



2. Д.К. Тюмиков Энтропийно-информационные меры многомерных статистических связей: Самарский гос. университет путей сообщ. – Самара: СамГУПС, 2012. - 130 с.

3. D.K. Tyumikov, M.A. Shcherbakov Structural characteristics of statistical relationships of multidimensional nonlinear systems // Austrian Journal of Technical and Natural Sciences, May, June, 2014 №3 , pp 28-32.

А.С. Шабека, А.В. Куприянов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК МЕТОДОМ МНОГИХ СЛОЁВ

(Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева (национальный исследовательский университет))

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.



1 Описание метода многих слоёв

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. Физический смысл этой свертки представлен на рисунке 1.

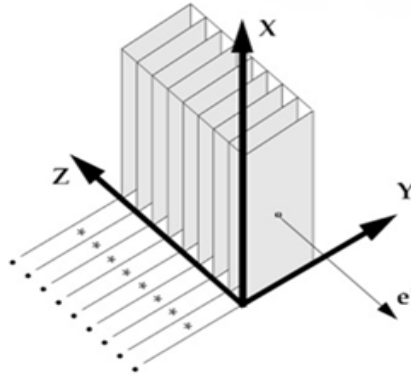


Рис. 1. Схема построения свёрток слоёв

2 Формирование электронного изображения

Рассмотрим основные этапы моделирования изображения [1]:

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.

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.

3 Результаты работы алгоритма

В результате работы программы было получены модельные изображения кристаллической решётки арсенида галлия (рисунок 2) при различных параметрах модели электронного микроскопа: C_s – сферическая абберация, E – ускоряющее напряжение, df – дефокусировка, ddf – хроматическая абберация (рисунки 3-4).

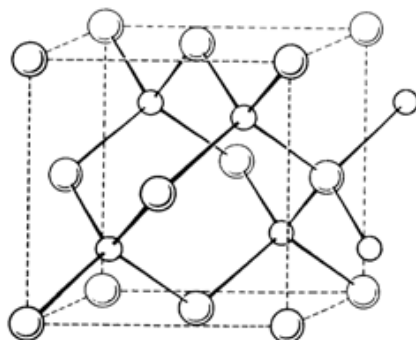


Рис. 2. Модель кристаллической решётки арсенида галлия

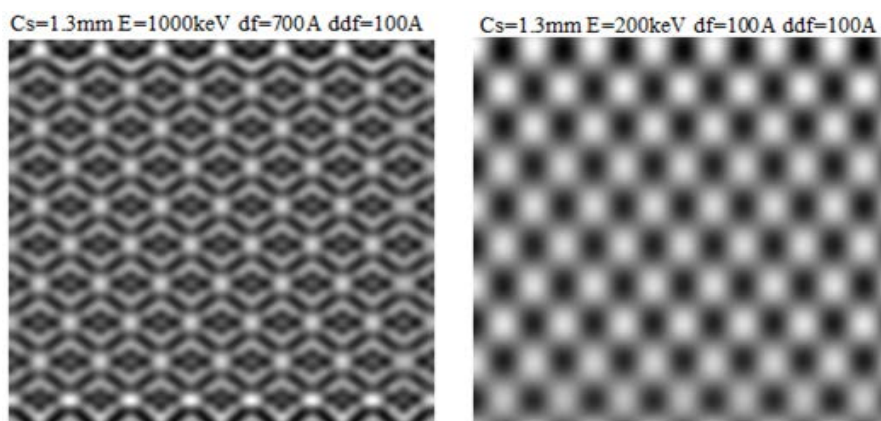


Рис. 3. Электронное изображение арсенида галлия при измененных значениях напряжения и дефокусировки

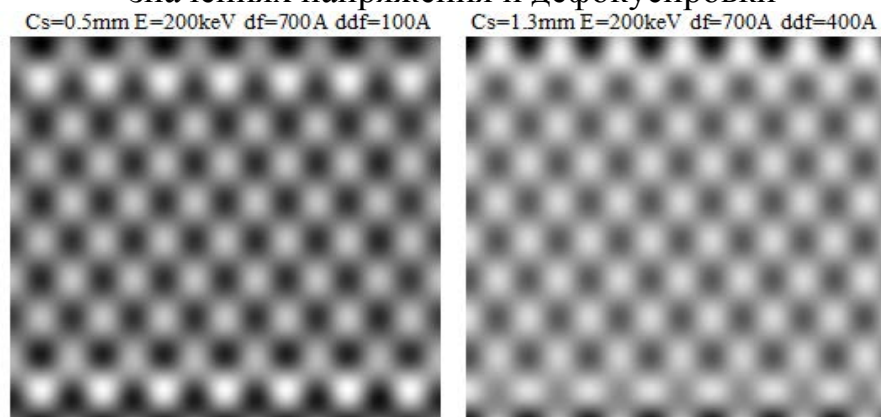
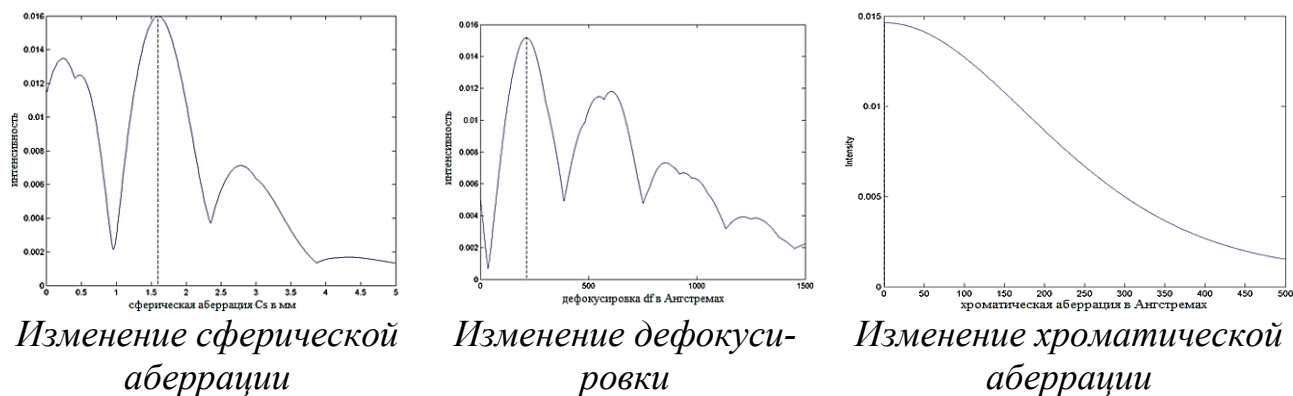


Рис. 5. Электронное изображение арсенида галлия при измененных сферической (слева) и хроматической (справа) абберациях

4 Анализ модельных изображений

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 6).



Изменение сферической абберации

Изменение дефокусировки

Изменение хроматической абберации

Рис. 6. Графики зависимости максимальной интенсивности

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 абберации будет примерно 1.6 мм, а для дефокусировки 220 А. При этом интенсивность убывает при увеличении хроматической абберации, поэтому следует использовать максимально близкое к нулю, допустимое значение хроматической абберации.

На рисунке 7а представлено натурное изображений полученное в электронном микроскопе высокого разрешения, на рисунке 7б соответствующее модельное изображение при оптимальных значениях параметров. Можно отметить высокую степень похожести.

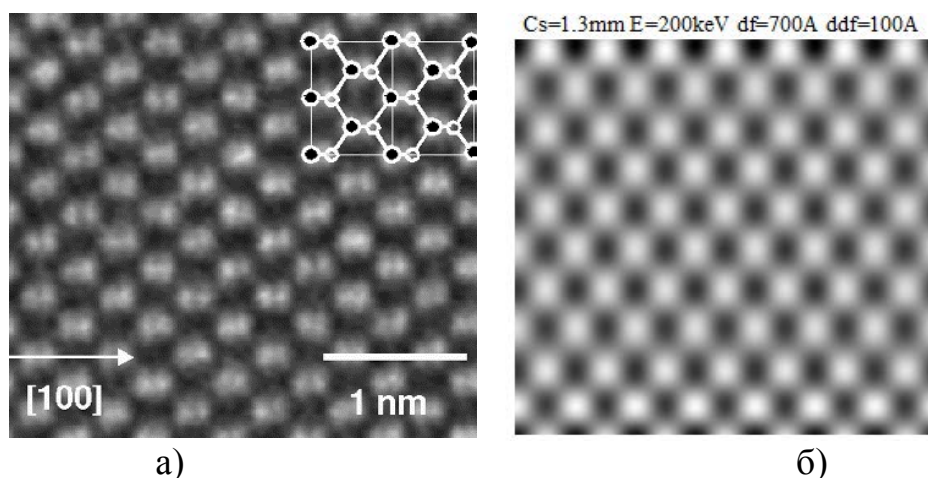


Рис. 7. Изображение арсенида галлия в электронном микроскопе а) натурное изображение б) результаты моделирования

Заключение

В результате реализации метода многих слоев были получены изображения кристаллической решетки при различных параметрах микроскопа. Полученные изображения вполне точно отображают структуру кристаллической решетки. Также были определены параметры, при которых изображение имеет наиболее высокое качество. Метод многих слоев для компьютерного моделирования является самым 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. 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

А.С. Широканев, А.В. Куприянов

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ ТРЁХМЕРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ПО ИЗОБРАЖЕНИЯМ ПРОЕКЦИЙ

(Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика
С.П. Королева (национальный исследовательский университет))

Введение

Электронная микроскопия (ЭМ) даёт в различных модификациях линейное разрешение до десятой доли нанометра (ангстрем). При увеличении в миллионы раз в твёрдых материалах можно наблюдать текстуры различного рода, атомарную структуру кристаллической решётки, в биологических – молекулы, белок, бактерии. Для изучения свойств наноматериалов необходимо знать атомарную структуру, то есть определить типы атомов, являющихся строительными блоками, и их взаимное расположение в пространстве. Большинство наблюдаемых наноструктур имеют кристаллический характер, то есть атомы упорядочены в систему, называемую кристаллической решёткой. Кристаллические структуры присутствуют в основном во всех твёрдых материалах, некоторых аморфных и даже в биологических структурах

С точки зрения формирования изображений кристаллических наноструктур наибольший интерес представляет *просвечивающая электронная микроскопия* (ПЭМ, Transmission electron microscopy) (рис. 1).

ПЭМ является наиболее универсальным классическим методом исследования структурных дефектов кристаллов, используется непосредственно для описания трёхмерной структуры материала, анализа морфологических особенностей, для определения ориентации дефектов и их размеров [1].

Анализ кристаллических наноструктур осуществляется на основе обработки изображений проекций трёхмерной кристаллической решётки [2]. Задача реконструкции кристаллической решётки заключается в восстановлении трёхмерного изображения решётки, наблюдаемой в ПЭМ.

В настоящей работе рассматриваются алгоритмы обратного проецирования, позволяющие восстанавливать трёхмерную структуру кристаллической решётки по плоским изображениям ориентированным в пространстве.