

02;10;11

Возможности реконструкции образа при сканировании решеткой фокусов атомных линз от электронного пучка

© А.Г. Резикян, В.В. Смирнов

Санкт-Петербургский государственный университет
 Научно-исследовательский институт физики им. В.А. Фока,
 198504 Санкт-Петербург, Россия
 e-mail: aram_rn@mail.ru

(Поступило в Редакцию 11 февраля 2005 г.)

При использовании рядов атомов в слое кристалла в качестве фокусирующих элементов для фокусировки пучка от электронного микроскопа на выходе из кристалла получается распределение интенсивности, представляющее собой решетку тонких пиков диаметром порядка 0.03 и 0.04 nm на расстоянии первой фурье-плоскости. Приведены результаты моделирования схемы микроскопии со сканированием образца такой решетки, при котором из детектируемого сигнала восстанавливается функция прохождения образца. Качество восстановления зависит от вида и величины искажений, обусловленных различными факторами. Некоторые из них были промоделированы, а именно: случайный шум, который вносится в регистрируемый сигнал в ходе эксперимента, и неточности знаний о падающей на образец волне, связанные с неточностью знаний о ширине первичного электронного пучка, падающего на фокусирующий кристалл. Выявлены диапазоны величин искажений позволяющих с допустимым качеством визуализировать образец.

Введение

В работах [1–14] была предложена и разрабатывалась концепция атомной линзы в корпускулярной оптике. Суть ее заключается в формировании тонких кроссоверов корпускулярных (электронных, атомных, и т. д.) пучков при фокусировке на различных системах атомного и наномасштабов, простейшей из которых является атом. Методы, основанные на данной концепции, могут иметь приложения во многих областях, в том числе в микроскопии. В частности, для электронов в [1,6] теоретически показано, что одиночные тяжелые атомы или колонки атомов в тонком кристалле могут выступать в качестве линзы, способной сфокусировать пучок электронов в область с поперечным сечением в десятки пикометров в диаметре. Экспериментальным подтверждением явилось получение разрешения 0.06 nm в работе [2] при использовании электронного микроскопа с разрешением не выше 0.34 nm по одной из схем, рассмотренных в [6].

При освещении кристалла электронным пучком с диаметром, превосходящим расстояние между соседними рядами атомов в фокусирующем кристалле, на выходе из кристалла образуется решетка пиков интенсивности малого диаметра, порядка десятков пикометра. При сканировании такой решеткой объекта можно в принципе восстановить изображение объекта с разрешением порядка диаметра пика.

В настоящей работе проведено компьютерное моделирование процедуры реконструкции образа при таком сканировании.

Схема рассматриваемой системы представлена на рис. 1. Ее изучение состоит из моделирования трех этапов: 1) прохождение пучка электронов от электронного микроскопа через тонкий слой кристалла;

- 2) прохождение вышедшей из кристалла волны до исследуемого образца, который мы хотим визуализировать (предполагается, что волна проходит в вакууме);
- 3) восстановление изображения образца из рассеянной образцом волны при сканировании.

1. Прохождение пучка электронов через кристалл

Прохождение пучка при каналировании через кристалл рассчитывалось с помощью пакета программ Earl J. Kirkland. Он основан на слоевом методе Cowley-Moodie [15], который широко используется для расчетов в электронной микроскопии. В [4] исследовался кристалл золота толщиной 6 nm (15 элементарных ячеек вдоль кристаллографического направления [100]). Рассматривался пучок электронов с параметрами, характерными для сканирующего электронного микроскопа: энергия 100 keV, угол сходимости 10 mrad и наименьший диаметр в кроссовере порядка 0.2 nm.

Проводились расчеты с различным смещением оси первичного пучка относительно выбранной колонки ато-

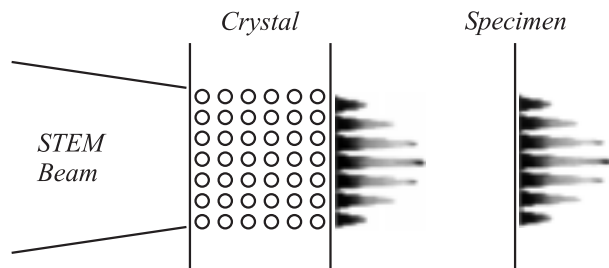


Рис. 1. Схема общей работы.

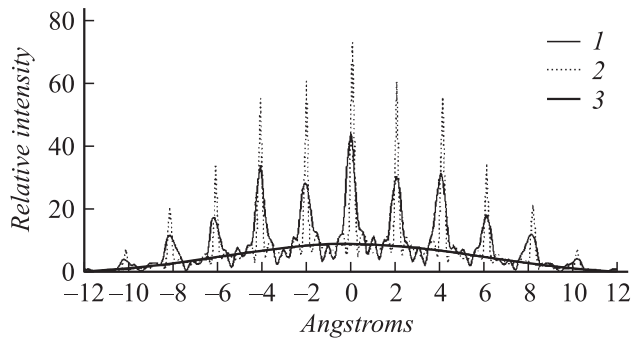


Рис. 2. Проекция распределенной интенсивности: в первой фурье-плоскости (1), у выходной поверхности кристалла (2), в поперечном сечении пучка электронного микроскопа (3).

мов, которые показали, что на выходе из кристалла образуется тонкий кроссовер с максимальной интенсивностью на расстоянии порядка 0.2 nm от последнего атома колонки и диаметром порядка 30 pm. Выходное распределение привязано к оси атомной цепочки и не смещается при смещении первичного пучка. При захвате первичным пучком соседней атомной цепочки появляется соответствующий сетеллитный пик интенсивности. Пики при смещении не уширяются.

Для рассмотрения решетки факусов нами проводился расчет прохождения более широкого первичного пучка электронов. На рис. 2 показаны проекции распределенной интенсивности в поперечном сечении пучка электронного микроскопа с параметрами: энергия 300 keV, угол сходимости 0.5 mrad и наименьший диаметр в кроссовере порядка 1.6 nm на выходе в кристалл и пучка, вышедшего из кристалла золота толщиной 6 nm (15 элементарных ячеек вдоль кристаллографического направления [100]), рассчитанного слоевым методом.

2. Прохождение выходного пучка в вакууме

Как было отмечено, на выходе из кристалла образуется тонкий кроссовер с максимальной интенсивностью на очень малых расстояниях (десятые доли nm) от последнего атома в кристалле. Исследуемый образец практически сложно перемещать при сканировании на таком расстоянии от кристалла ввиду неровности (в общем случае) поверхности образца. В зависимости от степени гладкости для каждого образца требуется определенная степень удаленности от кристалла, поэтому необходимо создать условия, при которых кроссовер образовывался бы как можно дальше от кристалла. В работе [5] предложен метод, который позволяет обойти вышеизложенные трудности. В волновой оптике известен принцип Фурье плоскостей: бесконечная решетка периодически расположенных в плоскости точечных когерентных источников (распределение интенсивности которых в пространстве представляет собой дельта-функцию) периодически по-

вторяется в пространстве (т.е. расходящиеся лучи снова фокусируются с некоторым периодом в пространстве).

Однако если решетка конечная, а источник не точечный (в нашем случае пики конечной ширины и высоты), то в каждой следующей плоскости фокусировки сигнал оказывается все более искаженным. Отсюда вывод: чем больше рядов в кристалле захватывает пучок электронного микроскопа, тем лучше будет воспроизводиться выходной пучок (который можно получить в плоскости нулевого порядка) в фурье-плоскостях. Однако, если падающая на образец волна состоит из большого количества пиков, возникают трудности восстановления изображения образца, так как в ходе реального эксперимента не удастся обойтись без шумов. Таким образом, приходится выбирать некоторое оптимальное количество пиков, которое приводило бы к эффекту периодической фокусировки пучка с малыми искажениями хотя бы в первой плоскости и вдобавок позволяло бы с хорошей точностью восстанавливать изображение образца.

Расстояния до фурье-плоскостей для точечных источников рассчитываются с помощью известного [5] соотношения

$$R = \frac{na^2}{2\lambda}, \quad (1)$$

где R — расстояние до плоскости, a — расстояние между источниками, n — порядок плоскости, λ — длина волны.

Если решетка конечная, а источники не точечные, то фурье-плоскости оказываются смещенными (по сравнению с идеальным случаем). Расчеты показали, что величина этого смещения оказывается не очень большой (по крайней мере для рассматриваемых нами конфигураций пучков).

При энергии электронов 300 keV для кристалла золота ($a = 0.2$ nm) по формуле (1) получаем расстояние до первой плоскости Фурье $R = 9.3$ nm. Современные технологии позволяют поместить и перемещать образец на таком расстоянии от кристалла.

После выхода из кристалла волна на расстоянии распространения z находится как свертка по поперечным координатам \mathbf{r} с вакуумным пропагатором [6]

$$p(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{i\lambda z} \exp\left(ik\left(z + \frac{r^2}{2z}\right)\right), \quad (2)$$

где λ — длина волны, k — волновое число.

Эта формула верна в том случае, когда пределы изменения продольной координаты z много больше пределов изменения поперечных координат.

На рис. 2 показаны проекции распределений интенсивности пучка в первой фурье-плоскости, полученное сверткой волны на выходе из кристалла с вакуумным пропагатором (2).

3. Восстановление изображения образца

Изображение образца можно получить путем его сканирования электронным пучком (типа I на рис. 2), полученным вышеизложенным способом. Однако существует ряд факторов, препятствующих качественной визуализации образца, некоторые из которых будут рассмотрены ниже. При сканировании образца одним единственным узким пиком (в идеале дельта-функцией) при восстановлении искажения будут малы (тем меньше, чем больше пик похож на дельта-функцию). В случае же большого количества пиков происходит некоторого рода наложение изображений от каждого пика и при восстановлении возникает необходимость „распутать“ эту картину.

Пусть на поверхность образца с функцией прохождения (transmission function) $v(x, y)$ падает волна $w(x, y)$. Здесь (x, y) — это координаты в плоскости образца (т.е. поперечные координаты, которые в формуле (2) для вакуумного пропагатора были обозначены как \mathbf{r}). Согласно [5], в плоскости за образцом выходная волна для тонкого образца (в котором можно пренебречь дифракцией волны) есть произведение $w \cdot v$, интенсивность которой, если ввести обозначения $g \equiv |w|^2$, $f \equiv |v|^2$, можно записать в виде $R' = g \cdot f$.

Детектируется сигнал $R = \iint_F R'(x, y) dx dy$, где F — область, занимаемая образцом. Под v (согласно [5]) понимается функция $v = \exp(-i\sigma U)$, где $\sigma = m/k$ (m — масса электрона, k — волновое число); $U(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{r}, z) dz$ — так называемый проективный потенциал (projected potential distribution); V — потенциал рассеяния. Таким образом, зная $f = \exp(2\sigma \text{Im}(U))$, можно найти мнимую часть проективного потенциала образца

$$\text{Im}(U) = \frac{1}{2} \sigma \ln(f).$$

Мнимая часть комплексного потенциала рассеяния соответствует поглощению в образце [16]. Тем самым на основе информации об f визуализируется поглощательная способность объекта.

Очевидно, что сканированию поверхности образца падающей волной соответствует свертка

$$g \otimes f = R. \quad (3)$$

Здесь $R(\Delta x, \Delta y)$ — функция координат $(\Delta x, \Delta y)$ — смещений при сканировании.

Для того чтобы восстановить f по известным g и регистрируемому сигналу R , нужно осуществить деконволюцию в (3). Для этого можно применить фурье-преобразование к этому уравнению

$$\left. \begin{aligned} F[g \otimes f] &= F[R] \\ F[g \otimes f] &= F[g]F[f] \end{aligned} \right\} \Rightarrow F[f] = \frac{F[R]}{F[g]} \quad (4)$$

и затем применить обратное фурье-преобразование к полученному уравнению

$$f = F^{-1} \left[\frac{F[R]}{F[g]} \right].$$

Значения функции $F[g]$ могут быть малыми величинами, и согласно формуле (4), функция $F[f]$ в этих точках будет иметь особенности, поэтому необходимо вводить регуляризацию, которую мы выбираем в виде

$$f = F^{-1} [F[R] \cdot Q] \begin{cases} Q = \frac{1}{\text{reg}} & \text{if } |F[g]| < \text{reg}, \\ Q = \frac{1}{F[g]} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (5)$$

где reg — параметр регуляризации.

При моделировании процесса записи и реконструкции можно в принципе использовать волну, получаемую слоевым методом, как описано в разделе 1. Такое приближение хорошо соответствует реальной волне. Однако в целях упрощения для проведения предварительного качественного рассмотрения процедур записи и реконструкции естественно использовать более простые модельные функции.

В качестве модельной функции g была взята функция, представляющая собой решетку, в узлах которой заданы гауссовы функции

$$2\pi/\Delta r \exp(-0.5r^2/(\Delta r)^2),$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, промодулированные огибающей гауссовой функцией $\exp(-r^2/(\Delta r_1)^2)$, т.е.

$$g = \left(\sum_{i=-m}^m \sum_{j=-m}^m \frac{2\pi}{\Delta r} \exp\left(-0.5 \frac{[r(x+i \cdot d; y+j \cdot d)]^2}{(\Delta r)^2}\right) \right) \times \exp\left(-\frac{r^2}{(\Delta r_1)^2}\right).$$

Моделирование проводилось при значении $\Delta r = 0.04$ nm (соответствует результату моделирования пиков слоевым методом в первой фурье-плоскости) и расстояния между узлами решетки 0.2 nm (соответствует кристаллу золота). Предполагается, что в реальном эксперименте (в результате которого будет найдена функция R) при реконструкции в качестве g будет использоваться распределение, полученное слоевым методом (распределение вида I на рис. 2). Ширина огибающей $\Delta r_1 = 0.25$ nm, использованная при моделировании, соответствует диаметру первичного электронного пучка (порядка 0.5 nm), образующего решетку из 9 интенсивных пиков и множества пиков малой интенсивности.

Модельная функция прохождения образца f показана на рис. 3 (слева). Ее выбор определялся тем, что соответствующая тестовая картинка легко узнаваема и структура на ней имеет характерный размер 0.6 nm, что



Рис. 3. Исходный образ (слева), результат сканирования (посередине) и восстановленный образ (справа).

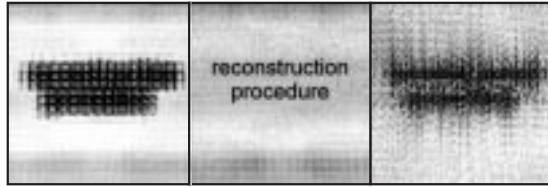


Рис. 4. Восстановленные изображения рисунка, соответствующего функции f (рис. 3), для $\Delta r_1 = 0.15$ (слева), 0.25 (по центру), 0.30 nm (справа). Для функции g параметр ширины $\Delta r_1 = 0.25$ nm.

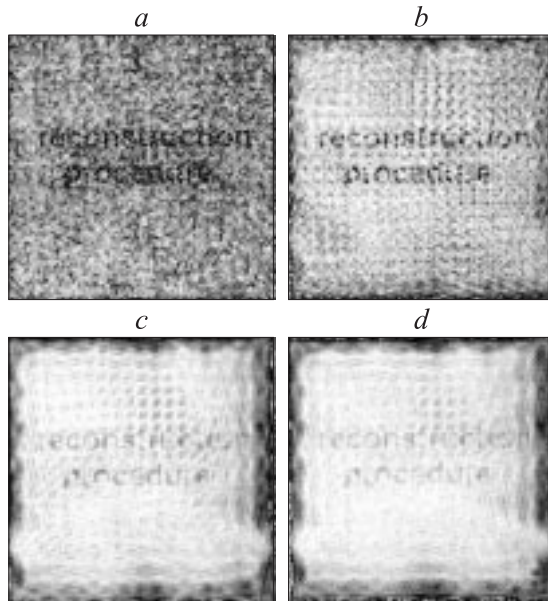


Рис. 5. Результат восстановления при шуме с параметрами a — $\varepsilon = 0.03$ nm, $\beta = 0.5\%$; b — $\varepsilon = 0.05$ nm, $\beta = 2.0\%$; c — $\varepsilon = 0.09$ nm, $\beta = 5.0\%$; d — $\varepsilon = 0.11$ nm, $\beta = 6.0\%$.

по порядку соответствует ширине зонда ($\Delta r = 0.04$ nm). Само изображение не имеет значения для процесса моделирования. Физически моделируемый размер тестовой картинки 4×4 nm.

Необходимость процедуры восстановления изображения образца из детектируемого сигнала видна из рис. 3, где приведен результат сканирования.

При моделировании выявлялись условия, ограничивающие возможность визуализировать образец.

Ширину огибающей сканирующей решетки пиков g можно узнать лишь с некоторой точностью, так как ширина распределения интенсивности в пучке электронного микроскопа точно почти никогда неизвестна. Поэтому при восстановлении в качестве распределения интенсивности падающего на образец сигнала используется решетка g' , ширина огибающей которой отличается от истинной. Таким образом, можно наблюдать зависимость качества восстановления от того, насколько отличается взятая нами при восстановлении функция от истинной (имеется в виду ширина огибающей пиков), а также можно выявить диапазон значений (на которые отличаются ширины огибающих распределений интенсивности падающего пучка и g'), не препятствующих визуализации образца с допустимым качеством.

В реальном эксперименте всегда присутствуют факторы, искажающие регистрируемый сигнал. Эти факторы могут иметь различную природу. Это могут быть вибрации при сканировании, попадание посторонних частиц в детектор, дрейф пучка электронного микроскопа, загрязнение камеры, в которой происходит сканирование, загрязнение самого образца, тепловой дрейф, разрушение образца и т.д. Поэтому необходимо выявить диапазон величин искажений, не препятствующих визуализации образца с допустимым качеством. Реальные параметры искажений могут быть выявлены только в эксперименте. В качестве простой модели искажений в данной работе использовался случайный шум, который накладывался на регистрируемый сигнал.

Сначала было исследовано качество реконструкции в зависимости от величины регуляризации (см. формулу (5)). Наилучшее качество реконструкции получается при значении параметра регуляризации порядка 10^{-3} . Это значение и использовалось при дальнейших расчетах.

При моделировании неточности знаний о волне g регистрируемый сигнал находился по формуле (3), а при восстановлении в формуле (5) бралась не функция g , а функции g' , отличающаяся от g значением параметра Δr_1 . На рис. 4 представлены результаты моделирования.

При моделировании шумов к регистрируемому сигналу (3) добавлялись случайные шумы различной пространственной частоты (или периода ε) и амплитуды β . На рис. 5 представлены результаты моделирования. Амплитуда шума β приведена в процентном отношении к максимальному значению самого сигнала R .

4. Заключение

В результате проделанной работы были выявлены следующие диапазоны параметров, которые позволяют с допустимым качеством реконструировать образ при сканировании решеткой фокусов атомных линз от пучка электронов: $\Delta r_1 = 0.15-0.30$ nm — значения ширины огибающей пиков распределения интенсивности падающей на образец волны, которое используется при рекон-

струкции (значение истинной ширины $\Delta r_1 = 0.25$ nm). Максимальные значения амплитуды шума β , которые еще позволяют визуализировать образец с допустимым качеством, для различных пространственных частот шума ε^{-1} приведены в таблице.

ε , nm	β , %
0.03	0.5
0.05	2.0
0.09	5.0
0.11	6.0

Приведенные результаты могут служить ориентировочными данными для постановки эксперимента.

Список литературы

- [1] *Smironov Valery V.* // J. Phys. D. 1998. Vol. 31. N 13. P. 1548–1555.
- [2] *Cowley J.M.* // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. N 16. P. 3618–3621.
- [3] *Smirnov V.V., Cowley J.M.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. N 6. P. 064109(9).
- [4] *Cowley J.M., Hudis J.B.* // Microscopy & Microanalysis. 2000. N 6. P. 429–436.
- [5] *Dunin-Borkowski R.E., Cowley J.M.* // Acta Cryst. 1999. Vol. A55. P. 119–126.
- [6] *Cowley J.M., Spence J.C.H., Smirnov Valery V.* // Ultramicroscopy. 1997. Vo. 68. N 2. P. 135–148.
- [7] *Смирнов В.В.* // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 7. С. 92–97.
- [8] *Mityureva A.A., Smirnov V.V., Vorobiev O.A.* // J. Phys. D. 2001. Vol. 34. N 13. P. L65–L69.
- [9] *Смирнов В.В., Воробьев О.А., Митюрева А.А., Примагина Т.Е.* // Вестник СПбГУ. Сер. 4. 2003. Вып. 3 (№ 20). С. 23–36.
- [10] *Смирнов В.В., Воробьев О.А., Митюрева А.А., Примагина Т.Е.* // Изв. вузов. Электроника. 2003. № 2. С. 3–7.
- [11] *Sanchez Michael, Cowley J.M.* // Ultramicroscopy. 1998. Vol. 72. P. 214–222.
- [12] *Cowley J.M., Dunin-Borkowski R.E., Hayward Michele.* // Ultramicroscopy. 1998. Vol. 72. P. 223–232.
- [13] *Cowley J.M., Ooi N., Dunin-Borkowski R.E.* // Actae Cryst. 1999. Vol. A55. P. 533–542.
- [14] *Cowley J.M.* // Ultramicroscopy. 2000. Vol. 81. N 2. P. 47–55.
- [15] *Van Dyck D.* // Advances in Electronics and Electron Physics. Orlando, 1985. Vol. 65. P. 295–355.
- [16] *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Т. 3. М.: Наука, 1989. С. 809.