

ПРИМЕНЕНИЕ СФЕРИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА ДЛЯ АНАЛИЗА СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ

Ю.К. Шелковников, П.В. Гуляев, А.В. Тюриков, С.Р. Кизнерцев, А.И. Кириллов

В статье рассмотрены особенности анализа изображений частиц в сканирующей туннельной микроскопии. Представлен сферический детектор измерения уровня локальной кривизны поверхности. Приведены результаты работы данного детектора, а также рекомендации по его применению.

Ключевые слова: сканирующий туннельный микроскоп, анализ изображений, локальная кривизна поверхности, детектор кривизны, сферический детектор.

Введение

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) является весьма перспективным инструментом изучения наночастиц и материалов на их основе. В СТМ математический аппарат обработки изображений используется для поиска и определения размеров наночастиц или локальных особенностей поверхности подложки. Это бывает необходимо при решении следующих задач:

- разработка методов исследований, основанных на поочередном применении различных зондирующих игл и сканирующих устройств к одному участку поверхности;
- координатная привязка зондирующего острия к определенным участкам поверхности наночастиц [1,2];
- учет и определение размеров частиц.

Постановка задачи

Для решения перечисленных задач перспективным может считаться подход, основанный на структурном анализе изображений [3]. Как было установлено ранее [1], суть этого подхода заключается в измерении уровня кривизны поверхности, т.е. в сегментации изображения на элементарные структуры. Используемые для этих целей плоские детекторы кривизны [1] отличаются невысокой вычислительной сложностью и показывают хорошие результаты на изображениях высокого качества. Для менее качественных изображений предлагается использовать объемный (сферический) детектор.

Принцип работы данного детектора можно пояснить следующим образом. Поместим в точку A на рельефе СТМ-изображения, описываемого функцией $Z(x,y)$, центр сферы небольшого радиуса r . Обозначим через величину V часть объема образца, заключенного внутри сферы (рисунок 1), и будем ассоциировать V с кривизной поверхности в точке A.

При этом в точках с положительной кривизной будет справедливо отношение:

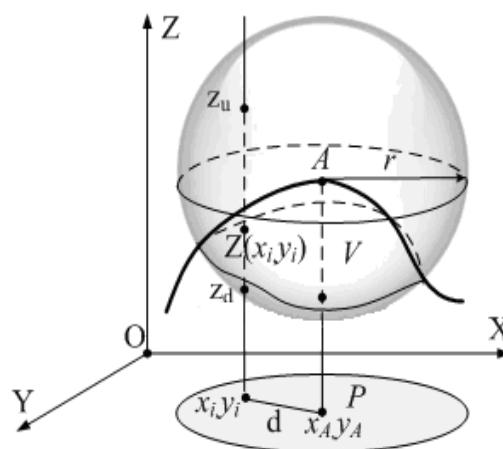


Рисунок 1 - Схема сферического детектора кривизны

$V / (V_0 / 2) < 1$, а в точках с отрицательной кривизной: $V / (V_0 / 2) > 1$, где V_0 - полный объем сферы. Далее будем рассматривать кривизну только выпуклых областей изображений. Установим связь между объемом V и оценкой радиуса кривизны $Z(x,y)$ в точке A. Пусть часть рельефа в окрестности этой точки аппроксимируется сферой радиуса R (рисунок 2). Установим зависимость R от V и r . Для этого найдем объем V общей части двух шаров, ограниченных сферами:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 + z^2 = R^2, \\ x^2 + y^2 + (R - z)^2 = r^2. \end{cases}$$

Пересечение сфер находится на уровне

$$r^2 - R^2 + 2Rz = R^2 \Rightarrow z = R - \frac{r^2}{2R} \quad \text{и} \quad \text{пред-}$$

ставляет собой круг с радиусом $\sqrt{r^2 - \frac{r^4}{4R^2}}$. Вычисления в декартовых координатах дают достаточно громоздкие выражения.

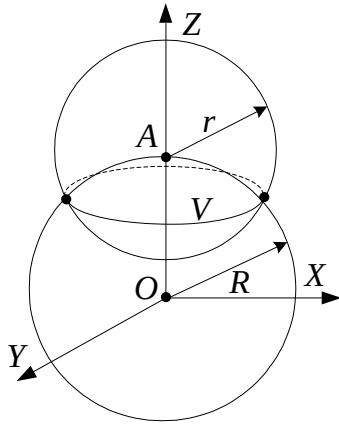


Рисунок 2 - Схема вычисления объема общей части двух сфер

В цилиндрических координатах объем V ограничен сверху поверхностью $z = \sqrt{R^2 - \rho^2}$, снизу - поверхностью $z = R - \sqrt{r^2 - \rho^2}$, поэтому:

$$V = \iiint_V dv = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\sqrt{r^2 - \frac{r^4}{4R^2}}} \rho d\rho \int_{R - \sqrt{r^2 - \rho^2}}^{\sqrt{R^2 - \rho^2}} dz =$$

$$= 2\pi \int_0^{\sqrt{r^2 - \frac{r^4}{4R^2}}} \left[\sqrt{R^2 - \rho^2} + \sqrt{r^2 - \rho^2} - R \right] \rho d\rho.$$

После промежуточных вычислений получим:

$$V = \pi \left[\frac{8R^3 r^3 - 3R^2 r^4}{12R^3} \right] = \pi \left[\frac{2}{3} r^3 - \frac{r^4}{4R} \right].$$

Отсюда:

$$R = \frac{3\pi r^4}{4(3V - 2\pi r^3)}. \quad (1)$$

В алгоритме, реализующем сферический детектор, значение V определяется по приближенной формуле вычисления интеграла:

$$V = \iiint_V dv \approx \sum_{x_i, y_i \in P} f(x_i, y_i),$$

где $f(x_i, y_i)$ – эффективная (определяющая объем) длина вертикальной линии между точкой $Z(x_i, y_i)$ и нижней точкой Z_d пересечения сферы; (x_i, y_i) – точки круга P (рисунок 1), радиус которых определяется выражением:

$$d = \sqrt{(x_i - x_A)^2 + (y_i - y_A)^2} \leq r.$$

В каждой такой точке вычисляются следующие величины (рисунок 1):

$$z_{sh} = \sqrt{r^2 - d^2},$$

$$z_d = Z(x_A, y_A) - z_{sh},$$

$$z_u = Z(x_A, y_A) + z_{sh}.$$

Тогда для функции $f(x_i, y_i)$ можно записать:

$$f(x_i, y_i) = \begin{cases} Z(x_i, y_i) - z_d, & z_d < Z(x_i, y_i) < z_u \\ 2z_{sh}, & Z(x_i, y_i) \geq z_u \\ 0, & Z(x_i, y_i) \leq z_d \end{cases}.$$

После сканирования всех строк изображения функции $Z(x, y)$ ставится в соответствие функция $V(x, y)$, максимумы и минимумы которой определяют положения локальных экстремумов кривизны $Z(x, y)$.

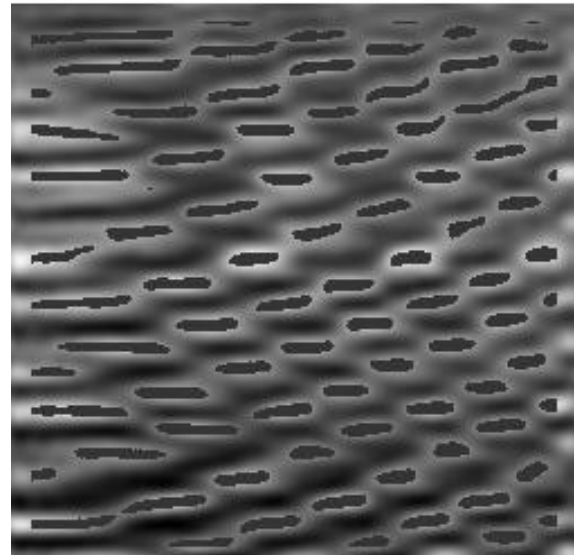


Рисунок 3 – Выделение областей положительной кривизны

Знак кривизны можно оценить проверкой условий:

- если $V(x, y) < V_0 / 2$, то кривизна положительная ($V_0 = 4\pi r^3 / 3$ – объем сферы);
- если $V(x, y) > V_0 / 2$ – кривизна отрицательная;
- если $V(x, y) = V_0 / 2$ – точка (x, y) располагается на плоской части поверхности.

На рисунке 3 приведен пример выделения областей положительной кривизны сферическим детектором. В этих областях оценка радиуса кривизны поверхности производится по формуле (1).

Результаты и их обсуждение

Для получения статистически значимых результатов использованы модельные изоб-

РАЗДЕЛ III. КОМПОНЕНТЫ ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ И УПРАВЛЯЮЩИХ СИСТЕМ

ражения сферических объектов. В процессе их генерации на неравномерном фоне случайным образом размещается n_{obj} сферических объектов (СО) заданного радиуса R_{obj} и затем наносится случайный гауссовский шум с нулевым математическим ожиданием и дисперсией σ_{sh}^2 . Пример такого изображения можно найти в работе [1].

В ходе испытаний сферического детектора оценивались следующие параметры:

- R_{cp} - средний радиус СО;
- σ_R^2 - дисперсия радиусов СО;
- $P_R(\%) = \frac{|R_{cp} - R_{obj}|}{R_{obj}} 100\%$ - относительная погрешность вычисления радиусов;
- σ_C^2 - дисперсия вычисленных значений координат СО;
- $P_n(\%) = \frac{|n_t - n_{obj}|}{n_{obj}} 100\%$ - относительная погрешность идентификации СО (n_t - число верно идентифицированных объектов).

Анализ работы детектора (при изменении радиуса r) проводился посредством серии испытаний на модельном изображении с параметрами $n_{obj}=50$, $R_{obj}=13$, $\sigma_{sh}^2=1.0$. Результаты испытаний приведены в таблице 1, из которой следует, что при увеличении радиуса детектора r оценка радиуса R_{cp} также увеличивается. Это обусловлено тем, что при возрастании r в анализируемую окрестность вовлекаются точки, не входящие в описание данного СО и каждая такая точка увеличивает значение оценки радиуса локальной кривизны окрестности. Вместе с тем, необходимо отметить, что для сферического детектора характерно наличие оптимального значения параметра r , обеспечивающего наилучшие условия для детектирования частиц определенного радиуса.

Таблица 1 - Результаты испытаний сферического детектора при изменении r

r	R_{cp}	σ_R^2	$P_R(\%)$	σ_C^2	$P_n(\%)$
9	12.14	0.76	11.99	1.16	8.00
11	12.13	0.45	2.38	0.87	1.33
13	13.11	0.29	1.87	0.88	0.00
15	13.40	0.16	0.79	0.96	0.00
17	14.18	0.22	9.11	1.05	0.00
19	15.37	0.71	13.25	1.32	1.00

Анализ величин относительной погрешности вычисления радиусов СО $P_R(\%)$ и относительной погрешности идентификации $P_n(\%)$ показал, что при заданных условиях наилучшие условия создаются при приближительном равенстве радиусов детектора и выделяемых объектов $r \approx R_{obj}$. Тем не менее, сферический детектор оказывается эффективным и при выделении объектов различного размера. Это наглядно иллюстрирует гистограмма распределения размеров объектов, представленная на рисунке 4.

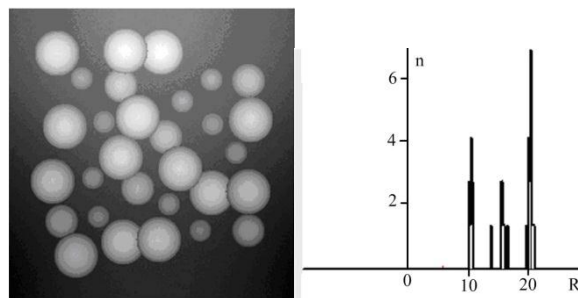


Рисунок 4 – Выделение объектов с различными размерами (10,15,20 пикселей)

С целью проверки помехоустойчивости детектора была проведена серия испытаний при нарастании шума на изображении. Результаты приведены в таблице 2. Сравнение таблицы 2 с данными, приведенными в работе [1] показывает, что сферический детектор имеет повышенную помехоустойчивость.

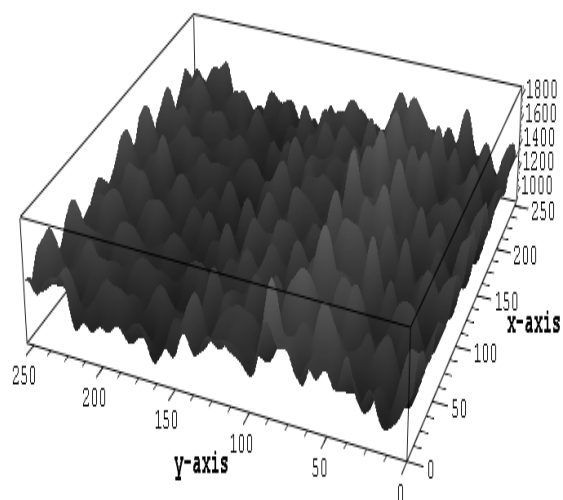
Таблица 2 - Результаты испытаний сферического детектора при изменении σ_{sh}

σ_{sh}	σ_R^2	σ_C^2	$P_n(\%)$
0.5	0.65	1.06	0
1.0	0.53	1.65	0
1.5	0.53	1.80	0.67
2.0	0.59	2.47	0.67
2.5	2.34	2.62	2.67
3.0	4.11	2.84	3.67
3.5	6.14	2.92	5.33

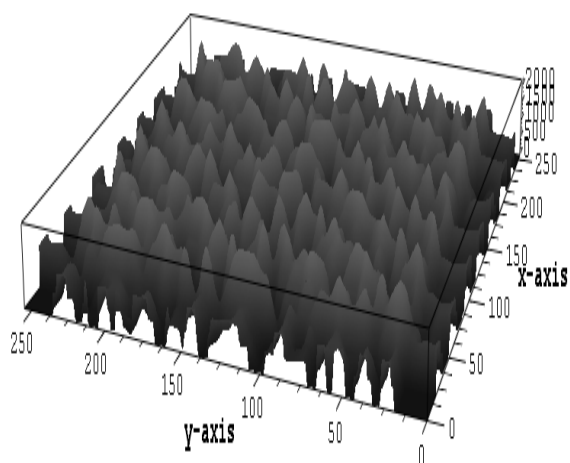
Испытания на реальных изображениях выявили высокую степень адаптации детектора к различным искажениям и шумам. Наглядно это можно увидеть на рисунке 5, где показаны исходный рельеф поверхности и рельеф функции кривизны. Как следует из рисунка, функция $Z(x,y)$ имеет существенно неравномерный фон, а функция $V(x,y)$ - равномерный. Таким образом, условия выделения локальных особенностей после преобразования $Z(x,y) \Rightarrow V(x,y)$ существенно улучшаются. Результаты выделения структурных элементов и их координат на реаль-

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3/2, 2012

ном СТМ-изображении показаны на рисунке 6.



а)



б)

Рисунок 5 - Трехмерное изображение: а - функция $Z(x,y)$; б - функция $V(x,y)$

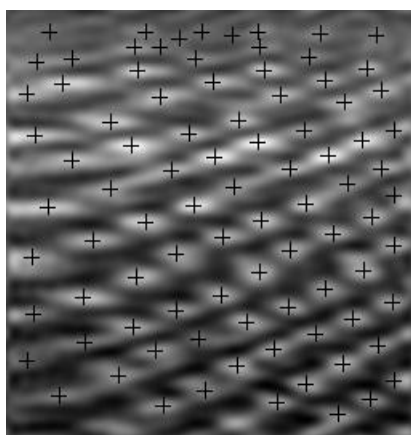


Рисунок 6 - Выделение структурных элементов на изображении графита (30x30нм)

Для повышения точности вычисления координат осуществлялась коррекция координат путем вычисления центра тяжести объема, заключенного внутри сферы-детектора:

$$x_c = \frac{\sum_{x_i, y_i \in P} \sum f(x_i, y_i) \cdot x_i}{\sum_{x_i, y_i \in P} \sum f(x_i, y_i)},$$

$$y_c = \frac{\sum_{x_i, y_i \in P} \sum f(x_i, y_i) \cdot y_i}{\sum_{x_i, y_i \in P} \sum f(x_i, y_i)}.$$

Это позволило увеличить точность вычисления координат СО и уменьшить средне-квадратическое отклонение приблизительно в 2,5 раза.

Выводы

Проведенные исследования показали универсальность и помехоустойчивость сферического детектора. Вычисление центра тяжести объема, заключенного внутри сферы-детектора, позволяет более точно определять координаты выделяемых объектов или частиц. Испытания на реальных СТМ-изображениях показали, что предложенный детектор является эффективным средством их автоматической обработки и может быть рекомендован для вычисления размеров частиц с небольшим разбросом значений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гафаров М.Р. Контроль дисперсности наночастиц в СТМ-измерениях выделением структурных элементов их изображений [Текст] / М.Р. Гафаров, Е.Ю. Шелковников, П.В. Гуляев, А.В. Тюриков, С.Р. Кизнерцев // Ползуновский вестник. – 2011. – №3. – С. 118-124.
2. Шелковников, Ю.К. Построение изображений поверхности при многокадровом режиме сканирующего туннельного микроскопа [Текст] / Ю.К. Шелковников, М.Р. Гафаров, П.В. Гуляев, А.В. Тюриков, С.Р. Кизнерцев // Химическая физика и мезоскопия. – 2008. – т.10. – №4. – С.514-520.
3. Гонсалес Р. Цифровая обработка изображений [Текст] / Р. Гонсалес, Р. Вудс – М.: Техносфера. – 2005. – 1072с.

Д.т.н., г.н.с. Шелковников Ю.К., к.т.н., с.н.с. Гуляев П.В., к.ф.-м.н., с.н.с. Тюриков А.В., к.т.н., с.н.с. Кизнерцев С.Р., студент Кириллов А.И. – (3412) 21-89-55, iit@udman.ru - Институт прикладной механики УрО РАН.