

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 на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 2.2.2 –электронная компонентная база микро- и наноэлектроники, квантовых устройств.

Современные технологии позволяют создавать новые функциональные материалы и системы нано- и микроэлектроники, рентгеновской оптики, литографии, телекоммуникаций, светоизлучающих приборов и т.д.. Все это стимулирует развитие новых методов неразрушающей диагностики и контроля качества различных материалов, включая твердотельные объекты, жидкофазные и органические соединения, медицинские изделия и многое другое. В этой области самыми перспективными являются методы, основанные на использовании рентгеновского и синхротронного излучения. Начиная с рентгеноструктурного анализа, появились новые направления исследований, таких как высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и рефлектометрия, фазовый контраст, когерентная брэгговская дифракционная визуализация, рентгеновская птихография, компьютерная рентгеновская томография и др. Все эти методы базируются на использовании источников синхротронного и рентгеновского излучения, включая рентгеновские лазеры на свободных электронах. Неразрушающее извлечение информации о внутренней структуре исследуемого объекта, его химической неоднородности, наличия в нем всевозможных включений и различного типа дефектов представляет собой решение уникальной технологической проблемы. Поэтому приведенные в диссертации исследования на основе методов EXAFS-спектроскопии и компьютерной рентгеновской томографии являются весьма своевременными, значимыми и актуальными.

Диссертационная работа М.В. Чукалиной состоит из введения, 5 глав и заключения, список литературы содержит 246 источников, объем составляет 327 страниц.

Во введении соискатель обосновывает актуальность темы диссертационной работы, формулирует ее цель и задачи, обсуждаются научная новизна, практическая и теоретическая значимость проведенных научных исследований, приводятся основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертационной работы приведен обстоятельный обзор существующих моделей формирования рентгеновских сигналов и изображений, на которые опираются построенные автором вычислительные рентгеновские методы определения атомного строения материалов и морфологической структуры изделий микро- и наноэлектроники. В частности, рассматривается параметрическая модель формирования дальней тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS-спектра). На ней базируется предложенный и описанный во второй главе метод вейвлет-анализа EXAFS-спектров с контролем размера ячейки спектральных характеристик, позволяющий определить параметры геометрической модели окружения ионизируемых атомов. Рассмотрены и проанализированы модели формирования рентгеновских флуоресцентных сигналов при сканировании объектов тонким протонным и рентгеновским пучком. Разработаны методы определения формы этих микропучков, что наглядно показано в третьей главе. Знание этой информации используется в сканирующих методах контроля элементного состава поверхностей исследуемого материала. Отметим, что знание формы микропучков позволяет повысить точность методов контроля и оптимизировать этапы безмасочной литографии. Завершается глава описанием моделей формирования рентгеновских и рентгенофлуоресцентных томографических проекций для монохроматического и полихроматического зондирования. Следует отметить, что два этих случая принципиально различаются подходами к линеаризации проекций, что впервые рассмотрено соискателем.

Во второй главе диссертации показан и детально проанализирован разработанный автором метод вейвлет-анализа EXAFS-спектров с контролем спектральных характеристик в зависимости от размера ячейки. Этот подход позволяет в геометрической модели окружения ионизируемого атома определять радиусы ближайших координационных сфер и элементный состав каждой сферы, что, несомненно, является заслугой автора. Этот метод существенно уменьшает временные затраты на подгонку параметров геометрической модели по сравнению с Фурье анализом. Особая заслуга М.В. Чукалиной состоит в том, что она предложила использовать размер ячейки в качестве критерия выбора одного из двух материнских вейвлетов (Morlet или FEFF-Morlet). Параметры вейвлета Morlet сопряжены с геометрической моделью окружения ионизируемого атома. Использование его в качестве материнского вейвлета позволяет определять количество типов рассеивателей в конкретной координационной сфере по числу максимумов вейвлет-карты на масштабе, равном радиусу координационной сферы. Для случая, когда использование вейвлета Morle невозможно в силу

невыполнения условия разрешимости, разработан метод построения вейвлета FEFF-Morlet для проверки гипотезы о наличии рассеивателей заданного типа в координационной сфере. В диссертации представлены результаты применения предложенного метода вейвлет-анализа EXAFS-спектров в задачах изучения состава границ раздела в слоях халькогенидных сверхрешеток и определения моделей атомного строения слоистых гидроксидов.

В третьей главе описан метод определения формы протонного и рентгеновского микропучка, основанный на математической обработке карт флуоресцентных сигналов, полученных при сканировании микроструктур с ортотропным профилем поверхности на однородной подложке. В случае регистрации сигналов от структур, для которых геометрия профиля и химический состав известны с высокой точностью, метод базируется на решении системы уравнений типа свертки, содержащих ошибку в правой части. Сформулирована оптимизационная задача с ограничениями в виде равенств. Ограничения наложены на высокие частоты Фурье спектра функции, описывающей форму микропучка. Задача решается методом Лагранжа. При отсутствии референсной структуры, уравнения содержат ошибку, как в правой части, так и в ядре. Для таких условий предложена дифференциальная схема определения значений функции, описывающей форму микрозонда. Следует отметить, что предложенный метод позволяет определять форму не только осесимметричных пучков.

Четвертая глава диссертации представляет разработанные автором вычислительные методы рентгеновской томографии, которые позволяют проводить изучение морфологической структуры, выполнять метрологический контроль и дефектоскопию узлов изделий без их разрушения. Обсуждаются два измерительно-вычислительных метода: метод рентгеновской флуоресцентной томографии, позволяющий контролировать элементный состав в глубоко скрытых слоях, и метод рентгеновской томографии, позволяющий восстанавливать внутреннюю морфологическую структуру компонентов и изделий. Разработанные в диссертации итерационные методы томографической реконструкции базируются на использовании уточненных моделей формирования проекций. Для каждого из рассматриваемых случаев сформулированы оптимизационные задачи и предложены методы их решения. В диссертации показано, что разработанный метод реконструкции с регуляризацией в виде нелинейного оператора повышает точность при работе с сильно зашумленными проекциями. Построенный метод томографической реконструкции позволяет работать с проекциями, которые зарегистрированы в условиях

нестационарной экспозиции. Это оказывается важным при организации потоковой томографической съемки, где могут возникать неконтролируемые сбои, например, в работе рентгеновского источника или измерительного оборудования. Выполнение томографического контроля в потоковом режиме накладывает строгие ограничения на время обработки регистрируемых данных. Соискателем отмечено, что ускорение контроля может проводиться разными способами, например, увеличением мощности вычислительных ресурсов, а также применением оптимизированных алгоритмов с заменой преобразования Радона на преобразование Хафа с более быстрыми вычислительными схемами. Эффективным является предложенный в диссертации метод автоматического уменьшения размера входных данных без потери точности реконструкции. В данной главе обсуждаются результаты применения рентгеновской флуоресцентной томографии для изучения роли ионных каналов в транспортировке ионов и использование метода для контроля процесса повторного осаждения элементов на краях отверстия, формируемого методом лазерной абляции.

Последняя, пятая глава посвящена решению задачи определения точности томографической реконструкции и представлению разработанных в диссертационном исследовании методов, понижающих выраженность искажений, которые возникают на реконструированных цифровых изображениях по причине отклонения условий томографического измерения от используемых в моделях аппроксимаций. В деталях рассматриваются следующие проблемы: неравномерный отклик ячеек позиционно-чувствительного детектора, приводящий к возникновению кольцевых артефактов на восстановленном изображении при использовании алгоритмов реконструкции, не адаптированных к проблеме; отклонение реальных значений положения оси вращения от передаваемых в реконструктор значений, приводящее к размытию границ локальных областей на восстановленном изображении; зондирование полихроматическим рентгеновским излучением, приводящее к уменьшению значения коэффициента ослабления в центре объема по сравнению со значениями в приповерхностном слое для однородных объектов (так называемый “эффект чаши”). Предложенные методы численно реализованы, проведенное сравнение результатов работы предложенных методов с ранее известными подходами демонстрирует повышение качества реконструкции до 5 раз.

В заключении приведены основные результаты проведенных исследований, научная новизна и значимость которых не вызывает сомнений.

Автореферат диссертационной работы в полной мере отражает ее содержание. Таким образом, диссертационная работа является целостной, завершенной, имеет теоретическую и практическую значимость.

Тем не менее, возникает ряд вопросов, а также можно сделать основополагающие и несущественные замечания:

1. Обычно при сравнении экспериментальных измерений и результатов расчета необходимо учитывать так называемую инструментальную функцию. В диссертации об этом ничего не сказано. Вопрос: учитывалась ли инструментальная функция в процессе моделирования?
2. Как оценить точность результата реконструкции в том случае, если пренебречь преломлением рентгеновских лучей?
3. Какие специализированные критерии можно применить для оценки уменьшения выраженности артефакта, например, типа «чаши», при работе с полихроматическим излучением. Поскольку кроме этого артефакта есть и другие ошибки, то, как тестировать метод, направленный на уменьшение выраженности именно этого артефакта?
4. В диссертации рисунки 5.13 (стр.202); 5.14. (стр.204) и 5.16. (стр.208) визуально одинаковы. Поскольку в тексте отсутствуют графические и числовые оценки, как их отличить?
5. На стр. 78. представлен рисунок 2.15 — EXAFS сигнал $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида и амплитуда Фурье спектра сигнала. К подписи к рисунку не указано, какие кривые относятся к эксперименту, а какие к расчету.

Несущественные замечания:

1. На некоторых графиках отсутствует наименование координатных осей (стр. 61, рис. 21) или осей нет масштабной нумерации (стр.62, рис.2.2; стр.72, рис.2.9; стр.74, рис. 2.11).
2. На некоторых рисунках контуры сигнала (в основном экспериментальные) визуально проявляются, профили моделирования практически не видны (см., например, рис.3.2 на стр.91).
3. Как правило, на картах сигналов контуры равной интенсивности нумеруются, а также указывается, использовался линейный или логарифмический масштаб в изображении изолиний. Эта информация отсутствует в демонстрации рис.2.3 на стр.63; рис.2.6 на стр. 67 и рис.2.8 на стр.68.
4. Встречаются выражения, которые не укладываются в физические понятия, например, «монохроматическое зондирование бесконечно тонким рентгеновским пучком» или «параметры геометрии измерения известны с бесконечной точностью» (стр. 35)

Несмотря на сделанные замечания, можно дать высокую общую оценку диссертационной работы. В диссертации представлены новые измерительно-вычислительные методы рентгеновской диагностики высокого разрешения, имеющие существенное значение для развития методов неразрушающего контроля приборов микро- и нанoeлектроники. Актуальность, достоверность и обоснованность результатов не вызывает сомнений. Материалы исследований опубликованы в высокорейтинговых научных журналах, а так же докладывались на престижных международных и российских конференциях. 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, безусловно, заслуживает присвоения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 2.2.2 – электронная компонентная база микро- и нанoeлектроники, квантовых устройств.

Официальный оппонент:

д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник Физико-математического института Федерального исследовательского центра «Коми научный центр Уральского отделения Российской академии наук» (Физико-математический институт ФИЦ «Коми НЦ УрО РАН»)

 Пунегов Василий Ильич
18 декабря 2025 г.

Согласен на обработку персональных данных:

 Пунегов Василий Ильич
18 декабря 2025 г.

Контактные данные: email: vpunegov@ipm.komisc.ru; punegov@rambler.ru

Телефоны: м.т. +7 912-869-85-61; р.т. +7(8212)391461; Факс: +7(8212)391451

Адрес места работы:

Физико-математический институт ФИЦ «Коми НЦ УрО РАН», 167982, Республика Коми, г. Сыктывкар, ул. Коммунистическая, д.24.

Подпись Пунегова В.И. заверяю:

Должность,



подпись

19.12.2025.

Главный ученый секретарь
ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

Д.В. Милохин

