



А.С. Шабека

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК ПОЛУЧАЕМЫХ В ЭЛЕКТРОННОМ МИКРОСКОПЕ МЕТОДОМ МНОГИХ СЛОЁВ

(Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королёва)

Введение

Кристаллическая решётка является регулярным расположением частиц в кристаллах, которое характеризуется периодической повторяемостью в трёх измерениях [1]. Объектом исследования являются изображения кристаллических решеток и метод их моделирования. В данной работе является изучение метода моделирования изображений электронной микроскопии, разработка алгоритма, реализующего данный метод.

В настоящее время электронная микроскопия очень быстро развивается и продолжает устанавливать все новые пределы разрешающей способности. Но тем не менее, из-за физических и технологических ограничений, исследование может сильно усложниться [2]. В этом случае значительную помощь может оказать компьютерное моделирование, не только в построении исследуемых изображений, но и в получении дополнительной информации от полученных изображений.

Процесс получения изображения в электронном микроскопе включает в себя: моделирование кристаллической структуры или неидеальной структуры; распространение падающей электронной волны через кристаллическую пластину; передача рассеянной волны от оптической системы электронного микроскопа; сравнение с экспериментальными микрофотографиями.

Существует два общих подхода для моделирования изображений электронной микроскопии [3]. Первый основан на использовании собственных состояний волн Блоха и матричной формулировки в возвратно-поступательном пространстве. Второй построен на математическом разрезании объекта вдоль оптической оси. Метод многих слоёв позволяет работать не только с полностью аморфными материалами, но и довольно гибко подходит для компьютерного моделирования кристаллических экземпляров с дефектными или разделёнными поверхностями.

1. Описание метода

Метод многих слоёв имитирует передачу электронов в толстом образце. Данный метод основан на том, что кристалл толщиной виртуально разрезается на множество слоёв толщиной dz [4]. На некотором уровне приближения человеческое зрение является линейной сверткой некоторой функции интенсивности света с функцией пространственного разрешения.



Данный метод включает в себя следующие этапы:

1) Формируется потенциал образца: $v_z(x) = \sum_{j=1}^N v_{zj}(x - x_j)$, где x_j - позиция j -го атома, v_{zj} - проекция атомного потенциала.

2) Рассчитывается передаточная функция образца: $t(x) = \exp(i\sigma v_z(x))$, где σ - параметр взаимодействия.

3) Вычисляется функция распространения через линзу объектива $H_0(K)$, с использованием преобразование Фурье от передаточной функции $T(k) = FT[t(x)]$

4) С использованием обратного преобразование Фурье рассчитывается функция распространения волны $\psi_i(k) = FT^{-1}[\Psi_i(K)]$.

5) Квадрат модуля волновой функции определяет распределение интенсивности конечного изображения.

2. Результаты

В результате работы программы было получены модельные изображения кристаллической решётки кремния при различных параметрах модели электронного микроскопа: Cs – сферическая абберация, E – ускоряющее напряжение, df – дефокусировка, ddf – хроматическая абберация (рисунки 1-2).

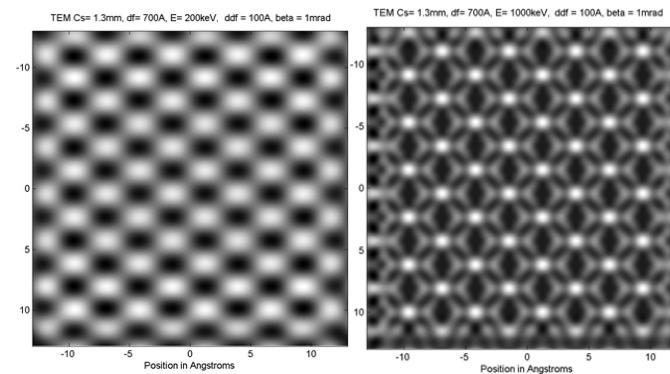


Рисунок 11- Электронное изображение арсенида галлия при различных значениях напряжения

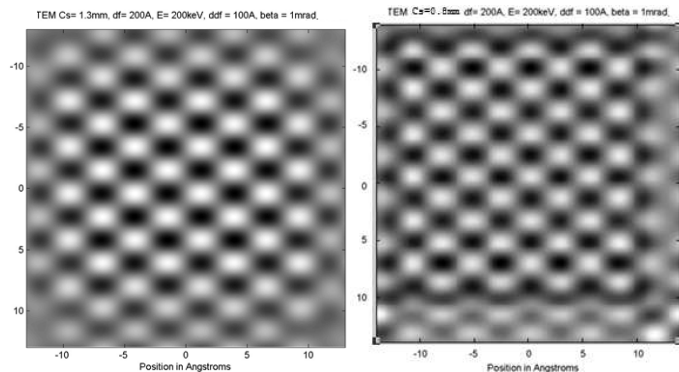


Рисунок 12- Электронное изображение арсенида галлия при измененных сферической (слева) и хроматической (справа) абберациях

3 Анализ результатов

Проанализировав полученные изображения, заметим, что такие параметры как сферическая и хроматическая абберации, а также напряжение и дефокусировка влияют на качество изображения, но не влияют на его общую структуру. Для повышения качества изображения необходимо подобрать оптимальные значения параметров. Для этого установим зависимость максимальной интенсивности от выбранных параметров (рисунок 4).

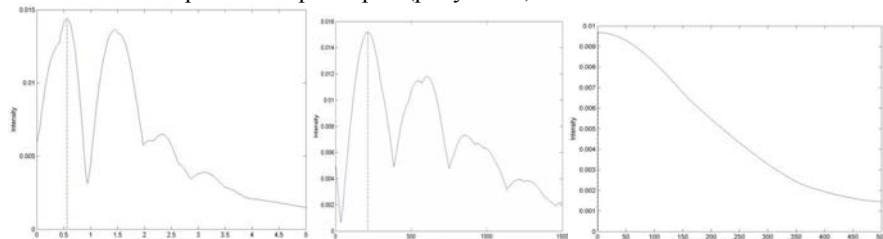


Рисунок 13- Графики зависимости максимальной интенсивности от параметров микроскопа

Оптимальными значениями будем считать сферическую абберацию 0,6 мм, дефокусировку 220 ангстрем и хроматическую абберацию 50 ангстрем. На рисунке 5а представлено натурное изображений полученное в электронном микроскопе высокого разрешения, на рисунке 5б соответствующее модельное изображение при оптимальных значениях параметров. Можно отметить высокую степень похожести.

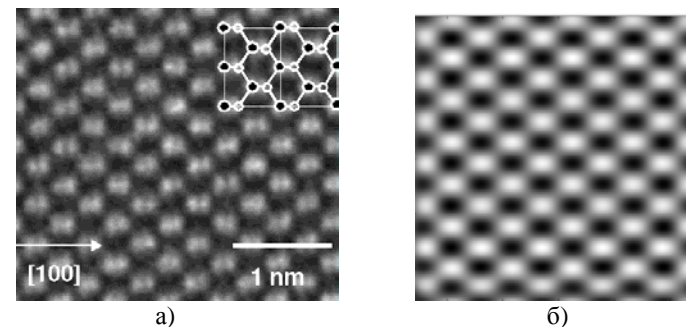


Рисунок 14- Изображение арсенида галлия в электронном микроскопе а) натурное изображение б) результаты моделирования

Заключение

В результате реализации метода многих слоев были получены изображения кристаллической решетки при различных параметрах микроскопа. Полученные изображения вполне точно отображают структуру рассмотренной кристаллической решетки.

Также были определены параметры, при которых изображение имеет наиболее высокое качество. Метод многих слоев для компьютерного моделирования является наиболее удобным методом.

Литература

1. Кларк, Э. Р. Микроскопические методы исследования материалов / Э. Р. Кларк, К. Н. Эберхардт. – М.: Техносфера, 2007. – 367 с.
2. Куприянов, А.В. О наблюдаемости кристаллических решеток по изображениям их проекций [Текст] / А.В. Куприянов, В.А. Сойфер // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 2. – С. 249-256.
3. P. Stadelmann Image Calculation Techniques, Lausanne, Switzerland, 1993. – P. 1-27.
4. Earl J. Kirckland Advanced computing in electron microscopy, Cornell University Ithaca, N.Y. 2006 P. 77-93, P. 115-198

Д.Г. Шамиданов, А.А. Бармин, М.А. Шилина

ПРАВИЛА ФОРМИРОВАНИЯ УНИВЕРСАЛЬНОЙ ФОРМАЛЬНОЙ МОДЕЛИ КОНТЕНТА ИНФОРМАЦИОННОГО ПРОСТРАНСТВА

(Уфимский государственный авиационный технический университет)

В статье рассмотрены проблемы построения универсальной формальной модели доступа к данным. Рассматриваются правила формирования модели контента со структурированными и неструктурированными данными.