

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ

УДК 004.932

ЗАСТОСУВАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ АНАЛІЗУ РЕЗУЛЬТАТІВ АСМ ДОСЛІДЖЕНЬ

І. Оленич, В. Матвіїшин

*Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна
iolenych@gmail.com*

Реалізовано спосіб визначення ступеня поруватості в приповерхневій ділянці порувато-го матеріалу за допомогою аналізу АСМ зображення його поверхні. Для аналізу растрових зображень використано вбудований у Microsoft .NET Framework клас Bitmap і його метод GetPixel. На основі графічної інформації у растровому форматі вивчено структурні характеристики поруватих матеріалів. З'ясовано причини відхилення результатів обчислень від реальних значень поруватості та запропоновано способи підвищення точності розрахунків.

Ключові слова: атомно-силова мікроскопія, візуалізація поверхні, фільтрація зображення, поруватість, комп'ютерне відновлення рельєфу.

Серед сучасних методів дослідження морфології і локальних властивостей поверхні твердого тіла з високою просторовою роздільною здатністю найбільш перспективними вважають методи зондової мікроскопії [1, 2]. Сьогодні зондова мікроскопія – це галузь техніки і прикладних наукових досліджень, яка набула стрімкого розвитку. За основу роботи таких мікроскопів узяті різні типи взаємодії зонда, робоча частина якого має вигляд вістря з розмірами близько десяти нанометрів, з поверхнею. Наприклад, робота сканувального тунельного мікроскопа (СТМ) ґрунтується на явищі проходження тунельного струму між металевим вістряем і провідним зразком, а силова взаємодія між атомами зонда і поверхні є в основі роботи атомно-силового мікроскопа (АСМ), який не потребує спеціальної підготовки досліджуваного зразка і має високу точність вимірювань (до одиниць ангстрема).

Зазвичай, отримане за допомогою СТМ чи АСМ зображення поверхні складно проаналізувати через спотворення, які властиві методам зондової мікроскопії. Щоб виділити корисний сигнал, необхідно усунути спотворення, зумовлені неідеальністю чи термодрейфом сканера і нахилом зразка відносно осі зонда. Для цього методом найменших квадратів будують апроксимувальну поверхню першого чи другого порядків та виконують поворот площини на кут між нормаллю до поверхні зразка та віссю Z. Отже, практично завжди результати первинного сканування піддаються математичному опрацюванню. Для цього використовують програмне забезпечення, яким безпосередньо забезпечений сканувальний зондовий мікроскоп.

АСМ зображення формується в процесі сканування поверхні зондом мікроскопа, який схожий з рухом електронного променя по екрану в електронно-променевої трубки телевізора (рис. 1). Зонд рухається вздовж лінії (рядка) спочатку в прямому, а згодом у зворотному напрямі (рядкова розгортка), після цього переходить на наступний рядок (кадрова розгортка). Реєструють інформацію про рельєф поверхні, зазвичай, у процесі прямого проходження.

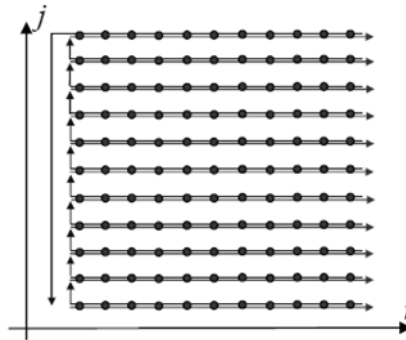


Рис. 1. Схема процесу сканування [1].

Інформацію від зонда сканувального мікроскопа записують у вигляді двовимірного масиву a_{ij} розміром $n \times n$ (зазвичай 256×256 або 512×512 елементів). Кожному значенню пари індексів ij відповідає певна точка поверхні в межах поля сканування з координатами $x_i = x_0 + i \cdot \Delta x$, $y_j = y_0 + j \cdot \Delta y$, де x_0 та y_0 – відстані між сусідніми точками вздовж осей X і Y , у яких записано інформацію. Візуалізують зображення поверхні $z = f(x,y)$ за допомогою засобів комп'ютерної графіки, головню, у вигляді три- (3D) або двовимірних (2D) зображень, які є вихідними результатами АСМ-досліджень [1]. У разі 2D візуалізації кожній точці поверхні $z = f(x,y)$ відповідає певний колір (рис. 2).

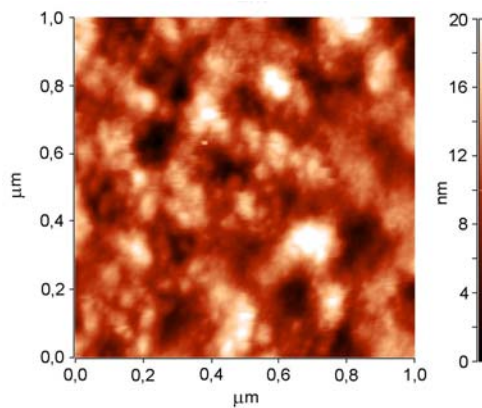


Рис. 2. Візуалізація поверхні поруватого кремнію у вигляді 2-D АСМ зображення.

Незважаючи на те, що основним призначенням АСМ є можливість дослідження топографії поверхні на нанорівні та її локальних властивостей, цей метод у випадку засто-

сування інформаційних технологій цифрового опрацювання зображень дає змогу отримати інформацію про структурні та інші фізико-механічні характеристики поверхні досліджуваного об'єкта. Зокрема, на підставі аналізу 2D зображення поверхні поруватого кремнію (див. рис. 2) можна оцінити ступінь поруватості матеріалу в приповерхневій ділянці. Поруватість p є важливою структурною характеристикою поруватих матеріалів, яку визначають за допомогою виразу

$$p = \frac{V - V_m}{V} = \frac{V_{por}}{V}, \quad (1)$$

де V_m , V_{por} , V – об'єми матеріалу, порожнин і загальний об'єм поруватого шару, відповідно [3–5].

Нижче запропоновано спосіб визначення ступеня поруватості за допомогою аналізу АСМ зображення поверхні поруватого матеріалу, який розбиває поверхню на $n \times n$ елементів (точок на зображенні) площею $x_0 \times y_0$, що є основою паралелепіпеда, висоту якого визначають за кольором точки. Сума об'ємів усіх паралелепіпедів становитиме об'єм матеріалу V_m , а добуток усієї площі поверхні на максимальну висоту – загальний об'єм поруватого шару V .

Для аналізу точкових зображень використовували вбудований у Microsoft .NET Framework клас `Bitmap` і його метод: `public Color GetPixel(int x, int y)`.

У підсумку кожній точці АСМ зображення поставлено у відповідність висоту поверхні. Описаний алгоритм реалізований мовою C#. Інтерфейс розробленої програми показаний на рис. 3.

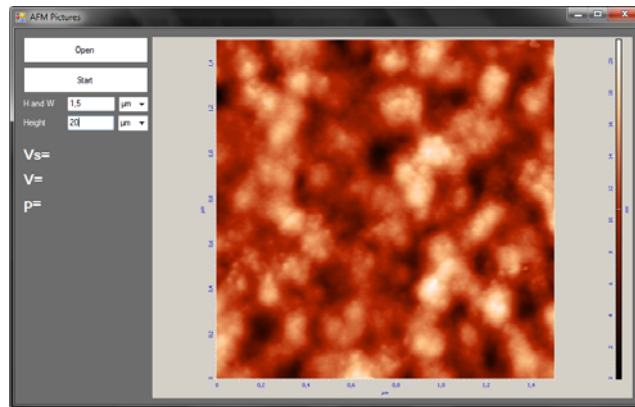


Рис. 3. Інтерфейс програми, яка визначає ступінь поруватості на підставі аналізу АСМ зображення поверхні поруватого матеріалу.

У програмі передбачена можливість завантаження растрових точкових АСМ зображень, які містять два робочі поля розміром 256×256 та 9×256 елементів, що відображають, відповідно, рельєф дослідженої поверхні і масштаб перепаду висот нерівностей. Задавши розміри сканованої ділянки поверхні й максимальне значення висоти рельєфу, можна виконати необхідні обчислення. Результатом роботи програми є обчислені значення об'ємів матеріалу V_m та поруватого шару V , а також ступінь поруватості p .

Зазвичай, зображення, сформовані різними інформаційними системами, спотворені дією завад. Зокрема, втрати й артефакти стиснення характерні для растрового формату збереження графічної інформації JPEG (Joint Photographic Experts Group). Це ускладнює як візуальний аналіз зображень, так і їхнє автоматичне опрацювання. Для зменшення похибки, яка зумовлена випадковими значеннями в разі визначення кольору точки, доцільно застосувати фільтрацію зображення, наприклад, за допомогою медіанного фільтра [6–10]. Унаслідок фільтрації випадкові викиди чи провали завжди будуть на краю масиву і не ввійдуть до відфільтрованого зображення. Уникнення похибок у ході визначення кольору точки є особливо важливим у випадку аналізу робочого поля, яке відображає масштаб висоти нерівностей.

Наголосимо, що запропонований спосіб визначення поруватості на підставі аналізу АСМ зображення враховує тільки відкриті пори, які виходять на поверхню. Крім того, недоліком усіх методів зондової мікроскопії є скінченний розмір робочої частини зонда, що зменшує просторову роздільну здатність мікроскопів та спотворює зображення поверхні з нерівностями рельєфу, які сумірні з характерними розмірами робочої частини зонда. Фактично одержане зображення є “згорткою” зонда і досліджуваної поверхні. Як наслідок, отримані значення поруватості будуть дещо занижені. Частково цю проблему можна вирішити за допомогою методів відновлення вихідного рельєфу поверхні, які ґрунтуються на комп’ютерному опрацюванні результатів АСМ досліджень з урахуванням конкретної форми зондів, зокрема, способом числового сканування зображення інвертованим зондом [11–13]. Для визначення форми робочої поверхні зонда зазвичай використовують тестові структури, які містять сумірні з вістрям нерівності з вертикальними стінками, наприклад, сходинки або шипи [14]. Однак для підвищення точності отриманих результатів вагомим є пошук способів урахування об’єму закритих пор і таких, які виходять на бічну поверхню стінок між порами.

Отже, на підставі цифрового опрацювання АСМ зображень поверхні поруватого кремнію оцінено ступінь його поруватості, який був у межах 55–75 % для різних зразків, отриманих у різних технологічних умовах. Для зменшення похибки в ході визначення висоти рельєфу доцільно використовувати фільтрацію зображення. Підвищити точність обчислень можна також за допомогою числових методів відновлення рельєфу поверхні з урахуванням конкретної форми зонда АСМ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Миронов В. Л.* Основы сканирующей зондовой микроскопии / В. Л. Миронов. – Нижний Новгород : Ин-т физики микроструктур РАН, 2004. – 114 с.
2. *Оленич І. Б.* Фізичні основи нанотехнологій : [навч. посібник] / І. Б. Оленич. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2014. – 232 с.
3. *Cullis A. G.* The structural and luminescence properties of porous silicon / A. G. Cullis, L. T. Canham, P. D. J. Calcott // *J. Appl. Phys.* – 1997. – Vol. 82. – P. 909–965.
4. *Bisi O.* Porous silicon : a quantum sponge structure for silicon based optoelectronics / O. Bisi, S. Ossicini, L. Pavesi // *Surf. Sci. Rep.* – 2000. – Vol. 38. – P. 1–126.
5. *Monastyrskii L. S.* Composition and properties of thin films on porous silicon surface / L. S. Monastyrskii, T. I. Lesiv, I. B. Olenych // *Thin Solid Films.* – 1999. – Vol. 343–344. – P. 335–337.

6. *Фисенко В. Т.* Компьютерная обработка и распознавание изображений / В. Т. Фисенко, Т. Ю. Фисенко. – СПб. : СПбГУ ИТМО, 2008. – 192 с.
7. *Прэтт У.* Цифровая обработка изображений / У. Прэтт. – М. : Мир, 1982. – Т. 2. – 478 с.
8. *Сойфер В. А.* Компьютерная обработка изображений. Ч. 2. Методы и алгоритмы / В. А. Сойфер // Соросовский образовательный журн. – 1996. – № 3. – С. 110–121.
9. *Давидов А. В.* Цифрова обробка сигналів [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://cozap.com.ua/text/11332/index-16.html>.
10. *Воробьев Н.* Одномерный цифровой медианный фильтр с трехотсчетным окном [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://chipinfo.ru/literature/chipnews/199908/29.html>.
11. *Williams P. M.* Blind reconstruction of scanning probe image data / P. M. Williams, K. M. Shakesheff, M. C. Davies [et al.] // J. Vac. Sci. Technol. B. – 1996. – Vol. 14, N 2. – P. 1557–1562.
12. *Keller D. J.* Reconstruction of STM and AFM images distorted by finite-size tips / D. J. Keller // Surf. Sci. – 1991. – Vol. 253. – P. 353–364.
13. *Xu S.* Calibration of the scanning (atomic) force microscope with gold particles / S. Xu, M. F. Arnsdorf // J. Microsc. – 1994. – Vol. 173. – P. 199–210.
14. *Reiss G.* Scanning tunneling microscopy on rough surfaces: Tip-shape-limited resolution / G. Reiss, J. Vancea, H. Wittmann [et al.] // J. Appl. Phys. – 1990. – Vol. 67. – P. 1156–1159.

*Стаття: надійшла до редакції 01.06.2016,
доопрацьована 08.06.2016,
прийнята до друку 10.06.2016.*

APPLICATION OF INFORMATION TECHNOLOGY FOR ANALYSIS OF AFM RESEARCH RESULTS

I. Olenych, V. Matviishyn

*Ivan Franko National University of Lviv,
50 Drahomanov St., UA-79005 Lviv, Ukraine
iolenych@gmail.com*

In this work we have implemented method for determining the porosity in the surface area by analyzing AFM images of porous materials surface. To analyze of raster images we are used the built-in Microsoft .NET Framework Bitmap class and method GetPixel. Based on graphic information in bitmap format the structural properties of porous materials were studied. The deviation reasons of the calculations results from actual values of porosity were found and ways to improve the accuracy of calculations were suggested.

Key words: atomic force microscopy, imaging surface, filtering images, porosity, computer recovery relief.