

О.Синицына, А.Филонов, И.Яминский
sinitsyna@gmail.com

АНАЛИЗ И РАСПОЗНАВАНИЕ ГРАФИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В НАНОСКОПИИ

Сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ) позволяет исследовать поверхности твердых тел с разрешением вплоть до атомного [1], при этом могут регистрироваться различные сигналы: в сканирующем тунNELЬНОМ микроскопе (СТМ) измеряется туннельный ток между зондом и образцом [2], в атомно-силовом микроскопе (АСМ) – действующая на иглу сила [3], в ближнепольном оптическом микроскопе – интенсивность оптического излучения [4].

Данные СЗМ могут быть записаны с помощью матрицы, каждая ячейка которой соотносится с точкой поверхности и значение которой может соответствовать высоте поверхности, величине туннельного тока, силе отталкивания иглы от поверхности, другим сигналам. На экране монитора такая матрица обычно представляется двумя способами: значениям ячеек соответствуют определенные цвета (яркостное изображение) или строится трехмерное изображение.

При съемке изображения в СЗМ вносятся искажения, связанные с неидеальностью пьезокерамического сканера, шумами аппаратуры, внешними помехами, другими причинами. Специальные программы позволяют проводить коррекцию изображений, характеризовать структуру поверхностей и осуществлять статистический анализ объектов.

Основные программы для работы с данными СЗМ – FemtoScan Online (Центр перспективных технологий) [5], SPIP (The Scanning Probe Image Processor, Image Metrology) [6], WSxM (Windows Scanning x Microscopy, Nanotec Electronica S.L.) [7], Gwyddion [8]. Снимки экранов с программами приведены на рис.1–4. Информация о системных требованиях и функциях для работы с файлами представлена в табл.1.

РЕДАКТИРОВАНИЕ СЗМ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Основная задача редактирования – устранение возникающих искажений. К первичной обработке изображений можно отнести вычитание плоскости и поверхностей более высокого порядка, усреднение по строкам, коррекцию нелинейных

эффектов, фильтрацию шумов, восстановление поверхности с учетом формы иглы.

Наличие постоянного наклона может быть связано с формой образца, "аккуратностью" его установки и с температурным дрейфом. Значительный общий наклон мешает восприятию мелкомасштабных деталей изображения (рис.5а,б). В зависимости от причины постоянного наклона используются различные методы его коррекции: вычитание плоскости среднего наклона или поворот плоскости изображения.

В СЗМ сканирование производится построчно, причем за время прохода одной строки может произойти сбой. В результате на изображениях появляются ступеньки поперек оси быстрого сканирования (рис.5б). Для их устранения из каждой строки вычитается среднее значение или полиномы различной степени (рис.5в – средние значения высот всех строк совпадают).

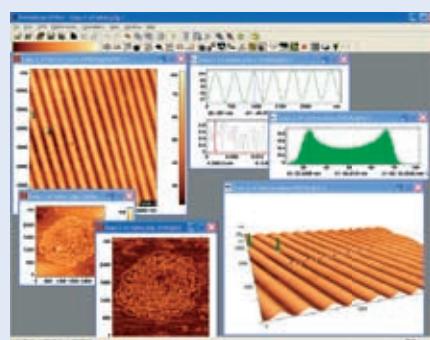


Рис.1 Программа FemtoScan

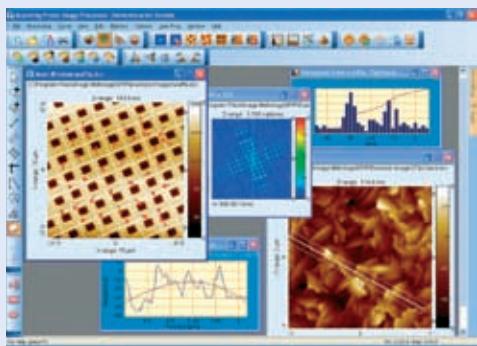


Рис.2 Программа SPIP

Важные аспекты – нахождение калибровочных коэффициентов по трем осям и корректировка деформации изображений, возникающих вследствие нелинейности, неортогональности и гистерезиса пьезосканера. Для этого сканируется периодическая структура, размеры которой хорошо известны. При изучении молекул, кластеров, монослоев роль такой структуры может выполнять атомная решетка подложки.

Для определения калибровочных коэффициентов в SPIP и WSxM по изображению автоматически строится двумерная сетка; в FemtoScan Online требуется ручное задание полилиний по узлам решетки; Gwyddion автоматически корректирует дрейф.

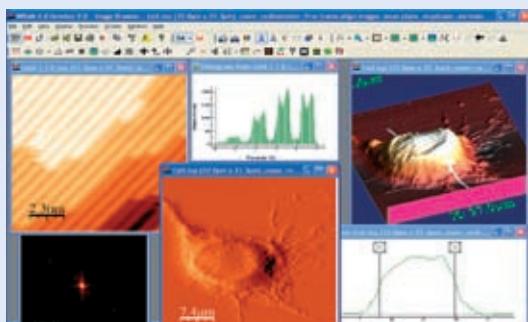


Рис.3 Программа WSxM

Фильтрация шумов. Хорошие результаты при удалении случайных выбросов дает медианная фильтрация, при которой не происходит сглаживания ступеней. В FemtoScan Online, SPIP, Gwyddion имеется широкий выбор окон медианного фильтра. В SPIP существует возможность ограничить общее число изменяемых точек, что уменьшает размытие изображения. В WSxM автоматически удаляются точки, значение сигнала в которых превосходит среднее на определенную величину: пользователь задает высоту порога и размер областей для расчета среднего.

Для устранения высокочастотного шума применяются различные фильтры, из которых самый простой – фильтр усреднения. Более стандартной техникой фильтрации шумов в любом диапазоне частот является Фурье-преобразование, реализованное во всех рассматриваемых программах.

Дополнительный источник артефактов – непосредственно игла зондового микроскопа, неидеальная форма которой приводит к уширению объектов.

Получение изображения $I(x,y)$ поверхности $S(x,y)$ иглой с формой острия $P(x',y')$ можно описать:

$$I(x,y) = \max_{(x',y')} [S(x-x', y-y') + P(x',y')]. \quad (1)$$

Операция называется делатацией объекта $S(x,y)$ со структурным элементом $-P(x',y')$, центр системы координат иглы совпадает с ее острием. По изображению $I(x,y)$ можно получить оценку сверху для формы иглы [9]. Форму зонда можно установить по специальным тестовым образцам, например массиву игл, выращенному на поверхности кремния или по изображениям иглы, полученным с помощью сканирующего электронного микроскопа.

Однако, зная даже точную форму зонда, восстановить истинную поверхность не удастся. Возможно получение лишь более близкой оценки ($S(x,y) \leq S'(x,y) \leq I(x,y)$) с помощью операции эрозия:

$$S'(x,y) = \min_{(x',y')} [I(x+x', y+y') - P(x',y')]. \quad (2)$$

FemtoScan Online, SPIP и Gwyddion позволяют определять форму иглы и реконструировать поверхность. В WSxM возможно только моделирование эффекта уширения изображения (параметры иглы задаются).

В табл.2 представлено краткое сравнение возможностей редактирования СЗМ изображений, реализованных в рассматриваемых программных продуктах.

АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ

После внесения необходимых правок в изображения можно перейти к их анализу. Как правило, интересует структура самой поверхности либо статистика, расположенных на ней объектов.

ХАРАКТЕРИСТИКА ПОВЕРХНОСТИ

Основные параметры, характеризующие свойства поверхности, можно разделить на амплитудные, функциональные, про-

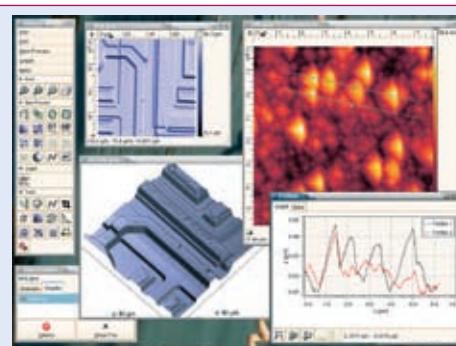


Рис.4 Программа Gwyddion



Таблица 1. Системные характеристики

	FemtoScan	SPIP	WSxM	Gwyddion
Операционная система	MS Windows	MS Windows	MS Windows	Linux, MS Windows, Mac OS X, FreeBSD
Диалог открытия неизвестных форматов	-	+	+	-
Пакетная обработка данных, макрокоманды	+	+	+	-
Возможность подключения модулей, плагинов	+	+	-	
Сохранение сессии	-	-	+	
Создание отчета (форматы)	-	.html .doc	-	-

пространственные и фрактальные [10]. Аналогичные параметры используют для характеристики профилей поверхности.

Простейшие амплитудные параметры – максимум, минимум, среднее значение, разность значений глобального максимума и минимума. К ним также относятся средние арифметическая и квадратичная шероховатость, асимметрия (S_{sk}), эксцесс (S_{ku}). Асимметрия и эксцесс определяются выражениями:

$$S_{sk} = \frac{\mu_3}{\mu_2^{3/2}}, \quad (3)$$

$$S_{ku} = \frac{\mu_4}{\mu_2^2}, \quad (4)$$

$$\mu_i = \frac{1}{NM} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^M [z(x_k, y_l) - \mu_1]^i. \quad (5)$$

где μ_1 – среднее значение высоты.

Эти параметры характеризуют симметрию распределения профиля относительно среднего значения и протяженность его распределения. Если значение асимметрии оказывается большим по модулю 1,5 – поверхность имеет сложную форму и не может адекватно характеризоваться средними значениями арифметической и квадратичной шероховатости. Значение шероховатости поверхности, как правило, растет с увеличением поля сканирования, а затем выходит на насыщение.

К функциональным параметрам относят индексы основной поверхности, сохранения гладкости поверхности, сохранения гладкости впадин, а также ряд параметров в стандартах DIN [11]. Параметры рассчитываются на основании кривой Абботта-Файерстоуна, показывающей, какая доля площади поверхности лежит выше заданной высоты. Данную кривую можно построить в программах SPIP и Gwyddion.

Группа пространственных параметров, характеризующих анизотропию поверхности и периодичность структуры, вычисляется по Фурье преобразованному массиву данных. К ним относятся радиальная длина волны, индекс ее направления, направление текстуры и его индекс.

Для профилей поверхности, получаемых с помощью СЗМ, значения фрактальной размерности изменяются от 2 до 3. Чем ближе это значение к двум, тем изучаемая поверхность более гладкая.

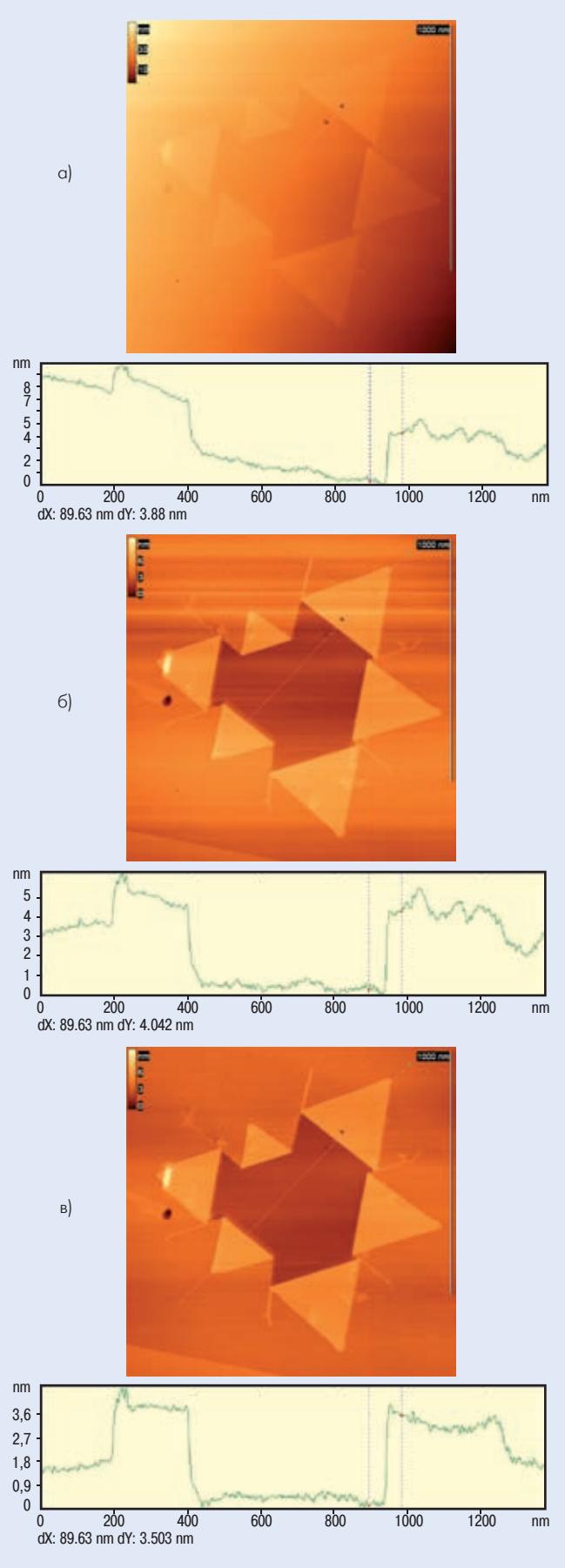


Рис.5 а) Изображение дефекта на поверхности графита, полученное с помощью АСМ, б) вычитание плоскости, в) усреднение по строкам

Таблица 2. Функции коррекции СЗМ изображений

	FemtoScan	SPIP	WSxM	Gwyddion
Покоординатное вычитание поверхностей	+	+	+	+
Наклон плоскости изображения	-	+	-	+
Выравнивание строк.	+	+	+	+
Автоматизированный поиск двумерной решетки	-	+	+	-
Фурье-фильтрация	+	+	+	+
Определение формы иглы и восстановление поверхности	+	+	-	+

Информация о наличии различных групп параметров поверхностей в рассматриваемых программах представлена в табл.3.

ПОИСК ОБЪЕКТОВ

Другая важная задача – нахождение объектов на поверхности образца. Для ее решения используются два основных метода: пороговая фильтрация и метод водораздела.

В первом методе задается уровень, все части поверхности, находящиеся выше него, считаются объектами. Способ хорошо работает для объектов, расположенных на плоскости. Если поверхность субстрата имеет значительные неровности, то при автоматическом поиске нельзя исключить ошибки. Существуют различные подходы для выравнивания поверхности, например, в FemtoScan Online реализована функция вычитания из СЗМ изображений спайна.

Метод водораздела дает лучшие результаты при разделении зерен или пор, отделенных друг от друга тонкими перегородками. (В WSxM отсутствует).

Для найденных объектов определяются периметры, высоты, площади, объемы, другие параметры. В FemtoScan Online, SPIP, WSxM возможен отсев объектов по каждому из параметров.

Специальные функции разрабатываются для анализа ступеней SPIP и Gwyddion позволяют определять высоту и другие параметры ступеней по стандарту ISO 5436. FemtoScan Online может обнаруживать ступени на поверхности кристалла, рисовать их профиль и находит структурную и автокорреляционную функции. Анализ шероховатости ступеней позволяет делать выводы о механизмах роста кристалла.

Для измерения параметров единичных объектов и структур в программы включены такие функции как определение расстояний, углов, проведения разрезов и другие. В FemtoScan Online объекты могут быть выделены с помощью изолиний, затем автоматически рассчитываются их периметр, площадь и объем.

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ, КРИВЫХ ПОДВОДА И ОТВОДА

Важная задача СЗМ – анализ данных спектроскопии, кривых подвода и отвода. В случае АСМ из этих кривых извлекаются такие параметры как коэффициент чувствительности канти-

левера, сила адгезии. FemtoScan Online и SPIP осуществляют предварительную обработку силовых кривых, находят локальные минимумы на силовой кривой и вычисляют параметры в приближении персистентной модели.

В туннельной микроскопии из зависимости туннельного тока от напряжения извлекают локальную плотность состояний, а из зависимости тока от расстояния между иглой и образцом – работу выхода. Специальные функции для работы с кривыми подвода и отвода и данными спектроскопии содержат FemtoScan Online, SPIP и WSxM. В них также возможна работа с трехмерными массивами, при создании которых в каждой точке поверхности снимается какая-либо зависимость.

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СЗМ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Так как для передачи значений измеряемой величины используется цветовая шкала, то от ее выбора во многом зависит качество изображения. Достаточно часто используются нелинейные шкалы или шкалы, адаптированные к определенному региону изображения, а также многоцветные палитры.

В некоторых случаях требуется увеличение резкости и контраста изображений. Для увеличения резкости конструируют фильтры, в центре ядра которых коэффициенты положительны, а по краям – отрицательные (рис.6).

Контраст может быть повышен разными способами. В SPIP реализованы два подобных фильтра. Первый вычитает из каждой точки изображения среднее арифметическое, рассчитанное по значениям точек в некоторой ее окрестности, второй – ставит в соответствие точке отношение стандартного отклонения для всего изображения к локальному стандартному отклонению. В Gwyddion для увеличения контраста растягивается диапазон значений в пределах окна фильтра. В FemtoScan Online для повышения контраста предусмотрен один из морфологических фильтров, представляющих собой комбинацию операций дилатации и эрозии.

Следующий ряд фильтров используется для улучшения восприятия изображений. Если в кадре имеется высокий объект, например бактерия (рис.7а), то маленькие детали оказываются почти незаметными, и для их отображения используется лишь малая часть цветового диапазона. В этой

Таблица 3. Функции анализа поверхности

	FemtoScan	SPIP	WSxM	Gwyddion
Амплитудные характеристики	+	+	+	+
Автокорреляционная функция поверхности	+	+	+	+
Спектральная функция шероховатости	-	+	-	+
Функциональные и пространственные параметры	-	+	-	-
Фрактальный анализ	-	+	+	+
Фурье-анализ	+	+	+	+
Вейвлет-анализ	-	-	+	+

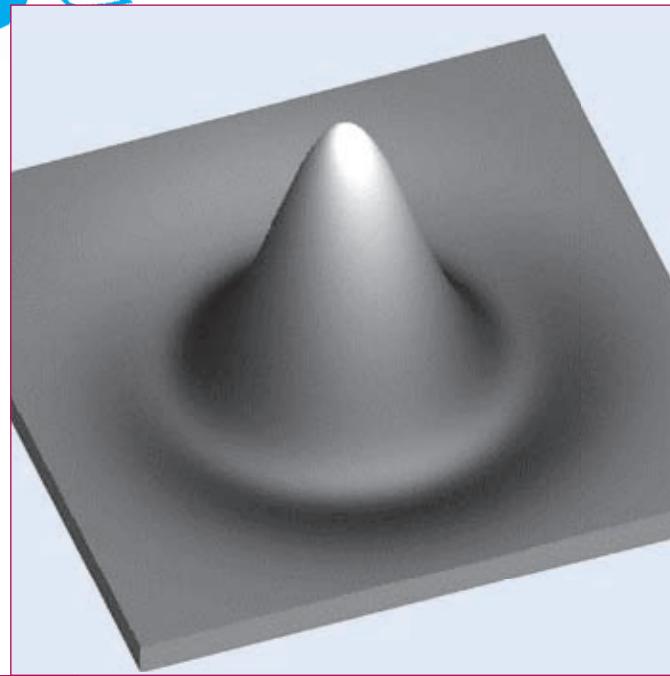


Рис.6 Изображение фильтра для увеличения резкости "мексиканская шляпа"

ситуации выгодно использовать подсветку (рис.7б), которая заключается в замене значения высоты на угол наклона поверхности, а также на синус или тангенс данного угла. FemtoScan Online позволяет использовать любую из описанных выше замен, возможна также настройка интенсивности фильтра. В Gwyddion пользователь может задавать произвольный угол подсветки.

Если заменять значения в точках на косинусы, то будет выявлен контур структур на поверхности (операция представлена в WSxM). Оконтурирование объектов также позволяет сделять различимыми маленькие детали одновременно с крупными. Так как на краях объектов высота, как правило, быстро возрастает или убывает, для оконтурирования используют градиентные операции, например замену высоты на модуль градиента профиля поверхности (рис.7в). В Gwyddion эффект оконтурирования достигают при расчете стандартных отклонений и степени нелинейности в окрестностях точек изображения. Дифференцирование по направлению дает сходные результаты с операцией подсветки.

Все программы позволяют создавать трехмерные представления СЗМ поверхностей (рис.7г). Возможна настраивание угла поворота изображения, параметров падающего света, свойств материала и других опций. FemtoScan Online и SPIP позволяют создавать видео ролик пролета над поверхностью. Для этого следует задать лишь несколько трехмерных видов, переход между которыми осуществляется автоматически. В FemtoScan Online могут создаваться стереоизображения.

SPIP и WSxM предоставляют возможность создания видео ролика на основе группы последовательно снятых кадров, что позволяет наглядно представлять информацию об измене-

ниях, происходящих на исследуемой поверхности, с течением времени.

Описанные выше программные продукты направлены преимущественно на работу с результатами сканирующей зондовой и электронной микроскопии. В области обработки графических данных, полученных методами оптической микроскопии, можно выделить:

- AxioVision (Carl Zeiss) [12] – позволяет обрабатывать данные всех типов оптической микроскопии;
- ImageJ [13] – работа с изображениями, полученными на конфокальном микроскопе.

Все перечисленные программные продукты позволяют провести полный цикл обработки данных микроскопии, включающий коррекцию изображений, их анализ и презентацию. У каждой программы есть свои сильные и слабые стороны.

Наибольшие возможности при работе с единичными объектами в пределах кадра предоставляет FemtoScan Online. В SPIP повышенное внимание уделено европейским стандартам для характеристики поверхностей. Gwyddion располагает наиболее широкими возможностями для аппроксимации статистических кривых.

Для работы с большими массивами однотипных данных требуется автоматизация их обработки, что предусмотрено в SPIP. Определенные шаги в этом направлении предприняты в программах FemtoScan Online и WSxM. Преимуществом и недостатком ImageJ одновременно является ее ориентированность на конфокальную микроскопию, вследствие чего в ней реализованы возможности по работе с последовательностью изображений, представляющих, например, серию срезов одного объекта.

Анализ ситуации подтвердил необходимость создания для обработки данных зондовой, оптической и электронной (сканирующей, просвечивающей) микроскопии программного обеспечения, адекватного по возможностям задачам современной науки [14]. Оно должно обладать интеллектуаль-

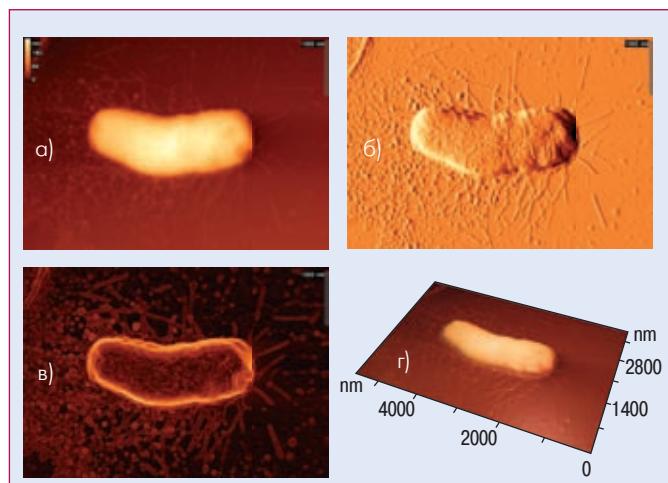


Рис.7 а) Изображение бактерии E-Coli, полученное с помощью АСМ, б) фильтр подсветки, в) градиентный фильтр, г) трехмерное представление

ными функциями обработки данных – выделения объектов, распознавания образов, многофакторного статистического анализа. Программное обеспечение должно иметь эргономичный интерфейс, быть адаптировано для работы в новых системах семейства Windows (*Windows Vista* и *Windows Server 2008*), иметь модульную структуру, с тем, чтобы модули, использованные для построения системы, могли быть сгруппированы в набор компонент, который можно использовать повторно для самостоятельной разработки программного обеспечения научно-исследовательскими организациями и производителями научкоемкой продукции.

Среди рассмотренных программ можно выделить пакет FemtoScan Online, обладающий широкими возможностями для полноценной обработки, анализа и представления результатов сканирующей зондовой, электронной и оптической микроскопии. В нем реализован ряд интересных алгоритмов, среди которых – выделение протяженных объектов, выделение и статистический анализ массива объектов, набор необходимых функций по обработке изображений. Продукт имеет русифицированный и эргономичный интерфейс, что особенно важно для его внедрения на отечественном рынке. Совместимость с современными операционными системами, поддержка распространенных форматов делает программный продукт универсальным. Модульная структура позволяет легко расширять его возможности без значительных изменений в основной программе.

В FemtoScan Online имеются модули с открытым кодом, и число их постоянно растет, что делает его особенно привлекательным для разработчиков и опытных пользователей.

Работа выполнена при поддержке Роснауки (проекты № 02.514.11.4102 и 02.512.11.2279), Научной программы НАТО (CBR.NR.NRSFPP 983204) и ОХНМ7 РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Москва, Техносфера, 2004, 144 с.
2. Binnig G., Rohrer H. Surface imaging by Scanning Tunneling Microscopy. Ultramicroscopy, 1983, vol. 11, pp. 157–160
3. Binnig G., Quate C.F., Gerber C. Atomic Force Microscope. Phys. Rev. Lett., 1986, vol. 56, pp. 930–933
4. Durig U., Pohl D.W., Rohrer F. Near-field optical-scanning microscopy. J. Appl. Phys. 1986, Vol. 59 (10), pp. 3318–3327
5. Программное обеспечение ФемтоСкан Онлайн [Электронный ресурс]. – <http://www.nanoscopy.net/rus/products/software/femtoscan.php>. – ресурс в Интернет
6. The Scanning Probe Image Processor, SPIP [Электронный ресурс]. – <http://www.imagejnet.com/index.php?main=products>. – страница в Интернет
7. www.nanotec.es
8. Gwyddion [Электронный ресурс]. – <http://www.gwyddion.net>. – ресурс в Интернет

9. Villarrubia J.S. Algorithms for Scanned Probe Microscope, Image Simulation, Surface Reconstruction and Tip Estimation. J. Nat. Inst. Stand. and Technol., 1997, vol. 102, pp. 435–454
10. Арутюнов П. А., Толстихина А.Л., Демидов В.Н. Система параметров для анализа шероховатости и микрорельефа поверхности материалов в сканирующей зондовой микроскопии. Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 1998, 9 (65), стр. 27–37
11. Mummery L. Surface texture analysis. The handbook. Hommelwerke GmbH, 1990
12. Карл Цейсс [Электронный ресурс]. – <http://www.zeiss.ru>. – ресурс в Интернет
13. ImageJ. Image processing and analysis in Java [Электронный ресурс]. – <http://rsbweb.nih.gov/ij/>. – ресурс в Интернет
14. Синицына О.В., Обработка и анализ данных зондовой микроскопии. Обзор программного обеспечения. Нано- и микросистемная техника. № 2, с. 2–7, 2007