

## АЛГОРИТМИ І ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ РОЗВ'ЯЗКУ ДЕЯКИХ ЗАДАЧ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ ТА Х-ПРОМЕНІВ

Створено алгоритми і комплекс програм для обробки результатів електронної дифрактометрії, зокрема зображень ліній Кікучі, моделювання Х-променеви кривих методом частинок, обробки даних Х-променеви методів за допомогою штучних нейронних мереж. Розроблено алгоритми визначення структурних характеристик кристалів на основі аналізу розподілу інтенсивності зображень ліній Кікучі. Моделювання Х-променеви кривих методом частинок виконано для поверхонь зі складним рельєфом, де в алгоритмі враховано багатократні відбивання і заломлення Х-променів. Відновлення структурних характеристик досліджуваних зразків на основі Х-променеви кривих проведено за допомогою тришарової штучної нейронної мережі, а в якості методу навчання нейромережі використано зворотне розповсюдження помилки.

Algorithms and software for treatment of results of electronic diffractometry, in particular images of the Kikuchi lines, simulation of X-ray curves using particles, treatments of data of X-ray methods by artificial neural networks are created. The algorithms for determination of structural parameters of crystals on the basis of analysis of intensity distribution of the Kikuchi bands images are developed. Simulation of X-ray curves by the method of particles for surfaces with complicated relief is realized, the multiple reflections and refractions of X-rays in the software algorithm are taken into account. Reconstruction of structural parameters of the investigated samples on the basis of X-ray curves is realized by the three-layered artificial neural network, back-propagation of errors as the method of studies of neural network is used.

### Вступ

Розглянемо можливості комп'ютерної обробки результатів деяких перспективних методів діагностики твердого тіла за допомогою розсіяння електронів та Х-променів. Серед методів електронної дифрактометрії виділимо метод ліній Кікучі [1], а з Х-променеви методів – Х-променеви рефлектометрію і дифрактометрію [2, 3].

На картинах Кікучі спостерігається характерна система дифракційних ліній та їх перетинів (вузлів) у вигляді світлих і темних смуг (рис.1). Зміна координат перетинів ліній Кікучі та їх профілю розподілу інтенсивності містять інформацію про структурні характеристики кристалів: значення періоду ґратки, структурну однорідність тощо [4, 5]. Експериментальні зображення ліній Кікучі містять шум, а локальні зміни структури кристалів можуть приводити до змін зображень лише в діапазоні кількох пікселів. Аналіз зображень ліній Кікучі в ручному режимі є досить трудомістким і не забезпечує максимальної точності, тому виникла потреба у створенні спеціалізованого програмного забезпечення.

Метод Х-променевої рефлектометрії, заснований на явищі повного зовнішнього відбивання (ПЗВ) Х-променів, є ефективним у діагностиці стану поверхні твердого тіла [2]. Проте форма розподілу інтенсивності кривих ПЗВ дуже складно залежить від геометрії поверхні зразків, тому моделювання кривих ПЗВ аналітичними методами можливе лише для відносно простих профілів рельєфу поверхні (наприклад, синусоїдального). Одним із способів моделювання розсіяння Х-променів від поверхонь з складним рельєфом є метод частинок [6], що вимагає створення відповідних алгоритму і програми.

У загальному випадку залежність розподілу інтенсивності Х-променеви кривих від структурних параметрів зразків складна й неоднозначна, що значно ускладнює розв'язання оберненої задачі (відновлення структурних параметрів). Водночас для розв'язання подібних задач, наприклад, у сфері медичної й технічної діагностики, ефективно використовується новий метод – штучні нейронні мережі [7-8]. Використання штучних нейронних мереж для знаходження структурних параметрів зразків на основі даних Х-променеви

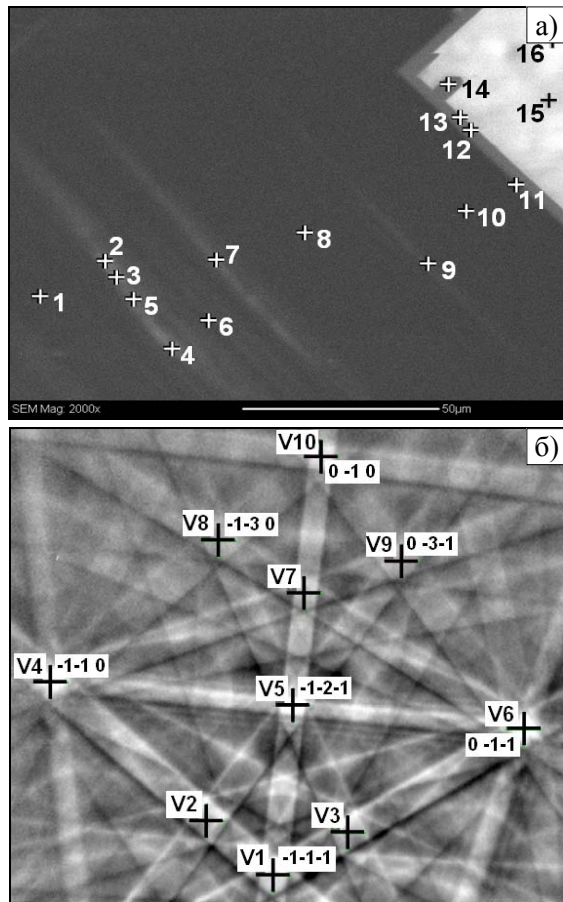


Рис. 1. Зображення фрагмента ( $140 \times 100 \text{ мкм}^2$ ) поверхні кристалу штучного алмаза, отримане за допомогою растрового електронного мікроскопу (цифрами вказані області №1–16, в яких отримані картини Кікучі) (а), картина Кікучі, отримана від області №1 (маркерами «+» відмічені вузли V1–V10 перетину ліній Кікучі [4]) (б)

методів потребує створення відповідного програмного забезпечення. При цьому вид і топологію штучних нейронних мереж потрібно вибрати відповідно до особливостей вхідних і вихідних даних X-променевого методів.

Мета даної праці полягає у створенні алгоритмів та комплексу програм для обробки зображень ліній Кікучі, моделюванні кривих повного зовнішнього відбивання X-променів методом частинок, обробці експериментальних X-променевого кривих за допомогою штучних нейронних мереж. Розроблений програмний комплекс складається з трьох програм для обробки картин Кікучі: *Image\_Compare*, *Image\_Profile*, *Fit\_Kikuchi*. Програма порівняння зображень *Image\_Compare*, яка використовує метод допустимих перетворень, нормалізує картини Кікучі однієї серії, максимально наближуючи зображення-зразок до еталону за масштабом, яскравістю, контрастом та іншими характеристиками. Програма *Image\_*

*Profile* зчитує зі зображення усереднені профілі інтенсивності вздовж вибраних напрямів. Програма *Fit\_Kikuchi* виконує аналіз профілів розподілу інтенсивності, наприклад, визначає відстань між мінімумом і максимумом профілю. Для моделювання кривих ПЗВ методом частинок на основі розробленого алгоритму створена програма *TER\_X\_Ray\_Part*. Моделювання штучної нейронної мережі, призначеної для знаходження структурних параметрів зразків на основі X-променевого кривих, виконано за допомогою програми *Neuro\_X\_Ray*. Всі програми реалізовані в середовищі *Delphi* [9].

## 1. Обробка результатів електронної дифрактометрії

### 1.1 Програма порівняння зображень

#### *Image\_Compare*

В якості початкових даних використано експериментальні зображення ліній Кікучі. Тестові картини Кікучі отримані для серії зразків синтезованих кристалів алмазу за допомогою скануючого растрового електронного мікроскопу фірми "Zeiss" *EVO-50* з використанням *CCD* – детектора (рис. 1) [4,10].

Для видалення високочастотного шуму зображення картини Кікучі оброблялися за допомогою програми, створеної в системі *MatLab* з використанням функцій пакету *Image Processing Toolbox* [11]. Використано фільтрацію зображень в частотній і просторовій області, зокрема низькочастотні фільтри Гаусса (*GLPF, Gaussian LowPass Filter*) і Баттєрворта (*BLPF, Butterworth LowPass Filter*).

Проблема аналізу картин Кікучі полягає в залежності координат перетинів ліній Кікучі (вузлів) не тільки від структурних параметрів досліджуваного кристалу, але й від умов експерименту. В залежності від експериментальних умов (кут падіння електронів на зразок, відстань від зразка до детектора електронів тощо) можливе зміщення вузла за шириною і висотою, стиснення або розтяг зображення вздовж різних напрямів, поворот, зміна середньої яскравості й інші спотворення. Тому основна задача розробленої програми полягає в компенсації різниці експериментальних умов для серії картин Кікучі, враховуючи можливі спотворення зображень і використовуючи метод допустимих перетворень. У загальному задача полягає у мінімізації невідповідності (різниці) між зображенням-зразком ліній Кікучі і зображенням-еталоном, отриманим від іншої області кристалу.

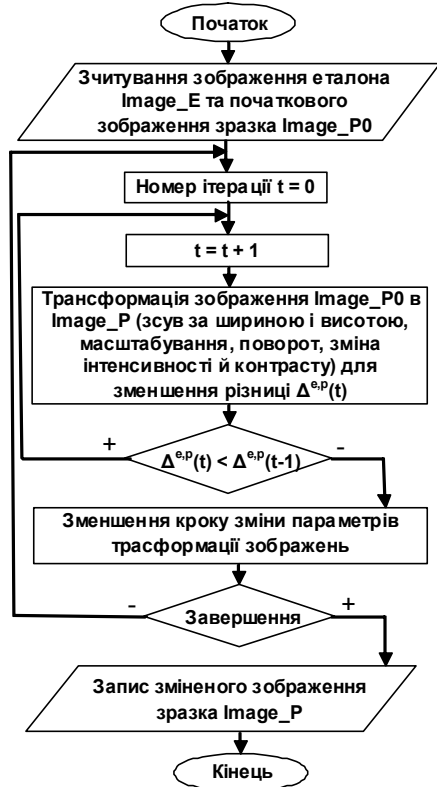


Рис. 2. Спрощений алгоритм програми *Image\_Compare*

Алгоритм роботи програми *Image\_Compare* наступний (рис. 2). Після зчитування зображення еталону і зразка ітераційно змінюються параметри трансформації зображень (зсув, масштабування тощо) в такий спосіб, щоб середня різниця яскравості  $\Delta^{e,p}$  відповідних пікселів зображень була мінімальною:

$$\Delta^{e,p} = \frac{1}{N \cdot M} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M \frac{|I_{i,j}^e - I_{i,j}^p|}{\max}, \quad (1)$$

де  $I_{i,j}^e, I_{i,j}^p$  – яскравості пікселів зображення еталону і зразка відповідно,  $N, M$  – ширина і висота зображення еталону в пікселях,  $\max=255$  – максимальне значення яскравості пікселів зображення.

Середня різниця яскравості  $\Delta^{e,p}$  пов'язана з кореляцією  $K$  між зображеннями: максимальному значенню  $K=1$  відповідає  $\Delta^{e,p}=0$ , а мінімальному значенню  $K$  – максимальне значення  $\Delta^{e,p}$ . Параметри трансформації змінюються спочатку з великим кроком, а в процесі наближення зображень крок зменшується до встановленого мінімуму [12]. Умовою завершення програми є мінімальне значення для кроку зміни параметрів або дії користувача (рис. 2). Після

програмної обробки розподіл інтенсивності картин Кікучі практично не залежить від умов експерименту, а визначається структурними параметрами дослідженої області кристалу.

### 1.2 Програма зчитування профілю розподілу інтенсивності *Image\_Profile*

Профілі розподілу інтенсивності, перпендикулярні певній лінії Кікучі, визначаються за допомогою розробленого алгоритму і програми *Image\_Profile* (рис. 3, 4).

Програма *Image\_Profile* дозволяє зчитувати окремі профілі, а також усереднювати серії профілів вздовж певного напрямку. За рахунок такого усереднення значно послаблюється випадкова складова інтенсивності (шум).

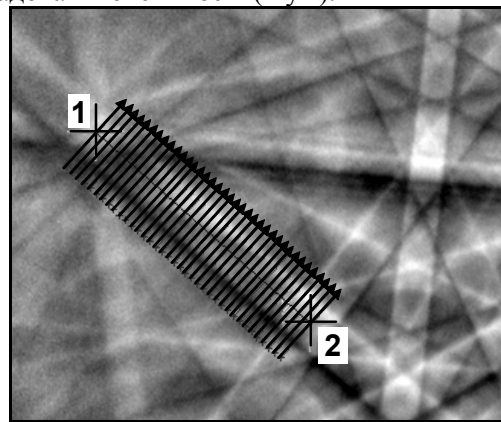


Рис. 3. Фрагмент інтерфейсу програми *Image\_Profile*: зчитування усередненого профілю  $y(x)$ , перпендикулярного напрямку лінії Кікучі між вузлами  $V2$  і  $V4$  (кристал алмазу, область №1)

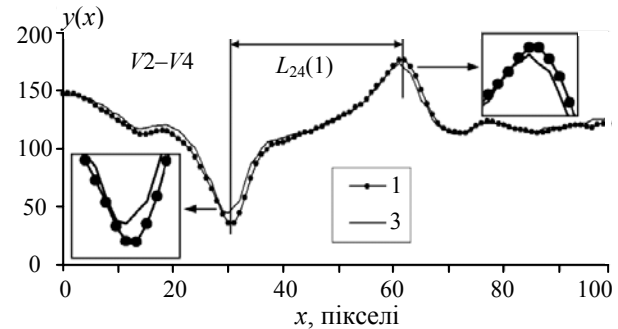


Рис. 4. Профілі розподілу інтенсивності для ліній Кікучі (кристал алмазу): область №1 (1), №3 (3). Ширина лінії між вузлами  $V2-V4$  для області №1 дорівнює  $L_{24}(1)=30,59$  пікселя, для області №3 –  $L_{24}(3)=30,43$  пікселя

### 1.3 Програма аналізу профілю *Fit\_Kikuchi*

Для точного визначення такого важливого геометричного параметра ліній Кікучі як відстань між екстремумами ліній (мінімумом і максимумом, темною і світлою смугою), створено спеціалізовану програму *Fit\_Kikuchi* (рис. 5). Алгоритм роботи програми наступний.

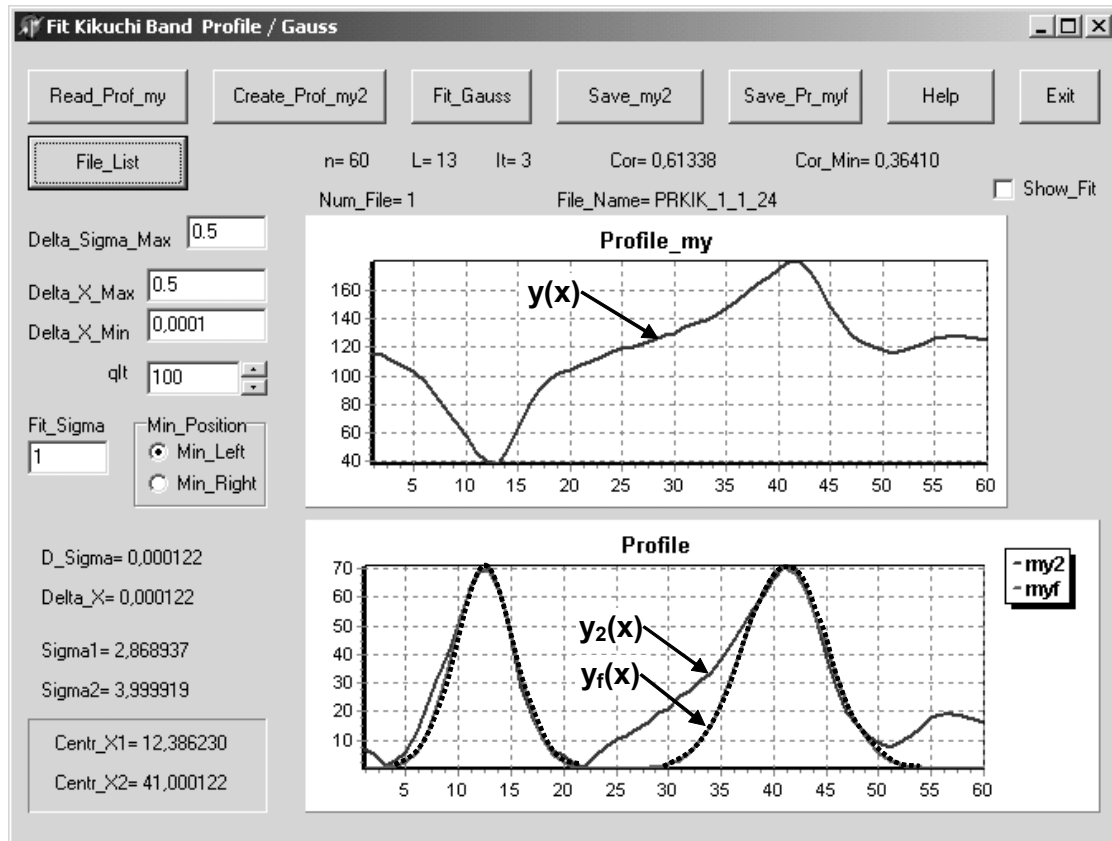


Рис. 5. Інтерфейс програми *Fit Kikuchi*: визначення відстані між екстремумами профілю лінії Кікучі (кристал алмазу, область №1, лінія між вузлами V2 і V4)

Початковий профіль  $y(x)$  (один мінімум і один максимум) зчитується з файлу і перетворюється у профіль  $y_2(x)$  (два максимуми). Перетворення  $y(x)$  в  $y_2(x)$  відбувається симетричним поворотом лівої частини профілю  $y(x)$  відносно середнього значення інтенсивності профілю. Максимуми профілю  $y_2(x)$  апроксимуються двома розподілами Гаусса  $G_1(x)$  і  $G_2(x)$  (2) з координатами центрів  $x_{C1}$ ,  $x_{C2}$  і середньоквадратичними відхиленнями  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  відповідно. Як апроксимуючу функцію вибрано нормальний розподіл Гаусса

$$G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_c)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2)$$

який точно описує форму більшості піків профілю. Сукупність розподілів Гаусса описується профілем  $y_f(x) = G_1(x) + G_2(x)$ . У процесі наближення  $y(x)$  до  $y_2(x)$  координати центрів  $x_C$  і середньоквадратичні відхилення  $\sigma$  розподілів Гаусса ітераційно змінюються шляхом мінімізації значення середньоквадратичної різниці

$$C_r = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_2(x) - y_f(x))^2}, \quad (3)$$

де  $n$  – кількість точок профілю.

Різниця профілів  $C_r$  розраховується тільки в діапазоні  $(x_C - \sigma, x_C + \sigma)$  відносно центру  $x_C$  кожного розподілу Гаусса, що дозволяє більш точно визначати координати піків (рис. 5). Умовою завершення програми є мінімальне значення для кроку зміни параметрів  $x_C$ ,  $\sigma$  або дії користувача.

## 2. Моделювання X-променевих кривих методом частинок

Метод частинок використовується для класу числових моделей, в яких дискретний опис фізичних явищ містить взаємодіючі частинки [6, 13]. Назва методу виникла з того, що в більшості випадків таким частинкам можна безпосередньо співставити фізичні об'єкти. Кожна частинка має набір атрибутів, таких як маса, координати, енергія тощо.

### 2.1 X-променева оптика

Для математичного опису методу ПЗВ X-променів використано наближення геометричної (френелівської) оптики [3]. У схемі комп'ютерного експерименту зразок нерухомий, а X-промені (частинки) падають на нього під кутом  $\omega$  і відбиваються під кутом  $\theta$  (рис. 6). Без врахування

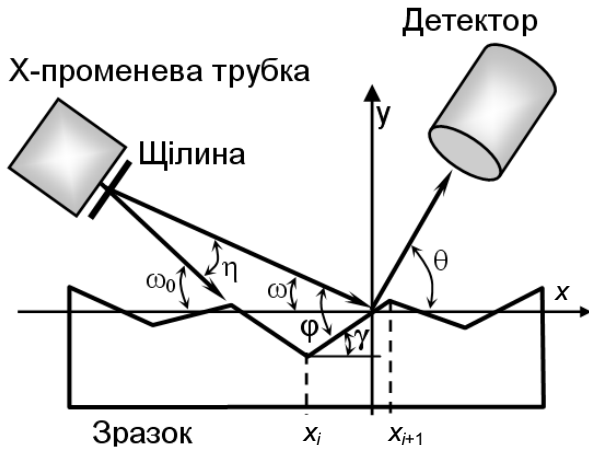


Рис. 6. Схема експерименту методом ПЗВ X-променів:  $\varphi$  – кут ковзання між падаючим променем і дотичною до поверхні розділу середовищ в точці падіння

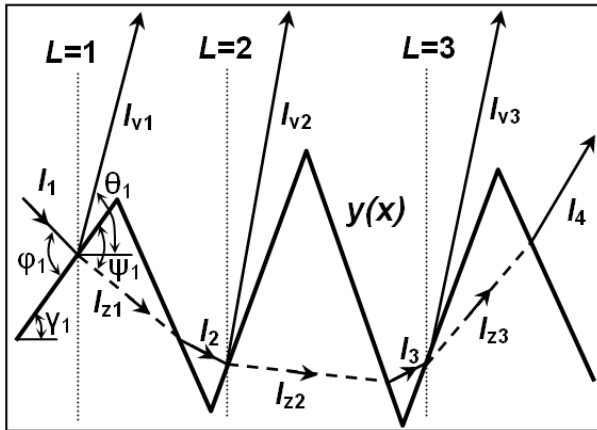


Рис. 7. Траєкторії X-променів при взаємодії з поверхнею зразка первинного променя з інтенсивністю  $I_1$ ,  $L$  – номер відбиття променів від профілю поверхні  $y(x)$ ,  $I_{vL}$  – інтенсивність відбитих променів,  $I_{zL}$  – заломлених променів,  $\psi_l$  – кут між заломленим променем і дотичною

кутового розсіяння промені падають на зразок під кутом  $\omega_0$ . Профіль  $y(x_i)$  поверхні зразка описується висотами у  $N$  дискретних точках  $x_i$ ,  $i=1, \dots, N$ . Відбиття X-променів розраховується від  $N-1$  мікроділянок профіля поверхні  $y(x_i)$ , які нахиленими під кутами  $\gamma$  по відношенню до середньої лінії профілю. На мікроділянки промені падають під кутом  $\varphi = \omega + \gamma$ . Кутове розсіяння падаючих променів за кутом  $\eta$  описується нормальним розподілом з середньоквадратичним відхиленням  $\sigma_\eta$ .

Детектор ділить діапазон  $\theta$  кутів відбиття променів на дискретні інтервали і фіксує інтенсивність променів для кожного інтервалу. У схемі фізичного експерименту для аналізу кутового спектру відбитих променів використовується кристал-аналізатор (метод трикристальної реф-

лектометрії – *angle-dispersive reflectometer*) [3]. У комп'ютерному експерименті аналізатор відсутній, а кутовий спектр відбитих променів розраховується програмно. При розрахунку кутового спектру та інтенсивності відбитих X-променів враховуються процеси відбивання, заломлення і поглинання (рис. 7).

## 2.2 Метод Монте-Карло

Частина атрибутів частинок (пучків X-променів) визначається на статистичній основі за допомогою випадкових чисел, тому таку процедуру називають вибіркою за Монте-Карло або методом статистичних випробувань [6, 14]. Наприклад, випадковим чином вибирається відстань променя від центра пучка і його відхилення  $\eta$  від кута  $\omega_0$  (рис. 6).

У випадку розрахунку кривої ПЗВ як досліджувану величину використовується розподіл інтенсивності кривої  $R_t$ ,  $t=1..Q$ . Інтенсивність кривої нормується в інтервалі 0..1. Для моделювання одної кривої виконується розрахунок розсіяння  $P$  променів. На основі вибірки з  $m$  кривих визначається середнє арифметичне значення для всіх  $Q$  точок:

$$R_t^c = \left( \sum_{j=1}^m R_{t,j} \right) / m, \quad (4)$$

де  $t=1..Q$  – номер точки кривої ПЗВ.

Для кожної точки  $t$  вибірки визначається середнє квадратичне відхилення

$$\sigma_t = \sqrt{\frac{1}{m} \left( \sum_{j=1}^m (R_{t,j} - R_t^c)^2 \right)} \quad (5)$$

і середнє квадратичне відхилення вибірки

$$\sigma = \left( \sum_t \sigma_t^2 \right) / Q. \quad (6)$$

Кількість випробувань (модельованих кривих ПЗВ)  $m$ , які забезпечать наперед задану верхню межу помилки  $\delta_t$  для розподілу інтенсивності результуючої кривої ПЗВ, визначається за співвідношенням

$$m = t_\gamma^2 s^2 / \delta_t^2, \quad (7)$$

де  $t_\gamma$  – значення аргументу функції Лапласа, при якому  $\Phi(t_\gamma) = \gamma_t / 2$ ,  $\gamma_t$  – надійність верхньої ме-

жі помилки  $\delta_t$ ,  $s = \sqrt{\frac{m}{m-1}} \sigma$ .

Результуюча крива ПЗВ отримується усередненням  $m$  розрахованих кривих.

### 2.3 Програма розрахунку кривих ПЗВ

Для розрахунку розподілу інтенсивності кривих ПЗВ методом частинок розроблено алгоритм і програмне забезпечення. Процес взаємодії одного пучка X-променів з поверхнею можна спрощено зобразити у вигляді графу (рис. 8).

Вершиною графу  $V_1$  є процес взаємодії з поверхнею первинного променя  $I_1$ . Далі сумарна інтенсивність первинного пучка ділиться між відбитим і заломленим пучками, а також зменшується за рахунок поглинання в матеріалі зразка. При кожному  $L$  відбиванні променів від поверхні їх кількість подвоюється. У такому випадку кількість вершин графу експоненційно збільшується при зростанні  $L$ . Для розв'язання цієї проблеми при кожному відбиванні розраховується подальший шлях тільки одного променя з максимальною інтенсивністю. Відбиті та частина заломлених променів формують розподіл інтенсивності кривої  $R_t$ .

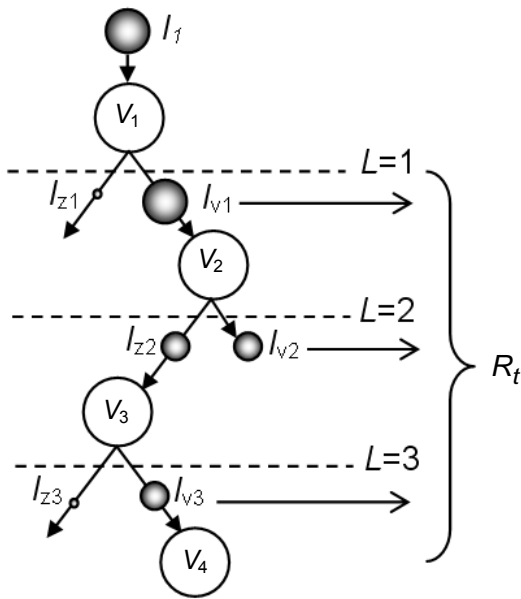


Рис. 8. Граф взаємодії X-променів з поверхнею. Розміри куль пропорційні до інтенсивності променів

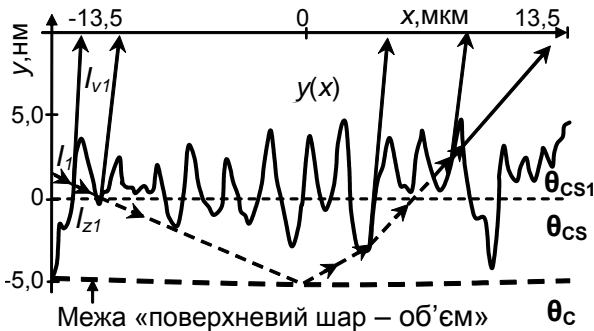


Рис. 9. Відбивання і заломлення X-променів ( $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -лінія) від профілю поверхні кристала GaAs, отриманого методом атомно-силової мікроскопії [13]

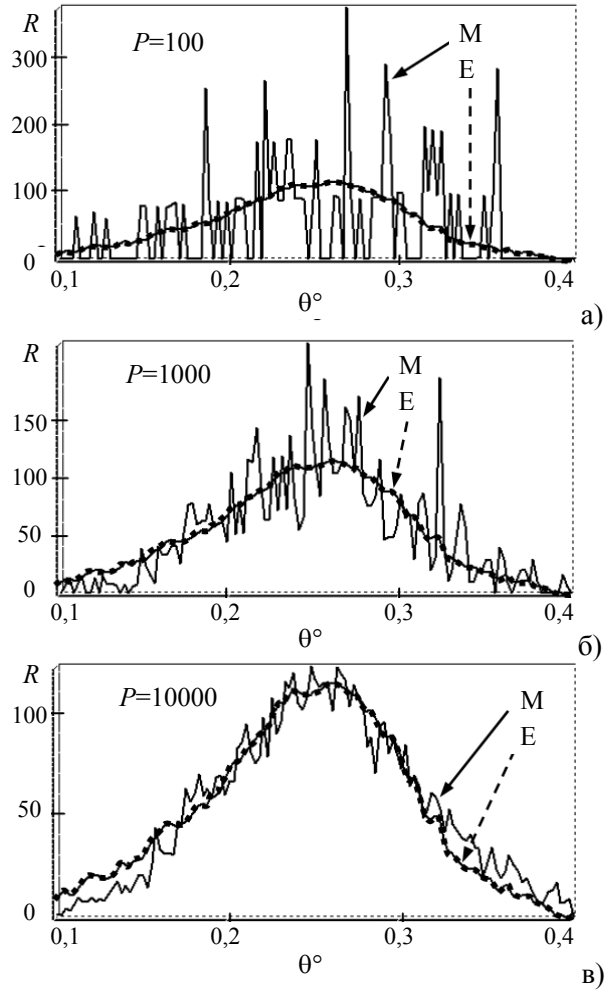


Рис. 10. Модельовані та експериментальні криві ПЗВ X-променів ( $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання), отримані від профілю поверхні кристала GaAs (кут падіння променів на зразок  $\omega=0,2$ : М – модельована крива, Е – експериментальна). Кількість частинок  $P=100$  (а), 1000 (б), 10000 (в)

За допомогою створеної програми виконано моделювання кривих ПЗВ на основі тестових профілів поверхні (рис. 9). Густина поверхневого шару значно нижче об'ємної, тому відбивання променів відбувається не тільки від межі поділу "повітря – речовина", але й межі поділу "поверхневий шар – об'єм".

Для невеликої кількості частинок  $P$  розподіл інтенсивності модельованої кривої є набором окремих піків, які отримані у результаті реєстрації детектором частинок (рис. 10а). При збільшенні кількості частинок  $P$  форма модельованої кривої ПЗВ наближається до форми експериментальної кривої (рис. 10б-в).

Створена програма дозволяє розраховувати фрактальний профіль поверхні  $y^f(x)$  як суму  $Q_p$  синусоїд з періодами  $S_p$  і амплітудами  $A_p$  [15-16]:

$$y^{fr}(x) = \sum_{p=1}^{Q_p} A_p \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{S_p}\right), \quad (8)$$

де  $A_p = A_{p-1}V_A$ ,  $S_p = S_{p-1}V_S$ , значення коефіцієнтів  $V_A \approx 0,6$ ,  $V_S \approx 0,65$  залежать від фрактальної розмірності профілю.

У першому наближенні фрактальний профіль розраховується за співвідношенням (8). Шляхом зміни амплітуд  $A_p$  синусоїд мінімізується різниця між модельованою і експериментальною кривими (рис. 10) і визначаються параметри профілю поверхні.

### 3. Обробка даних X-променевих методів за допомогою штучних нейронних мереж

Штучні нейронні мережі (*neural networks*) – надзвичайно спрощена модель біологічних нейронних мереж [7, 8]. Особливістю нейромереж (НМ) є те, що вони навчаються, а не програмуються. Існують програмні й апаратні моделі НМ,

але на сьогодні зазвичай виконують програмну реалізацію нейромереж. Виділяють наступні режими роботи НМ:

1. Навчання (відомі вхідні і вихідні дані, визначаються вагові коефіцієнти).
2. Тестування (відомі вхідні і вихідні дані, порівнюються розраховані вихідні дані з істинними).
3. Діагностика (реальне визначення результатів за вхідними даними).

Основними компонентами НМ є нейрони (*neurons*), які з'єднані зваженими зв'язками.

Нами використано тришарову нейронну мережу [17, 18], оскільки при меншій кількості шарів можливості мережі суттєво обмежені, а при більшій кількості шарів значно збільшується час розрахунку (рис. 11). Для навчання мережі використано алгоритм зворотного розповсюдження помилки.

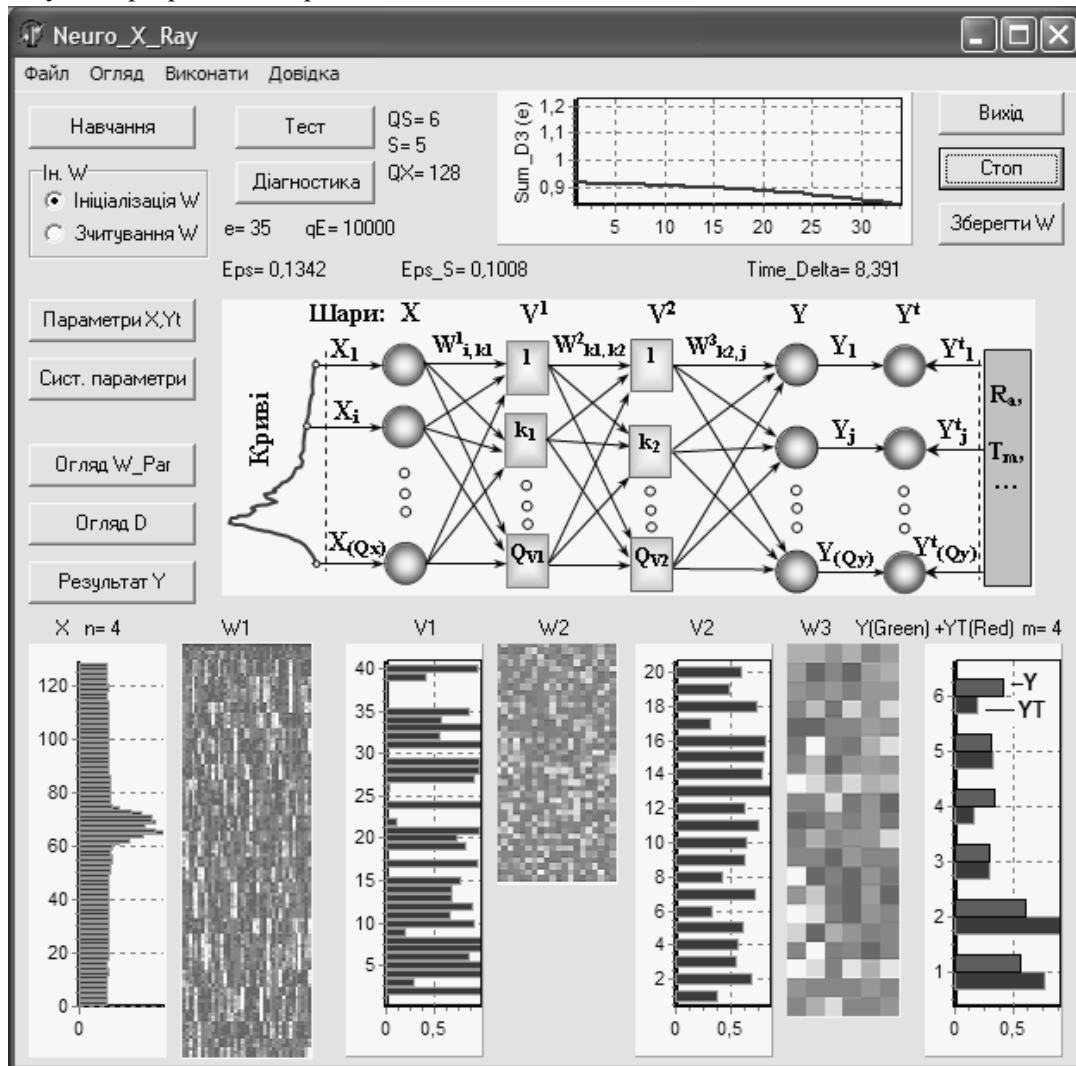


Рис. 11. Інтерфейс програми для моделювання штучної нейронної мережі:  $Y^t$  – правильний вихідний вектор,  $Y$  – вихідний вектор, розрахований за допомогою нейронної мережі

Таблиця 1. Структурні характеристики зразків CdTe, отримані за допомогою НМ (вектор  $Y$ )

| Зразок | Область | Вектор | Товщина області аморфізації $z_A$ , мкм | Густина дислокацій $n_n$ , $10^7 \text{ см}^{-2}$ | Глибина максимальної деформації $z_{max}$ , мкм | Максимальна деформація $\Delta d_{max}/d$ , $10^{-3}$ |
|--------|---------|--------|---|---|---|---|
| №2     | 3       | $Y^T$  | 0,3                                     | 0,094   | 0,14  | 0,06  |
|        |         | $Y$    | 0,293                                   | 0,048   | 0,136   | 0,042   |
| №3     | 3       | $Y^T$  | 0,38                                    | 1,2   | 0,16  | 0,5   |
|        |         | $Y$    | 0,337                                   | 0,872   | 0,139   | 0,467   |

Як об'єкти дослідження (зразки CdTe №1-3) використано епітаксійні шари  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  (111) ( $x=0,252$ ), нарощені на нелегованих підкладках CdTe (111) [19]. Зразки №2 та №3 імплантовані іонами As з енергією  $E=100$  кеВ. Для зразка №2 доза імплантованих іонів  $D=10^{15}\text{см}^{-2}$ , а для №3 –  $D=1,2 \cdot 10^{15}\text{см}^{-2}$ . Для двох областей кожного зразка визначено їх структурні характеристики: товщину області аморфізації, значення густини дислокацій у припущенні їх хаотичного розподілу, глибину максимальної деформації, значення максимальної деформації (таблиця 1).

Усі зразки досліджені методом  $X$ -променевої дифрактометрії (для кожного зразка отримано декілька експериментальних кривих дифракційного відбивання). Як вхідні дані для НМ (вектор  $X$ ) використано значення інтенсивностей  $X$ -променевих кривих у  $Q_X$  точках, а як вихідні дані (вектор  $Y^T$ ) – структурні параметри зразків, а також енергію і дозу імплантованих іонів. Для навчання мережі використано вибірку, яка містила криві дифракційного відбивання і структурні параметри для двох областей зразків CdTe №2-3 (таблиця 1).

Тестування нейронної мережі проведено за допомогою контрольної вибірки кривих гойдання. У таблиці 1 вектором  $Y^T$  позначено відомі параметри зразків, а  $Y$  – визначені за допомогою НМ. Отримана похибка для тестових векторів (CdTe №2 (область 3) –  $\epsilon_k=0,015$ , CdTe №3 (область 3) –  $\epsilon_k=0,054$ ) перевищує помилку навчання мережі лише на порядок, що свідчить про задовільне відновлення структурних характеристик допомогою НМ.

### Висновки

1. Створено алгоритм і програму порівняння зображень, що дозволяє нормувати масштаб та інші геометричні характеристики серії картин Кікучі. Завдяки програмній обробці розподіл інтенсивності картин Кікучі залежить тільки від структурних параметрів кристалів, а не від геометричних умов експерименту.

2. Розроблено програмне забезпечення для

усереднення профілів розподілу інтенсивності ліній Кікучі вздовж певних напрямів, що значно ослаблює випадкову складову інтенсивності (шум).

3. Виконано апроксимацію профілів розподілу інтенсивності ліній Кікучі функціями Гауса за допомогою розробленого алгоритму і програми, завдяки чому підвищено точність визначення ширини ліній, а відповідно і структурних параметрів кристалу.

4. Розроблено алгоритм і програмно реалізовано моделювання кривих ПЗВ  $X$ -променів для профілів поверхні довільної форми із врахуванням багатократного відбивання, заломлення і поглинання  $X$ -променів. Новизна полягає у використанні методу частинок для моделювання кривих ПЗВ.

5. Створено програмну модель нейронної мережі, призначену для визначення структурних характеристик кристалів на основі їх кривих дифракційного відбивання. Проведено оптимізацію топології і параметрів навчання нейронної мережі з урахуванням специфіки  $X$ -променевих кривих. Новизна полягає у використанні штучних нейронних мереж для обробки кривих дифракційного відбивання.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Bubert H., Jenett H.* Surface and thin film analysis. – Wiley-VCH Verlag, 2002.
2. *Geue T., Henneberg O., Pietsch U.* X-ray reflectivity from sinusoidal surface relief grating // Cryst. Res. Technol. – 2002. – **37**, No.7. – P.770-776.
3. *Holy.V., Pietsch.U., Baumbach.T.,* High-resolution X-ray scattering from thin films and multilayers. – Berlin: Springer-Verlag, 1999.
4. *Ткач С.В., Кузьменко Е.Ф., Ткач В.Н. Гонтарь А.Г., Шульженко А.А.* Возможности цифровой растровой микроскопии высокого разрешения при исследовании структуры режущей двухслойной пластины // Сверхтвердые материалы. – 2003. – №5. – С. 24-30.
5. *Борча М.Д., Баловсяк С.В., Гарабазив Я.Д., Ткач В.М., Фодчук И.М.* Определение структурной неоднородности искусственных кристаллов алмазов



- методом Кікучі-дифракції // *Металлофізика і новіші технології*. – 2009. – 31, №7. – С.911-925.
6. Хокни Р., Іствуд Д. Численне моделювання методом частиц. – М.: Мир, 1987.
  7. Рутковська Д., Пилинський М., Рутковський Л. Нейронні мережі, генетичні алгоритми і нечіткі системи. – М.: Горячая линия - Телеком, 2004.
  8. Уосермен Ф. Нейрокомп'ютерна техніка. Теорія і практика. – М.: Мир, 1992.
  9. Архангельський А.Я. Програмування в Delphi 7. – М.: БИНОМ, 2004.
  10. Баловсяк С.В., Гарабажів Я.Д., Фодчук І.М. Програмний комплекс для аналізу ліній Кікучі // *Вісник Хмельницького національного університету*. Вип. 137, №4. – Хмельницький: ХНУ, 2009. – С.68-73.
  11. Гонсалес Р., Вудс Р., Еддінс С. Цифрова обробка зображень в середі MatLab. – М.: Техносфера, 2006.
  12. Гілл Ф., Мюррей У., Райт М. Практична оптимізація. – М.: Мир, 1985.
  13. Баловсяк С.В., Фодчук І.М. Програмне забезпечення для моделювання X-променевої кривої методом частинок // *Науковий вісник ЧНУ*. Вип. 426: Фізика. Електроніка (Тематичний випуск "Комп'ютерні системи та компоненти". Частина II). – Чернівці: ЧНУ, 2008. – С.74-80.
  14. Гмурман В.Е. Теорія ймовірностей і математична статистика. – М.: Высш. шк., 2003.
  15. Мандельброт Б. Фрактальна геометрія природи. – М.: Ін-тут комп'ютерних досліджень, 2002.
  16. Федер Е. Фрактали. – М.: Мир, 1991.
  17. Баловсяк С.В., Фодчук І.М. Використання штучних нейронних мереж для визначення параметрів напівпровідників за даними X-променевої методики // *Науковий вісник ЧНУ*. Вип. 420: Фізика. Електроніка. – Чернівці: ЧНУ, 2008. – С.45-51.
  18. Кутковецький В.Я. Розпізнавання образів: Навчальний посібник. – Миколаїв: Вид-во МДГУ ім. П. Могили, 2003.
  19. Заплитний Р.А., Каземірський Т.А., Фодчук І.М., Святюк З. Структурні зміни в епітаксимальних структурах, модифікованих іонною імплантацією // *Металлофізика і новіші технології*. – 2006. – 27, №8. – С.915-932.