

Zielona Góra, 12.12.2014.

Recenzja rozprawy doktorskiej pt.

Symulacja obrazów mikroskopii jonowej i jej zastosowanie do ostrzy wolframowych pokrytych fasetkami

Daniela Niewieczerzała.

Przedstawiona do recenzji praca doktorska ma charakter teoretyczny i dotyczy opracowania modelu polowego mikroskopu jonowego i zbudowania odpowiedniego interfejsu programowego umożliwiającego przeprowadzanie wieloskalowych symulacji komputerowych obrazów w takim mikroskopie. Zbudowany model bezpośrednio nawiązuje do wynalezionej w 1951 roku przez Erwina W. Müllera mikroskopu jonowego (w literaturze anglojęzycznej występującego pod nazwą *Field Ion Microscope* (FIM)) i do wywodzącej się od tego mikroskopu współczesnej tomografii sondą atomową (w literaturze anglojęzycznej *Atome Probe Tomography* (APT)). Sposób przeprowadzenia eksperymentów komputerowych przez doktoranta i wyniki tych eksperymentów bezpośrednio nawiązują do prac doświadczalnych profesora Andrzeja Szczepkowicza co narzuciło dodatkową kontrolę nad modelem teoretycznym i właściwą interpretację wyników w tym bardzo trudnym zagadnieniu fizyki jakim jest obrazowanie badanych próbek. Zbudowanie symulatora mikroskopu jonowego, dalej będę używał skrótu angielskiego FIM dla mikroskopu jonowego, wymaga ogromnej wiedzy w zakresie fizyki ciała stałego, metod komputerowych, w tym związanych z optymalizacją w 3D i bezpośredniej korelacji z realnym eksperymentem. Wszystkie te warunki są spełnione w rozprawie doktorskiej. Zarówno rozprawa doktorska i opublikowane przez doktoranta prace mogą być przykładem jak powinny wyglądać prace teoretyczne w zakresie fizyki komputerowej w przypadku modelowania eksperymentu. Widać tutaj bardzo dobrą szkołę fizyki komputerowej grupy profesora Czesława Oleksego. Oprogramowanie symulatora FIM ma aspekt praktyczny wychodzący poza bezpośrednie zastosowanie dla mikroskopii jonowej. Doktorant wspomina o możliwości użycia tego oprogramowania w urządzeniach APT do tomografii lub w innych aplikacjach gdzie trzeba wyznaczyć pole elektryczne dla różnej konfiguracji elektrod. Jak najbardziej zgadzam się z sugestią doktoranta publikacji pełnego kodu źródłowego symulatora FIM w postaci kodu *Open-Source*. Uważam że to bardzo dobry pomysł, szczególnie w kontekście coraz powszechniejszego użycia różnego rodzaju wyspecjalizowanych ostrzy (ang. *tips*) w mikroskopach typu AFM czy STM, gdzie metodę opracowaną przez doktoranta można użyć do optymalizacji ich konstrukcji ze względu na

różne funkcje ostrzy.

Zasadnicza część rozprawy składa się z 5 rozdziałów i dodatku będącego opisem stworzonych pakietów oprogramowania, które w spójny sposób opisują realizację głównego celu pracy, tj. skonstruowanie trójwymiarowego modelu FIM.

Rozdział 1. jest przygotowaniem swojego rodzaju warunków brzegowych, kształtów elektrod i ich rozmiarów, do rozwiązań równania Laplace'a pozwalających na wyliczenie potencjału i pola elektrycznego w obszarze pomiędzy elektrodami.

Rozdział 2. dotyczy generowania próbek. Bardzo zainteresowało mnie przedstawione przez doktoranta zagadnienie fasetkowania zakrzywionych powierzchni i wykonane odpowiednie symulacje Monte Carlo w ramach modelu SOS. Zdaję sobie sprawę, że jest to bardzo trudne zagadnienie do symulacji komputerowej. Temat rozprawy doktorskiej nie pozwolił na rozszerzenie tego rozdziału aby napisać więcej o fizyce ale byłoby dobrze w tym miejscu nawiązać do konstrukcji G. Wulffa (1901r.) dotyczącej równowagowych kształtów kryształu a tym samym pozwalającej przewidzieć kształt i wielkość facetek dla różnych wartości indeksów Millera. W pewnym uproszczeniu, konstrukcja Wulffa sprowadza się do założenia że odległość w kierunku normalnym od wspólnego środka rozważanego kryształu do dowolnej zadanej powierzchniowej fasetki jest proporcjonalna do energii swobodnej powierzchniowej (napięcia powierzchniowego) dla tej fasetki. Jest to o tyle interesujące że doktorant ma model komputerowy, gdzie i tak wylicza pośrednio swobodną energię powierzchniową. Dodajmy, że metody Monte Carlo w zagadnieniach typu „*coarsening*” wymagają w przypadku kryształów z różnymi orientacjami (symetriami) bardzo dużych próbek do symulacji i długich czasów symulacji.

Rozdział 3. jest jednym z ważniejszych w rozprawie. Dotyczy metod obliczenia pola elektrycznego w przestrzeni mikroskopu pomiędzy próbką i ekranem. W tym celu należy rozwiązać równania Laplace'a z warunkami brzegowymi zadanymi kształtem elektrody wewnętrznej z próbką i ekranu wraz z odpowiednimi wartościami potencjału elektrycznego na nich. W przypadku, szczególnym kiedy elektrody są sferyczne i próbka jest półsferyczna doktorant podał rozwiązanie analityczne dla tego zagadnienia, które też jest później użyte jako test użytych metod numerycznych. W wykonaniu tego zadania doktorant zarówno używał swojego oprogramowania i algorytmów do dyskretyzacji powierzchni elektrod i próbek jak i tetrahedryzacji Delaunaya do dyskretyzacji przestrzeni mikroskopu przy pomocy biblioteki TetGen. Przy rozwiązywaniu równania Laplace'a zastosowana została metoda

elementów skończonych z wykorzystaniem biblioteki GetFEM. Dużą dokładność metody dało się uzyskać dzięki bardzo ciekawemu pomysłowi trzykrotnego rozwiązywania równania Laplace'a w coraz mniejszej objętości i coraz większej precyzji. Dowodem poprawności tego podejścia jest porównanie wyników symulacji w szczególnym przypadku rozwiązań analitycznych.

Rozdział 4. dotyczy bezpośredniej symulacji obrazów FIM poprzez wyznaczenie miejsc jonizacji cząstek gazu obrazującego, wyliczenie trajektorii jonów metodą dynamiki molekularnej, i zarejestrowania obrazu próbki. Wyniki wirtualnego mikroskopu porównane zostały z rzeczywistym obrazem FIM.

Rozdział 5. to dyskusja wyników symulacji komputerowych potwierdzająca jak ważny poznawczo jest wirtualny model mikroskopu FIM.

Doktorant, poza samym faktem zbudowania bardzo efektywnego oprogramowania dla mikroskopii FIM, uzyskał kilka ważnych praktycznych wyników, m.in. :

- (i) pokazał że deformacje obrazów FIM powierzchni badanych kryształów mogą być tak duże że uniemożliwiają użycie powszechnie stosowanej metody geometrii rzutowej,
- (ii) na przykładach pokazał przy pomocy modelu teoretycznego możliwości błędnej interpretacji wyników doświadczalnych obrazów FIM (przykład dwóch podwójnych krawędzi),
- (iii) zbadał wpływ powierzchni próbki i kształtu elektrod mikroskopu na deformację obrazu próbki,
- (iv) jest możliwość wykorzystania optymalizacji obrazu próbki z symulacji komputerowej do wsparcia analizy rzeczywistych obrazów FIM.
- (v) pokazana została możliwość użycia autorskiej metody wirtualnego mikroskopu FIM do szybkich symulacji w metodzie tomografii APT.

Uważam, że rozprawa spełnia ustawowe warunki stawiane przed rozprawami doktorskimi. Wyniki pracy doktoranta istotnie wpływają na pełniejsze rozumienie zagadnienia mikroskopii FIM i wnoszą nowe możliwości pełniejszej interpretacji obrazów FIM jak i pozwalają na uogólnienie użytej metodologii do ulepszenia obecnie stosowanego oprogramowania w tomografii APT.

Proszę o dopuszczenie rozprawy doktorskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Mironaw Duda