

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию **Чукалиной Марины Валерьевны**

«Измерительно-вычислительные методы рентгеновской диагностики для определения атомной и морфологической (пространственной) структуры материалов и изделий микро- и наноэлектроники», , представленную ею на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 2.2.2 Электронная компонентная база микро- и наноэлектроники, квантовых устройств.

Диссертационная работа М.В. Чукалиной посвящена разработке и исследованию измерительно-вычислительных методов рентгеновской диагностики, предназначенных для определения атомной и морфологической (пространственной) структуры материалов и изделий микро- и наноэлектроники.

Актуальность темы обусловлена стремительным развитием микро- и наноэлектронной промышленности, требующей высокоточных неразрушающих методов контроля характеристик материалов и компонентов на всех этапах технологического цикла. Использование новых материалов, повышение плотности интеграции, миниатюризация элементов выдвигают строгие требования к средствам метрологического контроля, в которых должны сочетаться высокое пространственное разрешение и высокая точность.

Рентгеновское излучение является одним из наиболее универсальных инструментов диагностики структуры веществ, однако существующие методы далеко не всегда обеспечивают требуемую точность и пространственное разрешение. Развитие неразрушающих измерительно-вычислительных методов, позволяющих восстанавливать параметры скрытой структуры объекта на основе косвенных измерений, делает необходимым уточнение математических моделей формирования сигналов и изображений, а также создания методов обработки регистрируемых сигналов и изображений. Именно этим вопросам посвящена представленная диссертация, в которой предложены новые решения для задач рентгеновской спектроскопии, флуоресцентной и абсорбционной рентгеновской томографии в условиях низкой радиационной нагрузки, анализа формы микропучков, применяемых в сканирующих методах.

Работа М.В. Чукалиной носит комплексный характер, объединяя теоретические исследования, разработку вычислительных методов, численные эксперименты и практическое внедрение полученных результатов в отечественных и международных научных центрах.

Достоверность и обоснованность результатов обеспечена корректной постановкой обратных задач, использованием современных методов численного анализа. Теоретические выводы подтверждаются численными экспериментами и натурными измерениями, проведёнными на установках исследовательского класса, включая источник синхротронного излучения ESRF.

Разработанное программное обеспечение прошло апробацию независимыми исследовательскими группами и используется в научных и прикладных задачах, что подтверждает воспроизводимость полученных результатов.

Апробация и публикации. Основные результаты диссертационной работы доложены на ведущих российских и международных конференциях. По теме диссертации опубликована 71 работа, из них 28 статей в журналах, рекомендованных ВАК, включая 26 публикаций в изданиях, индексируемых в Web of Science и Scopus, что полностью соответствует требованиям к докторской диссертации.

Теоретическая значимость работы заключается в развитии и обосновании математических моделей формирования рентгеновских сигналов и изображений, что позволило построить новые вычислительные методы для работы с рентгеновскими данными, в том числе томографическими. Разработанные подходы создают основу для дальнейшего совершенствования методов неразрушающего контроля и дефектоскопии изделий микро- и нанoeлектроники.

Практическая значимость заключается в создании и программной реализации комплекса методов, обеспечивающих снижение радиационной нагрузки, сокращение времени проведения рентгеновской диагностики, повышение точности. Разработанные алгоритмы внедрены в программный продукт Smart Tomo Engine компании ООО «Смарт Энджинс Сервис» применяются в исследовательских проектах на синхротронных источниках излучения, что документально подтверждено.

Диссертационная работа Чукалиной М.В. имеет чёткую структуру, отражающую последовательное решение поставленных научных задач. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, включающего свыше 200 источников. Общий объём диссертации соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, и насчитывает более 350 страниц машинописного текста с иллюстрациями, таблицами и формулами.

Во **введении** обоснована актуальность выбранной темы и сформулирована основная цель исследования — развитие измерительно-вычислительных методов рентгеновской диагностики высокого разрешения для определения характеристик материалов и компонентов изделий микро- и наноэлектроники. Определены основные научные задачи, представлена научная новизна, изложены теоретическая и практическая значимость работы, указана степень достоверности результатов, формы апробации и публикации.

Первая глава носит обзорно-теоретический характер и закладывает основу диссертационного исследования. Автор представляет существующие подходы к измерению и моделированию рентгеновских сигналов и изображений, рассматривает существующие математические модели их формирования. Отмечены проблемы некорректности обратных задач, возникающих при работе с результатами лабораторных рентгеновских измерений вследствие невысокой интенсивности лабораторных рентгеновских источников, необходимости полихроматического зондирования для сокращения времени измерений. Приведены уточнённые модели формирования абсорбционных проекций, в том числе в условиях наличия сильно поглощающих включений. Эта глава создаёт теоретическую основу для дальнейшего построения вычислительных методов.

Вторая глава посвящена описанию предложенного автором метода вейвлет-анализа протяжённой тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (EXAFS спектров) с контролем размера ячейки спектральных характеристик, впервые позволивший связать базисные параметры материнского вейвлета и параметры геометрической модели окружения ионизируемого атома изучаемого материала. Показано, что предложенный метод позволяет выделять вклады различных атомов в координационной сфере без привлечения априорной информации. Результаты работы метода представлены на модельных и реальных

данных (в том числе приведен анализ спектров халькогенидных сверхрешёток Ge–Sb–Te).

Третья глава содержит описание разработанных Чукалиной М.В. вычислительных методов восстановления двумерных профилей протонных и рентгеновских микропучков, используемых в сканирующих диагностических системах и методах безмасочной литографии. Уточнена математическая модель формирования флуоресцентных сигналов при взаимодействии микропучка с ортотропной структурой, описаны алгоритмы восстановления профиля пучка по измеренным флуоресцентным картам. Рассмотрены как случаи использования сертифицированных эталонных структур, так и ситуации, когда эталон отсутствует. Разработанные методы позволяют повышать пространственное разрешение сканирующих рентгеновских систем и оптимизировать процедуры микроструктурирования поверхностей.

Четвёртая глава посвящена построению и исследованию вычислительных методов рентгеновской и рентгеновской флуоресцентной томографии. Рентгеновская флуоресцентная томография используется для определения пространственного распределения химических элементов в объёме образца. На основе уточненной автором модели формирования флуоресцентных проекций предложен итерационный метод реконструкции, не требующий введения априорных ограничений на распределение источников флуоресценции. Разработанный Чукалиной М.В. итерационный метод реконструкции пространственного распределения коэффициента линейного ослабления рентгеновского излучения по набору абсорбционных проекций демонстрирует высокую устойчивость к шуму. Это позволяет использовать его для работы с проекциями, собранными при малом времени экспозиции, т.е. в условиях низкой радиационной нагрузки на томографируемый объект. Это важное условие при использовании метода томографии для решения задач дефектоскопии и метрологического контроля изделий микро- и наноэлектроники. При применении метода рентгеновской томографии для контроля на конвейере не может быть гарантирована стабильность работы рентгеновского источника. В связи с этим особую значимость приобретает предложенный автором метод реконструкции по проекциям, собранным в условиях нестабильного радиационного выхода или интенсивности излучения.

В пятой главе автор рассматривает проблему возникновения искажений на реконструированных изображениях и описывает предложенные им методы реконструкции, понижающие выраженность искажений. Последовательно рассмотрены случаи малого числа проекций, неравномерного отклика ячеек позиционно-чувствительного детектора, отклонения положения оси вращения от ожидаемого, наличия сильно поглощающих включений в исследуемом объекте. Применение построенных и численно реализованных методов для работы с томографическими проекциями демонстрирует повышение точности реконструкции по сравнению с методами, предложенными ранее.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы проведенного исследования.

Автор подчёркивает, что разработанные измерительно-вычислительные методы рентгеновской диагностики обеспечивают повышение точности, снижение радиационной нагрузки при их применении для анализа материалов и изделий микро- и нанoeлектроники. Выделены перспективные направления дальнейшего развития работы, включая интеграцию предложенных методов с нейросетевыми подходами.

Таким образом, структура диссертации является логичной и завершённой. Каждая глава представляет собой самостоятельное, но связанное с последующими звено единой исследовательской концепции. Работа характеризуется достаточной теоретической проработкой, большим объёмом оригинальных результатов, обоснованностью выводов и высокой степенью экспериментальной проверки.

Несмотря на это есть отдельные замечания, которые носят дискуссионный характер и не влияют на общую положительную оценку:

1. На странице 177 приведено утверждение, что реализации алгебраических методов требуют для расчета градиентов хранения решений на последовательных итерациях, т.е. быстро растут требования по памяти. Хотелось бы видеть сравнение требований для методов, традиционно используемых для реконструкции.

2. Поскольку время вычислений в томографии является важным параметром для оценивания предлагаемого метода, то хотелось бы видеть оценку по производительности для флуоресцентной томографии.

3. Автоматический метод коррекции артефакта на ужесточение пучка имеет точное решение для однокомпонентных объектов, но что можно о нем сказать при применении к двух- или многокомпонентных объектов?

4. При реализации метода флуоресцентной томографии автор проводит эксперименты с тестовым образцом на основе кварцевого капилляра диаметром около 160 мкм и толщиной стенок 10 мкм, заполненный кварцевыми зернами (диаметром ≤ 10 мкм), пропитанными 0,1-1 % солевыми растворами K, Fe, Cu, As и Y. Возможно ли использование метода для микроэлектроники, например при оценке распределения примесей (азот, бор и другие) в объемных монокристаллах карбида кремния или алмаза? Какова минимальная определяемая концентрация примесей, каковы условия, необходимые для такого эксперимента?

5. Автор использует термин «дозовая нагрузка», хотя он более применим к медицинским рентгенологическим и томографическим исследованиям. Применительно к неживым объектам корректнее было бы использовать термин «радиационная нагрузка».

Заключение

Диссертационная работа М.В. Чукалиной «Измерительно-вычислительные методы рентгеновской диагностики для определения атомной и морфологической структуры материалов и изделий микро- и наноэлектроники» является завершённым самостоятельным научно-квалификационным исследованием, в котором решена актуальная научная задача — развитие вычислительных методов рентгеновской диагностики, обеспечивающих повышение точности и эффективности неразрушающего контроля изделий микро- и наноэлектроники.

Полученные результаты имеют существенную научную новизну, теоретическую и практическую значимость, достоверны и обоснованы, опубликованы в рецензируемых изданиях. Диссертация и автореферат удовлетворяют всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, установленным Положением о присуждении учёных степеней №842 от 24 сентября 2013 года, а ее автор Чукалина Марина Валерьевна заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по

