Cмоделированные изображения многослойным методом в JEMS - Cubic Ni [001].

Параметры моделирования:

* Libra 200 HT;
* Ускоряющий потенциал 200 kV;
* Cc - 2.2 mm;
* Cs - 2.2 mm;
* C5 - 0.0 mm;
* Δf - 90 nm;
* dpa - 0.0005.

|  |  |
| --- | --- |
| Ni-001-Re.tif  **Рисунок 1.** Реальная часть изображения смоделированного многослойным методом в JEMS. Ni-001-Re.tif | D:\LEMOI\Multislice\docs\Profile Of Ni-001-Re.jpg  **Рисунок 2.** Профиль реальной части с центрального атома Ni. Profile Of Ni-001-Re.jpg |

|  |  |
| --- | --- |
| **Ni-001-Im.tif**  **Рисунок 3.** Мнимая часть изображения смоделированного многослойным методом в JEMS. Ni-001-Im.tif | **Profile Of Ni-001-Im.jpg**  **Рисунок 4.** Профиль мнимой части с центрального атома на изображении, смоделированного многослойным методом в JEMS. Ni-001-Re.tif |

|  |  |
| --- | --- |
| oneAtomInCenter_module.jpg  **Рисунок 5.** Изображение смоделированное на собственном программном обеспечении. oneAtomInCenter\_module.jpg | Profile Of oneAtomInCenter_module.txt.jpg  **Рисунок 6.** Профиль с изображения, смоделированного многослойным методом на собственном программном обеспечении. Profile Of oneAtomInCenter\_module.txt.jpg. |

|  |  |
| --- | --- |
| oneAtomInCenter_V.jpg  **Рисунок 7 .** Смоделированное распределение потенциала атома Ni [001]. oneAtomInCenter\_V.jpg | Profile Of oneAtomInCenter_V.jpg  **Рисунок 8.** Профиль распределения потенциала |

**Второй проход**

Существует целый ряд параметров, которые могут отрицательно повлиять пойти на результат моделирования изображения. Во-первых, достаточно подробно должна быть задана предлагаемая структура образца, как правило, в виде списка координат атомов и атомных номеров в объеме модели. Во-вторых, важно учесть толщину образца, так как при моделировании обычно рассчитывается длинная последовательность возможных толщин образца и сравнивается с экспериментом. В-третьих, необходимо учесть инструментальные или оптические параметры, такие как сферическая аберрация (Cs), апертура объектива и дефокусировка, все они должны быть определены. Как правило дефокусировка не известна заранее или изменяется в широком диапазоне (особенно при светлопольном фазовом контрасте). Поэтому часто рассчитывается серия дефокусировок для проведения сравнительного анализа. Есть также целый ряд параметров, таких как распространение расфокусировки, угол освещения и т.д., которые достаточно трудно оценить, но может в достаточно сильно влиять на результирующее изображение.

Есть также множество параметров, которые связаны исключительно с расчетом и не имеют ничего общего с микроскопом или образцом, однако могут критически повлиять на расчет. Эти параметры включают в себя размер выборки (размер пикселя) по образу и слои или сама толщина среза.

По существу, атомное ядро для таких масштабов является точечным зарядом (типичные ядерные размеры составляют порядка ). Это приводит к сингулярности для проекции атомного потенциала при (аналогично для трехмерного распределения потенциала). Ни один электронный микроскоп, который существует в настоящее время, не имеет достаточного разрешения, чтобы увидеть эту сингулярность, на практике, ограниченная разрешающая способность микроскопа приведет к дальнейшему размытию изображения, что исключит возможность наблюдения эффекта сингулярности на атоме. Беря это во внимание, была произведена оптимизация расчета проекции потенциала непосредственно вблизи ядра, для этого расстояние , заменялось на небольшое, но отличное от нуля , таким образом устраняя сингулярность.

В радиусе 0.1 А проекция атомного потенциала атома кремния равна 0.41 kV-A. Приведено изображение единичного атома кремния, на образце размером 50 А, размер изображения 512\*512.

|  |  |
| --- | --- |
| Si_one_V.jpg  Si\_one\_V.jpg | Profile Of Si_one_V.jpg  Profile Of Si\_one\_V.jpg |

Следующий этап, сделать тонкий фазомодулированный объект. Важно чтобы выполнялось следующее условие , в точке сингулярности. Рассеивающий параметр при энергии пучка 100 kV. Это означает, что единичный атом кремния производит смещение фазы 0.38 радиан и единичный атом золота создаст смещение фазы равное 1.34 радиан, для обоих результатов энергия пучка будет равна 100 keV, а радиус соответствует 0.1 А. Пример фазово-модулированного объекта приведен на рисунке **Si\_one\_T.jpg**, это комплексное изображение. Далее приведены реальная (Si\_one\_T\_Re.jpg) и мнимая часть (Si\_one\_T\_Im.jpg) и соответствующие им профили (Profile Of Si\_one\_T\_Re.jpg, Profile Of Si\_one\_T\_Im.jpg), из которых видно, что для реальной части в точке близкой к атому присутствует провал значения, а для мнимой части, отчетливо виден пик в точке лежащей рядом с атомом. Данные результаты полностью согласуются с табличными данными.

|  |  |
| --- | --- |
| *Si_one_T.jpg*  *Si\_one\_T.jpg* |  |
| *Si_one_T.txtRe.jpg*  *Si\_one\_T\_Re.jpg* | *Profile Of Si_one_T.txtRe.jpg*  *Profile Of Si\_one\_T\_Re.jpg* |
| *Si_one_T.txtIm.jpg*  *Si\_one\_T\_Im.jpg* | *Profile Of Si_one_V.jpg*  *Profile Of Si\_one\_T\_Im.jpg* |
| *C_Si_Cu_Au_U_H0.jpg*  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_H0.jpg* | *C_Si_Cu_Au_U_PhixH0.jpg*  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_PhixH0.jpg* |

***Третий проход***

Далее был произведено моделирование для следующей модели: 50 А \* 50 А, в которой в ряд расположены 5 атомов, слева направо C, Si, Cu, Au, U. Расстояние между атомами 10 А, следовательно их можно считать изолированными. Ускоряющее напряжение 200 keV. Сферическая аберрация 1.3 мм, дефокусировка 700 А и размером объективной апертуры 10.37 мрад.









Моделирование производилось в несколько этапов. В первой итерации предполагалось, Для случая когда **E = 1**, изменит вид частотная характеристика микроскопа. И соответственно будет другой вид у результирующего изображения.

|  |  |
| --- | --- |
| C_Si_Cu_Au_U_V.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_V.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U_T_Re.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_T\_Re.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_T_Re.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_T\_Re.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U_T_Im.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_T\_Im.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_T_Im.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_T\_Im.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Re.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Re.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Re.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Re.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Im.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Im.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Im.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Im.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |

*Второй случай когда A(k)*

|  |  |
| --- | --- |
| C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Re.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Re.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Re.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Re.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Im.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Im.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Im.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Im.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |

*Третий случай когда Es*

|  |  |
| --- | --- |
| C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Re.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Re.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Re.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Re.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Im.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Im.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U_TxPhi_Im.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_TxPhi\_Im.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |

***Сравнение результатов.***

|  |  |
| --- | --- |
| C_Si_Cu_Au_U.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |
| C_Si_Cu_Au_U.jpg  *C\_Si\_Cu\_Au\_U.jpg* | Profile Of C_Si_Cu_Au_U.jpg  *Profile Of C\_Si\_Cu\_Au\_U\_V.jpg* |