

**ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
Борзунова Андрея Анатольевича
на тему: «Восстановление трехмерной информации в сканирующей
электронной микроскопии при детектировании обратно-рассеянных
электронов»
по специальности 1.2.2
Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ**

Диссертационная работа посвящена построению математических моделей, вычислительных алгоритмов и прикладного программного обеспечения для решения двух связанных обратных задач растровой электронной микроскопии — восстановления микротопографии поверхности и томографии приповерхностных слоёв массивных образцов по сигналам четырёхквadrантного детектора обратно-рассеянных электронов.

Актуальность темы исследования

Сканирующая электронная микроскопия уже несколько десятилетий остаётся одним из базовых инструментов микро- и наноразмерной диагностики в материаловедении, микроэлектронике, биологии и машиностроении. При этом штатные режимы работы сканирующего электронного микроскопа ориентированы на формирование двумерных растровых изображений, тогда как значительная часть задач практики — контроль качества тонкоплёночных структур, количественная оценка шероховатости, паспортизация эталонных образцов — требует именно пространственной информации о микрорельефе и о распределении вещества в глубину. Альтернативные способы получения трёхмерных данных — конфокальная или атомно-силовая микроскопия, послойная съёмка посредством срезания или удаление верхних слоев ионным пучком, электронная томография — связаны либо с установкой дополнительного оборудования, либо с разрушением образца, либо с существенным усложнением эксперимента. На этом фоне разработка методов, позволяющих извлекать трёхмерную информацию из сигналов стандартного четырёхсекторного детектора обратно-рассеянных электронов без какой-либо модернизации прибора, представляется несомненно актуальной и востребованной задачей — как с точки зрения расширения функциональных возможностей уже имеющегося парка сканирующих электронных микроскопов, так и с точки зрения

научной методологии некорректно поставленных обратных задач. Тема работы является актуальной в обеих плоскостях — научной и инженерно-прикладной.

Обоснованность положений, выносимых на защиту

Положения, вынесенные на защиту, последовательно раскрываются в тексте диссертации и подкреплены как теоретическими построениями, так и вычислительным экспериментом.

Первая глава представляет собой критический литературный обзор. Автор систематизирует сведения о физике взаимодействия электронного пучка с веществом, приводит эмпирические зависимости коэффициента обратного рассеяния от атомного номера, энергии первичных электронов и угла падения, затем описывает ключевые семейства существующих методов трёхмерной реконструкции: стереоскопические схемы, восстановление по фокусировке, фотометрические подходы, основанные на восстановлении формы по интенсивности сигнала, а также методы томографии, опирающиеся на последовательное снятие слоёв и на изменение ускоряющего напряжения. Обзор сформулирован так, что из него следуют нерешённые до сих пор вопросы, решению которых посвящены последующие главы.

Вторая глава посвящена обратной задаче восстановления микротопографии. Автор формализует связь локальных углов наклона поверхности и парных разностей сигналов противоположных квадрантов детектора с помощью аппаратных функций прибора. Принципиальным содержательным шагом является гипотеза о разложении двумерной аппаратной функции прибора на две независимые одномерные компоненты вдоль осей сканирования; эта гипотеза проверяется на эталонных геометриях — в частности, на полусферических включениях платины на кремнии — и позволяет избежать необходимости измерять многомерную функцию отклика. Обратные одномерные зависимости отыскиваются процедурой, опирающейся на огибающую эмпирического облака точек. Восстановление функции поверхности по найденным компонентам градиента сводится к переопределённой системе линейных уравнений, вытекающей из конечно-разностной аппроксимации оператора градиента, и решается методом наименьших квадратов. Продемонстрировано, что разрешение по высоте, обеспечиваемое методом, в приведённых экспериментах сопоставимо с латеральным разрешением прибора, а сам метод устойчив к неточностям юстировки детекторной системы за счёт этапа калибровки.

Третья глава содержит модель формирования сигнала обратно-рассеянных электронов для трёхслойной системы «покровный слой — промежуточный слой — массивная подложка» и соответствующую обратную задачу восстановления толщин плёнок. Путём последовательного учёта энергетических потерь электронов в верхних слоях, затухания потока в каждом из них и коэффициента обратного рассеяния подложки строится явное выражение для интенсивности сигнала как функции ускоряющего напряжения, атомных номеров и толщин слоёв. На этой основе формулируется задача восстановления толщин слоёв по серии измерений, выполненных при различных ускоряющих напряжениях. Рассмотрены варианты постановки задачи с привлечением априорной информации — в частности, о суммарной толщине покрытия. Задача решается минимизацией функционала невязки с регуляризацией Тихонова; численно применяются квазиныютоновский метод минимизации и техника автоматического дифференцирования, что освобождает от необходимости вычислять градиенты функционала вручную. Работоспособность подхода подтверждена на тестовом образце алюминий — золото — кремний с полной трёхмерной реконструкцией исследуемого образца.

Четвёртая глава описывает прикладной программный комплекс, реализующий предложенные алгоритмы. Комплекс написан на языке Julia, разрабатывавшемся изначально под научные вычисления, и поставляется как в виде библиотеки, так и в виде консольного приложения. Архитектура включает блоки чтения растровых данных в формате TIFF, предварительной обработки (взаимное совмещение каналов детекторов, компенсация фонового наклона образца), восстановления топографии, восстановления толщин слоёв, а также выгрузки результатов в формат среды научной визуализации ParaView. Задействованы внешние библиотеки для автоматического дифференцирования, численной оптимизации и двумерной/трёхмерной визуализации; для независимых по точкам задач томографии предусмотрен многопоточный режим. Тем самым представленные во второй и третьей главах алгоритмы доведены до уровня воспроизводимого инженерного инструмента.

Структура диссертации выстроена логично, полученные результаты согласуются с положениями, выносимыми на защиту.

Достоверность полученных результатов

Достоверность результатов работы обусловлена корректным применением физических представлений о взаимодействии электронного пучка с веществом — законов рассеяния, зависимости коэффициента обратного рассеяния от атомного номера и энергии, моделей энергетических потерь — последовательным использованием устоявшегося математического аппарата теории обратных и некорректно поставленных задач, методов наименьших квадратов и квазиьютоновской оптимизации, а также согласованностью численных реконструкций с реальными экспериментальными данными, полученными автором на калибровочных образцах известной геометрии и на тестовых структурах: отпечатках индентора Виккерса, оловянно-медных напылённых плёнках, многослойных плёнках алюминий — золото — кремний. Основные результаты опубликованы в рецензируемых изданиях и прошли апробацию на научных конференциях.

Научная новизна работы

К числу результатов, обладающих научной новизной, следует отнести:

- предложенную процедуру калибровки аппаратных функций четырёхквadrантного детектора обратно-рассеянных электронов непосредственно на том приборе, на котором в дальнейшем выполняется измерение, с опорой на разложение многомерной функции отклика на две независимые одномерные составляющие вдоль осей сканирования;
- численный алгоритм восстановления функции поверхности микрообразца по измеренному полю градиента, основанный на конечно-разностной дискретизации и решении переопределённой системы линейных уравнений методом наименьших квадратов;
- аналитическую модель формирования сигнала обратно-рассеянных электронов для трёхслойных структур, учитывающую материал и толщины слоёв, а также ускоряющее напряжение первичного пучка;
- численную схему решения обратной задачи восстановления толщин слоёв с тихоновской регуляризацией и использованием автоматического дифференцирования, включая варианты с привлечением априорной информации;
- прикладной программный комплекс на языке Julia, объединяющий перечисленные алгоритмы в единый инструмент обработки данных сканирующей

электронной микроскопии и позволяющий выполнять трёхмерное восстановление микрообразцов на типовой рабочей станции микроскопа.

Замечания по работе

1. Для полноценной апробации работы желательно было выступить на научных семинарах Института вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН, Института математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, ФНИЦ Кристаллография и фотоника РАН, Физико-технологическом институте имени К.А. Валиева РАН.

2. В главе 2 задача сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами. Что можно сказать о числе обусловленности данной матрицы в зависимости от N ? Не указан параметр N в расчетах. Какие библиотеки для работы с разреженными матрицами использовались в расчетах?

3. Нет четкого описания постановки прямой задачи в главе 3. Желательно было привести алгоритм BFGS и в чем заключается его модификация.

4. Какое число параметров определяется в численных расчетах и по какому набору данных в каждой главе?

5. Какие методы из языков программирования Julia и Python применялись для решения поставленных задач и почему?

6. Что можно сказать о сходимости приведенных алгоритмов по функционалу и скорости сильной сходимости?

7. Исследовался ли вопрос единственности и условной устойчивости решения рассматриваемых обратных задач? Какие теоретические результаты уже получены в мире по данному вопросу?

Заключение

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание работы соответствует специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (по физико-математическим наукам), а также критериям, установленным пп. 2.1–2.5 Положения о присуждении учёных степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. Диссертационное исследование оформлено согласно требованиям

Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, автор диссертации Борзунов Андрей Анатольевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник лаборатории
прикладных обратных задач Федерального
государственного бюджетного учреждения науки
Института математики им. С. Л. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук
ШИШЛЕНИН Максим Александрович

Дата: 04.05.2026 г.

Контактные данные:

тел.: 7(383) 329-76-19, e-mail: maxim.shishlenin@math.nsc.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

01.01.07 – Вычислительная математика

Адрес места работы:

630090, г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, д. 4,
Институт математики им. С. Л. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук,
лаборатория прикладных обратных задач
тел.: 7(383) 329-76-19, e-mail: maxim.shishlenin@math.nsc.ru

Подпись главного научного сотрудника
лаборатории прикладных обратных задач
Института математики им. С. Л. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук

М.А. Шишленина удостоверяю:

Ученый секретарь Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН

к.ф.-м.н.

_____ Н.А. Даурцева