



Применение алгоритма Катхилла–Макки или модифицированных алгоритмов вложенных сечений совместно с методом решения систем, учитывающим разреженность, позволяет за разумное время решать на современном персональном компьютере задачи компьютерного зрения с десятками тысяч связанных изображений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Marquard D. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters // SIAM Journal on Applied Mathematics. – 1963. – Vol. 11, №2. – P. 431-441.
2. Hartley R., Zisserman A. Multiple View Geometry in Computer Vision. – Cambridge University Press, 2004.
3. Golub G.H., Van Loan C.F. Matrix Computations. – The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, second edition, 1989.
4. Cuthill E., McKee J. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices // Proc. of the 24-th National Conference ACM. – New York, 1969. – P. 157-172.
5. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений / пер. с англ. – М.: Мир, 1984.
6. Karypis G., Kumar V. A fast high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM Journal on Scientific Computing. – 1999. – Vol. 20, №1. – P. 359-392.

Статья представлена к публикации членом редколлегии С.И. Смагиным.

E-mail:

Камаев Александр Николаевич – kamaev_an@mail.ru.

УДК: 004.94+51-73

© 2013 г. А.Г. Масловская, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КОНТРАСТА РЭМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ ДОМЕННЫХ СТРУКТУР СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Предложена система имитационного моделирования изображений сегнетоэлектрических доменных структур, наблюдаемых с помощью методик растровой электронной микроскопии. Алгоритм основан на математической модели формирования видеосигнала в пироэлектрическом режиме. Представлены результаты вычислительного эксперимента.

Ключевые слова: математическая модель, алгоритм, компьютерное моделирование, доменная структура, сегнетоэлектрик, растровое изображение.

Введение

В настоящее время применение методов математического и компьютерного моделирования является одним из важнейших составляющих в решении фунда-

ментальных и прикладных научных задач исследования процессов взаимодействия заряженных пучков с твердым телом. Развитие компьютерных методов моделирования отклика физических систем на внешние энергетические воздействия позволяет с помощью программных средств исследовать явления, которые ранее не поддавались изучению чисто теоретическими или экспериментальными методами.

Широкое использование аналитических методик растровой электронной микроскопии для изучения и модификации свойств различных материалов приводит к необходимости теоретического обоснования и математического описания основных законов взаимодействия электронных пучков с облучаемыми образцами. Средства и методы математического и компьютерного моделирования в данной области традиционно применяют для решения следующих прикладных задач: моделирование транспорта электронов в облучаемой мишени [1]; расчет структурных изменений материала при электронном облучении; моделирование тепловых и зарядовых процессов, обусловленных инжекцией пучка в образец; моделирование формирования изображения топографии поверхности. В основе создания и алгоритмических реализаций таких моделей лежат методы, относящиеся к различным классификационным категориям: стохастический метод Монте-Карло; методики квантово-механических расчетов; численные методы реализации детерминированных моделей; методы обработки изображений [2] и др. В общем случае разработка новых компьютерных методов анализа физических процессов взаимодействия пучков электронов с материалами сопровождается проектированием программных комплексов по проведению вычислительных экспериментов для моделирования карты сопутствующих эффектов с использованием современного программного обеспечения.

Использование нестандартных методик растровой электронной микроскопии для исследования свойств сегнетоэлектриков приводит к необходимости теоретического анализа процессов взаимодействия электронных пучков средних энергий с полярными диэлектрическими материалами и развития методов моделирования формирования контраста изображений при визуализации доменных структур [4]. В работе [5] описан подход к визуализации сегнетоэлектрических доменов в пироэлектрическом режиме РЭМ. В [6] предложена математическая модель формирования пироэлектрического отклика от сегнетоэлектрического кристалла, используемого в РЭМ в качестве видеосигнала. Целью настоящей работы является разработка методики расчета и системы имитационного моделирования изображений доменных структур сегнетоэлектрических кристаллов на основе математической модели формирования видеосигнала в растровом электронном микроскопе при использовании пироэлектрического режима.

Постановка задачи

В растровой электронной микроскопии изображение объекта формируется последовательно по точкам и является результатом взаимодействия электронного пучка с поверхностью образца. Сфокусированный электронный зонд, как локальный источник тепла, может быть применен для формирования растрового изображения доменной структуры сегнетоэлектрических кристаллов. В этом случае ре-

гистрируемый пироэлектрический отклик кристалла является видеосигналом, обуславливающим формирование потенциального контраста [5].

Таким образом, для имитационного моделирования контраста изображений доменных структур сегнетоэлектриков в пироэлектрическом режиме необходимо получить модельное представление пироэлектрического сигнала, построить вычислительный алгоритм, имитирующий сканирование исходной доменной структуры и формирование итогового видеосигнала, и разработать программное приложение, предоставляющее возможность проведения вычислительного эксперимента.

Математическая модель формирования видеосигнала в пироэлектрических режимах

Изменение теплового поля кристалла, вызванное действием на него электронного зонда, повлечет за собой изменение поляризации кристалла P_S и протекание в цепи короткозамкнутого образца поляризационного тока [6]. Таким образом, задача о форме пиросигнала сводится к задаче о распространении тепла в образце от локального источника.

Выражение для пиротока получено с использованием нестационарного уравнения теплопроводности и теоремы Остроградского в следующем виде [5]:

$$I = \frac{\gamma W}{\rho c d} + \frac{a^2 \gamma}{d} \oint_S (\text{grad} T)_n dS = I_1 + I_2, \quad (1)$$

где W – мощность источника, Вт; d – толщина кристалла, м; γ – пирокоэффициент, Кл/(К·м²); ρ – плотность среды, кг/м³; c – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К); a^2 – коэффициент тепловой диффузии, м²/с; I_1 – кумулятивная компонента пиротока, А; I_2 – диффузионная компонента пиротока, А.

В модели понятие конечной толщины кристалла относится к области ненулевого значения γ , при расчете теплового поля кристалл предполагался безграничным. В модели переменные нормировались с использованием критериев подобия. Числа Фурье и Пекле [7] дают возможность задать масштабы времени $\tau_{sc} = x^2 / a^2$ и длины $y_{sc} = a^2 / v$ для заданной скорости v движения зонда.

Для бесконечного модельного кристалла решение задачи расчета формы пиротклика на воздействие зонда постоянной интенсивности (1) можно построить с использованием выражения для стационарного поля движущегося источника [7]:

$$T(x', y', z') = \frac{W}{4\pi k_T R} \exp\left(-\frac{v(R+x')}{2a^2}\right), \quad R = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}, \quad (2)$$

где k_T – коэффициент теплопроводности.

При использовании пульсирующего электронного зонда выражение для пиротклика кристалла (1) преобразуется к виду:

$$I(x, t) = \frac{\gamma W}{\rho c d} \exp(i\omega t) - \frac{W\gamma}{2d\rho c} \text{sign}(x) \exp(-|x|k(1+i)) \exp(i\omega t), \quad (3)$$

где $k = \sqrt{\omega/(2a^2)}$ – параметр, определяющий сдвиг фаз и затухание переменной тепловой волны; x – расстояние от зонда до доменной границы; ω – частота пуль-

саций зонда.

Форма переходного видеосигнала при пересечении зондом доменной границы будет определена способом детектирования. Выделение модуля амплитуды соответствует детектированию сигнала без учета его фазы. Выделяя действительную часть амплитуды, можно получить синфазную составляющую сигнала, которую физически можно измерить с помощью фазового детектора. Соответственно ортогональная составляющая сигнала вычисляется с использованием мнимой части амплитуды переменного сигнала и может быть измерена специальной настройкой работы фазового детектора.

Методика расчета растровых изображений доменных структур сегнетоэлектриков

Для определенности будем считать, что модельный расчет проводится по отношению к сегнетоэлектрическим кристаллам со 180° -доменными стенками. Исходные растровые двумерные изображения доменной структуры соответствуют поверхностному распределению поляризации: черные области отвечают за положительные домены с направлением вектора спонтанной поляризации \mathbf{P}_S «головой вниз» и белые области – за отрицательные домены с соответствующим направлением \mathbf{P}_S – «головой вверх». Для задания пространственной доменной конфигурации предположим, что все домены имеют цилиндрическую форму, соответствующую такому полярному состоянию, при котором произошло полное прораствание доменов сквозь кристалл (рис. 1).

Примем, что «сканирование» исходной доменной структуры происходит следующим образом: слева направо и сверху вниз, как это характерно для электронного зонда РЭМ. Далее осуществляется перевод черно-белого изображения в матрицу пирокоэффициентов, в нормированном виде соответствующей значениям $\gamma = \pm 1$, одновременно считывается размерность матрицы двумерного изображения: $N \times M$, $i = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, M}$. При «сканировании» доменной структуры координаты местоположения границ (p, q) записываются в отдельный массив и для каждой позиции движущегося зонда (i, j) на границах осуществляется вычисление температурного поля согласно (2).

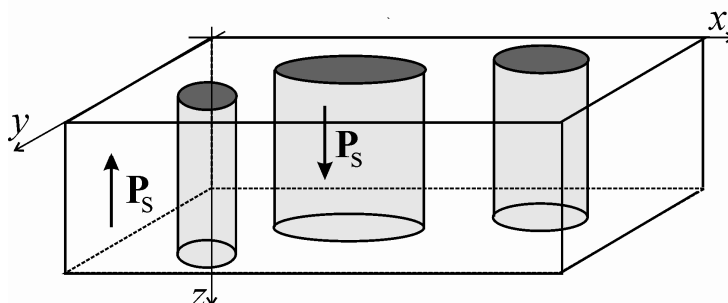


Рис. 1. Пример модельного сегнетоэлектрического кристалла с цилиндрическими 180° -доменами.

Для расчета пироотклика (1) необходимо задать градиент температуры $\text{grad}T$, который в двумерном случае определяется следующим выражением:

$$(\text{grad}T)_n dS = \frac{\partial T}{\partial x} dS_x + \frac{\partial T}{\partial y} dS_y. \quad (4)$$

Дискретность растрового рисунка приводит к тому, что наклонная граница является ступенчатой и представляет собой набор элементов с взаимно-перпендикулярными ориентациями границ. Вследствие этого вклад в поток тепла дает лишь одна из компонент градиента температуры (4) в зависимости от ориентации элемента границы (рис. 2).

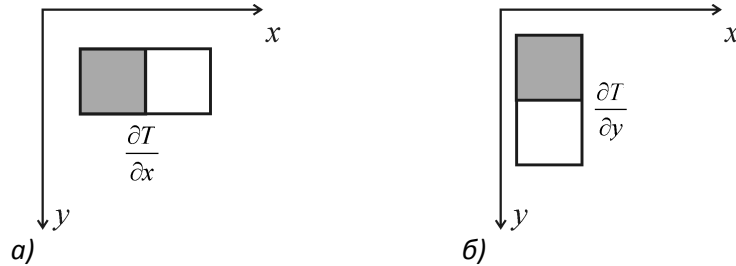


Рис. 2. Продольный (а) и поперечный (б) элементы границы.

Для реализации модели необходимо учесть направление ориентации элементарной площадки, определяемое знаком изменения пироккоэффициента в зависимости от того, состоялось ли пересечение зондом границы. Изменение знака пироккоэффициента при пересечении зондом границ с различной ориентацией иллюстрируется на рис. 3.

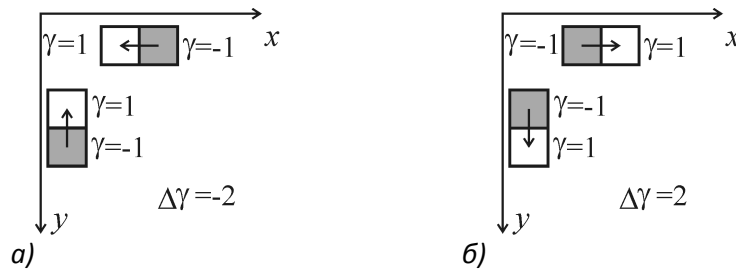


Рис. 3. Изменение знака пироккоэффициента $\Delta\gamma$ при пересечении границ с различными ориентациями.

Результирующий диффузионный отклик для каждой позиции зонда (i, j) от элемента границы определяется суперпозицией вкладов всех границ:

$$I_2(i, j) = \sum_{k=1}^K I_{2k}(i, j, p, q), \quad (5)$$

где I_{2k} – диффузионная компонента, обусловленная диффузией тепла через каждый элемент границы; K – число границ.

Таким образом, диффузионная компонента I_2 рассчитывается согласно (1) с учетом (5), причем интегрирование по поверхности S заменяется суммированием по элементарным компонентам I_{2k} с выбором составляющей градиента температуры $\partial T/\partial x$ – для продольного элемента границы либо $\partial T/\partial y$ – для поперечного элемента границы. Учет толщины кристалла d проводится интегрированием по третьей координате z в пределах от 0 до d . Геометрическая схема расчета для модельной конфигурации показана на рис. 4.

Кумулятивная компонента в нормированном виде определяется знаком пироккоэффициента в месте нахождения зонда $I_1(i, j) = \text{sign}(\gamma_{i,j})$ согласно соотноше-

нию (1). Следовательно, полный ток можно записать в виде:

$$I(i, j) = I_1(i, j) + \sum_{k=1}^K I_{2k}(i, j, p, q). \quad (6)$$

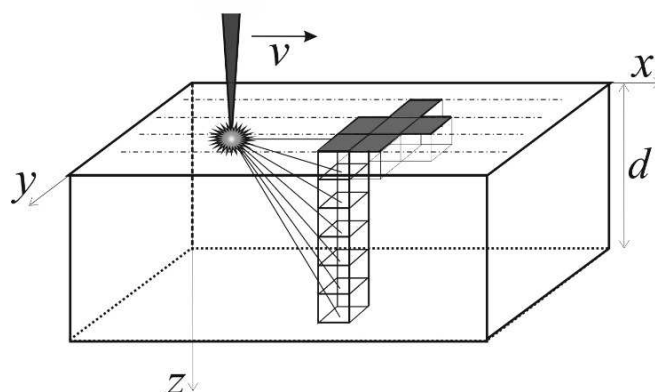


Рис. 4. Геометрическая схема взаимного положения зонда и фрагмента границы.

Скорость сканирования и ширина переходной зоны связаны масштабом длины Пекле, как и в случае для расчета формы пиротока.

Яркость соответствующего элемента микрофотографии определяется величиной пиротока, и для получения результирующей микрофотографии матрицу значений пирооткликов необходимо перевести в черно-белое растровое изображение (режим «градации серого»). Итоговое изображение представляет собой расчетную микрофотографию доменной структуры, построенную на основных законах формирования видеосигнала в режиме пирозонда.

Для наглядного представления возможностей визуализации доменной структуры с помощью пульсирующего электронного зонда методика расчета изображения доменной структуры была модифицирована: для соответствующих расчетов использовано соотношение (3), определяющее кумулятивную и диффузионную компоненты пиротока, с учетом подхода (6). В зависимости от способа регистрации сигнала выражение для пиротока было преобразовано к одному из следующих соотношений: 1) регистрация амплитуды пиросигнала $I = |I_1 + I_2|$; 2) регистрация синфазной составляющей соответствует выделению действительной компоненты диффузионного сигнала $I = I_1 + \text{Re}(I_2)$; 3) регистрация ортогональной составляющей определяется мнимой компонентой отклика $I = \text{Im}(I_2)$.

Алгоритм расчета изображения доменной структуры сегнетоэлектрика и описание структуры программного приложения

Описанную выше методику расчета растровых изображений доменных структур сегнетоэлектриков, основанную на модельном представлении видеосигнала, формирующего контраст изображения, можно представить в виде следующего алгоритма.

Шаг 1. Инициализация параметров моделирования. Выбор режима сканирования (и способа детектирования сигнала для пульсирующего режима). Импорт исходного черно-белого изображения доменной структуры.

Шаг 2. Перевод изображения в матрицу пирооткликов γ_{ij} (в нормированном

виде: $\gamma_{ij} = \pm 1$). Считывание размерности матрицы пирооткликов ($N \times M$).

Шаг 3. Начало цикла по i , начало цикла по j ((i, j) , $i = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, M}$).

Шаг 4. Сканирование матрицы пирооткликов слева направо и сверху вниз (по всем позициям зонда). Определение местоположения (p, q) и ориентации доменных границ («продольный» элемент или «поперечный»), а также расстояний x , y от позиции зонда (i, j) до местоположения границы (p, q) .

Шаг 5. Расчет пироотклика для каждой позиции зонда (i, j) на основе суперпозиции вкладов диффузионных компонент всех элементов доменных границ (p, q) согласно выражению (6).

Шаг 6. Организация процедуры численного интегрирования по всей толщине кристалла d .

Шаг 7. Конец цикла по i , конец цикла по j .

Шаг 8. Перевод рассчитанной матрицы пирооткликов в черно-белое растровое изображение.

Шаг 9. Экспорт результата в графический файл растрового формата. Вывод результата в графическую область.

Предложенный алгоритм был реализован в виде системы имитационного моделирования микрофотографий доменных структур сегнетоэлектриков произвольной конфигурации. В качестве среды программной реализации использован пакет прикладных программ Matlab, являющийся современным международным стандартом программного обеспечения в области математического моделирования. Обобщенная структура программного приложения показана на рис. 5.

Разработанное программное приложение состоит из основных частей: препроцессора (подготовка и проверка исходных данных модели); процессора (реализация вычислительного алгоритма математической модели); постпроцессора (графическая визуализация полученных результатов), при этом препроцессорная и постпроцессорная части функционально связаны с специальными системными модулями, реализующими пользовательский интерфейс.



Рис. 5. Обобщенная структура программного приложения.

Вычислительный эксперимент

Использование разработанной системы имитационного моделирования позволяет проводить вычислительный эксперимент по исследованию особенностей формирования видеосигнала в пирозлектрическом режиме РЭМ.

Визуализация микрофотографий доменных структур сегнетоэлектриков проводилась с учетом возможности выбора режима сканирования. На рис. 6 представлены модель кристалла с круглыми доменами различного радиуса и микрофотографии, построенный на основе расчетов для режимов постоянного и пульсирующего зонда (с регистрации действительной компоненты сигнала).

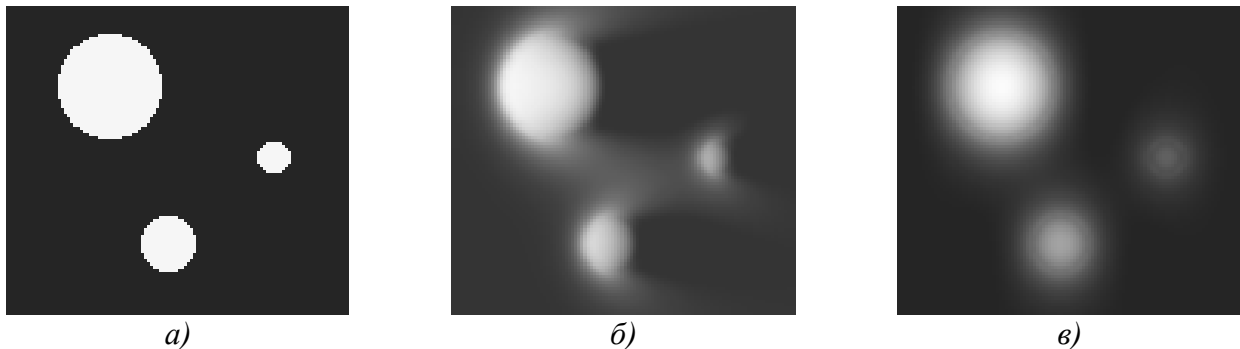


Рис. 6. Модельный кристалл с круглыми доменами – *a* и расчетные изображения: в режиме пирозонда постоянной интенсивности – *б* (скорость сканирования зонда v соответствует параметру $y_{sc} = 0.5$), в режиме пульсирующего зонда (регистрация синфазного сигнала, частота пульсаций зонда $\omega = 1/32$) – *в*. Размер среднего домена принят за единицу.

Анализ модельных изображений позволяет сделать вывод, что диффузионный характер распространения тепла приводит к размытию изображения на микрофотографии. Аналогичные закономерности наблюдаются и при визуализации доменных структур экспериментальными методами [4].

Использование модельного представления и возможностей вычислительного эксперимента позволили установить роль скорости сканирования зонда в формировании изображения пирозлектрическим методом. В режиме постоянного пирозлектрического зонда (рис. 6*a*) разрешение определяется скоростью сканирования зонда и зависит от ориентации границы. Ширина изображения перпендикулярной доменной границы определяется масштабом длины Пекле и уменьшается с ростом скорости движения зонда. Ширина изображения достаточно протяженной продольной доменной границы не может быть сделана малой, в этом случае рациональным представляется использование пульсирующего теплового зонда.

В случае формирования изображения пульсирующим пирозондом (рис. 6*б*) ширина как перпендикулярной, так и продольной доменной границы на микрофотографии определяется характерной частотой пульсаций зонда. Детальная структура границы будет зависеть от способа детектирования сигнала. Кроме того, универсальным фактором, ограничивающим разрешение изображения в растровом электронном микроскопе, является диаметр зонда. Однако неудачный выбор частоты пульсаций зонда приведет к размытию даже крупных по сравнению с диаметром зонда доменов.

Достоверность результатов моделирования обеспечивается применением фундаментальных законов теплопроводности и базовых соотношений, опреде-

ляющих пироэлектрический сигнал. Представленная модель, алгоритм и результаты компьютерного моделирования дают возможность проанализировать один из аспектов взаимодействия пучка электронов с сегнетоэлектриками и теоретически обосновать экспериментальную методику визуализации доменных структур в режиме пирозонда.

Кроме того, использование методов математического моделирования позволяет провести оценку роли теплового фактора в формировании контраста сегнетоэлектрических доменов в РЭМ при использовании иных, нестандартных режимов визуализации доменных структур, что представляет собой экспериментально трудноразрешимую задачу. В общем случае сложность постановки и проведения физического эксперимента обусловлена корпоративными процессами, сопровождающими воздействие электронного пучка на полярный материал, например, полевыми эффектами инжектированных зарядов.

Заключение

Таким образом, предложенный алгоритм и реализованная система имитационного моделирования изображений доменных структур сегнетоэлектрических кристаллов, наблюдаемых в режиме пироэлектрического зонда, предоставляют возможность проведения вычислительного эксперимента, отвечающего законам формирования изображения в РЭМ. Модельный расчет типичных структур свидетельствует, что электронный зонд не только регистрирует существующий потенциальный рельеф, но и сам формирует причины наблюдаемого контраста, создавая «активный», пироэлектрический режим зондирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Joy D.C. Monte-Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis. – New York: Oxford University Press, 1995.
2. Грачев Е.А., Устинин Д.М., Чуличков А.И. Линейные измерения в растровой электронной микроскопии на основе методов морфологического анализа изображений // Математическое моделирование. – 2003. – Т.15, №5. – С.47-53.
3. Масловская А.Г., Копылова И.Б. Взаимодействие электронных пучков средних энергий с сегнетоэлектрическими материалами – Владивосток: Изд-во "Дальнаука", 2010.
4. Sogr A.A., Maslovskaya A.G., Kopylova I.B. Advanced modes of imaging of ferroelectric domains in the SEM // Ferroelectrics. – 2006. – V. 341. – P.29-37.
5. Maslovskaya A.G. Simulation of ferroelectric domain structure imaging in pyroelectric mode by scanning electron microscopy // Ferroelectrics. – 2010. – V. 398. – P.55-63.
6. Лайнс М. Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы – М.: Мир, 1981.
7. Мартисон Л.К., Малов Ю.И. Дифференциальные уравнения математической физики – М.: МГТУ им. Баумана, 1996.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.А. Ереминым.

E-mail:

Масловская Анна Геннадьевна – maslovskayaag@mail.ru.