

УДК 681.2–5

© М. А. Михайлов, В. В. Манойлов

ПОСТОБРАБОТКА СЗМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

В статье анализируются факторы, вносящие искажения при проведении исследования топологии поверхности при использовании сканирующего зондового микроскопа, и предлагаются методы устранения их влияния в процессе постобработки изображений. Особое внимание уделяется решению прямой и обратной задач при исследованиях параметров системы автоматического регулирования сканера и его аппаратной функции.

Кл. сл.: СЗМ, решение обратной задачи, аппаратная функция, пьезосканер

ВВЕДЕНИЕ

При проведении исследований топологии поверхности с использованием сканирующих зондовых микроскопов могут возникать различные по физической природе и форме явления, искажающие топологию поверхности. В данной работе проводится исследование различных факторов, вносящих искажения, и указываются способы их устранения.

Проблему влияния искажений можно решить несколькими путями.

1. Изменять конструкцию отдельных узлов сканирующего зондового микроскопа, повышая точность измерений, и минимизировать влияние помех аппаратными средствами.

2. Производить обработку измерительного сигнала, повышая соотношение сигнал—шум.

Первый путь решения проблемы связан с дорогостоящей научно-исследовательской работой и большими затратами на производство новых узлов. Второй метод позволяет с меньшими затратами улучшить результаты измерений на существующем оборудовании. Обработку сигналов можно производить при помощи аналоговых методов и соответствующих устройств. Альтернативой аналоговым методам являются цифровые методы обработки сигналов. Цифровые методы обладают более богатым разнообразием алгоритмов и возможностей. Кроме того, цифровые методы позволяют производить обработку не только в процессе измерения, но и после эксперимента — постобработка. Цифровые методы также обладают возможностью простого изменения параметров алгоритма обработки сигналов и самого алгоритма автоматического управления сканером при малых

временных и материальных затратах по сравнению с аналоговыми методами. При использовании аналоговых методов обработки сигналов изменение параметров алгоритмов управления и алгоритмов обработки сигналов сопряжено с изменением принципиальной электрической схемы. С помощью цифровых методов возможно проще добиться более высокой точности по причине отсутствия влияния таких факторов, как температурный дрейф и других внешних шумов.

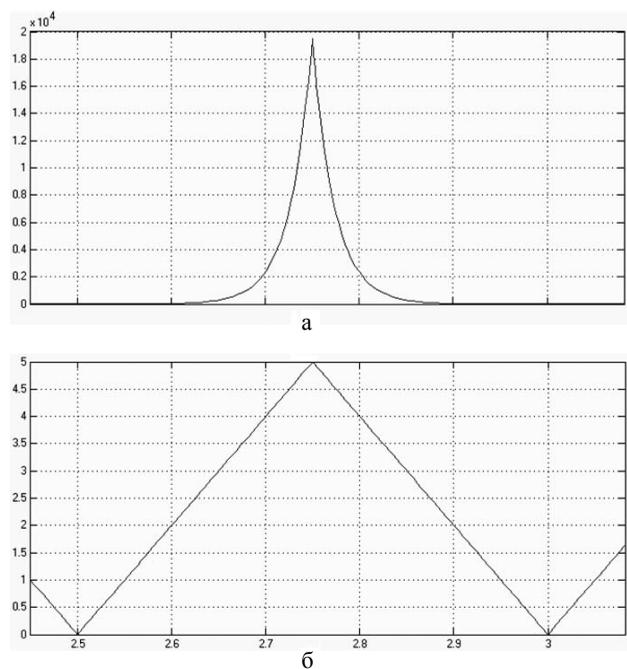


Рис. 1. Искажение треугольной структуры.
а — искаженный сигнал, б — исходный сигнал

Задача работы была сформулирована следующим образом.

1. Оценить (по возможности, количественно) искажения в результате решения прямой задачи в управлении сканером с учетом действия шумов и помех.

2. Наметить пути и разработать алгоритмы решения обратной задачи, в том числе с учетом параметров шумов и помех.

3. Разработать программное обеспечение для решения обратной задачи.

4. Провести количественную оценку результатов решения обратной задачи с помощью разработанных алгоритмов и программ.

При анализе помех и результатов обработки сигналов мы будем использовать критерий — близость формы сигнала по значениям невязки

$$\delta(x) = g(x) - w(x),$$

где $\delta(x)$ — величина невязки; $g(x)$ — измененный сигнал; $w(x)$ — изначальный сигнал.

Анализ искажения будет проводиться в два этапа:

1) выявить основные эффекты, вносящие искажения, и описать математически эти искажения, т. е. решить прямую задачу;

2) решить математически обратную задачу, из чего получим алгоритм обработки изображения.

Разберем основные эффекты, вносящие искажения. Рассмотрим все эффекты на примере двухмерного случая — профилей поверхностей, получаемых при проходе зонда.

ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

Туннельный эффект описывается формулой (1)

$$z_{np}(x) = I_0 k e^{\left(\frac{f_1 - f_2}{2}\right)^2} z(x), \quad (1)$$

где $z_{np}(x)$ — искаженный профиль поверхности; I_0 — опорный ток; k — коэффициент соответствия тока и расстояния; f_1, f_2 — работа выхода материала зонда и исследуемого образца; $z(x)$ — исходный профиль поверхности [1].

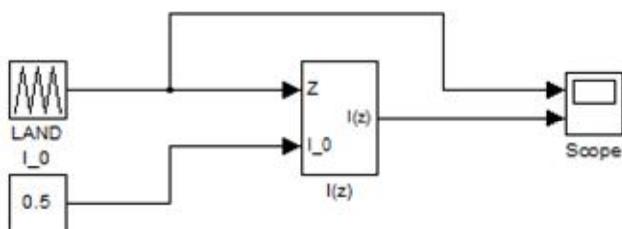


Рис. 2. Модель искажений, вносимых туннельным эффектом. (Используемые элементы пакета моделирования: "Repeating Sequence", "Constant", "Scope", "Subsystem")

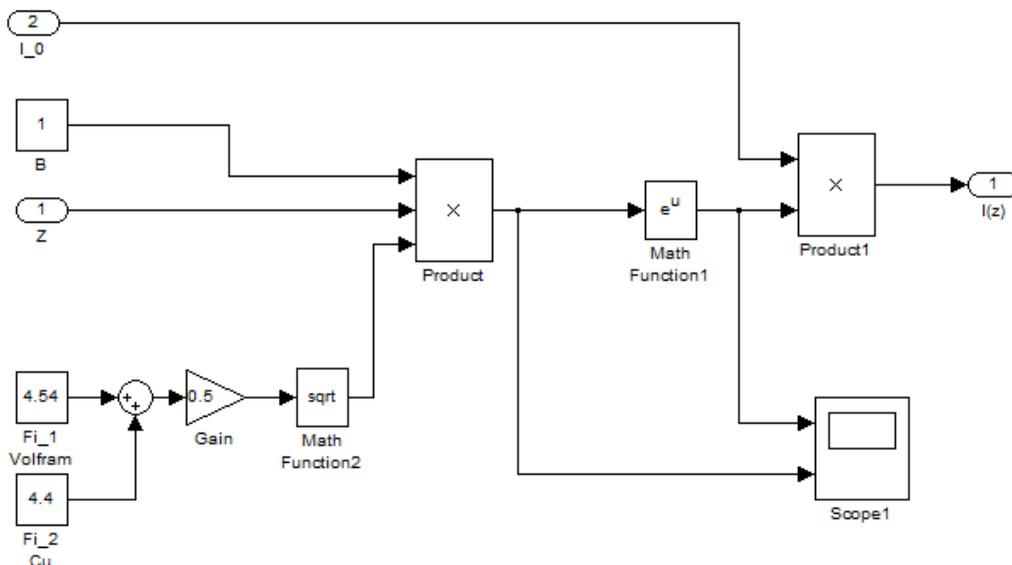


Рис. 3. Модель туннельного эффекта.

Используемые элементы пакета моделирования: "Add", "Gain", "Math Function", "Product", "In", "Out", "Constant", "Scope", "Subsystem")

Данный эффект проявляется на плавно возрастающем профиле, например треугольной формы. Искаженный сигнал представлен на верхнем графике (рис. 1, а), а изначальный сигнал на нижнем (рис. 1, б). Моделирование произведено с помощью программного пакета MatLab Simulink.

Модель, на которой были получены сигналы рис. 1, изображена на рис. 2 и 3 [2].

Решение обратной задачи сводится к выводу из формулы (1) исходного профиля поверхности $z(x)$:

$$z(x) = \frac{\ln(z_{np}(x))}{\frac{I_0 k}{\left(\frac{f_1 - f_2}{2}\right)^2}}. \quad (2)$$

ФОРМА ЗОНДА

Так как зонд не является идеально тонким стержнем, а имеет форму конуса или параболоида, то форма зонда накладывает погрешность на получаемый профиль поверхности (рис. 4) [1]. Этот эффект возникает из-за взаимодействия между зондом и поверхностью помимо кончика зонда другими его поверхностями. Например, туннелирование электронов в сканирующем туннельном

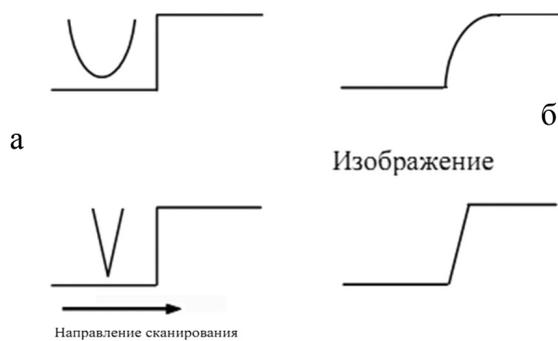


Рис. 4. Типовые искажение, вносимые формой зонда. а — профили зонда и рельефа, б — изображения

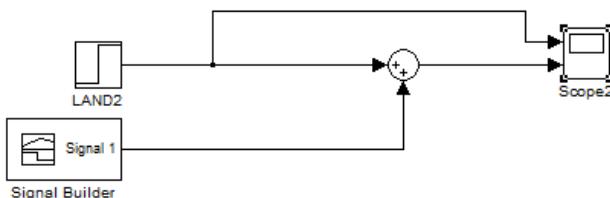


Рис. 5. Модель искажений, вносимых формой зонда

микроскопе или силовое взаимодействие в атомно-силовом микроскопе. С математической точки зрения это означает, что функции, описывающие форму зонда и поверхности, имеют больше одного решения. Начиная с этой точки в случае параболоидальной формы зонда информация о поверхности получается не кончиком зонда, а его гранью. При этом искажения имеют форму функции зонда со знаком минус.

Таким образом, форму зонда можно получить, сканируя эталонную ступенчатую структуру, отфильтровав другие шумы, или получив изображение зонда в электронном микроскопе с заведомо более высокой точностью. Зная функцию или таблицу, задающие форму зонда, можно отфильтровывать искажения, вносимые этим эффектом, находя большие перепады высот, сравнивать профиль грани с формой зонда и вычитать при необходимости.

Данный эффект промоделирован на рис. 5 и 6.

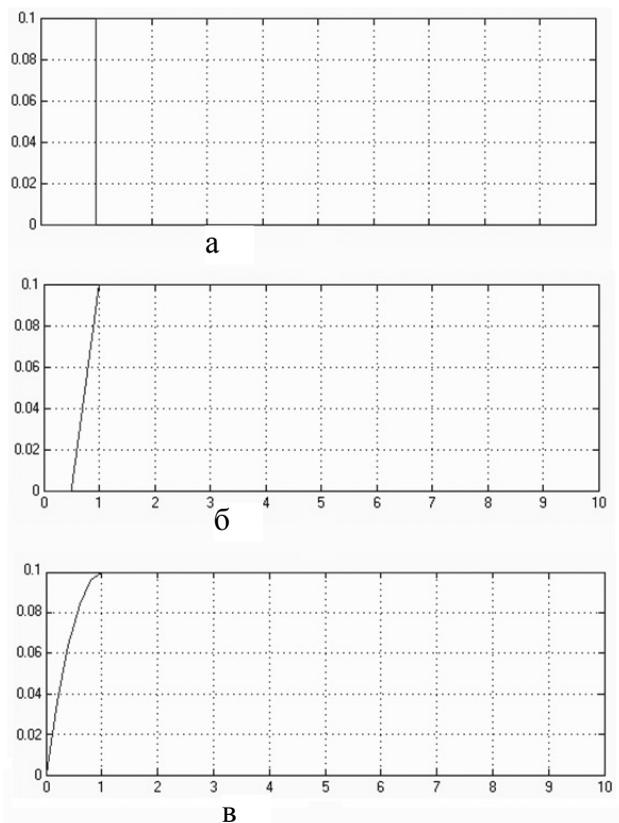


Рис. 6. Искажения, вносимые формой зонда. а — исходный сигнал; б — искажение зондом треугольной формы; в — искажение зондом параболоидной формы

АППАРАТНАЯ ФУНКЦИЯ СКАНЕРА

Аппаратная функция сканера описывается уравнением

$$m_s \ddot{z}_s = -\alpha_s \dot{z}_s - k_s (z_s - \gamma U(t)), \quad (3)$$

где z_s — смещения от положения равновесия сканера с образцом; m_s , α_s , k_s — эффективная масса, коэффициент трения и жесткость колебательной системы сканера с образцом; $U(t)$ — управляющее напряжение, приложенное к пьезоэлементу сканера; γ — чувствительность пьезосканера [3].

Зная частоту резонанса сканера (вычисляется из АЧХ сканера) и паспортные данные (масса) можно решить уравнение. Таким образом, решение данного уравнения будет являться решением прямой задачи.

Данный эффект промоделирован (прямая задача) [2] на рис. 7 и 8.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРОФИЛЯ

Сигнал реакции сканера можно представить в виде математической свертки импульсной характеристики сканера и входного сигнала — исследуемой поверхности, которая является уравнением Фредгольма 1-го рода:

$$\tilde{g}(x) = h(x) \cdot w(x), \quad (4)$$

$$\tilde{g}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(x, \omega) w(\omega) d\omega, \quad (5)$$

где $w(x)$ — истинный профиль поверхности; $h(x)$ — ядро уравнения (импульсная характеристика); $\tilde{g}(x)$ — искаженный профиль поверхности.

По теореме Бореля, фурье-образ свертки двух функций равен произведению их фурье-образов. Т. е. если

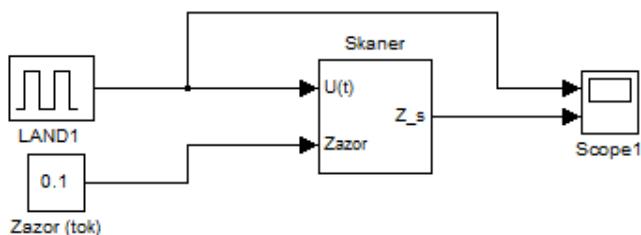


Рис. 7. Модель искажений, вносимых переходной функцией сканера

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(x) e^{i\omega x} dx \quad (6)$$

и

$$W(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} w(x) e^{i\omega x} dx, \quad (7)$$

где $H(\omega)$ — фурье-образ ядра уравнения (импульсной характеристики), $W(\omega)$ — фурье-образ исходного профиля, то

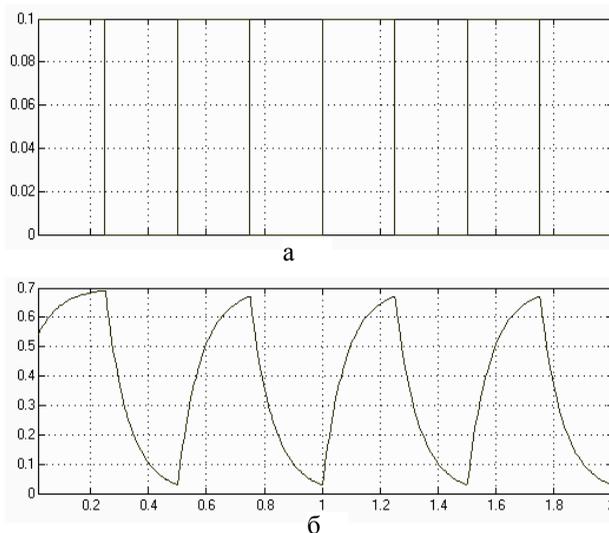


Рис. 8. Искажения, вносимые переходной функцией сканера.

а — исходный профиль поверхности вида , б — искаженный

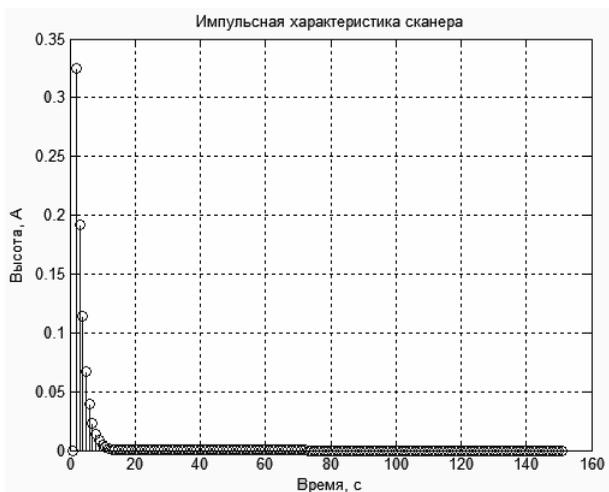


Рис. 9. Импульсная характеристика сканера $h(x)$

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} H(\omega)W(\omega)e^{i\omega x} dx, \quad (8)$$

где $G(\omega)$ — фурье-образ искаженного профиля.

Данное свойство дает возможность косвенного вычисления математической свертки и в дальнейшем решить обратную задачу.

Зная форму переходной характеристики сканера, подбираем подходящий полином z -функции, описывающий известную переходную характеристику сканера (рис. 9) и ее фурье-образ, как в уравнении (6).

Аналогично уравнению (6) запишем фурье-образ искаженного профиля

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}(x)e^{i\omega x} dx. \quad (9)$$

Тогда, решая обратную задачу методом преобразования Фурье (или инверсной фильтрации), искомый профиль поверхности можно записать в виде интегрального уравнения, исходя из уравнений (6)–(9):

$$w(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(\omega)}{H(\omega)} e^{-i\omega x} d\omega. \quad (10)$$

Рассмотрим поведение спектров. При $|\omega| \rightarrow 0$, $G(\omega)$ стремится к некому константному значению "белого шума", а $H(\omega) \rightarrow 0$. Это означает, что решение методом преобразования Фурье — неустойчиво и сингулярно. [4, с. 87] При воздействии внешних шумов с некоторой дисперсией на систему неустойчивость решения повышается, т. к. каждому элементу g соответствует не единственный элемент w [5, с. 26] Для устранения неустойчивости можно использовать метод преобразования Фурье с регуляризацией Тихонова. Решение уравнения имеет вид

$$w(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H(-\omega)G(\omega)}{|H(\omega)|^2 + \alpha\omega^{2p}} e^{-i\omega x} d\omega, \quad (11)$$

где $\alpha > 0$ — параметр регуляризации, а $p \geq 0$ — порядок регуляризации. При правильном выборе параметров $w(x)$ получается достаточно близким к исходному профилю. [6] На основании вышеизложенных выводов нами было разработано программное обеспечение в среде программирования MatLab. Результаты моделирования представлены на рис. 10–12.

При решении данной задачи мы столкнулись с эффектом Гиббса (рис. 12) — "звон", или ложные волны. Это связано с разрывом непрерывно-

сти функции на краях. Уменьшить этот эффект получается при помощи добавления нулевых точек с двух сторон (расширения) [5, с. 252].

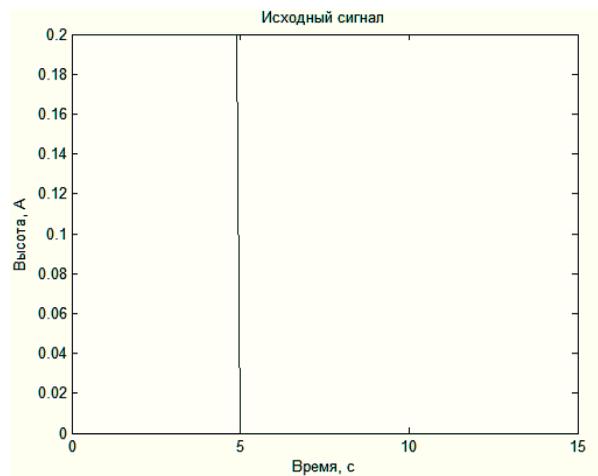


Рис. 10. Исходный профиль поверхности вида

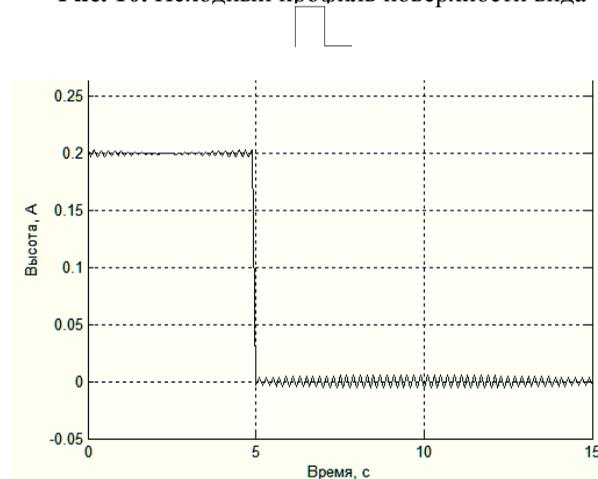


Рис. 11. Восстановленный сигнал профиля ($p = 1$, $\alpha = 1 \cdot 10^{-9}$, без расширения по краям)

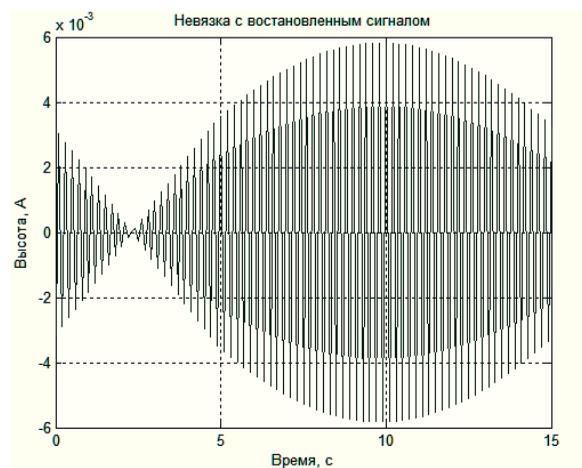


Рис. 12. Невязка исходного сигнала с восстановленным (рис. 11)

ВЫВОДЫ

Выявлены параметры математических моделей следующих трех факторов, вносящих искажения в СЗМ-изображения:

- 1) влияние туннельного эффекта;
- 2) форма зонда;
- 3) аппаратная функция системы управления сканером.

Использование этих математических моделей и моделей стандартных воздействий (ступень, треугольник, прямоугольник и т. п.) позволило численно оценить параметры искажений, вносимых рассмотренными факторами, т. е. результаты решений прямых задач. Устранение рассмотренных искажений было выполнено путем решения обратных задач методом Тихонова с различными параметрами регуляризации. Устранение искажения с помощью предложенных алгоритмов предполагается реализовать в программном обеспечении постобработки изображений, полученных методом сканирующей зондовой микроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород: Российская академия наук. Институт физики микроструктур, 2004. 110 с.
2. Манойлов В.В., Михайлов М.А. Оценка параметров цифрового управления в зондовом микроскопе "Nano educator" на основе физико-математической модели // Научное приборостроение. 2012. Т 23, № 2. С. 98–104.

3. Голубок А.О., Пинаев А.Л., Чивилихин Д.С. и др. Динамическая силовая литография на тонких металлических пленках в сканирующем зондовом микроскопе с пьезорезонансным датчиком локального взаимодействия // Научное приборостроение. 2011. Т 21, № 1. С. 31–43.
4. Сизиков В.С. Обратные прикладные задачи и MatLab: Учебное пособие. СПб.: Изд-во Лань, 2011. 256 с.
5. Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов: О редукции к идеальному прибору в физике и технике. М.: Сов. радио, 1979. 272 с.
6. Сизиков В.С., Кривых А.В. Восстановление непрерывных спектров адаптивным способом вычислительных экспериментов с регуляризацией // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2013. № 3 (85).
7. Binnig G., Rohrer H. Scanning tunneling microscopy // Helv. Phys. Acta. 1982. Vol. 55, nu. 6. P. 726–735.

НИУ ИТМО, г. Санкт-Петербург (Михайлов М.А.)

Институт аналитического приборостроения РАН,
г. Санкт-Петербург (Манойлов В.В.)

Контакты: Манойлов Владимир Владимирович,
manoilov_vv@mail.ru

Материал поступил в редакцию: 14.03.2014

POST-PROCESSING OF SPM-IMAGES BY THE CALCULATION OF INVERSE TASKS

M. A. Mikhaylov¹, V. V. Manoylov²

¹ITMO University, Saint-Petersburg, RF

²Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg, RF

The article analyzes the factors that introduce distortions on surface topology investigating using a scanning probe microscope and suggests methods to eliminate their influence on post-processing images. Furthermore the answer to direct and inverse problems on investigating automatic control system parameters and scanner hardware functions is generally examined.

Keywords: SPM, calculation of inverse tasks, hardware function, piezo-scanner

REFERENCES

1. Binnig G., Rohrer H. Scanning tunneling microscopy.
Helv. Phys. Acta., 1982, vol. 55, nu. 6, pp. 726–735.

Contacts: *Manoylov Vladimir Vladimirovich*,
manoilov_vv@mail.ru

Article arrived in edition: 14.03.2014