

快速与精确的 AFM 探针模型重构研究

袁帅^{①②}, 董再励^①, 缪磊^①, 席宁^{①③}, 王越超^①

① 中国科学院沈阳自动化研究所, 机器人学国家重点实验室, 沈阳 110016;

② 中国科学院研究生院, 北京 100049;

③ Department of Electrical and Computer Engineering, Michigan State University, USA

E-mail: yuanshuai@sia.cn

2009-06-22 收稿, 2009-10-30 接受

国家自然科学基金重点项目(批准号: 60635040)、国家高技术研究发展计划(编号: 2009AA04Z313, 2009AA03Z316)和中国科学院、国家外国专家局创新团队国际合作伙伴计划资助项目

摘要 在 AFM 扫描成像中, 由于探针具有展宽效应等因素, 导致扫描图像失真. 从数学形态学角度看, 可以认为真实图像失真是受到了探针针尖形貌卷积的作用, 因而不能反映样品表面的真实形貌. 采用反卷积运算处理可以排除这类扫描成像干扰, 但需要准确知道探针针尖形貌, 这对于 AFM 纳米扫描图像的精确重构具有实际意义. 在已有的探针建模算法中, 基于数学形态学的盲建模算法得到了广泛使用, 然而该算法存在运算时间较长, 最优降噪门限阈值很难确定等问题. 针对这些问题, 提出一种新的盲建模方法, 可以提高盲建模运算速度, 并且实现 AFM 扫描图像的精确重构. 仿真和实验结果证明了上述研究方法的可行性和有效性.

关键词

原子力显微镜
探针盲建模算法
多孔铝
数学形态学

扫描探针显微镜包括扫描隧道显微镜和原子力显微镜(atom force microscope, AFM)能够在原子尺度上进行观测和操作, 因而在纳米科学技术中得到广泛使用^[1~4]. 由于 AFM 探针在成像时导致展宽效应, 会严重地影响 AFM 的成像质量^[2]. 从数学形态学角度看, AFM 成像是由探针针尖形貌和样品表面形状卷积(膨胀运算)而成, 在样品表面的高度图中产生了明显的失真. 采用反卷积运算处理可以有效排除这类扫描成像干扰, 但需要已知探针形貌^[5].

目前为止, 众多研究者已经提出多种方法建立探针针尖形貌. 其中一种是采用扫描电子显微镜观测获得, 但难以直接和精确地建立探针三维形貌^[6]. 另一种方法是通过扫描特定样品建立探针针尖模型.

1993 年, Keller 等人^[7]提出扫描已精确标定的参考表面可以建立探针形貌. 1994~1998 年, Villarrubia 等人^[8~10]发表多篇论文阐述了通过扫描尖锐变化参考表面和采用盲建模算法建立探针针尖模型的方法.

2000 年, Dongmo 等人^[11]使用该算法完成了三坐标仪探针尖端的形貌建模, 并且与 SEM 探针图像进行了比较, 验证了该方法的有效性. 近年来, 有众多国外学者研究了盲建模的改进算法, 并据此对 AFM 扫描图像进行重构^[12~15].

目前探针建模主要采用两类方法. 一类方法通过对已确定的参考表面扫描建立探针形貌, 如纳米颗粒等物体^[16]. 另一类方法采用基于数学形态学的盲建模算法. 由于盲建模方法计算复杂, 需要大量计算时间, 因而建模效率很低, 同时噪声对探针建模也有很大影响, 难以有效地应用于 AFM 成像的修正和重构.

针对基于探针模型的 AFM 图像重构问题, 本文提出了一种快速新探针建模算法. 该方法提出了一种基于盲建模的探针建模改进方法, 可提高计算速度获得探针的精确形貌. 并采用数学形态学的腐蚀算法, 进行了 AFM 图像的重构实验验证.

1 探针建模的盲建模算法

AFM 扫描图像和样品形貌的关系可以用数学形态学公式(1)来描述^[8].

$$I = S \oplus P, \quad (1)$$

式中 P 为探针轮廓 T 的映像, \oplus 为数学形态学的膨胀运算.

AFM 图像的重构可用公式(2)描述^[8]:

$$S' = I \ominus P, \quad (2)$$

式中 \ominus 为数学形态学的腐蚀运算. 由(2)式可知, 重构图像 S 需要已知探针形貌 P .

探针形貌 P 重构的理论基础是基于数学形态学的盲建模算法^[8], 其基本原理是当样品表面 S 中存在足够尖锐、急剧变化的特征形貌时, 所对应得到的扫描数据就可以精确反映的探针形貌信息. 基于 AFM 扫描成像的每一像素点及其邻域形貌信息, 可以采用盲建模算法来计算探针局域形貌, 并将这些探针局域形貌集成完整的探针形貌.

盲建模算法: 在扫描成像 I 中, 若任一像素点 x 满足公式

$$\forall x \in I, \exists d \in P | P \subseteq I + d - x, \quad (3)$$

就可以利用下式(4)计算探针的轮廓^[8].

$$P_{i+1} \subseteq \bigcap_{x \in I} [(I - x) \oplus P_i^d(x)] \cap P_i, \quad (4)$$

式中的 d 是对应 P 在 I 中 x 处的位置变换矢量. P_{i+1} 是第 $i+1$ 次迭代运算的结果, $P_i^d(x)$ 是在 x 位置计算探针上界 P_i 在扫描图像中的位移矢量集合. 当 P_{i+2} 和 P_{i+1} 相同时, 说明已获得在 I 中蕴涵的探针针尖形貌. 由于该算法需要对用于建立探针模型的参考表面的成像中每一个像素进行处理, 所以计算量很大.

标定探针形貌的扫描图像 I 中的噪声对盲建模算法也有很大影响^[8], 当降噪阈值选取不适当时, 该算法的探针形貌估计会有很大误差^[18].

2 盲建模计算速度的改进方法

盲建模算法若在那那些能够反映探针形貌的特征点位置优先计算, 则算法的运算速度会得到提高^[10]. 为提高盲建模探针形貌估计的效率, 本文提出一种方法: ① 采用多尺度网格划分算法, 可有效提取特征点并进行探针形貌预估计. ② 运用探针映像 P 与扫描数据的包含关系, 排除无效计算点. ③ 提出基

于探针形貌估计更新判据的迭代改进算法.

2.1 基于多尺度网格划分算法的探针针尖形貌预估计

(i) 为了更有效地确定探针建模的特征点, 采用一系列边长为递增序列 $d, 2d, \dots, nd$ (d 为新探针针尖的半径, 可参考探针说明书. $n \leq 10$) 的正方形网格将扫描图像划分为多尺度的网格图像矩阵 I^m ($m=1, \dots, n$). 通过对不同尺度网格中的局部极值点搜索和处理, 可以排除无效的探针建模局部极值点. 图 1(a) 给出了多孔铝的 AFM 扫描图, 图 1(b) 显示了边长为 $2d$ 的正方形网格划分的图像矩阵 I^2 .

由下式给出了图像矩阵 I^m 的描述:

$$I^m = \begin{pmatrix} T_{1,1}^m \dots T_{1,q_i}^m \\ \vdots \\ \dots T_{j,k}^m \dots \\ \vdots \\ T_{p_i,1}^m \dots T_{p_i,q_i}^m \end{pmatrix}; \quad \begin{matrix} r_i = i \times d (i=1, \dots, n); m=1, \dots, n; \\ p_i = \text{Ceil}(h/r_i) (h: \text{height of } I); \\ q_i = \text{Ceil}(w/r_i) (w: \text{width of } I); \\ j=1, \dots, p_i; k=1, \dots, q_i; \end{matrix} \quad (5)$$

式中 $T_{j,k}^m$, j, k 为网格图像在全局图像中的位置, m 为正方形边长的递增序列号, r_i 为正方形网格的边长, p_i, q_i 为相应图像在网格划分后的图像块行列数.

图像 I 在多尺度网格的划分下所对应集合为 T^1, \dots, T^n (如式(6)); 并得到相应局部极值点集 D^1, \dots, D^n (如式(7)), 式中 $v_{p,q}^i$ 为网格图像 $T_{p,q}^i$ 中的局部极值点, 同时对间距小于 r_i 的极值点进行过滤, 保留最高点.

$$T^i = T_{1,1}^i \cup T_{1,2}^i \dots T_{p_i,q}^i \dots T_{p_i,q_i}^i, \quad (6)$$

$$D^i = \{v_{1,1}^i, \dots, v_{p_i,q}^i, \dots, v_{p_i,q_i}^i\}. \quad (7)$$

(ii) 对顶点集中的每个 D^i , 用数学形态学中交

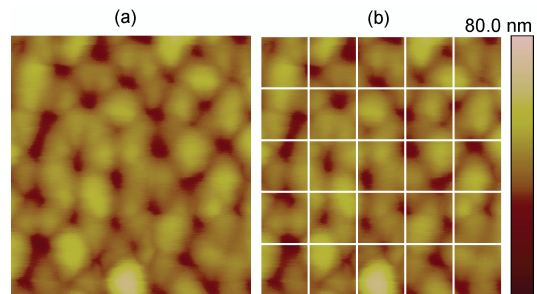


图 1 多孔铝成像的网格划分

集运算估算探针初始形貌:

(a) 首先, 用 D^i 中的任一极值点为中心, $2r_i$ 为边长的邻域内的图像信息估算原始探针形貌.

(b) 用 D^i 中全部极值点估算交集确定初始探针形貌:

$$P^i = P^i_{1,l} \cap \dots \cap P^i_{p,q} \dots \cap P^i_{p_i,q_i} \quad (8)$$

用上面的方法, 对所有尺度的顶点集 D^1, \dots, D^n 进行初始探针形貌估计, 得到不同尺度的 $P^1 \sim P^n$.

(iii) 使用“盲建模算法”以 P^n 为初始值建立探针估算模型(如图 2 所示), 图中的粗实线描述了探针针尖的初始估算形貌, (0,0)位置是探针针尖顶点. 并在该顶点用式(9)搜索两侧最低点, 由顶点和两侧最低点之间的估计值构成探针轮廓 P'_0 (图 2 中粗实线).

$$V_{\min} = \min_{I(x)} \{I(x) \mid x < 0\} \quad (9)$$

然后用盲建模算法对轮廓线 P'_0 进行迭代计算以得到较精确的探针形貌, 如图 2 细实线点 e, f 之间的探针估算 P_0 .

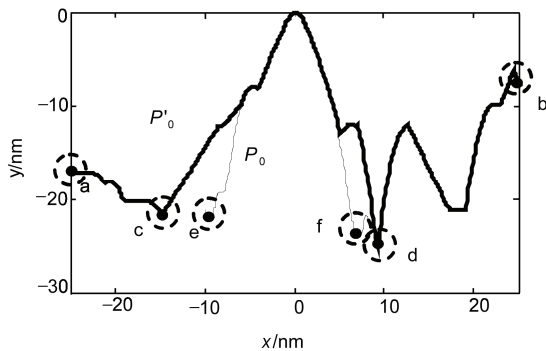


图 2 探针形貌预估计

(iv) 用 P_0 和前面初始探针形貌 $P^1 \sim P^n$ 分别进行比较(在探针顶点处重合, 计算 z 坐标的方差累积和 S_p)并得到最相近(S_p 最小)的第一个轮廓 P^i , 采用该轮廓所对应 D^i 作为探针建模算法中每次迭代时优先计算的特征点集.

2.2 运用探针映像 P 与扫描数据的包含关系排除 I 中无效计算点

原算法在每一次迭代运算中, I 中的所有点将参与运算, 而在改进算法中可以记录以前迭代运算中无效的点 a, b, c (如图 3 所示, P 为当前计算的探针形

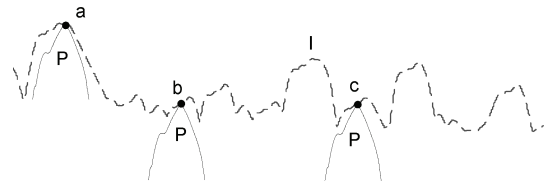


图 3 成像中的无效点

貌映像, I 为扫描线, 在 a 点附近的扫描线形貌都在 P 之上(除接触点 P 外). 根据盲建模算法原理, 在以后的迭代运算中, 这些无效点不再参与计算, 这样就减小了算法的计算量.

2.3 基于探针形貌估计更新判据的迭代改进算法

将公式(4)中的 $P_i^d(x)$ 展开如下:

$$P_i^d(x) = \{d \mid d \in P_i \wedge 0 \in I - x + d\} \quad (10)$$

原算法中需要对 P_i^d 中的全部 d 进行计算, 而在算法改进后, 当 x 取值变化时, 相应 $P_i^d(x)$ 中 d 就可能不必全部参与运算, 这样也就减少了算法的计算量. 算法改进具体过程如下: 假定算法是在 I 中 x 像素位置执行计算; 首先, 根据 $P_i^d(x)$ 中的约束条件, 找到一个位置变换矢量 d_i , 并计算该矢量对应的探针形状可能上界 ${}^d_i p_i$, 然后再找下一个

$${}^d_i p_i = (I - x + d) \cap p_i, \quad (11)$$

矢量 d_2 , 计算得到 ${}^{d_2}_i p_i$, 并计算 ${}_x p_i = {}^{d_1}_i p_i \cup {}^{d_2}_i p_i$ 后, 判断 ${}_x p_i$ 是否包含 P_b . 若成立, 则在 x 像素位置处结束计算, 跳转到下一个 x 像素位置执行相同的计算; 若不成立, 继续找下一个 d_i , 直到算法跳转或者是 $P_i^d(x)$ 中的 d 全部参与运算; 若算法在 I 中 x 位置运算结束的情况属于前者, 则算法改进后的计算量会得到减小, 否则, 与原算法相同.

2.4 算法仿真验证

在图 4(a)中, 存在尖锐, 狭长的特征物和陡峭的台阶边缘线, 算法改进前后恢复的探针形貌相同, 如图 4(b)所示. 算法改进前后的运算时间对比如下表 1 所示.

3 探针建模试验

本文的试验平台在 SPM(Veeco scope dimension 3100D)上进行. 试验环境温度 $18 \sim 21$ °C. 探针为 Veeco silicon Metrology Probes, 其共振频率是 300

kHz, 弹性系数是 $40 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$. 标定探针的样品为 MikroMasch 的多孔铝(PA01) [17]和标准栅格 TGZ02.

设定 SPM 工作在 Tapping 模式, 扫描成像角度 0° , 扫描频率为 $0.5\sim 1.1 \text{ Hz}$ 之间, 振幅 1 V .

采用扫描多孔铝和标准栅格的实验图像进行快速和最优估计探针形貌轮廓 [18]. 最后使用探针扫描单壁碳纳米管, 并对扫描图像进行重构, 通过对比扫描图像中碳纳米管宽度在重构前和重构后的变化, 验证了探针模型和重构方法的有效性.

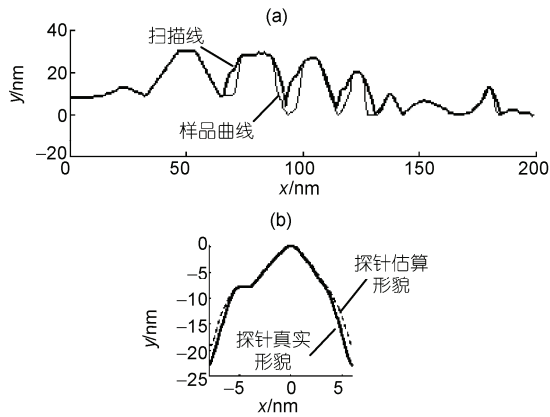
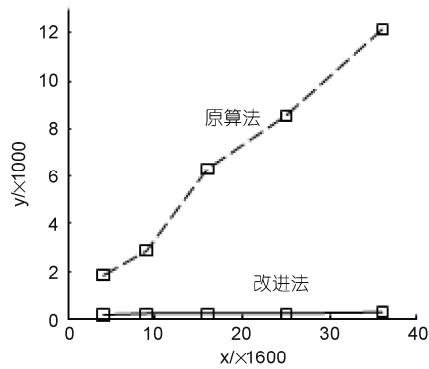


图 4 算法改进后的仿真结果

表 1 盲建模算法改进前后的计算时间比较

	原算法	改进算法
计算时间/s	142.68	10.49



数据量 ($\times 1600$)	4	9	16	25	36
原算法计算时间/s	1780	2843	6322	8537	12169
改进算法计算时间/s	141	185	205	225	238

图 5 探针建模算法改进后计算时间

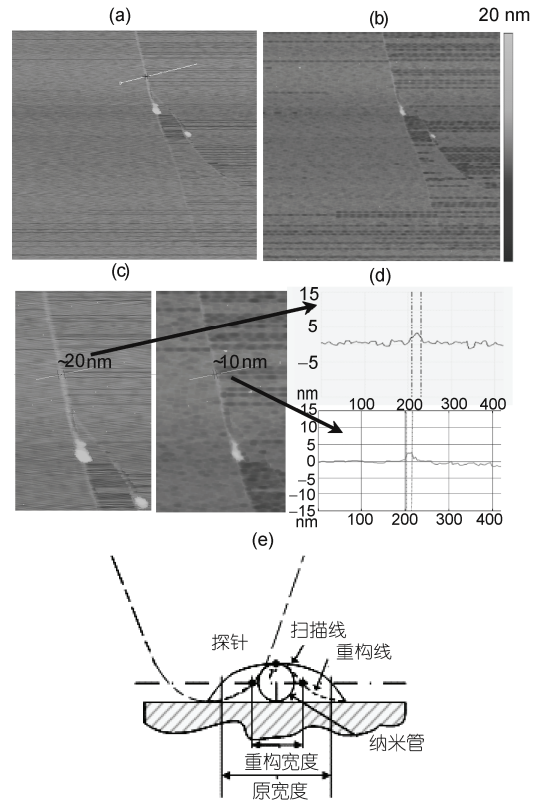


图 6 探针扫描碳纳米管重构实验图

3.1 算法改进后计算时间的加快

从图 5 得到, 随着算法处理数据量的增加, 改进后的算法执行时间与原算法相比较减少很多. 当数据量上升到一定值(16×1600)时, 因为算法改进后的运算加速收敛, 数据量的增加对计算量的影响很小, 所以改进后的算法运行时间增加缓慢, 而原算法呈现出线性增长的趋势.

3.2 基于探针模型对纳米管扫描图像的重构

在探针建模算法基础上, 使用探针扫描放置在云母上的碳纳米管, 如图 6(a), 图中碳纳米管宽度为 $\sim 20 \text{ nm}$; 对其进行重构试验, 得到重构结果如图 6(b), 重构图中纳米管宽度为 $\sim 10 \text{ nm}$. 将局部区域放大后如图 6(c), 截取对应的扫描线如图 6(d). 基于探针模型的碳纳米管扫描线和重构线如图 6(e)所示, 在理论上, 碳纳米管的宽度应该和其高度相一致($\sim 3 \text{ nm}$), 但是由于探针的展宽效应, 使其在扫描图像中的宽度和实际宽度相差甚远, 所以需要进行扫描图像的重构. 在实验中, 重构扫描图像中的碳纳米管宽度要比原扫描图像中的宽度平均窄 $\sim 10 \text{ nm}$, 因此图像质

量能够得到改善,使重构图像更接近真实的形状.并验证了基于精确探针模型的AFM成像重构算法的有效性.

4 结论

AFM扫描图像重构计算中需要建立探针的形貌.盲建模算法目前是最合适的算法,但是该算法需要

较长的计算时间,且容易受到图像中噪声的影响.本文中对探针针尖有效的预估计,排除图像中不能反映探针信息的无效点,对算法的核心进行改进,提高了算法的运算时间.同时为了保证算法的精度,采用文献[18]中的算法建立最优探针形貌,论文最后通过仿真计算和扫描碳纳米管图像进行重构的试验结果验证该方法的有效性.

参考文献

- 1 Bhushan B. Springer Handbook of Nano-technology. Berlin: Springer-Verlag Heidelberg, 2005
- 2 陈佩佩,董宏涛,陈龙,等.原子力显微术应用于活细胞及新鲜组织成像的新进展.科学通报,2009,54:2027—2032
- 3 田孝军,王越超,席宁,等.SWCNT的脉冲气流定向排列及AFM操作.科学通报,2008,53:251—256
- 4 王静,何世颖,徐丽娜,等.细菌表面镀镍的透射电子显微镜与原子力显微镜表征.科学通报,2007,52:1748—1752
- 5 Pingali G S, Jain R. Restoration of scanning probe microscope images. IEEE Workshop on Applications of Computer Vision, Dec 2, Palm Springs, CA, USA, 1992, 30: 282—289
- 6 Wickramasinghe H K. Scanning probe microscopy: Current status and future trends. J Vac Sci Technol A, 1990, 8: 363—368
- 7 Keller D J, Franke F S. Envelope reconstruction of probe microscope images. Surf Sci, 1993, 294: 409—419
- 8 Villarrubia J S. Morphological estimation of tip geometry for scanned probe microscopy. Surf Sci, 1994, 321: 287—300
- 9 Villarrubia J S. Algorithms for scanned probe microscope image simulation surface reconstruction and tip estimation. J Res Natl Inst Stan, 1997, 102: 425—454
- 10 Villarrubia J S. Strategy for faster blind reconstruction of tip geometry for scanned probe microscopy. SPIE, 1998, 3332: 10—18
- 11 Dongmo L S, Villarrubia J S, Jones S N, et al. Experimental test of blind tip reconstruction for scanning probe microscopy. Ultramicroscopy, 2000, 85: 141—153
- 12 Abdelhady H G, Allen S, Ebbens S J, et al. Towards nanoscale metrology for biomolecular imaging by atomic force microscopy. Nanotechnology, 2005, 16: 966—973
- 13 Tranchida D, Piccarolo S, Deblieck R A C. Some experimental issues of AFM tip blind estimation: The effect of noise and resolution. Meas Sci Technol, 2006, 17: 2630—2636
- 14 Shiramine K I, Muto S, Shibayama T, et al. Tip artifact in atomic force microscopy observations of InAs quantum dots grown in Stran-ski-Krastanow mode. J Appl Phys, 2007, 101: 033527
- 15 Zeng Z G, Zhu G D, Guo Z, et al. A simple method for AFM tip characterization by polystyrene spheres. Ultramicroscopy, 2008, 108: 975—980
- 16 David J K, Fransiska S F. Envelope reconstruction of probe microscope images. Surf Sci, 1993, 294: 409—419
- 17 Jessensky O, Müller F, Gösele U. Self-organized formation of hexagonal pore structures in anodic Alumina. J Electrochem Soc, 1998, 145: 3735—3740
- 18 袁帅,董再励,缪磊,等.基于精确探针模型的AFM图像重构研究.仪器仪表学报,2009,30:1117—1122