

01

Моделирование некоторых свойств изображений с атомарным разрешением в сканирующем зондовом микроскопе

© А.А. Потапов,^{1,3,4} С.Ш. Рехвиашвили^{2,¶}

¹ Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

² Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН, 360000 Нальчик, Россия

³ JiNan University (JNU), Guangzhou, China

⁴ Cooperative Chinese-Russian laboratory of informational technologies and signals fractal processing of JNU-IREE RAS, JiNan University (JNU), Guangzhou, China

¶ e-mail: rsergo@mail.ru

(Поступило в Редакцию 9 января 2017 г. В окончательной редакции 7 декабря 2017 г.)

Разработана методика моделирования изображений в сканирующем зондовом микроскопе (СЗМ) с одновременным применением вейвлет-преобразования и медианной фильтрации. В работе использовалось вейвлет-преобразование с ядром Добеши 4-го порядка. Данное преобразование позволяет выделять на СЗМ-изображениях детали различных масштабов, что дает возможность исследовать фрактальные свойства поверхностей. С помощью моделирования показано, что сверхвысокое разрешение в СЗМ может соответствовать атомарному, если размеры контактной области в системе „зонд–образец“ намного превышает атомные размеры, а также имеется случайный разброс в расположении атомов решетки. Дано объяснение явлению инверсии контраста на СЗМ-изображениях в режиме многократного сканирования.

DOI: 10.21883/JTF.2018.06.46008.2159

Введение

В настоящее время мультимодовые сканирующие зондовые микроскопы (СЗМ) насчитывают десятки модификаций — от простейших учебных приборов до сложных сверхвысоковакуумных нанотехнологических комплексов, которые включают в себя сканирующий туннельный микроскоп (СТМ), атомно-силовой микроскоп (АСМ), сканирующий ближнепольный микроскоп (СБОМ), прецизионную оптику, молекулярно-лучевую эпитаксию, технику ионных и электронных пучков и др.

При практическом использовании СЗМ приходится сталкиваться с различными искажениями электрических сигналов — артефактами. Все артефакты в СЗМ можно разделить на два типа: приборные и физические. К приборным артефактам относятся перекрестные помехи, нелинейность сканера, запаздывание и старение пьезокерамики, сгеер-эффект, шумы в электрических схемах. Для их устранения используют программные и аппаратные средства коррекции. Физические артефакты обусловлены конкретными физическими явлениями в системе „зонд–образец“. К ним, в частности, можно отнести флуктуации туннельного тока [1], эффект двойной иглы [2,3], интерференция от зонда, капиллярное смачивание контакта [4]. В большинстве случаев физические артефакты устраняются изменением условий эксперимента, например изменением рабочих напряжений или токов, помещением измерительной головки в вакуумную камеру, сменой зонда и т. п.

Для изучения особенностей формирования изображений в СЗМ с атомарным уровнем разрешения в режимах АСМ и СТМ широко используется численное моделирование [5–11]. При этом для расчета силы взаимодействия между зондом и образцом производится суммирование парного межатомного потенциала взаимодействия; расчет туннельного тока учитывает волновые функции или структурно-зависимые электронные состояния зонда и образца. В настоящей работе предлагается формализованная математическая модель, в рамках которой предполагается, что результирующий сигнал (сила взаимодействия в АСМ или туннельный ток в СТМ) в системе регистрации СЗМ пропорционален количеству атомов, попадающих в зону контакта зонда и образца с кристаллической структурой поверхности. Для обработки получаемых изображений предлагается одновременно использовать вейвлет-преобразование и медианное сглаживание. Данная математическая модель позволяет исследовать такие важные факторы, как появление атомарного разрешения, влияние дефектов решетки, усиление или ослабление контраста изображений.

Математическая модель

Будем предполагать, что в СЗМ при сближении зонда с кристаллическим образцом образуется плоская контактная область, которая представляет собой окружность радиусом R (рис. 1). Эта окружность в процессе сканирования перемещается вдоль поверхности и заме-

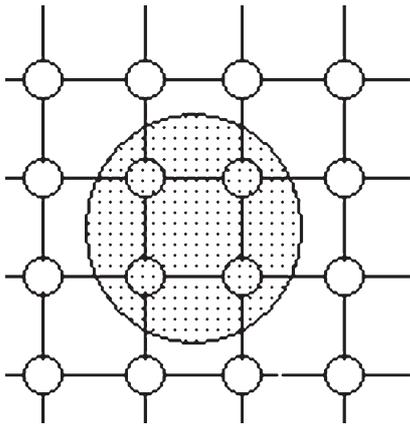


Рис. 1. Модель контакта в СЗМ.

тает некоторую часть атомов решетки, от количества которых зависит результирующий сигнал при формировании изображения. Число атомов внутри окружности равно

$$N(x, y) = \sum_i \sum_j \Phi(R^2 - (x - x_i)^2 - (y - y_j)^2). \quad (1)$$

$$\Phi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0, \end{cases}$$

где x и y — координаты центра окружности, соответствующие координатам зонда при сканировании, x_i и y_j — координаты узлов решетки, соответствующие атомам образца, $\Phi(x)$ — функция Хевисайда.

В работе [12] для обработки изображений и анализа физических процессов, происходящих в системе „зонд–образец“ АСМ, впервые предложено использовать непрерывное вейвлет-преобразование. Было показано, что вейвлет-преобразование позволяет эффективно решать задачу о подавлении шума на модельных АСМ-изображениях. В настоящей работе для аналогичных целей предлагается использовать дискретное вейвлет-преобразование с ядром Добеши 4-го порядка [13,14]:

$$f(t) = \sum_{j,k} c_{j,k} \psi_{j,k}(t), \quad (2)$$

$$\psi_{j,k}(t) = 2^{j/2} \psi(2^j t - k), \quad j, k \in I.$$

$$c_{j,k} = W\left(\frac{1}{2^j}, \frac{k}{2^j}\right), \quad W(a, b) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} u(t) \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt,$$

где $W(a, b)$ — функция, определяющая вейвлет-спектр, переменные a и b задают расширение и сдвиг для покрытия сигнала $t(t)$ базовым вейвлетом. Функция $\psi(x)$ выражается через коэффициенты Добеши [13,14]. Для покрытия всего сигнала короткими вейвлетами в (2) используются процедуры сдвига и масштабного преобразования. В итоге сигнал представляется совокупностью

параметрических „вейвлетных волн“, зависящих от частоты (масштаба) и координаты (сдвига). Как известно, основное преимущество вейвлет-преобразования перед фурье-преобразованием заключается в том, что оно позволяет эффективно обрабатывать сложные нерегулярные сигналы, следить за изменениями спектральных характеристик со временем и определять, какие частоты и масштабы преобладают в исследуемом сигнале.

В теории вейвлет-преобразования доказывается аналог теоремы Парсерваля, поэтому можно считать, что энергия сигнала пропорциональна квадрату соответствующего коэффициента разложения: $E \sim W^2(a, b)$. В связи с этим для подавления шума на СЗМ-изображениях можно использовать процедуру редактирования вейвлет-спектра, которая в нашем случае осуществляется следующим образом:

$$\tilde{W}(a, b) = W(a, b) \Phi(\pm |W(a, b)| \mp \Delta), \quad (3)$$

где Δ — уровень выделения спектра. Знаки в аргументе функции Хевисайда выбираются в зависимости от необходимости выделения нужных деталей в изображении: нижний знак ставится для выделения мелкомасштабных деталей в сигнале, а верхний — для выделения крупномасштабных деталей. В результате замены $W(a, b)$ на $\tilde{W}(a, b)$ в (2) получается отфильтрованный сигнал.

Для сглаживания помех, имеющих импульсный характер, нами выбрано медианное сглаживание (см. подробно [15]). Этот выбор обусловлен тем, что метод медианного сглаживания имеется в программном обеспечении современных СЗМ [16]. Суть метода заключается в выборе скользящего окна, которое охватывает нечетное количество точек изображения N . Центральная точка заменяется медианой всех точек в окне. При этом медианой для нечетного N является элемент, для которого существуют $(N-1)/2$ элементов, равных или меньших

```

G :=
  for i ∈ 0 .. N
  |
  |   for j ∈ 0 .. N
  |   |   p1j ← Mi,j
  |   |   pw ← wave(p1)
  |   |   for j ∈ 0 .. N
  |   |   |   pwj ← pwj · Φ(|pwj| - Δ)
  |   |   |   p1 ← iwave(pw)
  |   |   |   p2 ← medsmooth(p1, 5)
  |   |   |   for j ∈ 0 .. N
  |   |   |   |   p3i,j ← p2j
  |   |   |   p3
  |
  |
  |

```

Рис. 2. Фрагмент программы моделирования изображений в СЗМ.

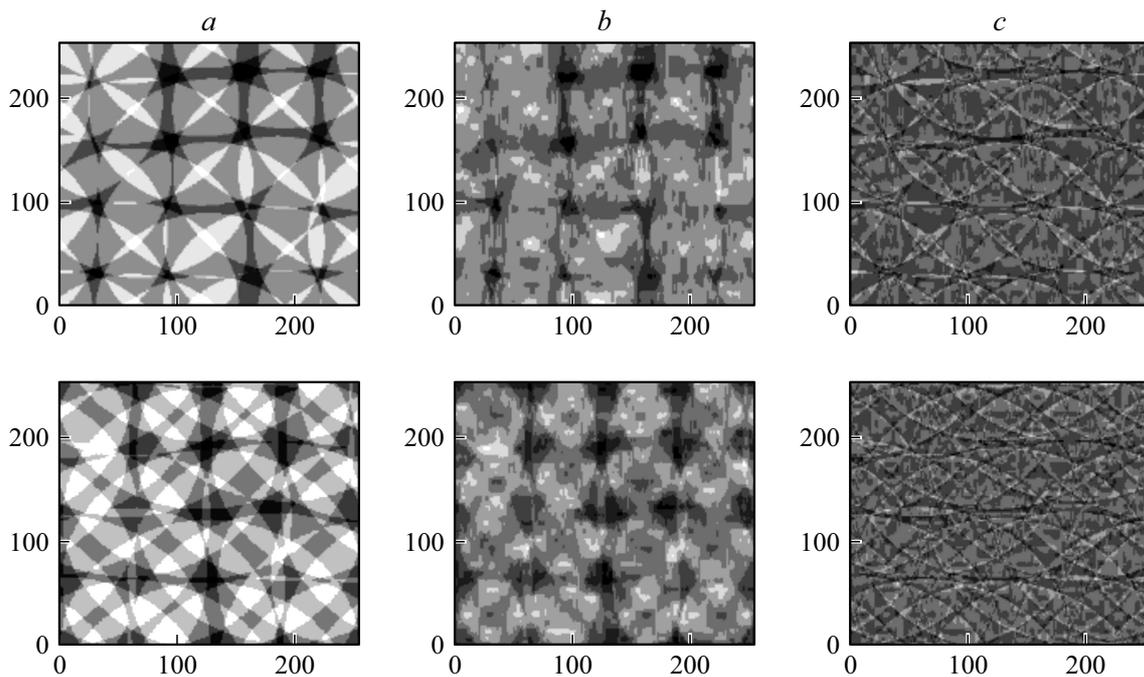


Рис. 3. Результаты моделирования квадратной решетки: *a* — исходные изображения, полученные по формуле (1); *b* — изображения, полученные в результате вейвлет-преобразования и медианного сглаживания; *c* — изображения шума.

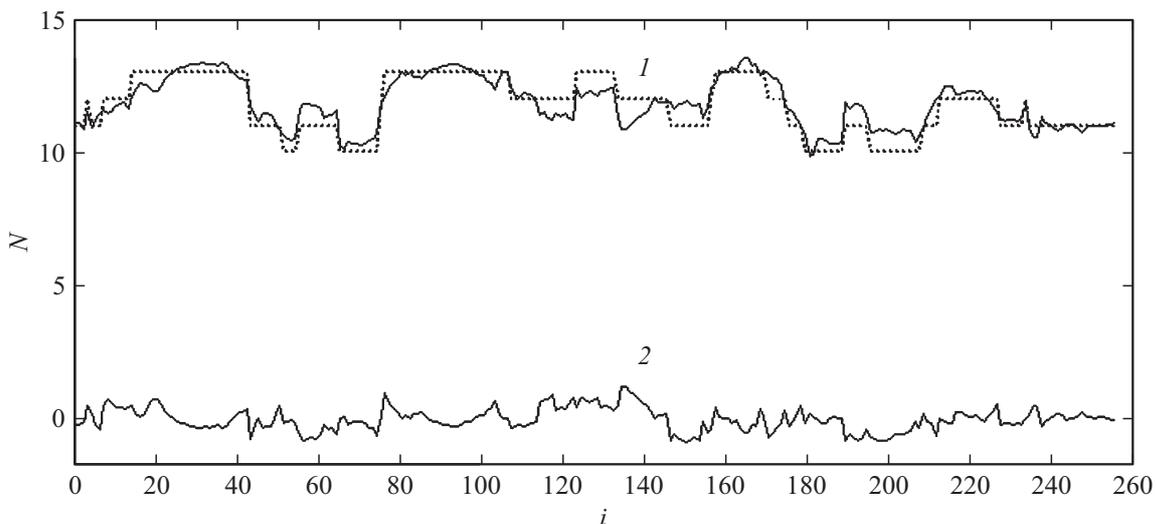


Рис. 4. Профили изображений: *1* — исходный профиль (пунктирная кривая) и результат сглаживания (сплошная кривая); *2* — сигнал шума.

ему по величине, и $(N-1)/2$ элементов, равных или больших ему по величине. В рамках рассматриваемой задачи проводилось сравнение медианного сглаживания со сглаживанием по методу наименьших квадратов. Авторы пришли к выводу, что данные методы здесь дают приблизительно одинаковые результаты.

В целях реализации описанной выше математической модели в работе применялись программа Mathcad и ее встроенные функции. Программный модуль, выполняющий вейвлет-преобразование с ядром Добеши 4-го

порядка и медианное сглаживание при $N = 5$, показан на рис. 2.

Результаты численного моделирования

В настоящей работе с помощью формулы (1) строились изображения простой квадратной решетки с единичным периодом ($d = 1$). Визуализировалась решетка размером 2×2 с числом разбиений 256×256 . Коор-

динаты узлов решетки x_i и y_j вычислялись с учетом разброса, который формировался с помощью генератора случайных чисел. Таким образом, поверхность представляла собой искаженную квадратную решетку, узлы которой располагались случайным образом в пределах заданного отклонения с нулевым математическим ожиданием. В вычислительном эксперименте изменялись степень искажения решетки, которая составляла определенную долю от периода решетки, радиус окружности R и уровень выделения спектра Δ .

Под атомарным разрешением здесь понимается однозначное и отчетливое воспроизведение структуры исходной решетки на изображении. Моделирование показывает, что изображения идеальной решетки передают атомарное разрешение без неустраняемых искажений, если радиус окружности превышает период решетки в десятки раз. Причем в этом случае существенная реконструкция изображений не требуется, поскольку они сохраняют регулярную структуру, соответствующую структуре решетки. Однако ситуация кардинально меняется, если $R > d$ и имеется случайный разброс в положении узлов решетки (атомов). На рис. 3 показаны результаты моделирования изображений при наличии случайного разброса величиной 2%. Уровень выделения спектра $\Delta = 1.5$, радиус окружности $R = 1.5d$ для верхних рисунков и $R = 2d$ для нижних рисунков. На рис. 4 показан пример получаемой функции профиля изображения вдоль одной линии сканирования.

Из рис. 3 можно видеть, что при наличии случайного разброса координат узлов увеличение радиуса R принципиально не приводит к исчезновению атомарного разрешения. При этом период чередования светлых пятен, отвечающих максимумам на этих изображениях, соответствует периоду исходной решетки. Если же радиус окружности больше периода решетки и случайный разброс координат узлов превышает 5%, то это влечет за собой исчезновение атомарного контраста изображения. Моделирование также показывает, что изменение радиуса на величину $\Delta R = d/2$ приводит к инверсии контраста, когда на изображении максимумы и минимумы меняются местами. На практике подобное явление часто наблюдается в СТМ и АСМ при многократном сканировании одного и того же участка поверхности в режимах регистрации тока или силы. По нашему мнению, данное явление может объясняться притуплением зонда или изменением общих условий измерений силы взаимодействия или туннельного тока в процессе сканирования. Явление инверсии контраста наблюдается также при моделировании контактного взаимодействия открытых однослойных и многослойных нанотрубок с поверхностью твердого тела [17]. При определенных сочетаниях периодов поверхностной структуры и радиусов нанотрубок происходит инверсия контраста изображений. Как выясняется, этот геометрический эффект вызван изменением эффективного числа атомов поверхности, попадающих в „поле видимости“ атомов углерода, локализованных на кончике нанотрубки.

Таким образом, можно сделать вывод, что асимметрия СЗМ-изображений, которая часто наблюдается экспериментально, может быть связана не только с физическими процессами в системе „зонд–образец“, но и с геометрией самой контактной зоны. В настоящей работе рассмотрены особенности формирования СЗМ-изображений с атомарным разрешением на примере простейшей кристаллической структуры. Однако известно, что для аморфных тел различной природы (полупроводниковых, диэлектрических, металлических) всегда имеется универсальный пространственный масштаб $\sim 1 \text{ nm}$ — своеобразный параметр порядка, который играет такую же важную роль, как элементарная ячейка для кристаллов [18]. Неоднородности в данных материалах представляют собой не единичные образования и аналоги дефектов в кристаллах, а фрагменты, из которых целиком построены аморфные тела. Применение СЗМ и предложенной в настоящей работе методики моделирования может играть конструктивную роль при исследовании структуры указанных неоднородностей.

Заключение

В настоящей работе с помощью математического моделирования показано, что основными факторами, влияющими на атомарное разрешение в СЗМ, являются размер контактной зоны и наличие дефектов кристаллической структуры. В данном случае, разумеется, не имеются в виду конструкционные особенности СЗМ, механический дрейф, шумы электрических схем и загрязнения исследуемой поверхности. Если исследуемая поверхность не содержит дефекты, то для получения истинного атомарного разрешения линейный размер контактной зоны может в десятки и даже в сотни раз превышать межатомное расстояние. Все это дает ключ к объяснению известного парадокса атомарного разрешения в СЗМ при использовании тупых зондов.

Моделирование выявляет высокую эффективность вейвлет-преобразования при обработке модельных СЗМ-изображений, что объясняется основными свойствами базовых вейвлетов, а именно их автотемпературностью и ограниченностью. Вейвлет-преобразование может использоваться для анализа фрактальной структуры профилей поверхностей, что представляет собой чрезвычайно актуальную задачу [19]. Коэффициенты $W(a, b)$ отображают иерархическую структуру профиля: каждому масштабному уровню соответствует локальный экстремум в спектре. Фрактальная размерность соответствующего сигнала может быть вычислена по коэффициентам вейвлет-преобразования как предел (при стремлении к нулю масштаба) отношения $\ln N(a)/\ln a$, где $N(a)$ — число локальных максимумов в спектре [13,19].

Работа выполнена в рамках программы „Leading–Talent Program of Guangdong Province“ (№ 00201502).

Список литературы

- [1] *Davies J.H., Hyldgaard P., Hershfield S., Wilkins J.W.* // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46. N 15. P. 9620–9633.
- [2] *Mizes H.A., Park S., Harrison W.A.* // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 36. N 8. P. 4491–4494.
- [3] *Flatte M.E., Byers J.M.* // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. N 16. P. 10536–10539.
- [4] *Рехвиашвили С.Ш., Розенберг Б.А., Дремов В.В.* // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 88. № 11. С. 805–809.
- [5] *Abraham F.F., Batra I.P., Ciraci S.* // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 60 N 13. P. 1314–1317.
- [6] *Kobayashi K., Tsukada M.* // J. Vac. Sci. Technol. A. 1990. Vol. 8. P. 170.
- [7] *Isshiki N., Kobayashi K., Tsukada M.* // Surface Science. 1990. Vol. 238. N 1–3. P. L439–L445.
- [8] *Watanaba S., Aono M., Tsukada M.* // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 44. N 15. P. 8330–8333.
- [9] *Tekman E., Ciraci S.* // J. Phys.: Condens. Mater. 1991. Vol. 3. N 6. P. 2613–2619.
- [10] *Покропивный А.В., Покропивный В.В., Скороход В.В.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. № 12. С. 70–75.
- [11] *Рехвиашвили С.Ш.* // Математическое моделирование. 2003. Т. 15. № 2. С. 62–68.
- [12] *Рехвиашвили С.Ш.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. № 6. С. 46–50.
- [13] *Астафьева Н.М.* // УФН. 1996. Т. 166. № 11. С. 1145–1170.
- [14] *Дьяконов В.П.* Вейвлеты. От теории к практике. М.: Солон-Р, 2002. 448 с.
- [15] *Прэнтт У.* Цифровая обработка изображений. Кн. 2. М.: Мир, 1982. 480 с.
- [16] *Миронов В.Л.* Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера, 2005. 144 с.
- [17] *Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. № 8. С. 124–127.
- [18] *Малиновский В.К.* // ФТТ. 1999. Т. 41. № 5. С. 805–808.
- [19] *Потапов А.А.* Фракталы в радиофизике и радиолокации: Топология выборки. Изд. 2-е, перераб. и доп. М.: Университетская книга, 2005. 848 с.