

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Борзунов Андрей Анатольевич

**Восстановление трехмерной информации в сканирующей
электронной микроскопии при детектировании
обратно-рассеянных электронов**

Специальность 1.2.2

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2026

Диссертация подготовлена на кафедре математики отделения прикладной математики физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель: *Лукьяненко Дмитрий Витальевич*
доктор физико-математических наук, доцент

Официальные оппоненты: *Шишленин Максим Александрович* — доктор физико-математических наук, Институт математики им. С. Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория прикладных обратных задач, главный научный сотрудник.
Гайнуллин Иван Камилевич — доктор физико-математических наук, доцент, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, отделение радиофизики и электроники, кафедра физической электроники, доцент.
Зайцев Сергей Иванович — доктор физико-математических наук, Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов Российской академии наук, лаборатория теоретической физики, главный научный сотрудник.

Защита диссертации состоится «12» мая 2026 г. в 16 часов 30 минут на заседании диссертационного совета МГУ.012.1 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, ул. Ленинские горы 1, строение 52, факультет ВМК, аудитория 685.
Email: ds@cs.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале <https://dissovnet.msu.ru/dissertation/3899>.

Автореферат разослан «___» _____ 2026 г.
Телефон для справок: +7 (495) 939-53-94.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.012.1,
доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН



А.В. Ильин

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Сканирующая электронная микроскопия является мощным методом исследования микроструктур, широко используемым в современных лабораториях и на производстве в самых различных областях. С помощью электронной микроскопии возможно получать высококачественное изображение микроструктуры образца с большой разрешающей способностью вплоть до нанометров, информацию о составе образца, кристаллографическую информацию и исследовать его морфологию поверхности, проводить дефектоскопию при производстве микроэлектронных устройств. Несмотря на то, что сканирующая электронная микроскопия является одним из ключевых методов анализа микрообразцов, данный метод долго оставался двумерным: исследователи изучали лишь снимки поверхности микрообразцов, на основе которых, порой, сложно было делать даже качественные выводы о трехмерной структуре образца, не говоря уже о количественных результатах. Это стало очевидным недостатком, поскольку многие характеристики материалов зависят именно от их трехмерной структуры: топографии рельефа (относительной высоты участков) поверхности микрообразца и внутренней структуры микрообразца. Позже были развиты дополнительные методы исследования топографии рельефа поверхности микрообразцов, разработаны методологии деструктивного анализа внутренней структуры микрообразцов посредством послышной съемки и недеструктивного исследования с помощью просвечивающего электронного микроскопа. Однако с распространением электронной микроскопии во всё более широком кругу прикладных задач возникают всё более строгие требования к качеству проводимых исследований и расширению арсенала исследовательских методов. Это подчеркивает необходимость постоянного совершенствования методов и технологий, чтобы обеспечить высокую точность и надежность получаемых данных.

Для задачи получения информации о топографии рельефа поверхности микрообразца обычно используются несколько методов её восстановления, главными из которых являются стереоскопический, когда трехмерную информацию восстанавливают на основе двумерных снимков из разных точек или под разными углами, и фотометрический, когда трехмерную информацию восстанавливают, например, на основе "затенения" участков на снимке. Каждый из этих методов имеет свои сильные и слабые стороны. Например, в фотометрическом методе первостепенную важность имеет математическая модель стоящая за выражением, которое предсказывает сигнал в каждой точке образца, вкладывая трехмерную информацию о топографии рельефа поверхности микрообразца в интенсивность сигнала в этой точке. Качество данной модели имеет критическое значение, ведь большое обилие приближений и допущений может сделать восстановление топографии рельефа поверхности микрообразца вовсе невозможным. Отдельная сложность может возникнуть у исследователей при внедрении фотометрических методов в связи с особенностями их

оборудования, что может потребовать значительных адаптаций методологии исследования. Так, например, качество восстановления топографии рельефа поверхности исследуемого микрообразца критически зависит от симметрии установки детекторных устройств относительно главной оси сканирующего микроскопа, что практически недостижимо на экспериментальных установках с вручную устанавливаемыми детекторами обратно рассеянных электронов. Стереоскопический метод незаменим, когда приходится работать с образцами имеющими значительно неоднородную поверхность сложной формы или даже содержащие на себе отдельно расположенные микрообъекты. Но данный метод требует специального дорогостоящего оборудования, которое позволяет получать снимки исследуемого образца из разных точек наблюдения.

Главным неdestructивным методом по исследованию внутренней структуры микрообразцов является трансмиссионная томография, минусами которой являются требование специального оборудования и возможность использования только в случае прозрачных для электронов микрообразцов, что делает невозможным изучение массивных микрообразцов, для изучения которых единственным доступным способом остается методы послойного изучения микрообразцов, где верхние слои удаляются механически или с помощью сфокусированного ионного пучка.

Таким образом, решение задачи разработки методов математического моделирования решения обратных задач восстановления томографии и топографии рельефа поверхности микрообразцов без использования специального оборудования позволит внедрить новые методы исследования в широком кругу лабораторий, которые используют базовые установки сканирующей электронной микроскопии.

Многие современные разработки реализуются в виде закрытого программного обеспечения, встроенного в операционную систему рабочей станции микроскопа, доступ к которой возможен только с заменой исследовательского оборудования. Всё это создает значительные сложности для внедрения новых типов исследования микрообразцов, требует разработки новых методов восстановления топографии рельефа поверхности микрообразцов и восстановления трехмерного строения микроструктуры, а совокупность описанных выше факторов делают создание сопутствующего прикладного программного комплекса актуальным.

Целью работы является создание методов математического моделирования, численных методов и комплекса программ для восстановления топографии рельефа поверхности микрообразцов и проведение томографии приповерхностных слоев массивных образцов с использованием сканирующего электронного микроскопа в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

- Разработать методы решения обратных задач восстановления топографии рельефа поверхности и томографии приповерхностных слоев

- микрообразцов, исследуемых с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов (ОРЭ) микрообразцов.
- Разработать численный метод для восстановления топографии рельефа поверхности микрообразца на основе изображений получаемых СЭМ в режиме детектирования ОРЭ, устойчивый к неточностям механического позиционирования детекторов относительно оси электронной пушки микроскопа.
 - Создать комплекс программ для восстановления топографии рельефа поверхности микрообразцов на основе двумерных экспериментальных данных, получаемых с помощью СЭМ в режиме детектирования ОРЭ.
 - Разработать численные методы решения обратной задачи томографирования приповерхностных областей микрообразцов на основе экспериментальных данных получаемых с помощью СЭМ в режиме детектирования ОРЭ и имеющейся априорной информации о структуре образца.
 - Создать прикладной комплекс программ для качественного и количественного исследования структуры приповерхностных слоев микрообразцов, исследуемых с помощью СЭМ в режиме детектирования ОРЭ.

Научная новизна:

1. Создан оригинальный метод для поточечного нахождения углов наклона участков поверхности исследуемого микрообразца, способный получать качественную информацию даже при неточностях в механическом позиционировании в детекторной системе СЭМ, что особенно актуально для экспериментальных установок, где требуется ручная установка детекторов ОРЭ.
2. Впервые реализован алгоритм комплексной обработки изображений полученных с помощью СЭМ в режиме детектирования ОРЭ для проведения количественного трехмерного исследования топографии рельефа поверхности микрообразца, а также для анализа с помощью томографирования объемного строения в приповерхностных областях массивных образцов.
3. Созданы прикладные комплексы программ для трехмерного восстановления топографии рельефа и томографирования приповерхностных слоев исследуемого образца, качественного и количественного анализа.

Практическая значимость заключается в том, что предложенные методы исследования могут быть внедрены на широком классе устройств, что позволит без их замены, и даже вовсе без модернизации, проводить новые виды исследования: томографирование рельефа поверхности и томографию приповерхностных слоев массивных образцов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Математическое моделирование процесса формирования сигнала в сканирующем электронном микроскопе при детектировании обратно-рассеянных электронов, основанное на известных моделях взаимодействия электронного зонда с веществом, позволяет описать зависимость сигнала от геометрии поверхности или от структуры многослойных образцов. Анализ модели при несимметричной установке детекторов или при вариации ускоряющего напряжения позволяет сформулировать обратные задачи по восстановлению трехмерной топографии рельефа или толщин приповерхностных пленок.
2. Численные методы решения указанных обратных задач, разработанные в диссертационной работе, отличаются повышенной устойчивостью к погрешностям экспериментальных измерений и позволяют восстанавливать топографию поверхности с разрешающей способностью по перепаду высот, сопоставимой с латеральным разрешением сканирующего электронного микроскопа, или выделять физически корректные решения при томографии приповерхностных слоев массивных образцов (при наличии априорной информации об общей толщине пленок).
3. Комплекс проблемно-ориентированных программ, реализующий предложенные численные методы, обеспечивает проведение вычислительного эксперимента по обработке данных сканирующей электронной микроскопии в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов. Программный комплекс позволяет проводить процесс калибровки микроскопа, восстанавливать трехмерную топографию рельефа поверхности микрообразцов или толщины приповерхностных слоев массивных образцов (томография).

Выносимые на защиту положения соответствуют следующим пунктам паспорта специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

- пункту 1 паспорта специальности («Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений»),
- пункту 2 («Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий»),
- пункту 5 («Разработка новых математических методов и алгоритмов валидации математических моделей объектов на основе данных натурального эксперимента»),
- пункту 4 («Разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели»),
- пункту 3 («Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента»).

Достоверность полученных результатов обеспечивается математическим обоснованием разработанных алгоритмов, проведенными численными экспериментами и сопоставлением их результатов с данными натуральных экспериментов, публикациями в рецензируемых журналах и апробацией на российских и международных конференциях.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на:

- Международная конференция International Conference On Differential Equations and Applications, (г. Ханой, Вьетнам, 2022 г.),
- Международная конференция Quasilinear Equations, Inverse Problems and Their Applications (г. Сочи, 2021 г.).
- Всероссийская с международным участием конференция Ломоносовские чтения (г. Москва, 2021 г.),
- Международная конференция Quasilinear Equations, Inverse Problems and Their Applications, (г. Долгопрудный, 2020 г.),

Отдельные результаты диссертационного исследования докладывались и обсуждались на научном семинаре в Москве, НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова, научный семинар «Обратные задачи математической физики» под руководством профессора А.Б. Бакушинского, профессора А.В. Тихонравова и профессора А.Г. Яголы (22 мая 2019 г. и 18 декабря 2024 г.), общезысического семинар «Материаловедение и технология» ИПТМ РАН (11 декабря 2025 г.).

Публикации. Опубликовано 4 работы, в том числе 4 по теме диссертации, из них 4 статьи, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете по специальности и отрасли наук.

Личный вклад. Все результаты работы получены автором лично под научным руководством доктора физико-математических наук, доцента Д.В. Лукьяненко. В работах, написанных в соавторстве, вклад автора диссертационной работы в результаты является определяющим.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и 2 приложений. Полный объем диссертации **120** страниц текста с **36** рисунками и 1 таблицей. Список литературы содержит **171** наименования.

Содержание работы

Первая глава посвящена обозначению места предложенных в следующих главах методов среди уже существующих методов трехмерного исследования микрообразцов в сканирующей электронной микроскопии. Кратко освещены прикладные способы использования сканирующей электронной микроскопии в науке и технике, а также базовые принципы взаимодействия электронов с веществом исследуемого микрообразца. Дано описание трех основных семейств методов трехмерного восстановления рельефа поверхности исследуемых

образов (топографирование): стереоскопический, фотометрический и восстановление топографии по фокусу. Последний пункт первой главы посвящен краткой характеристике методов исследования внутренней структуры образца: разрушающим методам послойного исследования образцов и неразрушающим методам томографирования образцов с помощью просвечивающей электронной микроскопии, а также объемному исследованию приповерхностных слоев образцов с помощью сканирующей электронной микроскопии. Первая глава не содержит научной новизны и личного вклада автора, а служит целям формирования у читателя актуального представления о современном положении дел в части топографирования и томографирования с помощью сканирующей электронной микроскопии, частично затрагивая смежные методы исследования микрообразцов.

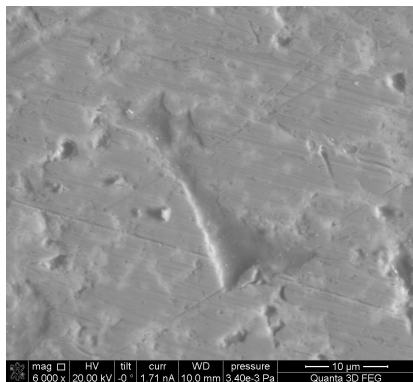
Вторая глава посвящена решению обратной задачи восстановления топографии рельефа поверхности микроструктур в сканирующей электронной микроскопии в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов. На изображениях поверхности, полученных с помощью сканирующего электронного микроскопа в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов, хорошо различимо наличие всех особенностей рельефа поверхности микрообразца. Но вот с интерпретацией этих особенностей могут возникнуть затруднения (см., например, изображение слева на рисунке 1). Часто исследователям сложно делать даже качественные выводы о характере этих особенностей: является ли эта особенность впадиной или выпуклостью. Ещё более сложным аспектом является вопрос об особенностях топографии рельефа микрообразца, то есть об относительных величинах возвышения (углубления) этих особенностей на снимке; исследователь вынужден опираться лишь на свой опыт.

При использовании четырех-квадратного детектора (схематическое устройство которого см. справа на рисунке 1), используя алгебраические преобразования над сигналами I_A , I_B , полученными от пары противоположных детекторов A и B соответственно, возможно составить изображение в так называемом *топографическом контрасте*. Выражение для сигнала в топографическом контрасте I_{AB} записывается в виде:

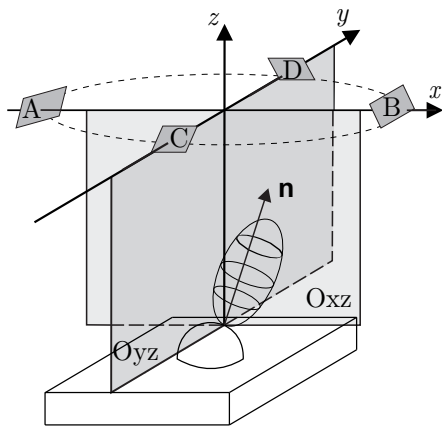
$$I_{AB} = \frac{I_A - I_B}{I_A + I_B}.$$

Семейство фотометрических методов восстановления топографии рельефа поверхности микрообразцов использует явные выражения, связывающие интенсивность сигнала в топографическом контрасте с информацией о топографии рельефа поверхности. Поэтому механические неточности в монтаже детекторов вызывают значительные отклонения наблюдаемого сигнала от его аналитического выражения, что является главным недостатком семейства фотометрических методов.

Главной идеей, предложенного в данной главе метода (из семейства фотометрических методов), является введение дополнительного этапа калибровки



а



б

Рисунок 1 — Пример изображения и схема детекторов. а — пример изображения, получаемого с помощью сканирующего электронного микроскопа, с интерпретацией которого могут возникнуть затруднения в части относительных высот участков поверхности. б — схематическое расположение детекторов в экспериментальной четырехквadrантной установке, получившее широкое распространение; x, y, z — оси системы координат; A, B, C, D — детекторы сканирующего электронного микроскопа; $\mathbf{n}(x, y)$ — нормаль к поверхности образца.

на образце с известной геометрией поверхности, целью которого является установление фактической зависимости сигнала от локальных углов наклона, что позволит учесть особенности каждой конкретной экспериментальной установки. Введём аппаратную функцию F , которая является математической моделью сканирующего электронного микроскопа и отображает локальные углы наклона — иными словами, компоненты градиента функции $u(x, y)$ — в интенсивность сигнала в топографическом контрасте (I_{AB}, I_{CD}) . То есть

$$F: (u'_x, u'_y) \mapsto (I_{AB}, I_{CD}).$$

Этап калибровки позволяет восстановить аппаратную функцию и далее использовать обратную к ней функцию F^{-1} .

Задача трехмерного восстановления топографии рельефа поверхности микрообразца в сканирующей электронной микроскопии может быть сведена к основной задаче по восстановлению функции, представляющей поверхность исследуемого микрообразца по её градиенту, и подзадаче о нахождении этого градиента по детектируемому сигналу, то есть по изображению, фиксируемому в эксперименте.

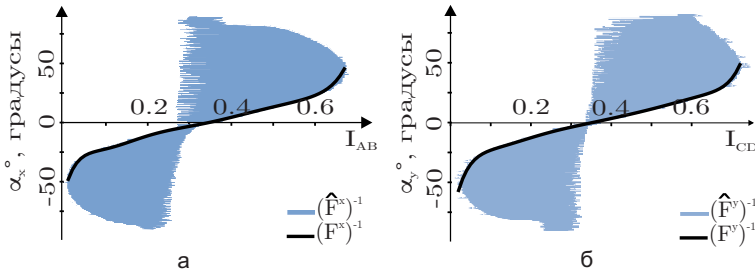


Рисунок 2 — График сеточных значений обратных к аппаратным функциям и их аппроксимаций функций. а — функции $(\hat{F}^x)^{-1}$ и $(F^x)^{-1}$. б — функции $(\hat{F}^y)^{-1}$ и $(F^y)^{-1}$.

Основную **задачу** можно сформулировать следующим образом: требуется восстановить функцию $u(x, y)$, представляющую топографию рельефа поверхности исследуемого микрообразца, которая связана в исследуемой области S с известным градиентом $\mathbf{J}(x, y)$ следующим соотношением:

$$\begin{pmatrix} u'_x(x, y) \\ u'_y(x, y) \end{pmatrix} = \mathbf{J}(x, y), \quad (x, y) \in S.$$

В свою очередь, градиент $\mathbf{J}(x, y)$ необходимо найти, решив следующую **подзадачу**: по интенсивности сигнала (то есть по изображению) в топографическом контрасте $I_{AB}(x, y)$, $I_{CD}(x, y)$ необходимо восстановить градиент $\mathbf{J}(x, y)$ функции $u(x, y)$ в области S по формуле

$$\mathbf{J}(x, y) = F^{-1}(I_{AB}(x, y), I_{CD}(x, y)), \quad (x, y) \in S.$$

Функция F^{-1} является обратной к функции F , представляющей математическую модель сканирующего электронного микроскопа в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов: по рельефу поверхности исследуемого микрообразца микроскоп формирует изображение в топографическом контрасте, то есть $F(\mathbf{J}) = (I_{AB}, I_{CD})$.

Подзадачу по восстановлению градиента по изображению предлагается решить с помощью дополнительного этапа калибровки на поверхности с известной геометрией. Для этого следует в каждой точке калибровочной поверхности сопоставить известные локальные углы наклона поверхности к осям α_x , α_y с интенсивностью сигнала в топографическом контрасте I_{AB} , I_{CD} соответственно, таким образом получив табулированные аппаратные функции \hat{F}^x , \hat{F}^y . Эти аппаратные функции являются математической моделью сканирующего электронного микроскопа и решают прямую задачу формирования изображения по топографии поверхности исследуемого микрообразца. Далее можно восстановить функции, обратные к аппаратным: $(F^x)^{-1}$, $(F^y)^{-1}$ (см. рисунок 2).

Применяя функции $(F_x)^{-1}$, $(F_y)^{-1}$ поэлементно к интенсивности сигнала, возможно получить «измеренный» с некоторой ошибкой δ градиент восстанавливаемой функции. Также следует выбрать абсолютную высоту какой-либо точки, например $u(0, 0) = 0$. Тогда восстанавливаемую функцию $u(x, y)$ следует искать как элемент, удовлетворяющий начальному условию и реализующий минимум функционала

$$G[u] = \|\nabla u - \mathbf{J}_\delta\|^2.$$

В конце главы приведён подробный численный алгоритм решения этой задачи. Один из результатов восстановления представлен на рисунке 3. Опыты показали, что, несмотря на простоту, алгоритм позволяет восстанавливать микро топографию с разрешением по оси z , сопоставимым с латеральным (в перпендикулярной плоскости) разрешением микроскопа.

Преимуществом разработанной методики является отсутствие необходимости вращения исследуемого микрообразца или детекторов электронов, что обеспечивает возможность её внедрения в широкий класс уже существующих экспериментальных установок с четырёхквadrантным детектором обратно рассеянных электронов, в том числе в установках с вручную устанавливаемыми детекторами. В ходе экспериментов по восстановлению топографии реальных образцов с достаточно гладкой поверхностью разработанный прикладной комплекс показал высокую производительность, а предложенная методология обработки экспериментальных данных и реконструкции поверхности микрообразцов — надёжность даже в случае механических неточностей в позиционировании детекторов. Метод хорошо работает на однородных гладких поверхностях, где стереометрический метод испытывает значительные затруднения с выделением стереометрических пар, так же как и с большим количеством ложноположительных стереометрических пар.

Третья глава посвящена обратной задаче восстановления томографии массивных (непрозрачных для электронов, которые не могут быть исследованы в трансмиссионном микроскопе) образцов на примере исследования трехслойной структуры. В основе метода лежит идея варьирования ускоряющего напряжения E_0 на катоде электронной пушки сканирующего электронного микроскопа. При увеличении E_0 пучок электронов проникает глубже в образец, и в формировании изображения принимают участие всё более глубокие слои. На финальном изображении при этом можно наблюдать «наслаивание» сигналов от разных слоев, а также «размытие» границ неоднородностей с более глубоких слоев в силу изменения угла выхода электронов (см. иллюстрацию слева на рисунке 4).

Для решения этой задачи используется явное выражение для зависимости сигнала I_n от ускоряющего напряжения $E_{0n} = \{E_{01}, E_{02}, \dots, E_{0N}\}$ кэВ, толщины пленки алюминия $t_{Al}(x, y)$ и золота $d_{Au}(x, y)$ в точке (x, y) микрообразца. Явное аналитическое выражение (приведено в полном тексте диссертационного исследования) построено на основе хорошо известной аппроксимации сигнала от структуры «тонкая пленка на подложке», адаптированной на случай трехслойной структуры, которая представляется в виде «тонкая пленка на эффективной

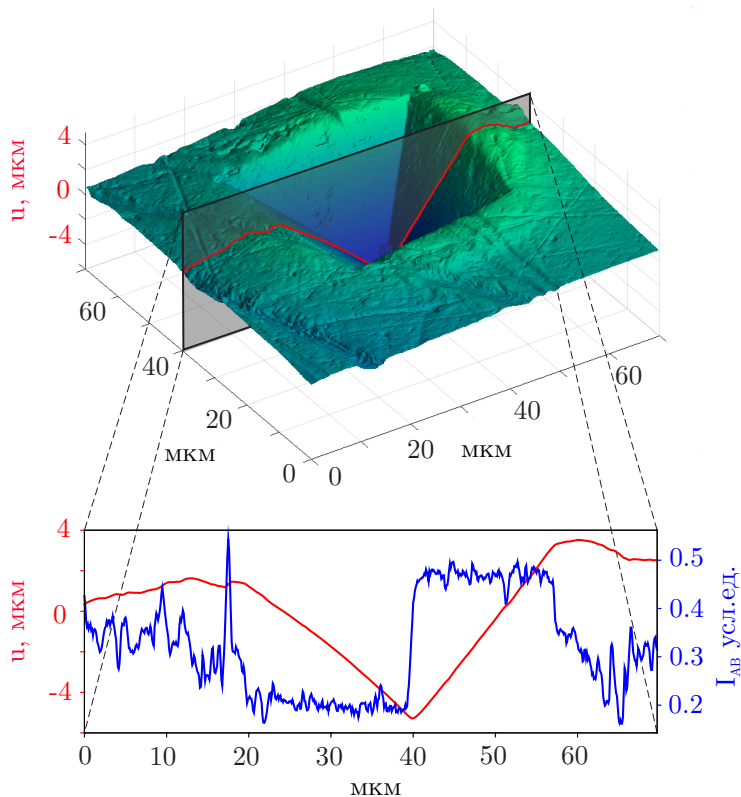


Рисунок 3 — Результат трехмерного восстановления топографии рельефа поверхности золотого микрообразца после теста на твердость с помощью индентора Виккерса. На нижней части рисунка изображена профилограмма функции $u(x, y)$, представляющая восстановленную топографию рельефа поверхности и профилограмма исходного сигнала I_{AB} .

подложке”, где, в свою очередь, ”эффективная подложка” также является системой ”тонкая пленка на подложке” (см. иллюстрацию слева на рисунке 4). В работе исследовался трехслойный тестовый образец с напыленными пленками золота и алюминия на кремниевую подложку. Расположенный посередине слой золота имел разную толщину в четырех областях микрообразца (0.0, 4.6, 10.7, 19.9 нм), а покровный слой алюминия всюду имел толщину 150 нм (см. структуру тестового микрообразца на рисунке 4). Образец исследовался при восьми различных ускоряющих напряжениях $E_{0n} = \{3.5, 5, 7, 10, 12, 15, 20, 30\}$ кэВ.

В первом разделе третьей главы приведено полное описание аналитического выражения для экспериментально фиксируемого сигнала I_n , которое здесь

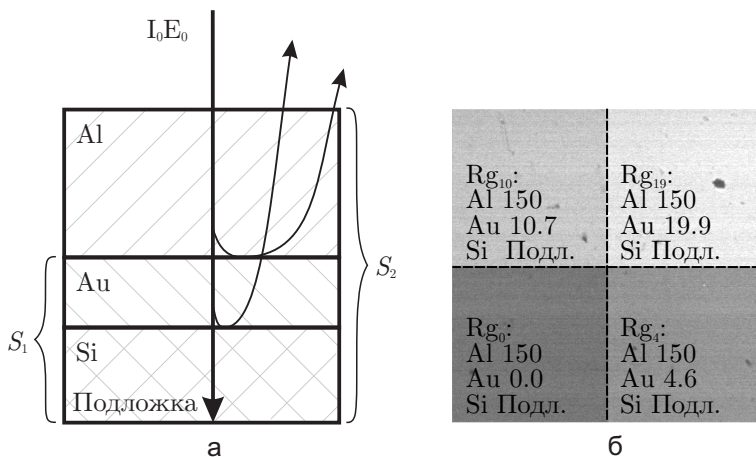


Рисунок 4 — Схема и изображение образца. а — иллюстрация исследования микрообразца при разном ускоряющем напряжении E_0 . Трехслойная структура рассматривается как система S_2 "тонкая пленка на эффективной подложке", где "эффективная подложка" S_1 сама является системой "тонкая пленка на подложке". б — показано изображение тестового трехслойного Al-Au-Si микрообразца, на котором присутствуют 4 региона с разной толщиной золотого слоя: 0, 4.6, 10.7, 19.9 нм. Во всех четырех областях присутствует покровная пленка алюминия толщиной 150 нм.

опущено в силу громоздкости. Для дальнейшего изложения материала будет использовано следующее обозначение

$$I_n(x,y) = M\left(E_{0n}, t_{Al}(x,y), d_{Au}(x,y)\right),$$

которое подчеркивает зависимость значения сигнала в точке (x,y) от текущего ускоряющего напряжения E_{0n} и от толщин пленок алюминия t_{Al} и золота d_{Au} в этой точке. Данное отображение $M(E_{0n}, t_{Al}(x,y), d_{Au}(x,y)) \mapsto [0, 1]$ является математической моделью того, как формируется изображение исследуемого микрообразца в зависимости от ускоряющего напряжения и подповерхностной структуры микрообразца. Это модель прямой задачи, которую решает сканирующий электронный микроскоп в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов: по образцу с заданными толщинами пленок сформировать его изображения при разных ускоряющих напряжениях E_{0n} . Сравнение построенного отображения $M(E_{0n}, t_{Al}, d_{Au})$ с экспериментальными данными представлено на рисунке 5.

Обратная задача по восстановлению толщин слоев алюминия и золота может быть сформулирована в различных формах в зависимости от наличия априорной информации о структуре образца:

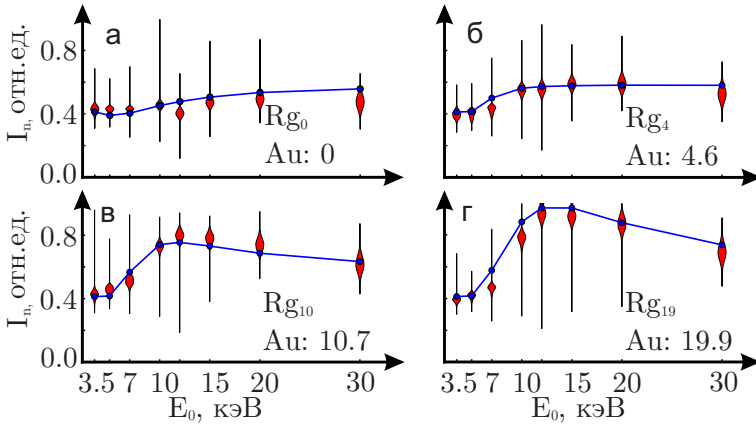


Рисунок 5 — Сравнение построенной модельной функции сигнала $M(E_0, t_{Al}, d_{Au})$ (синяя кривая с синими точками) с экспериментальными данными в каждой из областей (красные скрипичные графики, ширина которых пропорциональна частоте вхождения соответствующего значения по y в экспериментальную выборку). По оси x отложено ускоряющее напряжение в кэВ, по оси y — сигнал в относительных единицах. а — регион образца Rg_0 , б — регион образца Rg_4 , в — регион образца Rg_{10} , г — регион образца Rg_{19} .

- В случае если известна область (участок поверхности) микрообразца Rg (см. рисунок 4), где толщины слоев алюминия и золота постоянны, возможно сформулировать единую обратную задачу по восстановлению толщин слоёв одновременно во всех точках $(x, y) \in Rg$ этой области. Для этого можно использовать усредненный сигнал \bar{I}_n в области Rg . В случае отсутствия такой априорной информации следует решать задачу восстановления толщин слоёв пленок для каждой точки области независимо.
- В случае, если известна общая толщина слоев H , возможно использовать регуляризирующую добавку на соответствие искомого решения этой априорно известной общей толщине.

Толщину слоев алюминия и золота следует искать как элемент $\mathbf{z} := (t_{Al}, d_{Au}) \equiv (z_1, z_2)$, реализующий минимум функционала

$$J(\mathbf{z}) = \sum_{n=1}^{N_E} \left(T - M(E_{0n}, z_1, z_2) \right)^2 + \alpha \Omega_{\square}(\mathbf{z}), \quad (1)$$

где $\mathbf{z} \in \mathbb{G} \subseteq \mathbb{R}^2$, \mathbb{G} несет смысл естественных или априорных ограничений (например, $t_{Al}, d_{Au} \geq 0$); обозначенное квадратиком место Ω_{\square} призвано показать использование различных регуляризирующих добавок (Ω_0 и Ω_H); α — параметр регуляризации, выбираемый эмпирически (экспериментально) или по принципу

обобщенной невязки (в случае наличия оценок погрешности экспериментальных данных); значение T в случае использования априорной информации о постоянстве толщин слоёв в области будет усредненным по всем точкам этой области сигналом \bar{I}_n , или сигналом $I_n(x,y)$ в каждой точке микрообразца в случае, когда обратные задачи решаются независимо для каждой точки (x, y) микрообразца; функционал $\Omega(\mathbf{z})$ в простейшем случае выбирается тождественно равным нулю $\Omega_0(\mathbf{z}) \equiv 0$, или при наличии априорной информации о суммарной толщине слоёв H — в виде

$$\Omega_H(\mathbf{z}) = (H - z_1 - z_2)^2 \equiv (H - t_{Al} - d_{Au})^2.$$

Для нахождения минимума функционала (1) использовалась модификация алгоритма BFGS для ограниченной области (что позволит учитывать используемые априорные ограничения $\mathbb{G} = \{t_{Al} \in [0.1, 170.0], d_{Au} \in [0.1, 50.0]\}$) в совокупности с техникой автоматического дифференцирования для более быстрой численной реализации алгоритма. Параметр регуляризации α выбирался эмпирически на основе проведенных экспериментов для образца с известными толщинами пленок.

На рисунке 6 представлены результаты решения обратных задач в четырех различных постановках: столбчатые графики соответствуют задачам когда использовалась априорная информация о постоянстве толщины пленок в областях $Rg_0, Rg_4, Rg_{10}, Rg_{19}$. Асимметричные скрипичные графики — это случаи, когда обратные задачи решались для каждой точки микрообразца независимо. Синий цвет соответствует результатам решения обратных задач, когда не использовалась априорная информация об общей толщине пленок (т.е. $\Omega_0 \equiv 0$), а зелёный — когда использовалась априорная информация об общей толщине пленок (т.е. Ω_H).

Таким образом, для случая трёхслойных структур построены аналитические выражения, определяющие интенсивность сигнала сканирующего электронного микроскопа в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов в зависимости от толщин и материалов слоёв. Эти формулы могут быть адаптированы и для структур с любым химическим составом. Сформулирована в общем виде обратная задача восстановления толщин слоёв на основе обработки данных серий изображений, получаемых при варьировании ускоряющего напряжения. В зависимости от наличия или отсутствия априорной информации сформулированы постановки обратных задач в двух частных случаях. В первом случае учитывается постоянство толщин слоёв в некотором регионе микрообразца, а во втором случае учитывается известная общая толщина слоёв. На основе результатов решения обратной задачи проведена объёмная реконструкция трёхслойной Al-Au-Si микроструктуры с возможностью выделения необходимых томографических сечений (см. рисунок 7).

Как показал эксперимент, предложенный алгоритм реконструкции толщин пленок позволяет проводить достаточно точные оценки толщин слоёв в трёхслойных структурах в том случае, когда известна суммарная толщина слоёв.

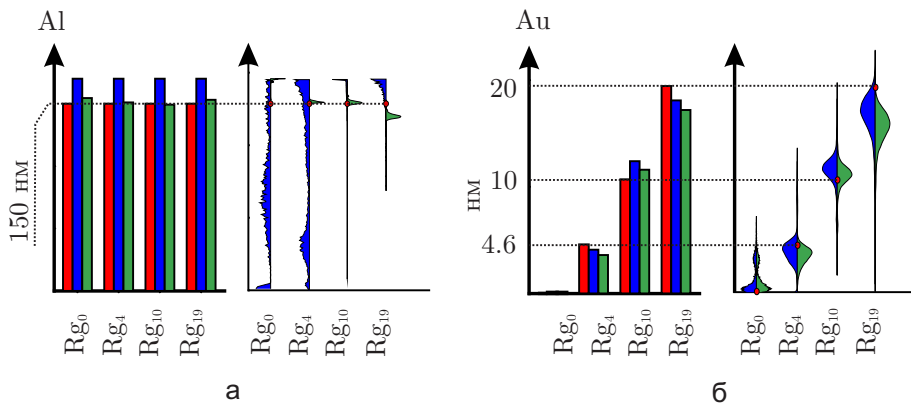


Рисунок 6 — Результаты восстановления толщины слоя алюминия и слоя золота. столбчатые диаграммы показывают результат восстановления, когда использовалась априорная информация о постоянстве толщины слоев в Rg_0 , Rg_4 , Rg_{10} , Rg_{19} . Столбцы слева направо: известная толщина (красный), результат восстановления для Ω_0 (синий), для Ω_H (зеленый). асимметричные скрипичные графики показывают результаты восстановления толщин слоев, когда обратная задача решалась для каждой точки независимо. Левая сторона скрипичного графика отображает плотность распределения восстановленных толщин слоев в случае отсутствия априорной информации (Ω_0), правая часть — при использовании априорной информации о суммарной толщине слоев (Ω_H), красные точки — истинное значение. Справа аналогичные графики по результатам восстановления толщины золотого (среднего) слоя. а — для слоя Al, б — для слоя Au.

В **четвертой главе** описан прикладной программный комплекс для решения обратных задач восстановления топографии рельефа поверхности и томографии трехслойных структур. Содержимое этой главы основано на практической реализации алгоритмов разработанных в двух предыдущих главах, а также зарегистрированных программ для ЭВМ.

Прикладной программный комплекс для ЭВМ реализован на языке программирования Julia в виде пакета, предоставляющего набор функций, реализующих описанные в предыдущих двух главах алгоритмы, что позволяет исследователю произвести внедрение на уровне исходного кода или использовать его в виде программ для командной оболочки.

Входными данными являются изображения в формате tiff формируемые сканирующим электронным микроскопом. Результат работы прикладного комплекса для восстановления топографии рельефа поверхности может быть сохранен в виде текстового файла с относительными высотами каждой точки изображения. Также доступен просмотр результата восстановления топографии

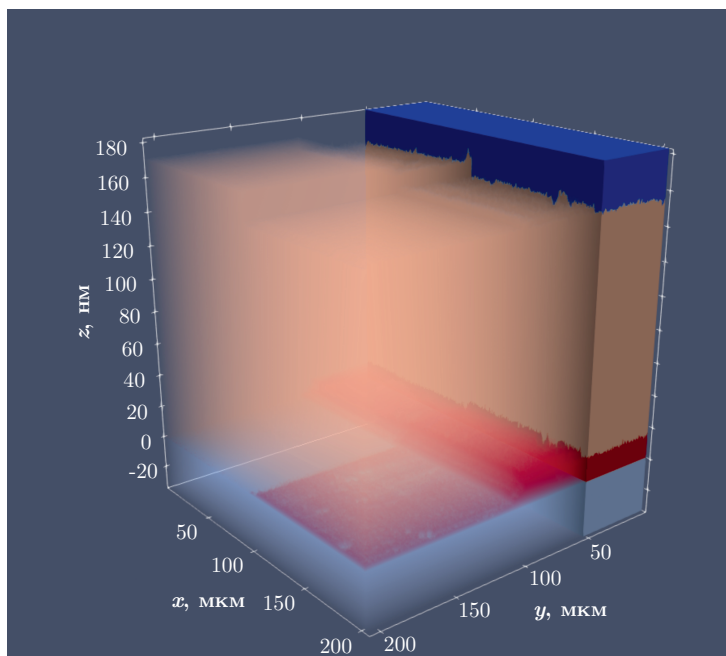


Рисунок 7 — Объёмное изображение восстановленной микрообразца для случая независимого решения обратных задач для каждой точки (x, y) с использованием априорной информации о суммарной толщине слоев H (Ω_H). Алюминий изображен коричневым цветом, золото — красным, часть массивной кремниевой подложки — синим. По всем осям отложено расстояние в нм.

рельефа поверхности микрообразца в интерактивном трехмерном режиме в браузере. Результат работы прикладного комплекса для восстановления томографии может быть сохранен в текстовом виде с толщинами пленок в каждой точке или в виде vtk файла для просмотра в среде инженерной визуализации ParaView. Реализованный программный комплекс лег в основу двух зарегистрированных программ для ЭВМ.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

- Установлено посредством математического моделирования, что возможно решение обратных задач по восстановлению трёхмерной информации об исследуемом с помощью сканирующего электронного микроскопа в режиме детектирования обратно-рассеянных электронов микрообразца, выполнение задач топографии рельефа поверхности микрообразца и топографии приповерхностных слоёв массивных образцов.
- Обеспечено эффективное восстановление трёхмерной информации о рельефе поверхности микрообразца на основе стандартного изображения,

формируемого микроскопом, с использованием четырёхкватдратного детектора обратно-рассеянных электронов и процедуры калибровки на образце известной геометрии; нивелированы неточности позиционирования детекторов относительно оси электронной пушки микроскопа, что позволило восстанавливать относительные высоты точек поверхности микрообразца с разрешением вплоть до нанометров.

- Обеспечено восстановление толщин плёнок при применении методологии исследования трёхслойного микрообразца при варьирующемся ускоряющем напряжении при наличии априорной информации об общей толщине плёнок и/или при наличии информации о постоянстве толщины плёнок в некотором регионе образца.
- Созданы прикладные программные комплексы для решения задач микротопографии и микротомографии, которые могут быть развернуты исследователем в связке с широким классом сканирующих электронных микроскопов, в том числе с теми, где детекторы обратно-рассеянных электронов устанавливаются вручную.

Публикации автора по теме диссертации

Научные статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук:

- [1] Borzunov A.A., Karaulov V.Y., Koshev N.A., Lukyanenko D.V., Rau E.I., Yagola A.G., Zaitsev S.V. 3D Surface Topography Imaging in SEM with Improved Backscattered Electron Detector: Arrangement and reconstruction algorithm // Ultramicroscopy. — 2019. — vol. 207, p. 112830. EDN: RLKDUG. Импакт-фактор 2,0 (JIF); 0,78 / 0,66 п.л.

Соискатель предложил метод математического моделирования связи экспериментальных данных сканирующего электронного микроскопа и трехмерной топографии рельефа, на основе которого сформулировал обратную задачу по восстановлению топографии рельефа микрообразцов. Соискатель разработал численные методы для решения данной обратной задачи, осуществил программную реализацию разработанных численных методов и проблемно-ориентированного комплекса программ, с помощью которых была восстановлена топография экспериментальных микрообразцов.

- [2] Borzunov A.A., Lukyanenko D.V., Rau E.I., Yagola A.G. Reconstruction Algorithm of 3D Surface in Scanning Electron Microscopy with Backscattered Electron Detector // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. — 2021. — vol. 29, no. 5. — pp. 753—758. EDN: GMKKYS. Импакт-фактор 1,1 (JIF); 0,32 / 0,28 п.л.

Соискатель формализовал математический алгоритм решения обратной задачи по восстановлению топографии рельефа микрообразцов, обрабатывал экспериментальные данные и проводил численные эксперименты по восстановлению топографии рельефа.

- [3] Борзунов А.А., Забродский В.В., Зайцев С.В., Караулов В.Ю., Лукьяненко Д.В., Рау Э.И., Шерстнев Е.В., Ягола А.Г. Трехмерная сканирующая электронная микроскопия топографии поверхности с учетом влияния функции отклика детекторной системы // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. — 2021. — № 4. — С. 23-28. EDN: GNBBMG. Импакт-фактор 0,125 (РИНЦ). 0,71 из 0,82 п.л.

Перевод: Borzunov, A.A., Zabrodsky V.V., Zaitsev S.V., Karaulov V.Y., Lukyankenko D.V., Rau E.I., Sherstnev E.V., Yagola A.G. Three-Dimensional Scanning Electron Microscopy of Surface Topography with Consideration of the Effect of the Respose Function of the Detector System // Moscow University Physics Bulletin. — 2021. — vol. 76, no. 4. — pp. 209–214. EDN: LYSSGL. Импакт-фактор 0,4 (JIF); 0,71 / 0,62 п.л.

Соискатель реализовал комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого получил все численные результаты реконструкции рельефа микрообразцов.

- [4] Борзунов А.А., Рау Э.И., Зайцев С.В., Кошев Н.А., Лукьяненко Д.В., Ягола А.Г. Томография трёхслойных наноструктур в сканирующей электронной микроскопии в режиме детектирования обратнорассеянных электронов // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. — 2024. — № 5. — С. 2450101. EDN: NXMNHR, Импакт-фактор 0,125 (РИНЦ). 1,04 из 1,13 п.л.

Перевод: Borzunov A.A., Rau E.I., Zaitsev S.V, Koshev N.A., Lukyanenko D.V., Yagola A.G. Tomography of Three-Layer Structures in Scanning Electron Microscopy in the Backscattered Electron Detection Mode // Moscow University Physics Bulletin. — 2024. — vol. 79, no. 5. — pp. 542-550. EDN: HVWEJO, Импакт-фактор 0,4 (JIF). 0,98 / 0,91 п.л.

Соискатель предложил метод математического моделирования связи экспериментальных данных сканирующего электронного микроскопа и внутренней структуры приповерхностных слоев, на основе которого сформулировал обратную задачу по восстановлению внутренней приповерхностной структуры (томографии) многослойных микрообразцов. Соискатель разработал численные методы для решения данной обратной задачи, осуществил программную реализацию разработанных численных методов и проблемно-ориентированного комплекса программ для ЭВМ, с помощью которого была проведена томография и восстановлена внутренняя трехмерная структура экспериментального микрообразца.

Борзунов Андрей Анатольевич

Восстановление трехмерной информации в сканирующей электронной микроскопии
при детектировании обратно-рассеянных электронов

Автореф. дис. на соискание ученой степени к. ф.-м. н.

Подписано в печать _____.____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____