

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК МЕТОДОМ МНОГИХ СЛОЁВ

А.С. Шабека, А.В. Куприянов

Самарский государственный аэрокосмический университет им. академика С.П. Королева  
(национально исследовательский университет)

В данной работе был рассмотрен метод многих слоев для формирования изображения кристаллических решеток. В результате работы были получены изображения кристаллических решеток, проведено их исследование и сравнение с результатами натурального эксперимента.

## Введение

Кристаллическая решётка представляет собой регулярное расположение частиц в кристаллах, характеризующееся периодической повторяемостью в трёх измерениях [1]. Объектом исследования являются изображения кристаллических решеток и метод их моделирования. Целью данной работы 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 инструментальных ограничений или ограничений самого объекта, исследование может сильно усложниться [2]. В этом плане существенную помощь может оказать компьютерное моделирование, не только в построении исследуемых изображений, но и в извлечении 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 том, что вовлекает собственные состояния волн Блоха и матричную формулировку 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.

Если оптические свойства линз в микроскопе известны, то распределение интенсивности в заключительном электронном микрографе может быть вычислено с относительно высокой точностью. Моделирование изображения может предоставить несколько источников дополнительной информации об исследуемом экземпляре. Например, можно изменить аберрации и дефокусировку и посмотреть, как это повлияет на изображение.

## 1. Метод многих слоев для формирования изображений

Метод многих слоёв имитирует передачу электронов в толстом образце. Данный метод основан на том, что кристалл толщиной виртуально разрезается на множество слоёв толщиной [4]. Человеческое зрение с некоторой точностью представляет собой линейную свертку функции интенсивности света с функцией пространственного разрешения. Физический смысл этой свертки представлен на рисунке 1.

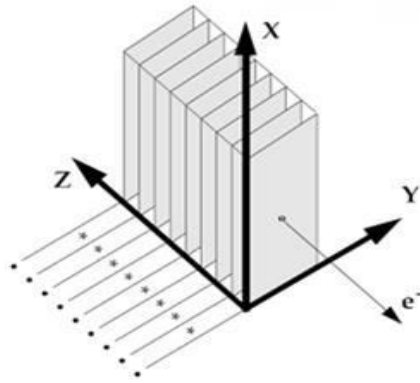


Рисунок 1- Схема построения свёрток слоёв

Само изображение представляет собой распределение интенсивности  $g(\mathbf{x})$  или квадрат модуля волновой функции  $\psi_i(\mathbf{x})$ :

$$g(\mathbf{x}) = |\psi_i(\mathbf{x})|^2 = |\psi_i(\mathbf{x}) \otimes h_0(\mathbf{x})|^2, \quad (7)$$

где  $h_0(\mathbf{x})$  - функция рассеяния точки,  $\psi_i(\mathbf{x})$  - волновая функция падающих электронов:

$$\psi_i(\mathbf{x}) \sim t(\mathbf{x}) \sim \exp[i\sigma v_z(\mathbf{x})] \sim 1 + i\sigma v_z(\mathbf{x}) + \dots, \quad (8)$$

где  $v_z(\mathbf{x})$  потенциал образца,  $t(\mathbf{x})$  - функция пропускания.

$$h_{wp}(\mathbf{x}) = h_0(\mathbf{x}) - i\bar{h}_0(\mathbf{x}). \quad (9)$$

Учитывая (2) и (9) выражение (7) можно переписать в следующем виде:

$$g(\mathbf{x}) \approx 1 + 2\sigma v_z(\mathbf{x}) \otimes h_{wp}(\mathbf{x}), \quad (10)$$

где  $h_{wp}(\mathbf{x})$  - функция рассеяния для изображения объекта слабой фазы в поле яркости.

Данное выражение удобнее вычислять через преобразование Фурье:

$$G(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k}) + 2\sigma V_z(\mathbf{k}) H_{wp}(\mathbf{k}), \quad (11)$$

где  $V_z(\mathbf{k})$  - преобразование Фурье от потенциала  $H_{wp}(\mathbf{k})$  - передаточная функция.

$$H_{wp}(\mathbf{k}) = \sin\left[\pi\lambda\mathbf{k}^2(0.5C_s\lambda^2k^2 - \Delta f)\right], \quad (12)$$

где  $C_s$  - сферическая абберация,  $\Delta f$  - дефокусировка.

## 2. Реализация метода многих слоев

Алгоритм формирования изображения состоит из следующих этапов:

- Разделяем образец на тонкие слои;
- Вычисляем проекции атомного потенциала  $v_{zi}$  для каждого слоя.
- Выполняем преобразование Фурье потенциала  $V_z(\mathbf{k}) = FT[v_z(\mathbf{x})]$ .
- Рассчитываем передаточную функцию  $H_{wp}(k)$  по формуле (12).
- Вычисляем распределение интенсивности в поле яркости  $G(\mathbf{k})$  по формуле (11)

• Выполняем обратное преобразование Фурье чтобы получить распределение интенсивности  $g(\mathbf{x}) = FT^{-1}[G(\mathbf{k})]$ .

## 3. Получение и исследование результатов экспериментов

В результате работы программы было получены модельные изображения кристаллической решётки арсенида галлия (рисунок 2) при различных параметрах модели

электронного микроскопа:  $C_s$  – сферическая aberrация,  $E$  – ускоряющее напряжение,  $df$  – дефокусировка,  $ddf$  – хроматическая aberrация (рисунки 3-4).

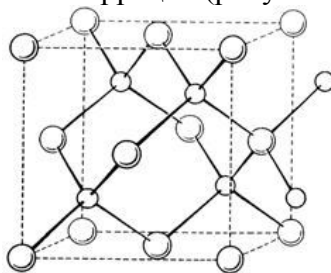


Рисунок 2- Модель кристаллической решётки арсенида галлия

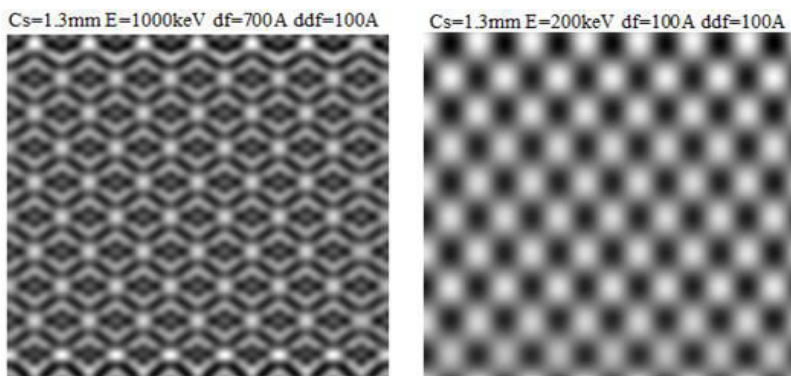


Рисунок 3-Электронное изображение арсенида галлия при измененных значениях напряжения и дефокусировки

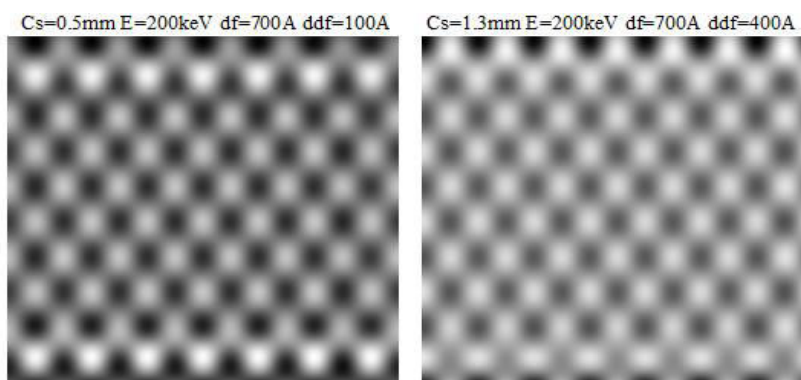


Рисунок 4-Электронное изображение арсенида галлия при измененных сферической (слева) и хроматической (справа) aberrациях

Проанализировав полученные изображения, заметим, что такие параметры как сферическая и хроматическая aberrации, 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 параметров (рисунок 5).

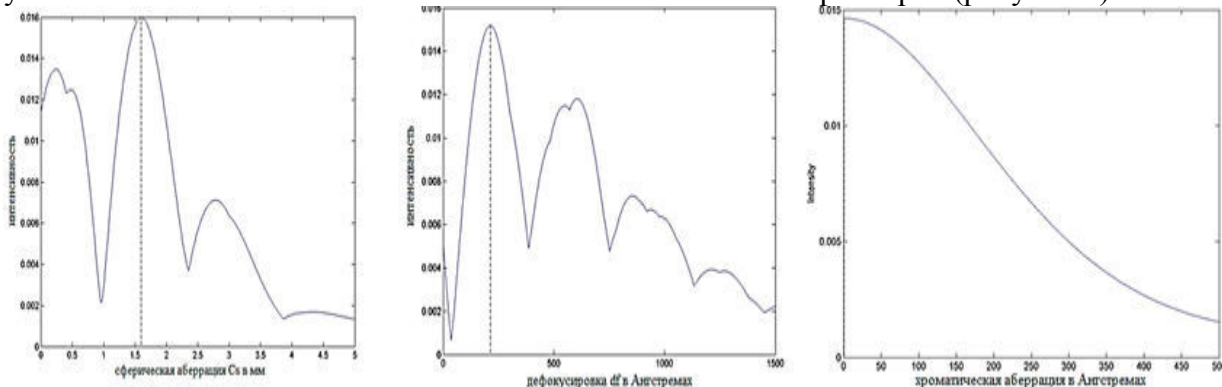


Рисунок 5- Графики зависимости максимальной интенсивности от выбранных параметров

При наличии искажений, максимальная интенсивность уменьшается, поэтому необходимо в качестве идеального параметра тот, который будет соответствовать максимуму этой функции. Анализ графиков показывает, что наилучшим значением сферической aberrации будет примерно 1.6 мм, а для дефокусировки 220 А. При этом интенсивность убывает при увеличении хроматической aberrации, поэтому следует использовать максимально близкое к нулю, допустимое значение хроматической aberrации.

Теперь сравним изображение арсенида галлия, полученное при моделировании с оптимальными параметрами и его изображение, полученное в электронном микроскопе экспериментально (рисунок 6).

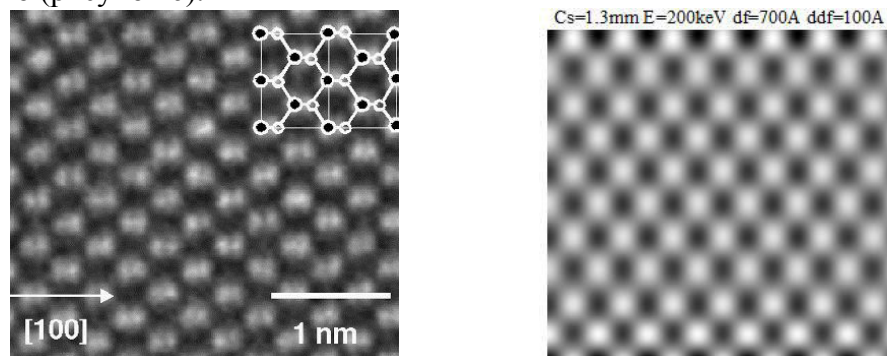


Рисунок 6- Изображения арсенида галлия. Справа изображение, получено в электронном микроскопе высокого разрешения. Слева модельное изображение при оптимальных значениях параметров

### Заключение

В результате работы были построены и исследованы изображения кристаллических решеток. Как видим, смоделированные изображения кристаллической решетки схожи по структуре с настоящим изображением. Данный метод можно применять на практике для моделирования изображений кристаллических решеток. Также можно проводить исследования полученных результатов.

На основе данного метода была написана программа, позволяющая получать изображения при различных параметрах микроскопа. Были изучены изображения кристаллической решетки и исследованы параметры, при которых изображение получается максимального качества. Проведено сравнение наилучшего смоделированного изображения и изображения полученного под электронным микроскопом. Благодаря данному методу можно не только получать изображения кристаллических решеток, но и получать о них больше информации, тем самым сократив прилагаемые усилия и время.

### 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. Соيفер // 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