运行时间会导致更高的计算成本；在Tidy3D中，这项成本通过一种称为FlexCredits[1]的积分系统计费。对于本研究而言，我们不一定需要所有光场都完全衰减。我们只关注 k-空间监视器中的相关贡献，因为这些贡献可能会影响神经网络性能。因此，我们选择进行收敛性测试，分别运行时长为50、100和200飞秒的3次仿真。随后，我们比较运行时间分别为50与100飞秒、100与200飞秒时得到的干涉图像。

该比较结果如图 S7 所示。图 S7a 展示了 100飞秒和 50飞秒模拟结果之间的强度差。该差值最大为 14%，且主要出现在高频分量中。图 S7b 绘出了这些强度差的直方图，并使用

[1]https://docs.flexcompute.com/projects/tidy3d/en/stable/faq/docs/faq/what-is-a-flexcredit.html

Python 软件包 e skimage，根据公式计算出归一化均方根误差为 7.49%。

$$\mathrm{NRMSE} = \sqrt{\frac{1}{M \times N} \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{N} (I_1(i,j) - I_2(i,j))^2} \times 100\%, \tag{S28}$$

其尺寸为 $M \times N$ 图像的尺寸。在图 S7c 中，我们展示了各个像素的相关性，并报告皮尔逊相关系数为 $r = 0.9963$。我们还在图 S7(d-f) 中对 200飞秒和 100飞秒运行时间的结果进行了比较，发现归一化均方根误差为 3.37%，相关性为 0.9993。

表 S2 进一步汇总了这些比较指标，其中我们将其与相对模拟成本进行对照。将运行时间从 50飞秒 切换到 100飞秒，成本为 1.32 倍的积分；而将运行时间从 100飞秒 切换到 200飞秒，成本为 1.53 倍的积分。对于这些指标，我们采用以下经验法则：两幅图像的归一化均方根误差为 $< 5\%$ 且相关性为 > 0.99 时，可认为它们相似。因此，我们得出结论：对于我们的研究目的而言，运行时间为 100飞秒 和 200飞秒 的模拟结果已足够相似；而运行时间为 100飞秒 的模拟，相较于运行时间为 50飞秒 的模拟，确实带来了显著改进。因此，在构建模拟库时采用了 100飞秒 的模拟时间。

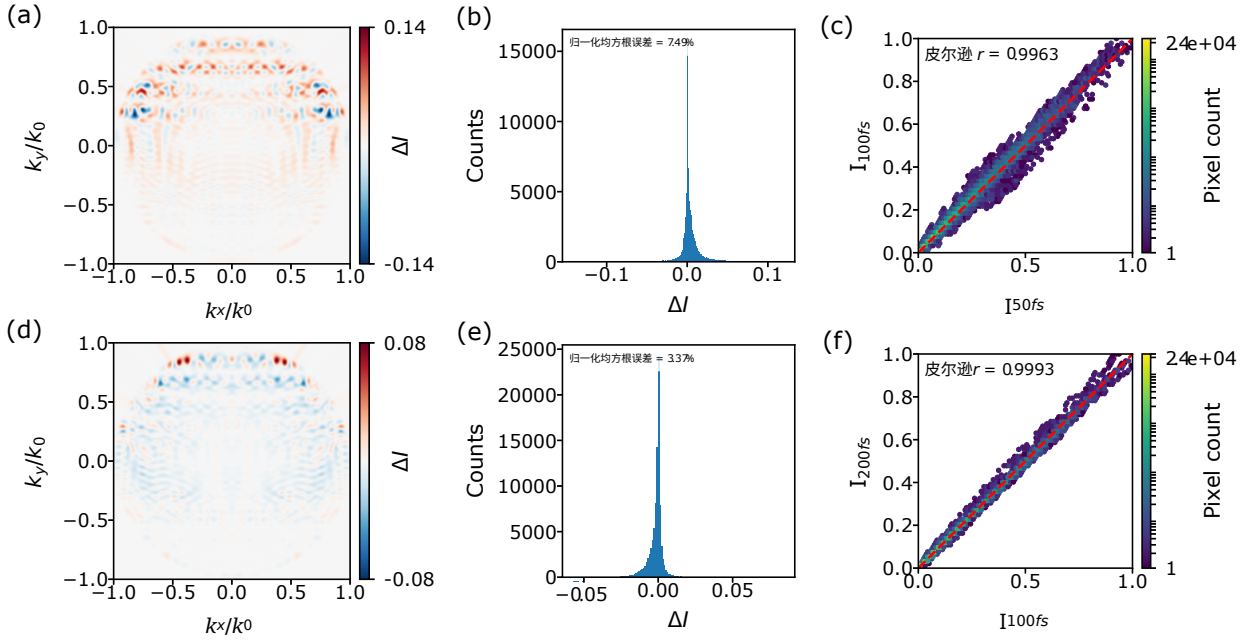


图 S7：不同运行时间下的 FDTD 仿真结果比较：(a-c) 50飞秒与 100飞秒，以及 (d-f) 100飞秒与 200飞秒。(a) 和 (d) 显示连续两幅图像之间的强度差。(b) 和 (e) 显示这些差值的直方图，并报告其归一化均方根误差。(c) 和 (f) 显示每个像素强度值的相关性。色条表示图中像素密度。

表 S2：不同运行时间下连续 FDTD 仿真的相对 FlexCredits 成本及图像比较指标。

运行时间	FlexCredit 成本	相对成本	归一化均方根误差	皮尔逊相关性
50飞秒	0.047	1.00×	-	-
100飞秒	0.062	1.32×	7.49%	0.9963
200飞秒	0.095	1.53×	3.37%	0.9993

参考值

(1) Brenny, B. J. M.; Polman, A.; García de Abajo, F. J. 高能电子在金属或介电表面上激发的飞秒等离激元和光子波包。*Phys. Rev. B* **2016年**, *94*, 155412。 (2) Olmon, R. L.; Slovick, B.; Johnson, T. W.; Shelton, D.; Oh, S.-H.; Boreman, G. D.; Raschke, M. B. 金的光学介电函数。*Phys. Rev. B* **2012年**, *86*,235147。