УДК 621.385.833

КОНТРОЛЬ ДИСПЕРСНОСТИ НАНОЧАСТИЦ В СТМ-ИЗМЕРЕНИЯХ ВЫДЕЛЕНИЕМ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

М.Р. Гафаров, Е.Ю. Шелковников, П.В. Гуляев, А.В. Тюриков, С.Р. Кизнерцев

В статье рассматриваются вопросы контроля дисперсности наночастиц на основе сегментации их СТМ-изображений по кривизне профилограмм. Предлагаются два алгоритма выделения структурных элементов изображений по экстремумам локальной кривизны поверхности наночастиц. Приведены результаты экспериментальных исследований разработанных алгоритмов.

Ключевые слова: сканирующий туннельный микроскоп, наночастицы, контроль дисперсности, сегментация изображений, кривизна поверхности

Введение

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) является важным инструментом изучения наночастиц и новых материалов на их основе. Одними из актуальных направлений применения СТМ в данной области являются поиск, идентификация и определение размеров наночастиц или локальных особенностей поверхности подложки. При этом широко используется математический аппарат обработки изображений, позволяющий выделять и анализировать их структурные элементы. В качестве основных задач, решаемых с использованием методов анализа изображений, можно выделить следующие:

- разработка комбинированных методов исследований, основанных на поочередном применении различных зондирующих игл и сред к одному нанообъекту;
- координатная привязка зондирующего острия (ЗО) иглы к определенным нанообъектам на поверхности подложки, удержание данных нанообъектов в поле зрения микроскопа при наличии латеральных перемещений или дрейфа [1-3];
- контроль дисперсности наночастиц;
- позиционирование ЗО при многокадровых методиках сканирования, определение взаимного сдвига кадров при точном или грубом смещении поля зрения СТМ [4,5].

Постановка задачи

Для решения перечисленных задач перспективным является подход, основанный на структурном анализе изображений [6]. Суть этого подхода заключается в автоматическом измерении формы нанообъектов, геометрии поверхности и уровня кривизны, т.е. в сегментации изображения на элементарные части (элементарные структуры) и описании изображения в терминах этих структур. В данном случае описание должно представлять собой иерархию естественных нанообъектов поверхности рельефа, и позволять вести оценку формы склонов и нанообъектов на нем через кривизну их поперечного и продольного сечений (т.е. выпуклостью/вогнутостью), а также вычисление положительных и отрицательных объемов (которые на профилограммах изображения часто выглядят в виде выпуклых или вогнутых фрагментов сфероидов и (или) их совокупностей).

Таким образом, с учетом свойств формы областей задача сегментации и описания геометрических структур СТМ-изображения может быть основана на понятиях выпуклости и вогнутости поверхности, функции локальной кривизны и ее экстремумов, т.е. на базе смысловых характеристик его структурных элементов. Целью данной работы является автоматизация обнаружения наночастиц путем разработки математической модели и метода анализа пространственной структуры СТМ-изображений, который заключается в выделении структурных элементов изображения на основе сегментации по кривизне профилограмм поверхности, а также определении их геометрических характеристик.

Большинство работ по вычислению кривизны ориентировано на анализ плоских кривых, например, контурных линий различной природы происхождения. Поэтому представляется, что разработка алгоритмов вычисления кривизны поверхностей в указанной выше постановке является актуальной задачей.

Известно, что кривизна аналитически заданной дуги кривой вычисляется по формуле:

$$K = \frac{|y''|}{\left[1 + y'^2\right]^{3/2}} \qquad (1)$$

Это определение кривизны дуги требует существования и непрерывности второй производной y'', что делает практически невозможным ее применение для искаженных шумами экспериментальных дискретных кривых.

Поэтому для обеспечения помехоустойчивости СТМ-измерений функцию кривизны оценивают косвенно.

Можно выделить два подхода к вычислению кривизны дискретной кривой. Первый сводится к ее аппроксимации некоторой аналитически заданной кривой и оцениванию кривизны дуги через кривизну аппроксимирующей кривой. Другой подход состоит в вычислении кривизны через разницу в наклонах прямых, аппроксимирующих два множества соседних точек дуги, пересекающихся в точке оценивания кривизны. Если рассматривать СТМ – изображение как дискретную двумерную функцию яркости $Z(x, y), (x = 0..nx-1,\ y = 0..ny-1)$, то ее значения являются положительными скалярными величинами, физический смысл которых определяется источником, формирующим изображение. В данной работе разрабатываются и исследуются два алгоритма сегментации и выделения структурных элементов трехмерных поверхностей на СТМ-изображениях, основанные на анализе их функций строк и столбцов $Z(x, y)$.

Алгоритм *Horda.* Пусть на участке с большой кривизной функции строки $Z(x)$ задана точка A (рисунок 1). Кривизну плоской кривой обычно отождествляют с кривизной соприкасающейся окружности. Соприкасающейся окружностью плоской кривой в точке A называют предельное положение окружности, проходящей через две соседние точки P_1 и P_2 при стремлении P_1 и P_2 к A.

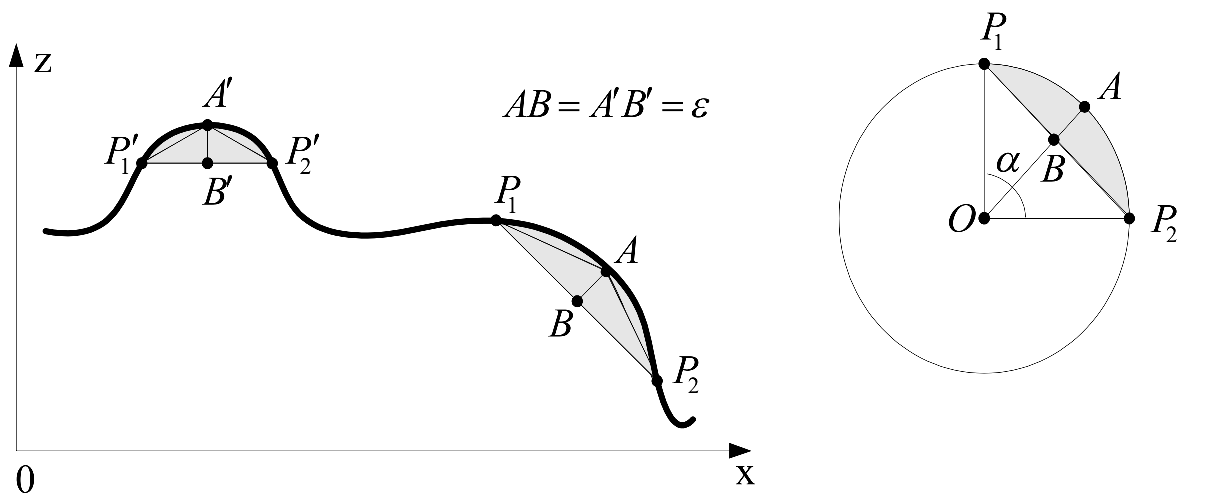


Рисунок 1 - Вычисление кривизны кривой Z(x)

Для того, чтобы нивелировать воздействие шумов на процесс вычисления кривизны, вместо прямого вычисления радиуса кривизны ее ассоциируют с другими элементами дуги кривой, которые также характеризуют кривизну и меньше деградируют при нарастании искажающих факторов. В качестве таких элементов могут быть хорда P_1P_2, стрела сегмента AB или центральный угол α. Представляется, что более устойчивым к воздействию шумов может оказаться площадь сегмента P_1AP_2. В этом случае актуальным является выбор отрезка дуги, которая будет использоваться для вычислений. Для небольших отрезков дуги можно считать, что площадь сегмента P_1AP_2 приблизительно равна площади вписанного равнобедренного треугольника ΔP_1AP_2, площадь которого равна $\frac{1}{2} \cdot P_1P_2 \cdot AB$. Если задать длину стрелы сегмента AB в качестве пороговой величины ε (которая будет постоянной для различных точек исходной кривой), то длина хорды будет пропорциональной радиусу кривизны в этих точках. Параметр ε определяет чувствительность такого подхода к вычислению кривизны к шумам. Таким образом, оценкой кривизны в точке A может служить радиус окружности R, выраженный через ε и длину хорды $H = P_1P_2$. Из треугольника ΔP_1OB следует: $(R-\varepsilon)^2 + \frac{H^2}{4} = R^2$. Отсюда:

$$R = \frac{H^2 + 4\varepsilon^2}{8\varepsilon}. \qquad (2)$$

Процедуре вычисления кривизны необходимо придать итеративный характер, чтобы наиболее точно «подогнать» длину отрезка AB к величине ε. С этой целью функция строки $Z(x)$ в окрестности точки A разбивается на отрезки длиной $\Delta u = \eta$ (начальные и конечные точки которых находятся на одинаковом расстоянии Δu, в евклидовой метрике). Поскольку $Z(x)$ задана в виде дискретной кривой, координаты промежуточных точек при таком разбиении определяются на основе линейной аппроксимации $Z(x)$. Точки P_1 и P_2 последовательно смещают от точки A в противоположных направлениях на величину Δu до выполнения условия $AB = \varepsilon$ с заданной точностью (которая зависит от значения η.)

Результаты и их обсуждение

Работа данного алгоритма проверялась на профилограмме выбранной строки СТМ-изображения и приведена на рисунке 2.

Вычисление расстояния между точкой A и отрезком прямой P_1P_2 производилось по формуле:

$$d = \frac{ax + by + c}{\sqrt{a^2 + b^2}}, \qquad (3)$$

где a, b, c – коэффициенты уравнения прямой, проходящей через точки P_1 и P_2. При этом величина d получается со знаком, совпадающим со знаком кривизны дуги в точке A. Этот знак присваивается длине отрезка P_1P_2, формируя, таким образом, значения функции $H(x)$. Из рисунка 2 видно, что функция $H(x)$ может быть использована для сегментации функции $Z(x)$ на выпуклые и вогнутые участки. Кроме того, на ней достаточно отчетливо выделяются локальные минимумы и максимумы и точки разрыва, которые соответствуют экстремумам кривизны и точкам перегиба профилограммы $Z(x)$.

На рисунке 2а видно, что выделилось несколько ложных экстремумов, обусловленных нарушениями гладкости некоторых участков функции $H(x)$. Эффективным средством их фильтрации является применение принципа «доминирующего экстремума» на некотором заданном отрезке длиной m, когда, например, каждый выделенный минимум подавляет другие локальные минимумы с бóльшими значениями и располагающиеся на расстоянии менее, чем $m/2$. Результаты такой обработки приведены на рисунке 2б.

В дальнейшем, без ограничения общности, будем рассматривать только кривизну выпуклых областей изображений (когда максимумам кривизны $Z(x)$ соответствуют минимальные значения $H(x)$).

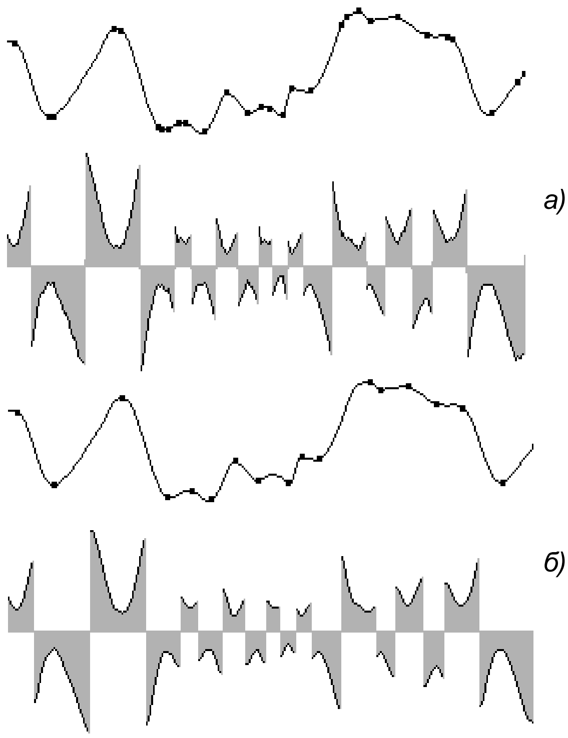


Рисунок 2 – СТМ-профилограмма $Z(x)$ с выделенными экстремумами локальной кривизны и функция $H(x)$: а – без фильтрации функции $H(x)$; б – с фильтрацией функции $H(x)$

После сканирования всех строк изображения $Z(x, y)$ формируется множество $\{H_i(x)\}, i = 0..ny-1$. Описанным способом сканированием по столбцам $Z(x, y)$ вычисляется множество функций $\{H_j(y)\}, j = 0..nx-1$.

Объединить полученные результаты для оценки кривизны поверхности в различных точках изображения $Z(x, y)$ можно двумя способами. Первый из них основывается на том, что траектории локальных минимумов для одного знака кривизны (выделенные по функциям $H(x)$ и $H(y)$) пересекаются в точках, соответствующих экстремумам функции кривизны для $Z(x, y)$. На рисунке 3а приведено СТМ-изображение с указанием таких траекторий.

Экспериментальная проверка этого способа показала, что из-за дискретного характера траекторий и значительного перепада их значений в окрестности схождения не удается надежно определять точку пересечения без увеличения вычислительной сложности алгоритма.

Во втором способе вычисляется функция:

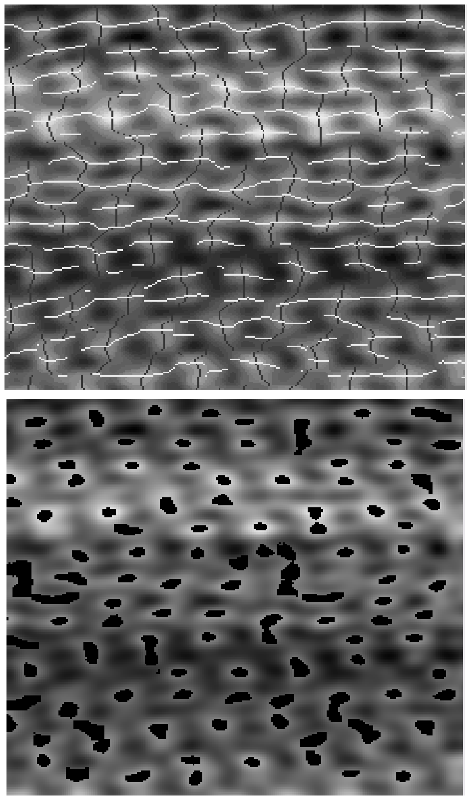
$$W^{+}(x,y)=\begin{cases} H_y(x)+H_x(y), \\ если\ H_y(x)\geq 0\ и\ H_x(y)\geq 0; \\ C,\ иначе \end{cases} \quad (4)$$

где $C > \max\limits_{x,y}(H_y(x)+H_x(y))$ - предопределенная константа.

Функция $W^{+}(x, y)$ позволяет осуществить сегментацию $Z(x, y)$ путем выделения на ней выпуклых областей. Локальные минимумы $W^{+}(x, y)$ определяют положения точек изображения с максимальной локальной кривизной. Как и при фильтрации функций $H(x)$ и $H(y)$ для устранения ложных минимумов, в этом случае можно применять принцип «доминирующего экстремума » в заданной окрестности $m \times m$.

Изображение с выделенными областями с положительной кривизной приведено на рисунке 3б. Здесь черным цветом показаны области, выделенные по условию $W^{+}(x, y) < \mu$ (где μ пороговая величина). В каждой точке локального максимума кривизны может быть вычислена оценка радиуса кривизны по формуле (2).

Алгоритм «*Sector*» основывается на следующем наблюдении. Если в точке A кривой $Z(x)$ (рисунок 4) с большой кривизной поместить центр окружности небольшого радиуса r, то она будет пересекать кривую в точках B и C. Радиусы, проведенные в эти точки, образуют два сектора, площади которых S_1 и S_2 будут значительно отличаться друг от друга. Если же точка A располагается на плоской части кривой, то соответствующие площади будут мало отличаться друг от друга. Следовательно, площадь S_1 (или S_2) может служить оценкой кривизны в точке A.



а)

б)

Рисунок 3 - Сегментация СТМ-изображения: а - траектории локальных минимумов, вычисленных по множествам функций $\{H_i(x)\}$ и $\{H_j(y)\}$; б - выделенные области с положительной кривизной

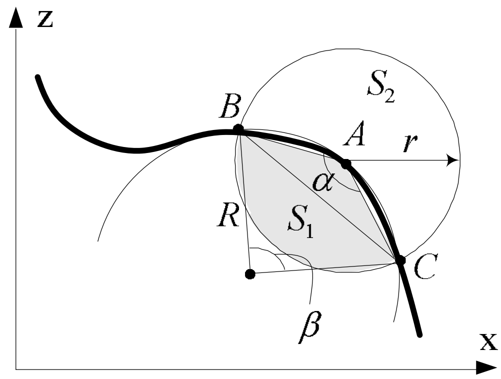


Рисунок 4 - Схема детектора кривизны «Sector»

Площадь сектора равна:

$$S = \frac{1}{2} r^2 \alpha , \quad (5)$$

где

$$\alpha = \angle BAC = \pi - arctg\left(\frac{z_B - z_A}{x_B - x_A}\right) + arctg\left(\frac{z_C - z_A}{x_C - x_A}\right);$$

(x_A, z_A), (x_B, z_B), (x_C, z_C) – соответственно, координаты точек A, B и C. Положения точек B и C можно определить, последовательно смещаясь от точки A в направлении искомой точки до выполнения условия $(x_A - x_i)^2 + (z_A - z_i)^2 \geq r^2$ (где (x_i, z_i) – координаты текущей точки).

Для оценки кривизны $Z(x)$ в точке A выразим радиус соприкасающейся окружности R через α и r:

$$BC = 2r\sin\frac{\alpha}{2} = 2R\sin\frac{\beta}{2},$$

где $\frac{\beta}{2} = \pi - \alpha$.

Отсюда: $$R = \frac{r\sin\frac{\alpha}{2}}{\sin\alpha}. \quad (6)$$

Как и в алгоритме *«Horda»* для каждой строки $Z(x)$ вычисляется функция $S(x)$ и для каждого столбца функция $S(y)$, образуя два множества $\{S_i(x)\}$ и $\{S_j(y)\}$.

Последние используются для вычисления функции:

$$W^+(x,y) = \begin{cases} S_y(x) + S_x(y), \\ если\ S_y(x) < s_0\ и\ S_x(y) < s_0, \\ s_0 = \pi r^2/2; \\ C,\ иначе \end{cases} \quad (7)$$

где $C > \max\limits_{x,y}(S_y(x) + S_x(y))$ - предопределенная константа.

При поиске локальных минимумов $W^+(x,y)$, кроме применения принципа «доминирующего экстремума» в окрестности $m \times m$ проверяется условие, чтобы $(S_y(x)/s_0 < \mu_S) \wedge (S_x(y)/s_0 < \mu_S)$ (где $\mu_S < 1$ - пороговая величина).

На рисунке 5 приведен пример обработки СТМ-изображения данным алгоритмом с выделенными точками локальных экстремумов положительной кривизны. В этих точках может быть проведена оценка радиуса кривизны по формуле (6).

Далее случайным образом на этом фоне размещались n_{obj} сферических объектов (СО) заданного радиуса R_{obj}, и затем наносился случайный гауссовский шум с нулевым математическим ожиданием и дисперсией σ_{sh}^2. При размещении СО также можно задавать величину минимального расстояния между ними. Все перечисленные величины являются параметрами ГМИ. С помощью него была создана база модельных изображений нанообъектов, которые использовались для испытаний разработанных алгоритмов. Пример модельного изображения приведен на рисунке 6. Можно отметить, что с увеличением n_{obj} увеличивается число взаимных перекрытий СО, что усложняет условия их детектирования.

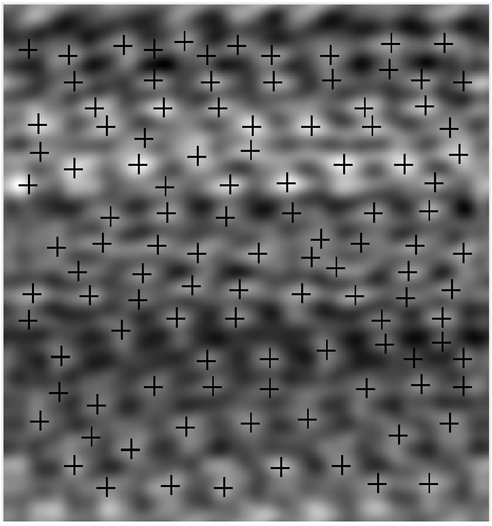


Рисунок 5 - СТМ-изображение с выделенными по алгоритму «Sector» точками локальных экстремумов положительной кривизны

В ходе испытаний оценивались следующие параметры СО: R_{cp} – средний радиус; σ_R^2 – дисперсия вычисленных значений радиусов; $P_R(\%) = \frac{|R_{cp} - R_{obj}|}{R_{obj}} 100\ \%$ – относительная погрешность вычисления радиусов; σ_C^2 – дисперсия вычисленных значений координат; $P_n(\%) = \frac{|n_t - n_{obj}|}{n_{obj}} 100\ \%$ – относительная погрешность идентификации СО (где n_t - число идентифицированных нанообъектов).

Анализ результатов проведенных испытаний показал, что оба алгоритма продемонстрировали схожие результаты как по точности вычисления радиусов СО, так и по точности определения их координат. Необходимо отметить, что каждый из алгоритмов характеризуется оптимальным значением своего главного параметра (ε - для алгоритма

«Horda» и r - для алгоритма *«Sector»*), обеспечивающего более эффективные условия для детектирования кривизны определенного радиуса.

Для иллюстрации вычисления радиусов СО на модельном изображении на рисунке 7 приведен пример гистограммы распределения R .

Рисунок 6 - Модельное изображение нанообъектов (n_{obj} =70, R_{obj} =13, σ_{sh}^2 =1.0)

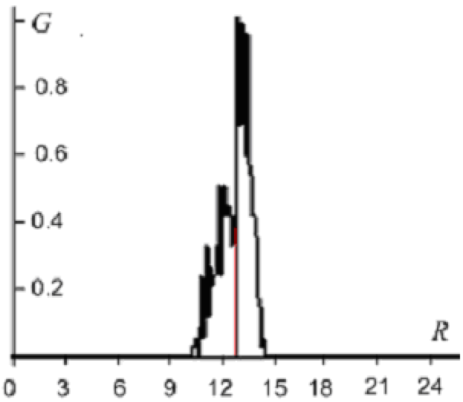


Рисунок 7 - Гистограмма распределения вычисленных радиусов СО на модельном изображении алгоритмом «Horda»

Результаты испытаний приведены в таблице 1.

Таблица 1 - Результаты испытаний алгоритмов (n_{obj} =50, R_{obj} =13, σ_{sh}^2 =1.0)

Алгоритм «Horda»					
ε	R_{cp}	σ_R^2	$P_R(\%)$	σ_C^2	$P_n(\%)$
1.0	12.84	1.38	6.49	1.55	2.00
1.5	13.36	1.39	2.81	1.39	1.63
2.0	13.69	1.64	5.35	1.35	0.80
2.5	14.11	1.87	8.56	1.37	0.87
3.0	14.47	2.10	11.33	1.49	7.27
3.5	14.59	2.58	12.25	3.29	21.60

Таблица 1 - продолжение

Алгоритм «Sector»					
r	R_{cp}	σ_R^2	$P_R(\%)$	σ_C^2	$P_n(\%)$
9	11.36	2.51	12.63	7.08	12.8
11	11.58	0.88	10.95	2.55	2.40
13	12.67	0.76	2.54	3.52	5.20
15	13.75	0.59	5.74	3.20	5.20
17	14.92	0.38	14.78	5.46	5.40
19	16.20	0.65	24.60	8.38	6.40

В заключение следует отметить, что разработанные алгоритмы могут быть использованы для сегментации СТМ-изображений по кривизне профилограмм, детектирования нанообъектов с криволинейной поверхностью, а также для выделения локальных особенностей изображений, по которым может осуществляться их координатная привязка при многокадровых методиках сканирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патент 2181218 Российская Федерация, МПК G11B9/14, G11B11/26. Способ считывания цифровой информации в зондовом запоминающем устройстве [Текст] / Р.В. Лапшин. – № 98119766/28, заявл. 02.11.1998; опубл. 10.04.2002.
2. Патент 2175761 Российская Федерация, МПК G01N13/12. Способ измерения рельефа поверхности сканирующим зондовым микроскопом [Текст] / Р.В. Лапшин. – № 99112623/28, заявл. 08.06.1999; опубл. 10.11.2001.
3. Патент 2181212 Российская Федерация, МПК G02B21/32. Способ перемещения зонда сканирующего микроскопа-нанолитографа в поле грубого X-Y позиционера [Текст] / Р.В. Лапшин. – № 99119434/28, заявл. 07.09.1999; опубл. 10.04.2002.
4. Жихарев А.В. Устройство точного позиционирования зонда для сканирующих зондовых микроскопов [Текст] / А.В. Жихарев, С.Г. Быстров, О.В. Карбань // ПТЭ. – 2003. – №3. – С.125-127.
5. Шелковников Ю.К. Построение изображений поверхности при многокадровом режиме сканирующего туннельного микроскопа [Текст] / Ю.К. Шелковников, М.Р. Гафаров, П.В. Гуляев. – Химическая физика и мезоскопия. – 2008. – т.10. – №4. – С.514-520.
6. Гонсалес Р. Цифровая обработка изображений [Текст] / Р. Гонсалес, Р. Вудс – М.: Техносфера. – 2005. – 1072с.

М.н.с. ***М.Р. Гафаров****, д.т.н., зав. лаб.* ***Е.Ю. Шелковников****, к.т.н., с.н.с.* ***П.В. Гуляев****, к.ф.-м.н., с.н.с.* ***Тюриков А.В.****, к.т.н., с.н.с.* ***С.Р. Кизнерцев*** *– (3412) 21-89-55, iit@udman.ru - Институт прикладной механики УрО РАН.*