

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ОБРАБОТКИ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ

**Е. Ю. Шелковников, П. В. Гуляев, М. Р. Гафаров,
Б. Л. Жуйков, В. В. Матвеев**

Институт прикладной механики УрО РАН
г. Ижевск

При проведении исследований с применением сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) для анализа и интерпретации получаемых результатов весьма важными являются определение и коррекция возможных механизмов возникновения артефактов (т.е. аппаратных эффектов СТМ, приводящих к наблюдению ложных или искаженных параметров исследуемой поверхности). Одним из недостатков СТМ является конечный размер рабочей части зондирующих острий (ЗО) измерительных игл, а также то, что электроны туннелируют от ЗО к исследуемой поверхности расходящимся пучком. Это приводит к ухудшению пространственного разрешения и значительным искажениям в СТМ-изображении [1-3].

При изучении нанообъектов с применением туннельного микроскопа с атомным разрешением вносят искажения рабочие размеры ЗО, соизмеримые с радиусом закругления его кончика. Если же размеры изучаемых объектов значительно больше радиуса закругления ЗО, то при формировании СТМ-изображения участвуют и боковые стороны острия. Кроме того, электроны в промежутке между ЗО и образцом падают на исследуемую поверхность расходящимся пучком (интенсивность которого экспоненциально уменьшается по мере удаления от самого близкого расстояния между ЗО и образцом), что приводит к сглаживанию мелких деталей микрорельефа поверхности на СТМ-изображении. При этом электронный конусный луч обеспечивает через туннельный зазор бесконтактный неразрушающий съем измерительной информации, а формируемое СТМ-изображение является фактически сверткой (конволюцией) аппаратной функции СТМ и рельефа поверхности [4, 5].

Для комплексного восстановления СТМ-изображения поверхности нанообъектов с учетом растекания туннельного тока и геометрических размеров острия необходимо иметь инструмент компьютерного трехмерного сканирования поверхности ЗО с заданными геометрическими параметрами. Основным

недостаткам такого компьютерного сканирования обычно является большое время сканирования поверхности, особенно, в случае значительного размера раstra изображения. Поскольку реальные СТМ-изображения обычно имеют размеры 256x256 элементов и более, то для использования подобной методики при восстановлении СТМ-изображений необходимо существенно сократить время расчета изображения. Для этого обычно используются процедура упрощения математической модели протекания туннельного тока между ЗО и образцом, а также ряд допущений, которые вносят значительные искажения в результат обработки СТМ-изображений.

Для увеличения скорости расчета больших СТМ-изображений, а также возможности применения более сложных моделей протекания туннельного тока между ЗО и образцом предложено использовать параллельные вычисления, реализуемые на графических процессорах (ГП). Идеально адаптированные приложения для обработки с применением ГП должны использовать большие наборы данных, иметь высокий уровень параллелизма и минимальную зависимость между элементами данных. Наиболее распространенная форма потока данных для ГП – это двумерная сетка, которая используется для множества различных вычислений, например, в линейной алгебре, при симуляции физических процессов, и т.д. Рассмотрим применение параллельных вычислений для восстановления СТМ-изображений размером $n \times m$. Как было отмечено, для этой процедуры необходимо произвести компьютерное сканирование поверхности туннельным микроскопом [6]. Типовая схема такого сканирования представлена на рисунке 1. Сначала производится установка параметров сканирования, и игла размещается над первым элементом первой строки сканируемой поверхности. Далее производится сканирование поверхности следующим образом.

Игла последовательно перемещается вдоль строки, в каждой точке которой производится вычисление туннельного тока

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ОБРАБОТКИ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ

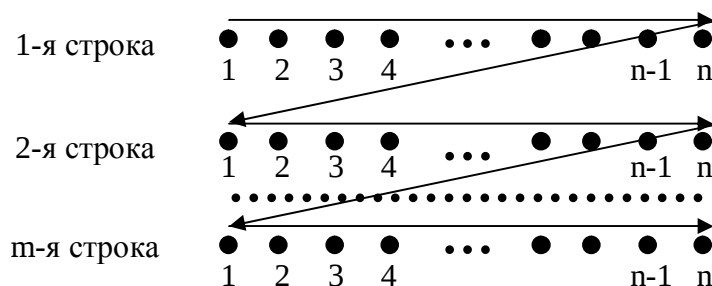


Рисунок 1 – Схема сканирования поверхности туннельным микроскопом

(протекающего с иглы на поверхность) и корректировка высоты иглы таким образом, чтобы вычисленный ток был равен эталонному значению (установленному в начале сканирования). Таким образом, фактически моделируется работа системы отрицательной обратной связи реального туннельного микроскопа. После сканирования первой строки игла перемещается в начальную точку следующей строки, и процесс повторяется до тех пор, пока не будет отсканирована вся поверхность образца. Идея применения параллельных вычислений заключается в том, что туннельный ток вычисляется в каждой точке поверхности не последовательно (как описано выше), а параллельно. Перенос таких расчетов на многоядерные процессоры или видеокарту приводит к значительному росту их производительности. Особенно это заметно на больших объемах данных, так как ГП обладают большим количеством потоковых процессоров (например, AMD HD5850 имеет 1440 таких процессоров).

Наиболее трудоемкой задачей, которую необходимо решать в процессе компьютерного сканирования, является нахождение минимального расстояния от точки поверхности до ЗО иглы. Простой перебор всех точек поверхности острия для определения минимального расстояния требует N^2 операций (где N – размер карты высот поверхности острия). Вместо этого предложено использовать kd-дерево – структуру данных, позволяющую быстро (в среднем за $\log N$ операций) находить кратчайшее расстояние между произвольной точкой и заданным набором точек. kd-дерево – это бинарное дерево, каждый узел которого является точкой в k -мерном пространстве. Нелистовой узел можно представить как гиперплоскость, разделяющую пространство на 2 части. Точки слева от гиперплоскости представляют собой левое поддерево, а точки справа – правое. Гиперплоскость выбирается следующим образом: для каждого узла дерева в одном из k

измерений она должна быть перпендикулярна измерению. Например, если выбрано измерение X , то все точки с координатой меньше X будут слева, остальные – справа. Для того, чтобы сбалансировать дерево, в качестве родительского узла выбирается медиана. Для kd-дерева используется рекурсивная функция, разбивающая массив точек 3D пополам так, что в левой части находятся точки левее медианы (левее по требуемой координате), в правой – правее, а медиана записывается в узел. Далее для левой и правой частей описанная процедура повторяется. Пример построения kd-дерева представлен на рисунке 2.

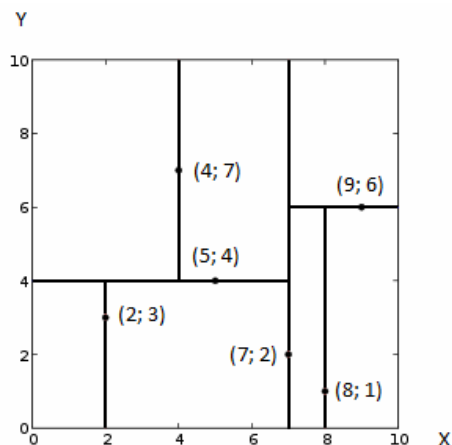


Рисунок 2 – Пример построения kd-дерева

Для оценки эффективности разработанной программы было использовано три различных набора данных для исследуемой поверхности и ЗО иглы. Каждый набор обрабатывался на компьютере, оборудованном процессором AMD Phenom X4 925, 4 ГБ ОЗУ и графической картой ATI Radeon 5870. Результаты обработки приведены в таблице 1.

Из анализа полученных результатов следует, что эффективность обработки СТМ-изображений с применением параллельных вычислений значительно возрастает с увели-

чением размеров обрабатываемых СТМ-изображений и количеством процессоров. Использование графического процессора видеокарты ATI Radeon 5870 позволило существенно увеличить скорость обработки: в частности, время компьютерного сканирования

СТМ-изображений размером 128x128 сократилось в ~47 раз, а 256x256 в ~133 раза. Это дает возможность применять сложные алгоритмы восстановления, обрабатывать СТМ-изображения больших размеров и, в итоге, улучшать качество их восстановления.

Таблица 1 – Оценка эффективности обработки СТМ-изображений

Размер СТМ-изображения	Усредненное время работы для различных наборов данных, с		
	Последовательные вычисления (CPU, 1 ядро)	Параллельные вычисления (CPU, 4 ядра)	Параллельные вычисления (GPU)
64x64	61	13	7
128x128	1363	213	29
256x256	29949	3449	224
512x512	–	55327	2097

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chicon R., Ortuno M., Abellan J. An algorithm for surface reconstruction in scanning tunneling microscopy // Surface Science. 1987. V.181. P.107-111.
2. Савинов С.В. Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия тонких плёнок на поверхности графита: Дис...канд. физ-мат. наук. М, 1993.– 152с.
3. Бухараев А.А., Бердунов Н.В., Овчинников Д.В., Салихов К.М. ССМ-метрология микро- и наноструктур // Микроэлектроника. 1997. Т.26. №3.– С.163-167.
4. Stoll E. et al., Current distribution in the scanning vacuum tunnel microscope: a free-electron model // J. Phys. C: Solid State Phys. 1984, Vol. 17, P3073-3086.
5. Гайкович К.П., Грибков Б.А., Жилин А.В., Миронов В.Л. Восстановление СТМ изображения атомарной структуры пиролитического графита методом деконволюции с учётом нелокальности взаимодействия в системе зонд-поверхность // 5-й Белорусский семинар по сканирующей зондовой микроскопии.– Минск: БГУ, 2002.– с.123-127.
6. Шелковников Е.Ю. Компьютерное формирование изображений поверхности в туннельном микроскопе // Химическая физика и мезоскопия, 2007г.– Т.9.– №3.– С.101-113.