



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ,
ПАТЕНТАМ И ТОВАРНЫМ ЗНАКАМ

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ПАТЕНТУ

(21), (22) Заявка: 2006127131/28, 27.07.2006

(24) Дата начала отсчета срока действия патента:
27.07.2006

(45) Опубликовано: 10.06.2008 Бюл. № 16

(56) Список документов, цитированных в отчете о
поиске: Yurov V.Y., Klimov A.N. Scanning
tunneling microscope calibration and
reconstruction of real image: Drift and slope
elimination, Rev. Sci. Instrum., vol.65,
no.5, p.1551, 1994. RU 2175761 C2,
10.11.2001. US 5107113 A, 21.04.1992. US
6178813 B1, 30.01.2001.

Адрес для переписки:

107023, Москва, ул. Большая Семеновская, 31,
корп.2, кв.2, Р.В. Лапшину

(72) Автор(ы):

Лапшин Ростислав Владимирович (RU)

(73) Патентообладатель(и):

Лапшин Ростислав Владимирович (RU)

(54) СПОСОБ КОРРЕКЦИИ ИСКАЖЕННЫХ ДРЕЙФОМ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПОВЕРХНОСТИ,
ПОЛУЧЕННЫХ НА СКАНИРУЮЩЕМ ЗОНДОВОМ МИКРОСКОПЕ

(57) Реферат:

Изобретение относится к области сканирующей зондовой микроскопии и может использоваться на любом приборе из семейства сканирующих зондовых микроскопов, возможно также применение способа на растровом электронном микроскопе. Коррекция дрейфа осуществляется в автоматическом режиме. Вызываемые дрейфом искажения описываются линейными преобразованиями, которые справедливы в случае, когда скорость дрейфа микроскопа изменяется достаточно медленно. В качестве исходных данных используется одна или две пары встречно-сканированных изображений (ВСИ) рельефа поверхности. При встречном сканировании перемещение по строке растра и перемещение от

строки к строке в одном изображении производят в направлении, противоположном направлению перемещения в другом. Согласно предложенному способу для исправления искажений необходимо в каждом ВСИ распознать одну и ту же особенность поверхности и определить ее латеральные координаты. Находя коэффициенты линейных преобразований, производят коррекцию ВСИ в латеральной и вертикальной плоскостях. Совместив исправленные ВСИ, выполняют усреднение рельефа в области их перекрытия. Способ позволяет оценивать погрешность исправления дрейфа и получать исправленные изображения, погрешность в которых не превышает некоторого заранее заданного значения. 21 з.п. ф-лы, 23 ил., 4 табл.

Изобретение относится к области сканирующей зондовой микроскопии и может использоваться на любом приборе из семейства сканирующих зондовых микроскопов (СЗМ), например, на сканирующем туннельном микроскопе (СТМ), на сканирующем атомно-силовом микроскопе (АСМ), на сканирующем оптическом микроскопе ближнего поля и т. п., возможно также применение данного способа на растровом электронном микроскопе.

Точность измерения рельефа поверхности, физические размеры элементов которого лежат в диапазоне от нескольких ангстрем до нескольких десятков нанометров, во многом определяется величиной дрейфа сканирующего зондового микроскопа. Как правило, дрейф инструмента включает в себя две основные компоненты: одна из них вызвана тепловой деформацией механических узлов прибора, другая – крипом используемых пьезоманипуляторов [1].

К настоящему моменту разработано несколько способов, позволяющих уменьшить негативное действие дрейфа. Часть из предложенных решений связана с усовершенствованиями в конструкции прибора (например, компенсация термодрейфа путём встречного включения пьезоэлементов сканера), с применением материалов, имеющих малый коэффициент теплового расширения (инвар, плавленый кварц, зеродур и др.), а также с введением теплоизолирующих оболочек для достижения термостабилизации устройства [1, 2, 3]. Перечисленные способы относятся к пассивным способам уменьшения дрейфа.

Вторую группу образуют активные способы [1, 3, 4]: в СЗМ встраиваются линейные высокочувствительные x , y , z -датчики положения зонда, каждый из которых управляется посредством замкнутой следящей системы. Задача следящей системы заключается в том, чтобы постоянно компенсировать разность, возникающую между заданным перемещением по поверхности и фактическим, измеряемым при помощи датчика положения.

К третьей группе относятся способы [5, 6, 7], в которых посредством компьютерного анализа СЗМ-изображения удаётся определить величину и направление дрейфа. В способах [6, 7] полагают, что за время сканирования скорость дрейфа остаётся практически неизменной. Постоянство скорости дрейфа в этом случае позволяет рассматривать производимые дрейфом искажения как линейные, что значительно упрощает решаемую задачу. Зная величину и направление дрейфа, можно исправить изображение поверхности. На практике с целью получения наибольшего эффекта обычно сочетают пассивные способы первой группы со способами второй и/или третьей.

Основное преимущество способов третьей группы в сравнении со второй заключается в том, что для устранения дрейфа не нужна модернизация стандартного микроскопа, а основной недостаток – в том, что из-за влияния нелинейной составляющей не удаётся полностью устранить вызванные дрейфом искажения на больших сканах. Заметим, что и системы из второй группы по причине термодформации базовых поверхностей (системы отсчёта) не всегда способны правильно скомпенсировать дрейф, а из-за дополнительных шумов, вносимых датчиками замкнутых следящих систем, устранение дрейфа при работе микроскопа вблизи или на пределе своего разрешения вообще оказывается невозможным [1].

Другими недостатками активных способов являются: существенное ограничение скорости сканирования, связанное с большими постоянными времени интегрирующих звеньев следящих систем, а также сильное искажение левого и правого краёв скана из-за большого рассогласования следящей системы по X в этих местах, вызванного изменением направления перемещения зонда на противоположное.

Наконец, можно указать также на способы [8, 9], образующие четвёртую группу, где имеются признаки как активных систем, так и способов коррекции, основанных на компьютерном анализе СЗМ-изображений.

Способы коррекции, в которых выполняется компьютерный анализ СЗМ-изображений с целью определения величины и направления дрейфа, либо используют априорную информацию о структуре и размерах особенностей известной поверхности, как, например, в способе [6], либо производят последовательное измерение одного и того же участка поверхности, как в способах [7, 8, 9], определяя разницу в положении какой-нибудь особенности поверхности или трансформируя полученные изображения таким образом, чтобы свести указанную разность к нулю.

Среди перечисленных способов к аналогам заявляемого способа можно отнести способы [7, 8]. В полуавтоматическом способе [8] оператору микроскопа предлагается выбрать хорошо заметную особенность поверхности на отсканированном изображении, а затем повторять сканирование данного участка до тех пор, пока выбранная особенность не сдвинется под действием дрейфа на некоторое расстояние. Измерив это расстояние и разделив его на время, прошедшее между первым и последним сканами, можно определить величину дрейфа. После этого выполняется окончательное сканирование рельефа, в процессе которого специальное устройство управления развёрткой осуществляет непрерывное смещение всего раstra со скоростью измеренного дрейфа в направлении противоположном направлению дрейфа.

Недостатки данного способа состоят в следующем: во-первых, требуется участие оператора; во-вторых, необходимо выполнить, как минимум, три скана поверхности, хотя для коррекции дрейфа, как будет показано ниже, достаточно только двух сканов. Наличие третьего скана, не только снижает производительность, но и повышает вероятность

изменения скорости дрейфа, т. е. увеличивает вероятность нарушения принятого соглашения о неизменности скорости дрейфа в течение времени измерения. В третьих, требуется модификация контроллера, управляющего развёрткой изображения, с тем чтобы
5 реализовать функцию непрерывного смещения раstra в заданном направлении и с заданной постоянной скоростью.

Для случая упорядоченных бездефектных поверхностей, состоящих из одинаковых элементов, например, для изображений атомов поверхности кристаллов, в изобретении
10 [8] предлагается не следить за выбранной особенностью, что можно сделать только в случае сканов небольшого размера, а, повторяя сканирование, последовательно вводить в устройство, осуществляющее сдвиг раstra, такое направление и величину антидрейфа,
15 чтобы полученное изображение перестало смещаться. Недостатками данного способа являются: наличие оператора, необходимость в более сложном контроллере развёртки, низкая точность и малая производительность, вызванные ручным подбором нужного направления и величины антидрейфа.

В патенте [8] также описывается способ компенсации дрейфа, где вместо измерения
20 целого скана выполняется последовательное сканирование одной строки изображения, в процессе которого оператором осуществляется подбор таких направления и величины антидрейфа, чтобы изображение рельефа в строке перестало смещаться. После этого
25 производится сканирование столбца изображения, при котором снова путём подбора антидрейфа добиваются остановки движения профиля столбца. После выполнения указанных операций производят сканирование целого изображения, в процессе получения которого происходит непрерывная компенсация дрейфа посредством соответствующего
30 смещения раstra развёртки. В целом, недостатки данного способа такие же как и предыдущего.

Другим вариантом описанного выше способа коррекции является способ, при котором
35 рельеф в строке (столбце) измеряется как при прямом, так и при обратном ходе зонда. В этом случае величина и направление антидрейфа подбираются так, чтобы профиль рельефа при прямом проходе по строке (столбцу) совпал с профилем рельефа при обратном проходе по строке (столбцу). Здесь, из-за необходимости выполнения измерений
40 в столбце нарушается равномерность хода развёртки и возникает дополнительный дрейф изображения, связанный с ползучестью пьезокерамики. Перемещение по столбцу изображения эквивалентно в этом случае смещению раstra (см. патент [10]).

Для того чтобы исключить оператора из процесса измерения, в патенте [8] также
45 предложено не подбирать антидрейф, а вычислять его по разности частот характерных пиков пространственных спектров рельефа в прямой и встречной строках (столбцах) СЗМ-изображения. Однако данный способ не является универсальным, поскольку наличие чётко выраженных пиков в спектре свойственно только поверхностям, имеющим пространственную периодичность.
50

Следует также принять во внимание то, что при использовании спектров, вычисляемых по изображениям небольшого размера (на изображениях большого размера нарушается условие постоянства скорости дрейфа), возникает проблема идентификации положения пика спектра, связанная с уширением пиков спектра вследствие ограниченного размера скана (в математически строгих формулах спектрального преобразования интегрирование по пространственной переменной производится от $-\infty$ до $+\infty$), что, в свою очередь, приводит к дополнительной погрешности при вычислении величины дрейфа.

Недостатком группы способов, в которой определение антидрейфа производится по одиночным строкам и столбцам, является невысокая точность коррекции, что связано с ограниченным объёмом используемых исходных данных (анализ информации производится только по одной строке/столбцу изображения). Указанный недостаток наиболее сильно проявляется в реальных условиях проведения измерений, когда скорость дрейфа может заметно изменяться, а получаемые сканы, как правило, зашумлены, искажены краевыми нелинейностями и внешними вибрациями, содержат сбойные участки.

Для автоматического исправления дрейфа в сканах, не содержащих периодических структур, в изобретении [8] предлагается вычислять двумерную корреляционную функцию двух изображений одного и того же участка поверхности, после чего определять направление и величину дрейфа по сдвигу пика этой функции. Данный способ также не является универсальным, поскольку на периодической поверхности он будет давать периодическую корреляционную функцию, что сделает невозможным нахождение величины сдвига пика.

Следует обратить внимание на общий недостаток способа [8], в котором искажения от дрейфа в вертикальной плоскости никак не исправлены. В описании патента [8] полностью отсутствует количественная информация, указывающая на точность коррекции дрейфа, что затрудняет объективный анализ и сравнение этого способа со способом [7] и со способом, предлагаемым в настоящей заявке.

Наиболее близким к предлагаемому способу коррекции является способ [7], суть которого заключается в следующем. Вначале производится последовательная запись двух сканов одного и того же участка поверхности таким образом, что первая строка второго скана совпадает с последней строкой первого, а направление перемещения от строки к строке во втором скане устанавливается противоположно направлению в первом.

Используя затем специальную программу, оператор путём линейной трансформации полученных изображений (предполагается, что скорость дрейфа за время измерения двух сканов изменяется настолько медленно, что может рассматриваться как постоянная), добивается совпадения контуров особенностей поверхности на обоих изображениях (в роли особенностей выступают атомы углерода на поверхности пиролитического графита).

Вертикальная составляющая скорости дрейфа определяется в данном способе по

разности средних наклонов рельефа поверхности полученной пары, измеренных вдоль направления y . Зная вертикальную составляющую скорости дрейфа, каждое из исправленных в латеральной плоскости изображений корректируется в вертикальной плоскости.

5 Недостатками используемого в прототипе изобретения способа исправления искажённых дрейфом СЗМ-изображений являются:

1. Необходимость вручную трансформировать изображения и совмещать контуры особенностей, что не только существенно замедляет работу, но и ведёт к появлению субъективных ошибок, снижающих точность исправления дрейфа и, в конечном счёте, точность проводимых измерений.

2. Наличие ограничений, накладываемых на абсолютные величины скоростей дрейфов (все три составляющие должны быть много меньше скорости сканирования в строке, а y -составляющая скорости дрейфа должна быть меньше скорости сканирования в кадре), что сужает область применимости способа, а также снижает точность исправления дрейфа (по причине малости не учитывается часть вызываемых дрейфом смещений; например, вертикальное смещение из-за действия вертикальной составляющей дрейфа, набегающее за время движения по строке изображения, полагается равным нулю; не принимается в расчёт y -смещение позиций зонда, производимое y -составляющей дрейфа, при движении зонда по строке растра; не учитывается растяжение/сжатие строки, вызываемое x -составляющей дрейфа, при перемещении зонда по строке растра).

3. Невозможность исправления дрейфа на изображениях среднего и большого размера.

4. Невозможность оценивать погрешность исправления дрейфа на изображении априори неизвестной поверхности, а также проводить коррекцию дрейфа с некоторой заранее заданной погрешностью.

Таким образом, на сегодняшний день не существует способов, с помощью которых можно исправлять вызываемые дрейфом искажения СЗМ-изображений в полностью автоматическом режиме, с высокой точностью и без существенной доработки аппаратной части микроскопа.

С целью устранения указанных выше недостатков предлагается следующий способ коррекции дрейфа, описание которого начнём с анализа возникающих искажений. Анализ искажений, вызываемых дрейфом зонда микроскопа относительно поверхности образца, показывает, что в латеральной плоскости дрейф приводит к растяжению/сжатию изображения вдоль осей x и y растра, а также к перекосу картинки вследствие сдвига строк/столбцов изображения относительно друг друга. То же самое, но в отношении высоты рельефа, происходит в вертикальной плоскости. Здесь неверно изображаются перепады высот, и появляется добавочный несуществующий наклон поверхности.

50 Полагая, что скорость дрейфа за время сканирования изображений небольшого размера изменяется медленно, описанные искажения можно представить в виде следующих линейных преобразований

$$\begin{aligned}\bar{x}(x, y) &= x + (K_x - 1)\{x + [(k + 1)m_x + 1]y\}, \\ \bar{y}(x, y) &= y + (K_y - 1)\{x + [(k + 1)m_x + 1]y\}, \\ \bar{z}(x, y) &= z(x, y) - (K_z - 1)\{x + [(k + 1)m_x + 1]y\},\end{aligned}\tag{1}$$

5 где \bar{x} , \bar{y} , \bar{z} – координаты точек исправленного изображения; x , y , z – координаты точек
искажённого дрейфом изображения; K_x , K_y , K_z – коэффициенты линейных преобразова-
ний (КЛП); k – отношение скорости v_x перемещения зонда в строке при прямом ходе к
10 скорости перемещения при обратном ходе; m_x , m_y – число точек (без единицы) в строке и
в столбце искажённого изображения, которые определяют диапазоны изменения пере-
менных $x=0\dots m_x$ и $y=0\dots m_y$.

15 Помимо условия постоянства скорости дрейфа уравнения (1) записаны в предполо-
жении, что в латеральной плоскости одиночные шаги микроскопа равны между собой
 $\Delta_x=\Delta_y$, а скорости перемещения одинаковы $v_x=v_y$. Множители K_x-1 , K_y-1 , K_z-1 преобразова-
ний (1) описывают вызванное дрейфом смещение по x , y , z , соответственно, при пере-
20 движении зонда на один шаг по x или по y . Параметр k необходим для того, чтобы учесть
смещение зонда по x , y или z , накопленное за время выполнения обратного хода.

Таким образом, члены $(K_x-1)x$, $(K_y-1)x$, $(K_z-1)x$ учитывают вызываемое дрейфом сме-
ещение зонда по x , y , z , соответственно, возникающее во время перемещения зонда по
25 текущей строке. Члены $(K_x-1)(k+1)m_x y$, $(K_y-1)(k+1)m_x y$, $(K_z-1)(k+1)m_x y$ выражают смещение
зонда по x , y , z , соответственно, произошедшее за время перемещения зонда по преды-
дущим строкам. Члены $(K_x-1)y$, $(K_y-1)y$, $(K_z-1)y$ принимают во внимание смещение зонда
30 по x , y , z , соответственно, возникшее за время перемещения зонда между строк раstra.

С целью отыскания неизвестных КЛП K_x , K_y , K_z выполним сканирование поверхности
по траектории, схематично показанной на Фиг. 1а. В результате получим пару изображе-
ний, строки которых прочерчиваются в противоположных направлениях, и перемещения
35 от строки к строке в одном изображении производятся в направлении противоположном
направлению перемещения в другом. Скорости сканирования изображений задаются
одинаковыми. Подобные изображения будем называть далее встречно-сканированными
изображениями (ВСИ).

40 Для ВСИ характерно наличие точки общей для обоих изображений (см. Фиг. 1), дан-
ную точку будем называть точкой совмещения (ТС). В точке совмещения траектория раз-
вертки первого прямого изображения заканчивается, а траектория развертки второго
встречного ему изображения начинается. По мере удаления от ТС изображения вследст-
45 вие действия дрейфа всё сильнее отличаются друг от друга: увеличиваются различия в
координатах положения одних и тех же особенностей, а сами особенности претерпевают
взаимно-противоположные трансформации (растяжения/сжатия и перекосы).

50 Если на каждом изображении полученной пары имеется одна и та же особенность
поверхности (см. Фиг. 2а, поз. 2), то, определив её латеральные координаты (x_1, y_1) и
 (x_2, y_2) , можно записать следующую систему уравнений

$$\begin{aligned} \bar{x}_1(m_x - x_1, m_y - y_1) &= \bar{x}_2(x_2, y_2) \\ \bar{y}_1(m_x - x_1, m_y - y_1) &= \bar{y}_2(x_2, y_2) \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь и ниже по тексту цифры 1, 2 в обозначениях указывают на принадлежность величины к первому (прямому) или второму (встречному) изображению, соответственно. Слагаемые m_x и m_y в уравнениях (2) обеспечивают преобразование системы координат 1-го изображения к системе координат 2-го (начало системы координат 2-го изображения находится в ТС).

В целом, для исправления вызываемых дрейфом искажений достаточно выявить на ВСИ только одну особенность и определить её латеральные координаты. Поскольку реальные СЗМ-изображения имеют конечное разрешение, зашумлены и содержат сбойные участки, то для более точного определения параметров коррекции желательно использовать все имеющиеся на поверхности особенности.

Таким образом, представляя всю совокупность особенностей её "центром масс" с координатами (x_1, y_1) и (x_2, y_2) в соответствующем ВСИ, с учётом преобразований (1) уравнения (2) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} m_x - x_1 + (K1_x - 1)(m_x - x_1 + [(k + 1)m_x + 1](m_y - y_1)) &= x_2 + (K2_x - 1)(x_2 + [(k + 1)m_x + 1]y_2), \\ m_y - y_1 + (K1_y - 1)(m_x - x_1 + [(k + 1)m_x + 1](m_y - y_1)) &= y_2 + (K2_y - 1)(x_2 + [(k + 1)m_x + 1]y_2). \end{aligned} \quad (3)$$

Связь между коэффициентами $K1$ и $K2$ во встречно-сканированных изображениях очень простая

$$\begin{aligned} K2_x &= 2 - K1_x, \\ K2_y &= 2 - K1_y, \\ K2_z &= 2 - K1_z. \end{aligned} \quad (4)$$

Если один из коэффициентов пары растягивает изображение, то другой сжимает и наоборот. Если один из коэффициентов транслирует изображение без искажения, т. е. равен 1 (дрейф отсутствует), то и другой коэффициент также транслирует изображение без искажения, т. е. он также равен 1.

Подставляя коэффициенты $K2_x$ и $K2_y$ из (4) в уравнения (3), находим искомые КЛП $K1_x$ и $K1_y$ 1-го изображения (поз. 3)

$$\begin{aligned} K1_x &= \frac{x_1 + x_2 - m_x}{x_2 - x_1 + m_x + [(k + 1)m_x + 1](y_2 - y_1 + m_y)} + 1, \\ K1_y &= \frac{y_1 + y_2 - m_y}{x_2 - x_1 + m_x + [(k + 1)m_x + 1](y_2 - y_1 + m_y)} + 1, \end{aligned} \quad (5)$$

зная которые, через соотношения (4) определяем КЛП $K2_x$ и $K2_y$ 2-го изображения. После этого, используя полученные коэффициенты, посредством преобразований (1) исправляем ВСИ 1 и 2 в латеральной плоскости (поз. 4).

Строго говоря, необходимо различать коэффициенты K_z для положительного (K_z^+) и для отрицательного (K_z^-) перепадов рельефа Δz . Поэтому последнее выражение из (4),

показывающее в общем виде связь между коэффициентами K_z ВСИ, следует представить как

$$\begin{aligned}
 K2_z^- &= 2 - K1_z^+, \\
 K2_z^+ &= 2 - K1_z^-, \\
 K2_z^- &= K1_z^-, \\
 K2_z^+ &= K1_z^+.
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

В соответствии с определением коэффициента K_z для перепадов высот в точке (\bar{x}, \bar{y}) области перекрытия исправленных в латеральной плоскости изображений 1 и 2 (поз. 5) можно записать следующую систему уравнений

$$\begin{aligned}
 \Delta z_1(\bar{x}, \bar{y}) &= K1_z^+ \Delta \bar{z}(\bar{x}, \bar{y}), \\
 \Delta z_2(\bar{x}, \bar{y}) &= K2_z^- \Delta \bar{z}(\bar{x}, \bar{y}),
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

где $\Delta z_1, \Delta z_2$ – искажённые перепады высоты в латерально-исправленных изображениях 1 и 2, соответственно; $\Delta \bar{z}$ – истинный перепад высоты рельефа.

Подставляя в полученную линейную систему вместо $K2_z^-$ его выражение из (6), находим решения

$$\begin{aligned}
 K1_z^+(\bar{x}, \bar{y}) &= \frac{2\Delta z_1(\bar{x}, \bar{y})}{\Delta z_1(\bar{x}, \bar{y}) + \Delta z_2(\bar{x}, \bar{y})}, \\
 \Delta \bar{z}(\bar{x}, \bar{y}) &= \frac{\Delta z_1(\bar{x}, \bar{y}) + \Delta z_2(\bar{x}, \bar{y})}{2}.
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

Из полученного решения для $\Delta \bar{z}$ видно, что истинный перепад высоты рельефа определяется полусуммой искажённых перепадов высот. Следует обратить внимание на то, что для разных перепадов высоты $\Delta \bar{z}$ будут получаться разные коэффициенты K_z , поскольку за время Δt выполнения латерального шага вертикальный дрейф приводит к одному и тому же смещению (коэффициент K_z , приведённый в формуле (1), соответствует перепаду $\Delta \bar{z} = 1$).

Поэтому удобнее оперировать не перепадом высоты $\Delta \bar{z}$ и соответствующим ему коэффициентом K_z , а величиной вертикального смещения $(K_z - 1)\Delta \bar{z}$, одинаковой во всех точках области перекрытия. Используя формулы (8), легко определить, что вертикальное смещение равно полуразности перепадов высот Δz_1 и Δz_2 . Вертикальное смещение вычисляется в каждой точке области перекрытия, а затем усредняется.

Таким образом, искажения в вертикальной плоскости можно исправить, применяя формулу (1), в которой вместо $K_z - 1$ следует подставить полученное усреднённое вертикальное смещение. Однако данный способ коррекции не является точным, поскольку за время Δt выполнения латерального шага дрейф не успевает существенным образом указать перепад высоты $\Delta \bar{z}$.

Для точек области перекрытия ВСИ, исправленных в латеральной плоскости (поз. 5), можно составить следующее уравнение

$$\bar{z}_1(\bar{x}, \bar{y}) = \bar{z}_2(\bar{x}, \bar{y}) \quad (9)$$

Преобразования в латеральной плоскости обратные (1) выглядят так

$$\begin{aligned} x(\bar{x}, \bar{y}) &= \frac{\{(K_y - 1)\{(k + 1)m_x + 1\} + 1\}\bar{x} - (K_x - 1)\{(k + 1)m_x + 1\}\bar{y}}{K_x + (K_y - 1)\{(k + 1)m_x + 1\}}, \\ y(\bar{x}, \bar{y}) &= \frac{(1 - K_y)\bar{x} + K_x\bar{y}}{K_x + (K_y - 1)\{(k + 1)m_x + 1\}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Используя тождество $\bar{z}(x, y) \equiv \bar{z}(\bar{x}, \bar{y})$, в котором координаты \bar{x} , \bar{y} области перекрытия связаны с координатами x , y прямоугольного растра соответствующего ВСИ преобразованиями (10), и выражение для \bar{z} из системы (1), уравнение (9) можно представить в развёрнутом виде, как

$$\begin{aligned} z_1(m_x - x_1, m_y - y_1) - (K1_z^+ - 1)\{m_x - x_1 + [(k + 1)m_x + 1](m_y - y_1)\} \\ = z_2(x_2, y_2) + (K2_z^- - 1)\{x_2 + [(k + 1)m_x + 1]y_2\} - (K1_z^+ - 1)\{m_x + [(k + 1)m_x + 1]m_y\}. \end{aligned} \quad (11)$$

Смещения m_x , m_y координат x_1 , y_1 , соответственно, обеспечивают возврат из системы координат встречного изображения к системе координат прямого изображения. Знак плюс перед множителем $(K2_z^- - 1)$ стоит потому, что знак перепада $\Delta\bar{z}$ на встречном изображении противоположен знаку перепада $\Delta\bar{z}$ на прямом изображении (здесь $|\Delta\bar{z}| = 1$).

Слагаемое $(K1_z^+ - 1)\{m_x + [(k + 1)m_x + 1]m_y\}$ в правой части уравнения (11) учитывает вертикальное смещение начала координат встречного изображения, которое произошло за время сканирования прямого изображения.

Из уравнения (11), используя связь (6) между коэффициентами $K1_z$ и $K2_z$, легко выразить коэффициент $K1_z$ в виде

$$K1_z^+ = \frac{z_2(x_2, y_2) - z_1(m_x - x_1, m_y - y_1)}{x_1 + x_2 + [(k + 1)m_x + 1](y_1 + y_2)} + 1, \quad (12)$$

который вычисляется для всех точек (\bar{x}, \bar{y}) области перекрытия, а затем усредняется (поз. 6). Зная коэффициент K_z , исправляем каждое изображение в вертикальной плоскости согласно выражению для \bar{z} преобразований (1) (поз. 7).

Наконец, совмещаем полученные изображения в точке совмещения и усредняем рельеф в области перекрытия (поз. 8). Таким образом, на выходе имеем исправленное изображение поверхности, в котором устранены искажения, вызываемые x , y и z дрейфами, а также уменьшен уровень зашумлённости.

Для автоматического поиска особенностей и определения их латеральных координат применяется процедура распознавания [9, 11]. В качестве особенностей используются элементы рельефа типа "холм" или "яма". Поскольку особенности поверхности определены в самом общем виде, то в большинстве встречающихся на практике случаев на изображении удаётся обнаружить подходящую особенность.

Процедура распознавания может работать как отдельно только с холмами или только

с ямами, так и с холмами и с ямами одновременно. Из соображений повышения точности определения КЛП, следует стараться использовать последний из перечисленных режимов, так как в этом случае число задействованных особенностей максимально. В качестве координат положения особенности выступают координаты "центра тяжести" особенности [9, 11], что, учитывая линейный характер искажений, вполне допустимо.

Поскольку в данном способе выполняется распознавание сосканированного изображения, то особенности рельефа следует понимать в широком смысле. Физически они могут представлять собой не только рельеф, но, в зависимости от используемой разновидности зондового микроскопа, и области намагниченности, места локализации электрического заряда и т. п.

Из-за искажений, вызываемых дрейфом, позиции одних и тех же особенностей на ВСИ не совпадают, причём степень несовпадения увеличивается по мере удаления от ТС, неодинаково также количество особенностей в ВСИ. Кроме того, в результате сбоя сканирования некоторые особенности, распознанные на одном из изображений, могут оказаться нераспознанными на другом. Таким образом, после распознавания особенностей в ВСИ необходимо выполнить следующий итеративный процесс, в ходе которого устанавливается, что некоторая особенность с координатами (x_1, y_1) на изображении 1 и некоторая особенность с координатами (x_2, y_2) на изображении 2 являются одной и той же особенностью с координатами (\bar{x}, \bar{y}) на исправленном изображении.

С этой целью из списка особенностей изображения 1 выбирается такая особенность, которая встретится первой, если двигаться от ТС вдоль траектории встречного скана. Затем, в списке особенностей изображения 2 производится поиск особенности ближайшей к выбранной на изображении 1 особенности и лежащей при этом в пределах некоторой её круговой окрестности. В процессе поиска в списке особенностей изображения 2 рассматриваются только особенности того типа (холм/яма), которому принадлежит особенность, выбранная на изображении 1. Если подходящая особенность отсутствует в списке особенностей изображения 2, то особенность, выбранная из списка особенностей изображения 1, удаляется из этого списка, и новый итерационный цикл начинается досрочно.

Координаты особенностей, выбираемые из списков с целью обнаружения следующей пары, предварительно исправляются посредством преобразований (1) с использованием значений промежуточных латеральных коэффициентов $K1, K2$, найденных в предыдущем цикле (исходные значения промежуточных коэффициентов задаются равными 1).

Обнаружив подходящую особенность в изображении 2, определяются координаты центра тяжести, отобранных на данный момент совокупностей особенностей (в случае существенного изменения скорости дрейфа следует использовать не все отобранные особенности, а только часть из них, полученную в нескольких предыдущих циклах итераций). Затем по формулам (5) находят новые промежуточные КЛП $K1$. После чего по формулам (4) вычисляются новые промежуточные КЛП $K2$. Описанный итерационный

процесс повторяется до тех пор, пока не будут проанализированы все особенности из списка особенностей изображения 1.

Поскольку в предлагаемом способе при определении КЛП выполняется совмещение центров тяжести совокупностей особенностей, обнаруженных в изображениях 1 и 2, то сумма квадратов отклонений исправленных положений особенностей будет минимальной. Преимущество приведённого алгоритма становится очевидным при его применении к состоящим из одинаковых элементов высокоупорядоченным поверхностям с малым числом дефектов, где нет иной возможности отличить одну особенность поверхности от другой.

Для успешного выявления пар особенностей необходимо стремиться, так располагать область сканирования, чтобы в окрестность ТС попадало несколько особенностей. В том случае, когда все особенности измеряемой области поверхности оказались сосредоточены в нижней части ВСИ и, вдобавок, слабо различимы между собой по размерам, форме и по взаимному расположению, то для безошибочного выявления пар особенностей следует повторить встречное сканирование, но не снизу-вверх → сверху-вниз, как изображено на Фиг. 1, а сверху-вниз → снизу-вверх.

Точность исправления рельефа поверхности можно улучшить, если использовать режим коррекции дрейфа по двум парам ВСИ. Для этого скорость обратного хода в строке задаётся равной скорости прямого хода ($k=1$), а сканирование выполняется по траектории, показанной на Фиг. 1б. Выполнив поиск КЛП так, как это было описано ранее, производится коррекция изображений каждой пары (см. Фиг. 2б, поз. 2-8).

Если погрешность совмещения 1-ой пары изображений мала, т. е. условия измерения и работа микроскопа близки к идеальным, то определение коэффициентов 2-ой пары может быть упрощено, поскольку справедливы следующие равенства $K_{3x}=2-K_{1x}$, $K_{3y}=K_{1y}$, $K_{3z}^+ = K_{1z}^+$. Обратное утверждение также верно. Приведённые равенства могут служить для дополнительной проверки правильности работы предложенной схемы исправления дрейфа. Так, если коэффициент $K_{1x}<1$, то $K_{3x}>1$, а если $K_{1x}>1$, то $K_{3x}<1$ (см. Таблицу 2). Если $K_{1y}<1$, то и $K_{3y}<1$, а если $K_{1y}>1$, то и $K_{3y}>1$ (для K_z действуют аналогичные соотношения).

Полученная пара исправленных изображений снова совмещается, а рельеф в месте наложения изображений усредняется (поз. 9), что приводит к дополнительному уменьшению уровня шума. Так как точки совмещения у каждой пары ВСИ разные (см. Фиг. 1б), то совмещение исправленных картинок выполняется путём совмещения центров тяжести особенностей (при зашумленности изображений здесь также "работает" критерий минимума суммы квадратов отклонений). Перед вычислением позиций центров тяжести из списков особенностей следует исключить особенности, обнаруженные в одной паре ВСИ, но отсутствующие в другой.

Если КЛП K_x , K_y , K_z известны, то средняя скорость \bar{v} соответствующих компонентов

дрейфа определяется по формулам

$$\begin{aligned}\bar{v}_x &= (K_x - 1)\Delta_x / \Delta t = (K_x - 1)v_x, \\ \bar{v}_y &= (K_y - 1)\Delta_y / \Delta t = (K_y - 1)v_y, \\ \bar{v}_z &= (K_z - 1)\Delta_z / \Delta t,\end{aligned}\tag{13}$$

где Δ_z - размер шага Z манипулятора. Располагая составляющими дрейфа \bar{v}_x , \bar{v}_y , мож-

но найти модуль вектора дрейфа в латеральной плоскости $|\bar{v}_{xy}| = \sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}$.

Скорость вертикального дрейфа \bar{v}_z можно также определить, воспользовавшись следующим способом. Запишем последний член последнего уравнения преобразований (1) для точки с координатами (m_x, m_y) . Найденная величина соответствует подъёму/снижению рельефа, который произошёл вследствие действия вертикальной составляющей дрейфа за время сканирования t всего изображения (прямого или встречного). Вычисляя отношение полученной величины к времени сканирования, определяем среднюю скорость вертикального дрейфа

$$\bar{v}_z = \frac{(K_z - 1)\Delta_z \{m_x + [(k + 1)m_x + 1]m_y\}}{t}.\tag{14}$$

Сравнивая формулы (13) и (14), можно записать следующее тождество $m_x + [(k + 1)m_x + 1]m_y \equiv t\Delta t^{-1}$, в котором величины слева и справа от знака тождества это общее количество шагов в растре.

В целом, третий способ нахождения скорости вертикальной составляющей дрейфа состоит в измерении разности высот между последней и первой точками прямого скана, измерении разности высот между последней и первой точками встречного скана, вычислении полусуммы полученных разностей и последующего деления найденного значения на время сканирования t одного изображения (вычисление полусуммы позволяет исключить собственный средний наклон поверхности).

Поскольку в ВСИ последняя точка встречного скана из-за действия латеральных составляющих дрейфа не совпадает с первой точкой прямого скана, то чтобы исключить влияние рельефа на получаемый результат, следует, используя метод наименьших квадратов, заменить рельеф каждого ВСИ средней плоскостью, после чего определить указанные разности высот по данным плоскостям.

При проведении средних плоскостей нужно использовать только точки области перекрытия, поскольку в ней рельеф представлен одними и теми же особенностями. Не следует вычислять разность высот непосредственно по рельефу области перекрытия, поскольку вызываемые дрейфом искажения в этой области происходят на прямом и на встречном участках за разное время.

Преимуществом описанного способа является то, что для оценки скорости вертикального дрейфа \bar{v}_z здесь не нужно знать коэффициент K_z . Более того, в соответствии с

формулой (13) (или с формулой (14)) сам коэффициент может быть найден по значению этой скорости.

Наибольший эффект от применения описанного способа коррекции дрейфа достигается при его использовании в способе особенность-ориентированного сканирования (ООС) [9], поскольку в этом случае появляется возможность исправления дрейфа в изображениях практически любого размера. В результате может быть устранён существенный недостаток аналога – неспособность исправлять дрейф на сканах средних и больших размеров.

Дело в том, что, начиная с определённого размера скана, обязательно нарушается основное предположение о неизменности скорости дрейфа в течение времени сканирования. Хотя точно такое же предположение должно выполняться и для сканов, получаемых по способу ООС, но там возникающее противоречие устраняется благодаря тому, что большая площадь сканируется по частям – малыми сегментами (квадратными окрестностями особенностей поверхности), а все перемещения происходят на короткие расстояния от одной особенности к другой, расположенной по соседству.

Чтобы окончательно убедиться в сказанном, следует сравнить время выполнения скана атомарной поверхности графита размером $(35 \times 35) \text{ \AA}^2$ (см. ниже), которое составляет около 1.5 мин, с временем сканирования-распознавания сегментов размерами $(4.5 \times 4.5) \text{ \AA}^2$ “Следующего” и “Текущего” атомов углерода в одном цикле скиппинга, которое составляет около 300 мс [9].

Операция скиппинга особенностей заключается в перемещении зонда из позиции текущей особенности в позицию следующей особенности, сканировании-распознавании сегмента следующей особенности, вычислении разности координат “вперёд” между текущей и следующей особенностями, перемещении обратно в позицию текущей особенности, сканировании-распознавании её сегмента и вычислении разности координат “назад” между текущей и следующей особенностями. Операция скиппинга особенностей предназначена для точного измерения относительного расстояния между смежными особенностями, определяемого по полусумме разностей вперёд и назад, а также для получения сегментов рельефа поверхности, из которых впоследствии может быть собрано целое изображение. Число повторений (циклов) операции скиппинга теоретически неограничено.

При переходе от атомного масштаба к поверхностям с характерными размерами особенностей и расстояниями между ними в десятки и сотни нанометров внешнее проявление на изображении термосоставляющей дрейфа ослабевает, а нелинейной составляющей от крипа, напротив, усиливается. Несмотря на это, измеряя рельеф по частям небольшими сегментами, а также используя взаимно-встречные перемещения зонда в апертурах (апертурой называется вспомогательный скан окрестности текущей особенности, вмещающий несколько соседних особенностей), в сегментах, между соседними осо-

бенностями (скиппинг) и при движении по строкам из особенностей, которые образуют целую иерархию встречных перемещений, возможно значительно ослабить негативное действие крипа [9].

5 Кроме того, в случае заметного изменения скорости дрейфа, мониторинг которой при ООС производится непрерывно, процесс измерения автоматически приостанавливается, испорченные локальные данные отбрасываются, и микроскоп, выполняя периодическую
10 привязку зонда к текущей особенности поверхности или вводя холостые циклы скиппинга, ждёт, пока скорость дрейфа не стабилизируется. Как только скорость дрейфа стабилизировалась, работа возобновляется с того, что заново выполняется прерванное забракованное локальное измерение. Таким образом, в результате применения указанной совокупности приёмов суммарный дрейф снова оказывается медленно изменяющимся процессом и, следовательно, также поддаётся линеаризации.

Следует обратить внимание на то, как просто при ООС происходит обнаружение одной и той же особенности в ВСИ. Дело в том, что сегмент, как правило, вмещает только
20 одну особенность. В тех случаях, когда сегмент содержит несколько особенностей (обычно две-три), особенности, расположенные ближе остальных к центрам ВСИ, будут соответствовать одной и той же текущей особенности в исправленном сегменте, поскольку
25 основным признаком текущей особенности в сегменте является её близость к центру квадратного раstra [9].

Необходимо отметить, что из-за внутренней избыточности ООС, его производительность гораздо ниже производительности обычного сканирования, тогда как точность измерений, напротив, существенно выше [9]. Для ряда практических задач, очень высокая
30 точность измерений не требуется, но важна обеспечиваемая ООС подходом функциональность при удовлетворительной производительности сканирования. В таком случае следует отказаться от операции скиппинга и собирать поверхность не из сегментов, а из
35 апертур.

Выполняя встречное сканирование апертуры с последующим исправлением дрейфа предложенными здесь и ниже способами, можно определить истинный рельеф в апертуре, а, следовательно, и истинное расстояние между текущей и следующей особенностями
40 цепочки. Располагая исправленными апертурами и относительными расстояниями между ними, нетрудно выполнить реконструкцию всей поверхности.

Распознавание двух/четырёх ВСИ может производиться одновременно. Распознавание особенностей типа холм и особенностей типа яма на каждом изображении также может выполняться одновременно [9]. Кроме того, процесс распознавания прямых изображений и процесс сканирования встречных изображений могут быть совмещены во времени.
45 Таким образом, производительность вычислений может быть существенным образом увеличена применением двух/четырёх процессорного компьютера. Наибольшая выгода от использования многопроцессорного компьютера возникает при использовании встреч-

ного сканирования в способе ООС, где распознавание должно осуществляться в реальном масштабе времени.

5 Отметим в заключение, что при непосредственном применении описанного способа исправления дрейфа число усреднений изображения ограничено и не может быть больше 4, а вот при его использовании в способе ООС, напротив, нет никаких ограничений на количество усреднений изображений (сегментов/апертур).

10 На Фиг. 1 схематично показана траектория движения зонда в процессе встречного сканирования. Четыре строки в растре сканируются встречно, перемещения от строки к строке в паре изображений также осуществляются навстречу друг другу. (а) Встречное сканирование с холостым обратным ходом (показан пунктирной линией). (б) Встречное
15 сканирование без холостого обратного хода. Обе развертки обеспечивают возможность исправления результатов действия x , y и z -составляющих дрейфа. Цифрами 1...4 обозначены номера получаемых изображений. ТС – точка совмещения пары встречно-сканированных изображений. Развертка (б) позволяет добиться дополнительного уменьшения
20 уровня шума в исправленном изображении, однако требует вдвое большего объема памяти и времени вычислений.

На Фиг. 2 изображена последовательность операций, устраняющая вызванные дрейфом искажения скана поверхности. (а) Коррекция по паре ВСИ. (б) Коррекция с использованием двух пар ВСИ. ЦТ – “центр тяжести” особенности или группы особенностей. Символом “ \cap ” обозначено перекрытие соответствующих ВСИ, а горизонтальной чертой – усреднение рельефа.
25

30 На Фиг. 3 приведены искажённые дрейфом ВСИ атомной поверхности пиролиитического графита. (а), (б) 1-ая пара ВСИ. (в), (г) 2-ая пара ВСИ. Режим измерений: СТМ, постоянная высота. Число точек в растре $m_x=m_y=127$. Размер шага при сканировании: $\Delta_x=0.257 \text{ \AA}$, $\Delta_y=0.269 \text{ \AA}$. Скорость сканирования $v_x=v_y=187.6 \text{ \AA/c}$ (определена в процессе тренировки, $k=1$). Время сканирования 1 мин 29 с.
35

На Фиг. 4 показаны особенности поверхности, распознанные на ВСИ пиролиитического графита. (а), (б) 1-ая пара ВСИ. (в), (г) 2-ая пара ВСИ. В качестве особенностей поверхности выступают и холмы (атомы углерода) и ямы (междоузлия). Чёрными точками помечены распознанные атомы, а белыми точками – междоузлия.
40

На Фиг. 5 представлены пары особенностей, обнаруженные в ВСИ пиролиитического графита. Кружками обозначены все особенности поверхности, распознанные в изображении, а плюсами только те из них, что имеют пару в соответствующем встречном изображении. (а), (б) 1-ая пара ВСИ, имеет 424 общие особенности. (в), (г) 2-ая пара ВСИ, содержит 430 общих особенностей. Итеративный процесс начинается в ТС и распространяется далее вдоль траектории сканирования встречного изображения. В ходе итеративного процесса парные особенности обнаруживались исключительно по близости их положения в промежуточном изображении, исправленном с помощью промежуточных КЛП.
45
50

Выявленные в ВСИ пары особенностей соответствуют одной и той же особенности на исправленном изображении и служат для вычисления КЛП. Особенности, отстоящие от краёв скана менее чем на 1 \AA , были пропущены, для того чтобы ослабить негативное влияние краевых нелинейных искажений на результаты вычисления КЛП. Вызванная дрейфом максимальная относительная погрешность измерений в латеральной плоскости δ_{\max} : (а), (б) 7.8%, (в), (г) 8.0%.

На Фиг. 6 показаны исправленные ВСИ пиролитического графита: (а) 1-ая пара; (в) 2-ая пара. ВСИ каждой пары были скорректированы в латеральной плоскости посредством линейных преобразований (1), затем совмещены в соответствующей ТС и усреднены в области перекрытия. Исправленные положения особенностей после совмещения ВСИ: (б) 1-ая пара; (г) 2-ая пара. Значком "+" обозначены исправленные позиции особенностей прямого изображения, а значком "x" – встречного. Среднее значение остаточного рассовмещения Δ : (а), (б) 0.22 \AA ; (в), (г) 0.30 \AA . Средняя погрешность по полю изображения δ : (а), (б) 0.2%; (в), (г) 0.3%.

На Фиг. 7 показаны совмещённые в одно изображение исправленные пары ВСИ пиролитического графита: (а) рельеф поверхности, (б) взаимные положения особенностей. Значком "+" обозначены исправленные усреднённые позиции особенностей 1-ой пары ВСИ, а значком "x" – 2-ой пары ВСИ. Количество общих особенностей в совмещённых парах ВСИ – 422. Средняя величина рассовмещения $\Delta=0.05 \text{ \AA}$. Средняя погрешность по полю изображения $\delta=0.05\%$.

На Фиг. 8 приведена зависимость среднего взаимных рассовмещений исправленных позиций пар особенностей от порядкового номера пары. Номера присваиваются особенностям последовательно согласно пути, пройденному от ТС до особенности вдоль траектории встречного скана.

На Фиг. 9 показаны регрессионные поверхности 3-го порядка, проведённые через локальные (а) D_x смещения, (б) D_y смещения особенностей 1-го ВСИ. Локальное смещение особенности (изображено точкой) определяется как разность между исправленной позицией особенности и искажённой. Для того чтобы найти исправленную позицию особенности вычисляются локальные КЛП $K_x(x,y)$, $K_y(x,y)$. Регрессионные поверхности обеспечивают плавный переход от локальных смещений, соответствующих действительным координатам особенностей, к локальным смещениям, соответствующим целочисленным координатам точек исправляемого изображения.

На Фиг. 10 представлены ВСИ пиролитического графита, полученные после проведения нелинейной коррекции: (а) 1-ая пара; (в) 2-ая пара. ВСИ каждой пары были вначале исправлены в латеральной плоскости посредством смещений D_x , D_y , определяемых по регрессионным поверхностям; затем совмещены по центрам тяжести используемых множеств особенностей, после чего усреднены в области перекрытия. Исправленные положения особенностей после совмещения ВСИ: (б) 1-ая пара; (г) 2-ая пара. Среднее значение

ние остаточного рассовмещения Δ : (а), (б) 0.072 Å; (в), (г) 0.096 Å. Средняя погрешность по полю изображения δ : (а), (б) 0.07%; (в), (г) 0.10%. В отличие от линейной коррекции размытость в верхней и в нижней частях изображений вследствие рассовмещения латеральных позиций особенностей отсутствует (сравни с Фиг. 6).

На Фиг. 11 даны совмещённые в одно изображение исправленные нелинейным способом пары ВСИ пиролитического графита: (а) рельеф поверхности, (б) взаимные положения особенностей. Средняя величина рассовмещения $\Delta=0.048$ Å. Средняя погрешность по полю изображения $\delta=0.05\%$.

На Фиг. 12 показано исправленное изображение поверхности пиролитического графита, собранное в ходе нелинейной коррекции из отдельных частично перекрывающихся сегментов. Размытость изображения вследствие рассовмещения латеральных позиций особенностей отсутствует (сравни с Фиг. 7а), что свидетельствует о гораздо более корректном исправлении рельефа в латеральной и вертикальной плоскостях. Усреднённая постоянная решётки a равна 2.113 Å, что соответствует относительной методической погрешности измерения 14%.

На Фиг. 13 представлен атомный рельеф пиролитического графита, полученный после коррекции систематических погрешностей масштабирования. (а) Реальное изображение поверхности. (б) Шаровая модель поверхности. Погрешности масштабирования были вызваны ошибками калибровки, выполненной ранее без учёта производимых дрейфом искажений. Усреднённая постоянная решётки a на полученных изображениях равна 2.4638 Å, что соответствует относительной погрешности измерения 0.01%.

На Фиг. 14 приведены искажённые дрейфом ВСИ квазиупорядоченной пористой поверхности оксида алюминия. (а), (б) 1-ая пара ВСИ. (в), (г) 2-ая пара ВСИ. Режим измерений: АСМ, тэппинг мода. Число точек в растре $m_x=m_y=127$. Размер шага при сканировании: $\Delta_x=3.913$ нм, $\Delta_y=3.935$ нм. Размер шага Z манипулятора $\Delta_z=0.032$ нм. Скорость сканирования $v_x=v_y=1109.7$ нм/с (определена в процессе тренировки, $k=1$). Время сканирования 3 мин 50 с.

На Фиг. 15 показаны особенности поверхности, распознанные на ВСИ пористого оксида алюминия. (а), (б) 1-ая пара ВСИ. (в), (г) 2-ая пара ВСИ. В качестве особенностей поверхности выступают и холмы и ямы (поры). Распознанные холмы помечены чёрными точками, а поры – белыми.

На Фиг. 16 представлены пары особенностей, обнаруженные в ВСИ пористого оксида алюминия. (а), (б) 1-ая пара ВСИ, содержит 88 общих особенностей. (в), (г) 2-ая пара ВСИ, содержит 85 общих особенностей. Особенности, отстоящие от краёв скана менее чем на 10 нм, в расчёт не принимались. Несмотря на очень большие искажения, пары особенностей в ВСИ были выявлены в ходе итеративного процесса поиска без ошибок. Вызванная дрейфом максимальная относительная погрешность измерений в латеральной плоскости δ_{max} : (а), (б) 24.6%; (в), (г) 24.4%.

На Фиг. 17 показаны исправленные ВСИ пористого оксида алюминия: (а) 1-ая пара; (в) 2-ая пара. Исправленные положения особенностей после совмещения ВСИ: (б) 1-ая пара; (г) 2-ая пара. Среднее рассовмещение Δ : (а), (б) 16.6 нм; (в), (г) 15.8 нм. Средняя погрешность по полю изображения δ : (а), (б) 1.5%; (в), (г) 1.4%.

На Фиг. 18 показаны совмещённые в одно изображение исправленные пары ВСИ пористого оксида алюминия: (а) рельеф поверхности, (б) взаимные положения особенностей. Количество общих особенностей в совмещённых парах ВСИ – 84. Средняя величина рассовмещения $\Delta=3.1$ нм. Средняя погрешность по полю изображения $\delta=0.2\%$.

На Фиг. 19 приведена зависимость среднего взаимных рассовмещений исправленных позиций пар особенностей от порядкового номера пары, построенная для сканов пористого оксида алюминия.

На Фиг. 20 показаны регрессионные поверхности, проведённые через локальные (а) D_x смещения особенностей, (б) D_y смещения особенностей, (в) D_z смещения высот рельефа 1-го ВСИ пористого оксида алюминия. Порядок регрессионной поверхности: (а), (б) 3; (в) 1.

На Фиг. 21 представлены ВСИ пористого оксида алюминия после проведения нелинейной коррекции: (а) 1-ая пара; (в) 2-ая пара. Исправленные положения особенностей после совмещения ВСИ: (б) 1-ая пара; (г) 2-ая пара. Среднее рассовмещение Δ : (а), (б) 1.9 нм; (в), (г) 1.9 нм. Средняя погрешность по полю изображения δ : (а), (б) 0.16%; (в), (г) 0.15%. В отличие от линейной коррекции размытость в верхней и в нижней частях изображений отсутствует (сравни с Фиг. 17).

На Фиг. 22 даны совмещённые в одно изображение исправленные нелинейным способом пары ВСИ пористого оксида алюминия: (а) рельеф поверхности, (б) взаимные положения особенностей. Средняя величина рассовмещения $\Delta=2.2$ нм. Средняя погрешность по полю изображения $\delta=0.14\%$.

На Фиг. 23 представлен рельеф поверхности пористого оксида алюминия, полученный после нелинейной коррекции дрейфа. (а) Реальное изображение, собранное из отдельных частично перекрывающихся сегментов. Размытость вследствие рассовмещения латеральных позиций особенностей отсутствует (сравни с Фиг. 18а). (б) Стилизованное изображение. Среднее расстояние между порами 69.9 нм.

В Таблице 1 дана простейшая статистика особенностей рельефа, распознанных в ВСИ пирографита и пористого оксида алюминия.

В Таблице 2 приведены коэффициенты линейных преобразований для искажённых дрейфом ВСИ пирографита и пористого оксида алюминия.

В Таблице 3 указаны погрешности исправления ВСИ пирографита и пористого оксида алюминия: минимальное Δ_{min} , максимальное Δ_{max} и среднее Δ латеральные рассовмещения особенностей; среднее рассовмещение Δ_{\perp} в вертикальной плоскости; максимальная

δ_{max} и средняя по полю изображения δ относительные погрешности в латеральной плоскости. Первое значение погрешности получено при применении линейной коррекции, а второе – нелинейной.

5 В Таблице 4 даны составляющие средней скорости дрейфа СЗМ-зонда относительно поверхности. Для вертикальной составляющей приведены три значения, полученные тремя различными способами.

10 Чтобы проверить работу предложенного способа, было выполнено встречное сканирование небольшого участка упорядоченной поверхности высокоориентированного пиро-литического графита (ВОПГ). Измерения проводились вблизи начала координат сканера, где погрешности, вызываемые нелинейностью сканера, паразитными связями и ошибкой
15 смещения Аббе – минимальные. В результате получено 2 пары ВСИ (см. Фиг. 3). Сканирование рельефа производилось на микроскопе Solver™ P4 производства НТ-МДТ. Иглой служила механически срезанная проволока NiCr.

20 Непосредственно перед началом сканирования было выполнено 40 “тренировочных” проходов зонда по 1-ой строке растра для того, чтобы обеспечить более плавный перевод пьезоманипуляторов из состояния покоя в состояние сканирования. Используя дан-
25 ный приём, можно заметно уменьшить искажения, вызываемые крипом в начале скана. В процессе тренировки также определялась фактическая скорость сканирования v_x , составившая 187.6 Å/с ($k=1$).

На Фиг. 4 показаны результаты распознавания полученных ВСИ графита. В качестве
30 особенностей рельефа выступают атомы углерода (холмы) и междоузлия (ямы). В Таблице 1 для каждого ВСИ приведено количество обнаруженных в нём особенностей, а также определяемые в процессе распознавания средняя величина постоянной решётки a и относительная погрешность её измерения (номинальное значение постоянной решётки
35 ВОПГ равно 2.464 Å).

На Фиг. 5 значком “+” отмечены те особенности, которые были обнаружены на обоих
40 ВСИ в ходе выполнения итеративного процесса поиска пар особенностей. В первой паре ВСИ обнаружено 424 общие особенности, во второй паре – 430. Находя среди обнару-
45 женных пар пару, особенности которой располагаются на максимальном расстоянии друг от друга, например, по координате x , можно определить вызванную дрейфом абсолютную погрешность измерений в латеральной плоскости Δx_{max} . Максимальная относительная погрешность δ_{max} для одного изображения вычисляется по формуле

$$\delta_{max} = \frac{\Delta x_{max} 100\%}{2m_x \Delta_x} \quad (15)$$

Относительная погрешность по координате y вычисляется аналогично. Из двух найден-
50 ных погрешностей выбирается наибольшая. Для 1-ой пары ВСИ погрешность составляет 7.8%, для 2-ой пары – 8.0%.

Полученные в результате применения предлагаемого способа латеральные КЛП приведены в Таблице 2. На Фиг. 6а, в представлены результаты исправления дрейфа в 1-ой и 2-ой парах ВСИ. Остаточные рассовмещения исправленных положений особенностей можно визуальнo оценить по Фиг. 6б, г. В численном выражении среднее рассовмещение особенностей (см. Таблицу 3) оказалось сравнимо с шагом сканирования. Заметные рассовмещения в верхней и в нижней частях изображений указывают на то, что, по-видимому, во время сканирования уже начало происходить изменение скорости дрейфа. Относительные погрешности коррекции приведены в Таблице 3.

Изображение рельефа, представленное на Фиг. 7а, является результатом наложения исправленных ВСИ, показанных на Фиг. 6а, в, и последующего усреднения рельефа в области перекрытия. Точность совмещения пар ВСИ можно визуальнo оценить по Фиг. 7б, в численном выражении среднее остаточное рассовмещение исправленных позиций особенностей составляет 0.05 Å.

На Фиг. 8 показана найденная в процессе итеративного поиска пар особенностей зависимость среднего взаимных отклонений исправленных позиций пар особенностей Δ от порядкового номера пары n . Напомним, что каждая особенность приобретает свой номер, согласно её удалению от ТС. Причём, под удалением от ТС понимается не расстояние до особенности по прямой, а путь, проходимый вдоль встречной траектории сканирования.

Исправленные позиции первой особенности имеют нулевую погрешность совмещения (точка А), поскольку только одна эта особенность участвует в определении коэффициентов коррекции. Далее, по мере увеличения числа задействованных особенностей погрешность вначале резко возрастает (участок А-В), что связано с близостью используемых особенностей к ТС (латеральные КЛП чувствительны к относительной погрешности определения положения особенности) и с ещё недостаточно большим их количеством (погрешности в определении положений особенностей ещё не скомпенсированы усреднением), а затем довольно быстро уменьшается в результате удаления от ТС и усреднения по большому числу особенностей (участок В-С).

Если бы в процессе сканирования скорость дрейфа оставалась неизменной, то погрешность по мере вовлечения новых особенностей стремилась бы к нулю. Однако на графике видно, что, достигнув некоторого минимума (точка С), погрешность начинает возрастать (участок С-Д). Таким образом, наблюдаемый рост погрешности указывает на то, что в процессе встречного сканирования скорость дрейфа изменилась.

Задавая на участке CD величину погрешности, по данным зависимостям можно определить те особенности, для которых остаточное рассовмещение не превосходит этой погрешности. После чего по найденным особенностям вычисляются КЛП, обеспечивающие исправление дрейфа с заданной погрешностью. Окончательное изображение получается после отбрасывания той части исправленного изображения, которая расположена

ниже позиции последней из этих особенностей.

Для представленных здесь и ниже сканов поверхности, характеризующихся большим числом достаточно равномерно распределённых по площади изображения особенностей, можно предложить следующий способ нелинейной коррекции. Вначале, используя изложенный линейный подход, определяют пары особенностей ВСИ; затем по каждой паре вычисляют локальные КЛП K_x , K_y . В результате получается распределение, в котором каждой особенности с координатами x , y сопоставлены свои латеральные КЛП $K_x(x, y)$, $K_y(x, y)$.

Используя преобразования (1), для каждой особенности изображения с действительными координатами x, y находят локальные смещения $D_x(x, y) = \bar{x}(x, y) - x$, $D_y(x, y) = \bar{y}(x, y) - y$ в латеральной плоскости. Проводя через полученные смещения регрессионные поверхности, определяют смещения, соответствующие целочисленным координатам точек искажённого изображения. Наконец, прикладывая к точкам искажённого СЗМ-изображения соответствующие им локальные смещения, получают изображение, исправленное в латеральной плоскости.

Для того чтобы выполнить коррекцию дрейфа в вертикальной плоскости необходимо совместить ВСИ, исправленные в латеральной плоскости, путём совмещения центров тяжести используемых наборов особенностей. Вычисляя локальный коэффициент K_z , а затем разность между исправленной высотой рельефа и искажённой в каждой точке (\bar{x}, \bar{y}) области перекрытия ВСИ, находим распределение локальных смещений по полю изображения в вертикальной плоскости $D_z(\bar{x}, \bar{y}) = \bar{z}(\bar{x}, \bar{y}) - z(\bar{x}, \bar{y})$. Проводя через найденные локальные смещения регрессионную поверхность, определяется рабочее распределение, с помощью которого выполняется нелинейная коррекция изображения в вертикальной плоскости.

Построение поверхностей регрессии позволяет также ослабить влияние погрешностей в определении латерального положения особенности и высоты рельефа на результаты нелинейной коррекции. Выбор порядка регрессионной поверхности производится по остаточному рассовмещению положений особенностей (высот рельефа). Принимается тот порядок, который приводит к минимальному рассовмещению. В случае сильных нелинейных искажений регрессионные поверхности можно также использовать при итеративном поиске пар особенностей.

В качестве примера на Фиг. 9 показаны регрессионные поверхности 3-го порядка, проведённые через локальные смещения $D1_x(x, y)$, $D1_y(x, y)$ особенностей 1-го ВСИ. На Фиг. 10 даны результаты нелинейной коррекции каждой из пар ВСИ в латеральной плоскости. На Фиг. 11 показано изображение, полученное в ходе совмещения и последующего усреднения в вертикальной плоскости изображений, представленных на Фиг. 10. В Таблице 3 приведены остаточные погрешности совмещения, даваемые предложенным спо-

собою нелинейной коррекции. Из полученных результатов следует, что за счёт более точного совмещения используемых особенностей (сравни Фиг. 10 с Фиг. 6) нелинейный подход в сравнение с линейным обеспечивает более высокую точность исправления рельефа.

Анализируя картинки, показанные на Фиг. 6б, г, можно предложить ещё одну схему нелинейной коррекции. Вокруг особенности на каждом исправленном изображении вырезается некоторая квадратная окрестность (сегмент); после чего вырезанные фрагменты рельефа помещаются в позицию, являющуюся средним исправленных позиций этой особенности в соответствующем ВСИ. Коррекция изображений и позиций особенностей может проводиться как линейным, так и нелинейным способами, описанными выше. В местах наложения сегментов рельеф усредняется.

Таким образом, помимо усреднения в вертикальной плоскости, исправленный рельеф будет приближен к истинному за счёт усреднения позиций особенностей. В собранном из отдельных фрагментов изображении, показанном на Фиг. 12, уже нет той размытости, которая возникает после совмещения и наиболее заметна в верхней и в нижней частях изображения, исправленного с помощью линейного способа (сравни с Фиг. 7а).

О сегментной структуре Фиг. 12 можно судить лишь по изрезанным краям, каких-либо других артефактов, связанных с сегментами, на этом рисунке не наблюдается. Следует обратить внимание на то, что максимальный перепад высот на Фиг. 12 (см. вертикальную шкалу) больше максимального перепада высот на Фиг. 7а, что свидетельствует о более адекватной коррекции рельефа в вертикальной плоскости.

Обоснованием изложенных способов нелинейной коррекции является то, что истинное положение особенности находится, где-то на отрезке между исправленными положениями особенности и, скорее всего, тяготеет к середине.

Усреднённая постоянная решётки a , вычисленная по данным, представленным на Фиг. 12, равна 2.113 \AA , что соответствует относительной методической погрешности измерения 14%. Указанная погрешность связана с погрешностью предыдущей калибровки XY сканера микроскопа, которая была выполнена без учёта искажающего действия дрейфа. Применяя методику автоматической калибровки, описанную в работе 11, были определены корректирующие коэффициенты $\bar{K}_x=1.1896$, $\bar{K}_y=1.1429$ и угол косости $\alpha=0.4^\circ$ (учитывает неортогональность между X и Y пьезоманипуляторами).

В численном выражении найденные латеральные калибровочные коэффициенты оказались очень близки друг к другу: $\bar{K}_x \Delta_x=0.306 \text{ \AA}$, $\bar{K}_y \Delta_y=0.307 \text{ \AA}$, что свидетельствует о практически полной идентичности каналов развёртки используемого микроскопа (сквозная идентичность каналов обеспечивается производителем в процессе специальной настройки). Следует отметить, что одинаковость латеральных калибровочных коэффициентов говорит об отсутствии диспропорции в получаемых изображениях, а также может

служить одним из подтверждений правильности выполненного исправления дрейфа.

После коррекции масштаба и косости изображения на Фиг. 12 атомная поверхность графита приобретает вид, показанный на Фиг. 13а. Усреднённая постоянная решётки a на полученном изображении равна 2.4638 Å, что соответствует относительной погрешности измерения около 0.01%.

На Фиг. 13б дано стилизованное изображение поверхности графита, на котором атомы углерода изображены условно в виде шаров. Стилизованные изображения позволяют представить структуру состоящей из одинаковых элементов поверхности в обобщённом виде, схематично, а также визуально выявлять дефекты поверхности незаметные на реальном изображении.

Следует отметить, что определение калибровочных коэффициентов и угла косости позволяет также подтвердить правильность предложенного способа исправления дрейфа. При разных по величине и направлению дрейфах, на разных размерах получаемых изображений и при разных скоростях сканирования данные величины вблизи начала координат сканера должны изменяться незначительно. Указанный критерий нашёл подтверждение на практике при проведении серии проверочных измерений.

Численное определение скоростей дрейфа в латеральной плоскости произведено по формулам (13). Чтобы учесть выявленную погрешность калибровки, полученные скорости \bar{v}_x и \bar{v}_y были умножены на коэффициенты \bar{K}_x и \bar{K}_y , соответственно. Найденные значения представлены в Таблице 4.

Использование режима постоянной высоты при сканировании атомарной поверхности графита не позволяет определить скорость дрейфа в вертикальной плоскости. Дело в том, что следящая система в данном режиме компенсирует медленные изменения туннельного тока, вызываемые вертикальной составляющей дрейфа. В результате, токовое изображение практически не искажается вертикальным дрейфом.

На Фиг. 14 показаны ВСИ квазиупорядоченной пористой поверхности оксида алюминия. Представленная поверхность настолько сильно искажена дрейфом, что встречный скан содержит только половину (!) участка поверхности, полученного на прямом скане. Несмотря на столь значительные искажения, даже применение линейной модели, как будет показано ниже, позволяет исправить данные изображения с вполне приемлемой погрешностью.

В отсутствии дефектов каждая пора имеет 6 соседних пор, образующих правильный шестиугольник. По периметру отверстия каждой поры расположены 6 небольших холмиков, также образующих правильный шестиугольник. Указанные элементы рельефа являлись теми особенностями, которые пыталась обнаружить используемая программа распознавания (см. Фиг. 15). Простейшая статистика найденных особенностей представлена в Таблице 1.

На Фиг. 16 знаком "+" отмечены те особенности поверхности оксида алюминия, кото-

рые были обнаружены на обоих ВСИ в ходе выполнения итеративного процесса поиска пар особенностей. Вызванная дрейфом максимальная относительная погрешность измерений в латеральной плоскости δ_{max} составляет: 24.6% в 1-ой паре ВСИ и 24.4% во 2-ой паре ВСИ. Подставляя найденные координаты особенностей в выражения (5), определены КЛП K_x , K_y (см. Таблицу 2). Следует отметить, что приведённые выше отношения между неравенствами для коэффициентов K_x пар ВСИ нарушены, по-видимому, из-за существенного изменения x составляющей скорости дрейфа (обрати внимание на сильное искривление регрессионной поверхности на Фиг. 20а).

На Фиг. 17 для 1-ой и 2-ой пар ВСИ показаны: исправленный рельеф и остаточное рассовмещение особенностей. КЛП K_z , найденные по формуле (12) в ходе вертикальной коррекции, помещены в Таблицу 2. Латеральные и вертикальные погрешности совмещения приведены в Таблице 3, там же указаны относительные погрешности коррекции. На Фиг. 18а дан результат линейной коррекции дрейфа по двум парам ВСИ, на Фиг. 18б показано соответствующее остаточное рассовмещение.

Тот факт, что, несмотря на значительное остаточное рассовмещение в парах (см. Фиг. 17б, г), все четыре изображения пористой поверхности оксида алюминия удалось довольно точно совместить в одном изображении (см. Фиг. 18б и Таблицу 3), указывает на то, что развитие искажения в 1-ой и 2-ой парах ВСИ происходит одинаково (см. Таблицы 2 и 4). Полученный результат служит экспериментальным доказательством обоснованности способа коррекции по двум парам ВСИ.

Чтобы избежать размытия изображения и, как следствие, потери полезной топографической информации, можно вообще отказаться от совмещения исправленных ВСИ (Фиг. 2, поз. 8, 9). В этом случае решение о выборе одного из четырёх изображений, наилучшим образом характеризующего исследуемую поверхность, принимает микроскопист.

На Фиг. 19 представлены найденные в процессе итеративного поиска пар особенностей зависимости среднего взаимных отклонений исправленных позиций пар особенностей от порядкового номера пары. Составляющие скорости дрейфа, действовавшие при встречном сканировании оксида алюминия, приведены в Таблице 4.

В качестве примера на Фиг. 20 показаны регрессионные поверхности, проведённые через локальные латеральные смещения особенностей и через локальные смещения высот рельефа 1-го ВСИ. На Фиг. 21 даны результаты нелинейной коррекции 1-ой и 2-ой пар ВСИ, а также соответствующие остаточные рассовмещения особенностей. На Фиг. 22 представлена нелинейная коррекция дрейфа по двум парам ВСИ. В отличие от линейной коррекции, нелинейная коррекция даёт гораздо более чёткое изображение пористой поверхности оксида алюминия (сравни Фиг. 21 с Фиг. 17, сравни также погрешности совмещения, указанные в Таблице 3).

На Фиг. 23а изображена исправленная поверхность пористого оксида алюминия, реконструированная в ходе нелинейной коррекции из сегментов особенностей. Здесь также

хорошо видно, что построенное изображение является чётким по всему полю скана, а не только в центре, как было получено ранее на Фиг. 18а. По данным Фиг. 23а определены средние расстояния между холмами 44.9 нм и между порами 69.9 нм. На Фиг. 23б показана модель поверхности пористого оксида алюминия.

В заключение перечислим существенные признаки, отличающие предлагаемый способ исправления дрейфа от его прототипа [7]:

1. При выполнении встречного сканирования перемещение зонда вдоль строки растра в паре изображений производится навстречу друг другу.
2. Исправление вызываемых дрейфом искажений рельефа поверхности осуществляется в полностью автоматическом режиме без какого-либо участия оператора.
3. Исправление дрейфа производится с использованием аналитических преобразований, полностью учитывающих все составляющие линейного искажения изображения, вызываемого дрейфом зонда микроскопа относительно измеряемой поверхности с постоянной скоростью. Какие-либо ограничения, накладываемые на величины компонентов дрейфа, отсутствуют, что делает предлагаемый способ более универсальным.
4. При поиске латеральных КЛП используются все имеющиеся на поверхности особенности – и холмы и ямы.
5. Откорректированные ВСИ совмещаются, после чего рельеф в области перекрытия усредняется. В результате достигается дополнительное снижение шума в выходном изображении, а вместо пары изображений, характеризующих одну и ту же область поверхности, получается одно изображение.
6. Применяется режим исправления дрейфа по двум парам ВСИ, что увеличивает точность коррекции.
7. Автоматическое определение величины погрешности исправления дрейфа на произвольной поверхности, т. е. такой поверхности структура и характерные размеры элементов которой априори не известны.
8. Автоматическое обнаружение факта изменения скорости дрейфа.
9. Исправление дрейфа с заранее заданной погрешностью в пределах определённой области изображения в соответствии с фактическим изменением скорости дрейфа, имевшим место во время встречного сканирования.
10. Нелинейная коррекция дрейфа с использованием регрессионных поверхностей, обеспечивающая более высокую точность исправления дрейфа.
11. Нелинейная коррекция дрейфа посредством сборки исправленного изображения из отдельных частично перекрывающихся сегментов исправленных ВСИ, обеспечивающая более высокую точность исправления дрейфа.
12. Предложенные способы коррекции легко встраиваются в способ ООС, в результате чего могут быть получены неискажённые дрейфом сканы поверхности практически любого размера, а также осуществлено любое заданное число усреднений рельефа поверх-

ности.

13. Возможность представления исправленной поверхности, состоящей из одинаковых или почти одинаковых элементов рельефа, в стилизованном виде, что удобно для последующего анализа поверхности.

Использованные источники информации:

[1] J. E. Griffith, D. A. Grigg, Dimensional metrology with scanning probe microscopes, J. Appl. Phys., vol. 74, no. 9, p. R83, 1993.

[2] K. Besocke, An easily operable scanning tunneling microscope, Surf. Sci., vol. 181, no. 1-2, p. 145, 1987; J. G. H. Hermsen, H. Van Kempen, B. J. Nelissen, L. L. Soethout, G. F. A. Van de Walle, P. J. W. Weijts, P. Wyder, New mechanical constructions for the scanning tunneling microscope, Surf. Sci., vol. 181, no. 1-2, p. 183, 1987; S. Gregory, C. T. Rogers, High speed scanning tunneling microscope, U. S. Patent no. 4814622, 21 March 1989; J. W. Lying, Variable temperature scanning tunneling microscope, U. S. Patent no. 4841148, 20 June 1989; B. L. Blackford, D. C. Dahn, M. H. Jericho, High stability bimorph scanning tunneling microscope, U. S. Patent no. 4894537, 16 January 1990.

[3] E. C. Teague, The National Institute of Standards and Technology molecular measuring machine project: Metrology and precision engineering design, J. Vac. Sci. Technol. B, vol. 7, no. 6, p. 1898, 1989.

[4] J. E. Griffith, G. L. Miller, C. A. Green, D. A. Grigg, P. E. Russell, A scanning tunneling microscope with a capacitance-based position monitor, J. Vac. Sci. Technol. B, vol. 8, no. 6, p. 2023, 1990; R. C. Barrett, C. F. Quate, Optical scan-correction system applied to atomic force microscopy, Rev. Sci. Instrum., vol. 62, no. 6, p. 1393, 1991; H. Zhang, F. Huang, T. Higuchi, Dual unit scanning tunneling microscope-atomic force microscope for length measurement based on reference scales, J. Vac. Sci. Technol. B, vol. 15, no. 4, p. 780, 1997.

[5] R. S. Robinson, Method and apparatus for correcting distortions in scanning tunneling microscope images, U. S. Patent no. 5107113, 21 April 1992.

[6] J. F. Jørgensen, L. L. Madsen, J. Garnaes, K. Carneiro, K. Schaumburg, Calibration, drift elimination, and molecular structure analysis, J. Vac. Sci. Technol. B, vol. 12, no. 3, p. 1698, 1994; M. Aketagawa, K. Takada, Correction of distorted STM image by using a regular crystalline lattice and 2D FFT, Nanotechnology, vol. 6, no. 4, p. 105, 1995.

[7] V. Y. Yurov, A. N. Klimov, Scanning tunneling microscope calibration and reconstruction of real image: Drift and slope elimination, Rev. Sci. Instrum., vol. 65, no. 5, p. 1551, 1994.

[8] V. B. Elings, J. A. Gurley, M. R. Rodgers, Drift compensation for scanning probe microscopes using an enhanced probe positioning system, U. S. Patent no. 5077473, 31 December 1991.

[9] Р. В. Лапшин, Способ измерения рельефа поверхности сканирующим зондовым микроскопом, Патент РФ на изобретение, № 2175761, приоритет от 08.06.1999 (патент дос-

тупен через Интернет по адресу: www.nanoworld.org/homepages/lapshin/patents.htm);
 R. V. Lapshin, Feature-oriented scanning methodology for probe microscopy and nanotechnology, Nanotechnology, vol. 15, no. 9, p. 1135, 2004 (статья доступна через Интернет по адресу: www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm).

[10] V. B. Elings, Method of operating a scanning probe microscope to improve drift characteristics, U. S. Patent no. 5081390, 14 January 1992.

[11] R. V. Lapshin, Automatic lateral calibration of tunneling microscope scanners, Rev. Sci. Instrum., vol. 69, no. 9, p. 3268, 1998 (статья доступна через Интернет по адресу: www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm).

Таблица 1

Образец	ВСИ	Холмы	Ямы	Всего	Усреднённая постоянная решётки a или среднее расстояние между одно- типными особенностями (холмы, ямы) (Å)	Относительная по- грешность измерения постоянной решётки a (%)
ВОПГ	1	261	229	490	2.221	9.9
	2	310	281	591	2.024	17.9
	3	274	246	520	2.220	9.9
	4	320	290	610	2.023	17.9
Пористый Al_2O_3	1	117	62	179	398.0, 641.2	–
	2	67	30	97	518.1, 828.6	–
	3	115	58	173	399.1, 641.4	–
	4	64	32	96	516.9, 826.1	–

Таблица 2

Образец	ВСИ	K_x	K_y	K_z^+
ВОПГ	1	0.9997155	0.9996909	—
	3	1.0003653	0.9997057	—
Пористый Al_2O_3	1	1.000127	1.001523	1.032365
	3	1.000276	1.001491	1.034608

Таблица 3

Образец	Исправленные ВСИ	Число n общих особен- ностей	Δ_{min} (Å)	Δ_{max} (Å)	Δ (Å)	Δ_{\perp} (Å)	δ_{max} (%)	δ (%)
ВОПГ	$\overline{102}$	424	0.002, 0.003	0.677, 0.392	0.221, 0.072	—	0.8, 0.6	0.23, 0.07
	$\overline{304}$	430	0.008, 0.008	0.713, 0.451	0.297, 0.096	—	0.9, 0.6	0.31, 0.10
	$\overline{(102)0(304)}$	422	0.002, 0.001	0.253, 0.248	0.050, 0.048	—	0.2, 0.4	0.05, 0.05
Пористый Al_2O_3	$\overline{102}$	88	15.2, 1.3	445.9, 65.4	165.5, 18.9	56.4, 37.3	2.8, 0.9	1.5, 0.16
	$\overline{304}$	85	11.9, 1.8	414.9, 63.6	157.5, 18.5	55.7, 37.6	3.1, 0.8	1.4, 0.15
	$\overline{(102)0(304)}$	84	0.6, 0.2	77.5, 57.6	30.6, 22.3	20.4, 42.4	0.8, 0.6	0.2, 0.14

Таблица 4

Образец	ВСИ	\bar{v}_x (Å/c)	\bar{v}_y (Å/c)	$ \bar{v}_{xy} $ (Å/c)	\bar{v}_z (Å/c)		
ВОПГ	1	-0.063	-0.066	0.091	-	-	-
	3	0.082	-0.063	0.103	-	-	-
Пористый Al ₂ O ₃	1	1.41	16.91	16.96	2.94	2.93	3.26
	3	3.07	16.54	16.82	3.14	3.13	3.36

Формула изобретения

1. Способ коррекции искаженных дрейфом изображений поверхности, полученных на сканирующем зондовом микроскопе, при котором два раза производят сканирование одной и той же области поверхности так, чтобы перемещение от одной строки растра к другой во втором скане происходило в направлении, противоположном направлению перемещения в первом, после чего трансформируют полученную пару изображений таким образом, чтобы особенности типа "холм" на этих изображениях совпали друг с другом, отличающийся тем, что перемещение по строке во втором скане производят в направлении, противоположном направлению перемещения в первом, а трансформацию встречно-сканированных изображений выполняют следующим образом: вначале распознают одни и те же особенности поверхности типа "холм" или "яма" в каждом изображении в автоматическом режиме, затем по найденным в ходе распознавания латеральным координатам пар особенностей (x_1, y_1) и (x_2, y_2), определяют латеральные коэффициенты линейных преобразований по формулам

$$K1_x = \frac{x_1 + x_2 - m_x}{x_2 - x_1 + m_x + [(k + 1)m_x + 1](y_2 - y_1 + m_y)} + 1,$$

$$K1_y = \frac{y_1 + y_2 - m_y}{x_2 - x_1 + m_x + [(k + 1)m_x + 1](y_2 - y_1 + m_y)} + 1,$$

$$K2_x = 2 - K1_x,$$

$$K2_y = 2 - K1_y,$$

где цифры 1 и 2 в обозначениях указывают на принадлежность величины первому или второму изображению соответственно;

m_x, m_y - число точек в строке и в столбце искаженного изображения соответственно;

k - отношение скорости перемещения зонда в строке при прямом ходе к скорости перемещения при обратном ходе;

после чего, используя нижеследующие линейные преобразования

$$\bar{x}(x, y) = x + (K_x - 1)\{x + [(k + 1)m_x + 1]y\},$$

$$\bar{y}(x, y) = y + (K_y - 1)\{x + [(k + 1)m_x + 1]y\},$$

где \bar{x} , \bar{y} - латеральные координаты точек исправленного изображения; x, y - латеральные координаты точек искаженного дрейфом изображения: исправляют в автоматическом режиме каждое из встречно-сканированных изображений в латеральной плоскости с заранее заданной погрешностью; затем, временно совместив полученные изображения в точке совмещения, определяют для каждой точки \bar{x} , \bar{y} из области перекрытия этих изображений, соответствующие ей точки с координатами (x_1, y_1), (x_2, y_2) на искаженных встречно-сканированных изображениях, используя нижеследующие

обратные преобразования

$$x(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{\{(K_y - 1)[(k + 1)m_x + 1] + 1\}\bar{x} - (K_x - 1)[(k + 1)m_x + 1]\bar{y}}{K_x + (K_y - 1)[(k + 1)m_x + 1]},$$

$$y(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{(1 - K_y)\bar{x} + K_x\bar{y}}{K_x + (K_y - 1)[(k + 1)m_x + 1]},$$

после чего вычисляют вертикальные коэффициенты линейного преобразования по формулам

$$K1_z^+ = \frac{z_2(x_2, y_2) - z_1(m_x - x_1, m_y - y_1)}{x_1 + x_2 + [(k + 1)m_x + 1](y_1 y_2)} + 1,$$

$$K2_z^- = 2 - K1_z^+,$$

где z - вертикальная координата точки искаженного дрейфом изображения; которые затем усредняют; после этого каждое из встречно-сканированных изображений, исправленных в латеральной плоскости, исправляют в вертикальной плоскости посредством нижеследующего линейного преобразования

$$\bar{z}(x, y) = z(x, y) - (K_z - 1)\{x + [(k + 1)m_x + 1]y\},$$

где \bar{z} - вертикальная координата точки исправленного изображения; наконец, совмещают исправленные встречно-сканированные изображения в точке совмещения и усредняют в области перекрытия этих изображений.

2. Способ по п.1, отличающийся тем, что из исправленных встречно-сканированных изображений вырезают небольшие окрестности особенностей - сегменты рельефа, такого размера, что соседние сегменты частично перекрывают друг друга; после чего полученные сегменты укладывают в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, а затем усредняют рельеф в местах наложения сегментов.

3. Способ по п.1, отличающийся тем, что в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, помещают стилизованные изображения этих особенностей.

4. Способ по п.1, отличающийся тем, что для каждой особенности встречно-сканированных изображений определяют локальные коэффициенты линейного преобразования, по которым вычисляют локальные смещения, как разности между исправленным положением особенности и искаженным, после чего проводят через найденные локальные смещения регрессионные поверхности, по которым для каждой точки искаженного изображения определяют соответствующее корректирующее смещение.

5. Способ по п.4, отличающийся тем, что из исправленных встречно-сканированных изображений вырезают небольшие окрестности особенностей - сегменты рельефа, такого размера, что соседние сегменты частично перекрывают друг друга, после чего полученные сегменты укладывают в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, а затем усредняют рельеф в местах наложения сегментов.

6. Способ по п.5, отличающийся тем, что в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, помещают стилизованные изображения этих особенностей.

7. Способ по пп.1 или 2, или 3, или 4, или 5, или 6, отличающийся тем, что перед началом встречного сканирования зонд микроскопа перемещают несколько раз вперед и назад по первой строке раstra.

8. Способ по пп.1 или 2, или 4, или 5, отличающийся тем, что встречное сканирование выполняют в сегментах и/или в апертурах, получаемых в процессе особенность-ориентированного сканирования.

9. Способ по п.8, отличающийся тем, что перед началом встречного сканирования в сегментах и/или в апертурах зонд микроскопа перемещают несколько раз вперед и назад

по первой строке растра.

10. Способ по п.8, отличающийся тем, что особенность-ориентированное сканирование производят без использования операции скиппинга особенностей, а изображение поверхности собирают, используя относительные координаты особенностей в исправленной апертуре и исправленный рельеф в сегменте/апертуре.

11. Способ по п.10, отличающийся тем, что перед началом встречного сканирования в сегментах и/или в апертурах зонд микроскопа перемещают несколько раз вперед и назад по первой строке растра.

12. Способ по п.1, отличающийся тем, что в каждом из встречно-сканированных изображений во время холостого обратного хода в строке производят считывание рельефа, получая таким образом еще одну пару встречно-сканированных изображений; после исправления изображений в каждой паре выполняют совмещение исправленных пар путем наложения изображений так, чтобы совпали "центры тяжести" используемых совокупностей особенностей; после чего рельеф поверхности снова усредняют в области перекрытия изображений.

13. Способ по п.12, отличающийся тем, что из исправленных встречно-сканированных изображений вырезают небольшие окрестности особенностей - сегменты рельефа, такого размера, что соседние сегменты частично перекрывают друг друга; после чего полученные сегменты укладывают в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, а затем усредняют рельеф в местах наложения сегментов.

14. Способ по п.12, отличающийся тем, что в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, помещают стилизованные изображения этих особенностей.

15. Способ по п.12, отличающийся тем, что для каждой особенности встречно-сканированных изображений определяют локальные коэффициенты линейного преобразования, по которым вычисляют локальные смещения, как разности между исправленным положением особенности и искаженным, после чего проводят через найденные локальные смещения регрессионные поверхности, по которым для каждой точки искаженного изображения определяют соответствующее корректирующее смещение.

16. Способ по п.15, отличающийся тем, что из исправленных встречно-сканированных изображений вырезают небольшие окрестности особенностей - сегменты рельефа, такого размера, что соседние сегменты частично перекрывают друг друга, после чего полученные сегменты укладывают в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, а затем усредняют рельеф в местах наложения сегментов.

17. Способ по п.16, отличающийся тем, что в позиции, являющиеся средними арифметическими исправленных позиций соответствующих особенностей, помещают стилизованные изображения этих особенностей.

18. Способ по пп.12 или 13, или 14, или 15, или 16, или 17, отличающийся тем, что перед началом встречного сканирования зонд микроскопа перемещают несколько раз вперед и назад по первой строке растра.

19. Способ по пп.12 или 13, или 15, или 16, отличающийся тем, что встречное сканирование выполняют в сегментах и/или в апертурах, получаемых в процессе особенность-ориентированного сканирования.

20. Способ по п.19, отличающийся тем, что перед началом встречного сканирования в сегментах и/или в апертурах зонд микроскопа перемещают несколько раз вперед и назад по первой строке растра.

21. Способ по п.19, отличающийся тем, что особенность-ориентированное сканирование производят без использования операции скиппинга особенностей, а изображение поверхности собирают, используя относительные координаты особенностей в исправленной апертуре и исправленный рельеф в сегменте/апертуре.

22. Способ по п.21, отличающийся тем, что перед началом встречного сканирования в

сегментах и/или в апертурах зонд микроскопа перемещают несколько раз вперед и назад по первой строке раstra.

5

10

15

20

25

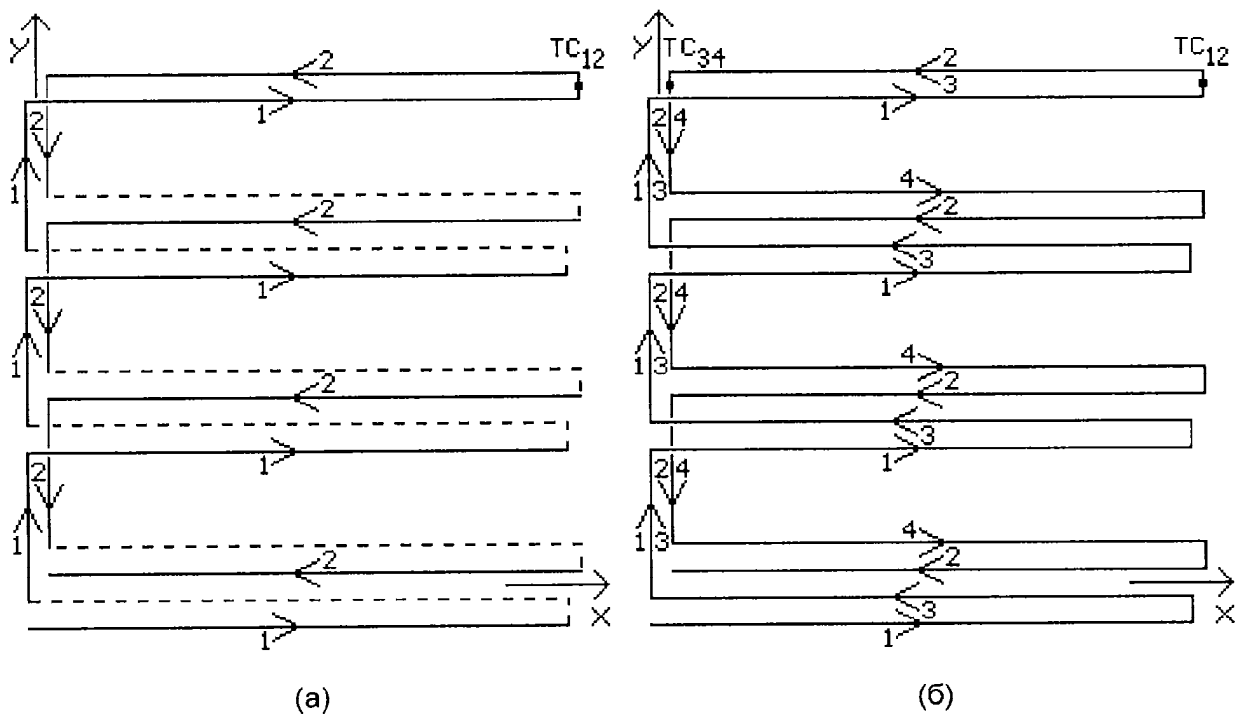
30

35

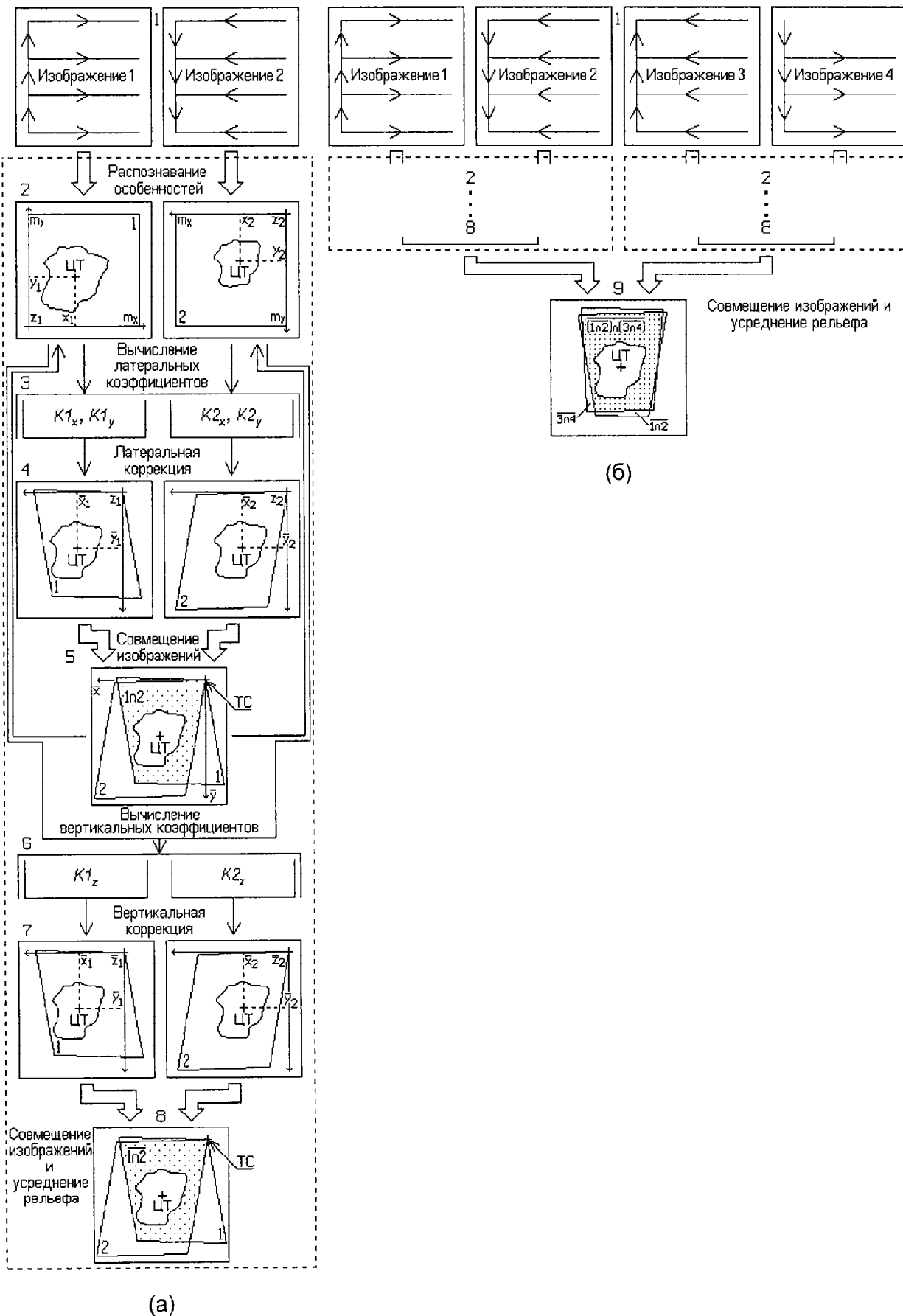
40

45

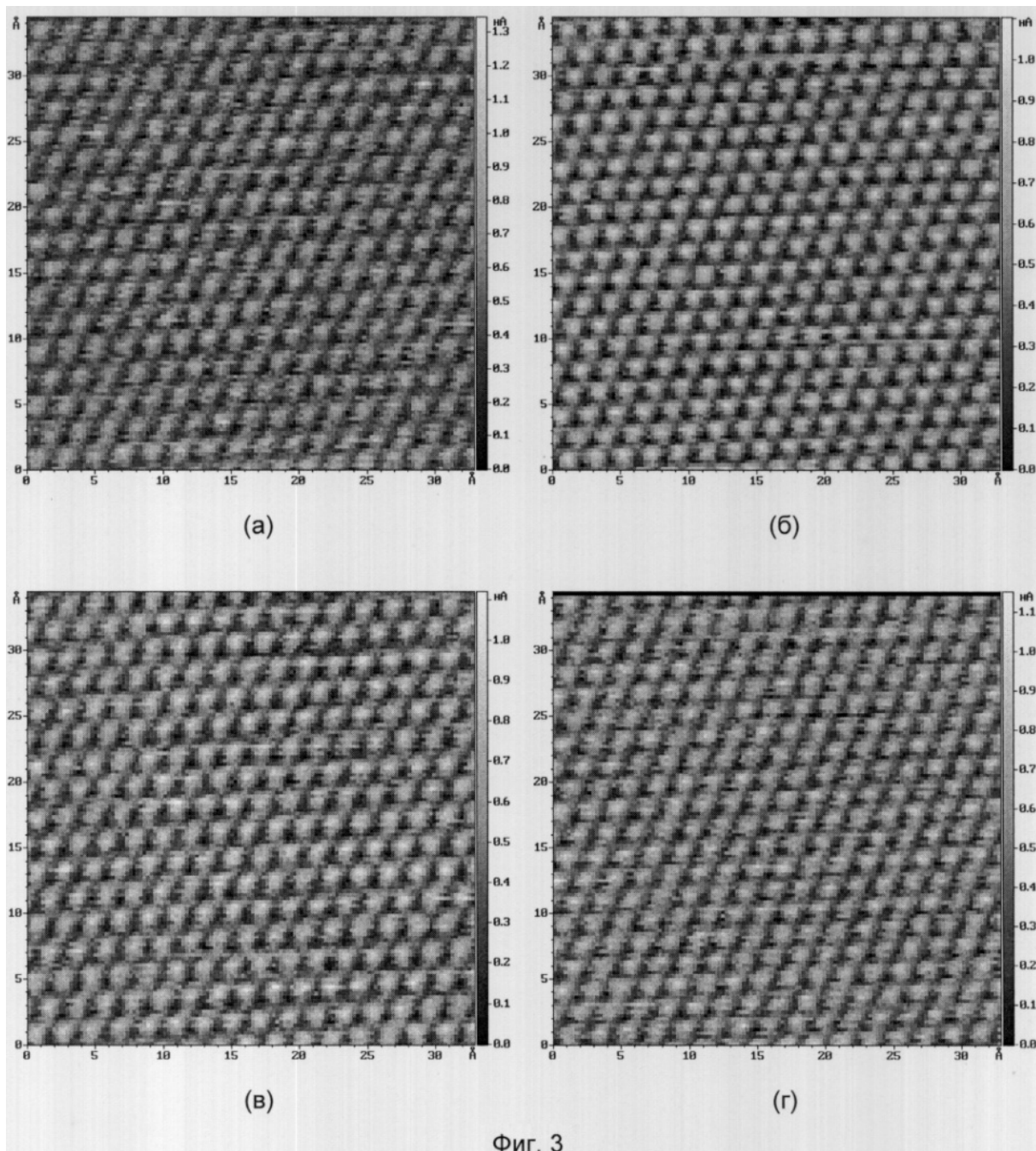
50

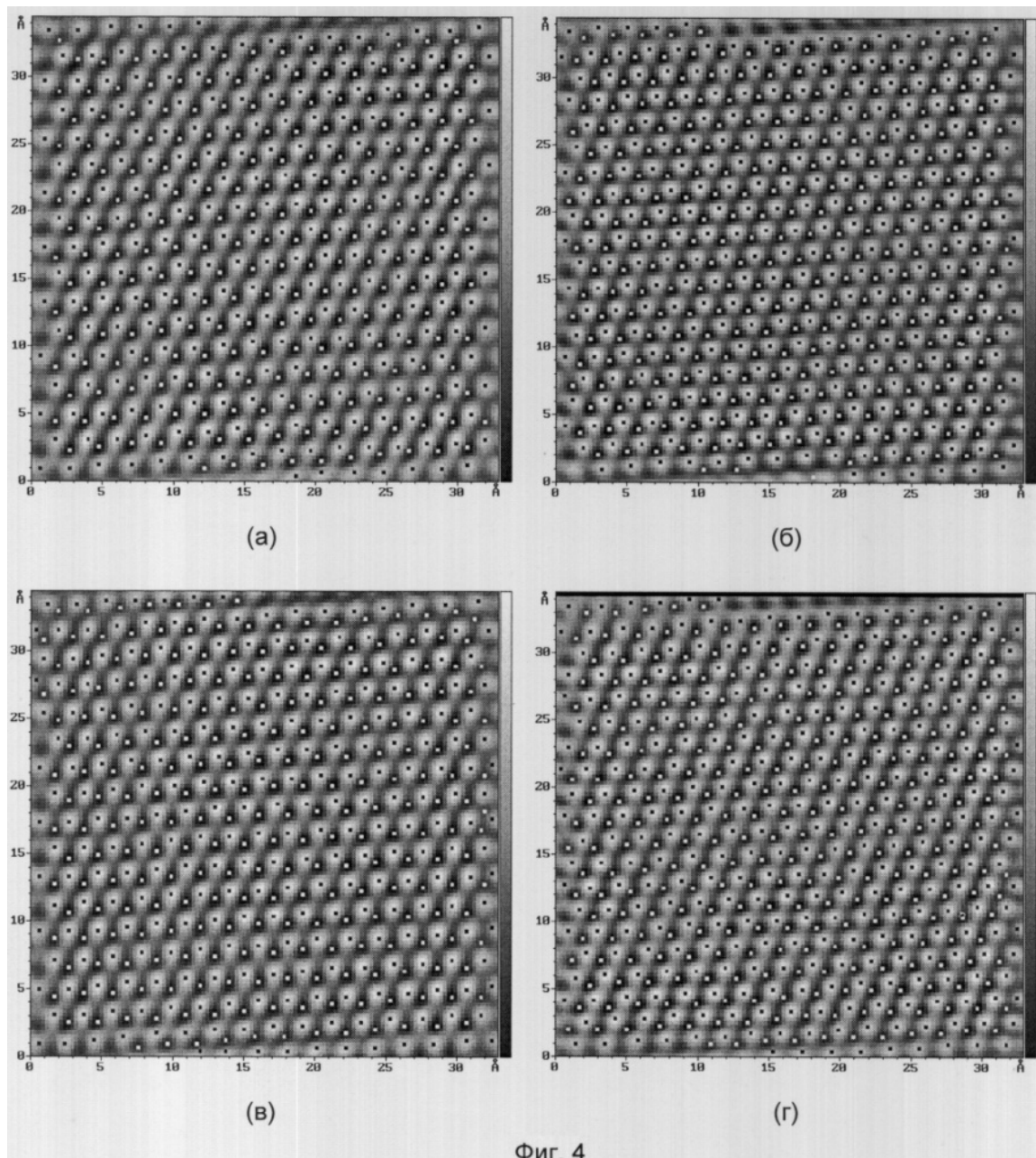


Фиг. 1

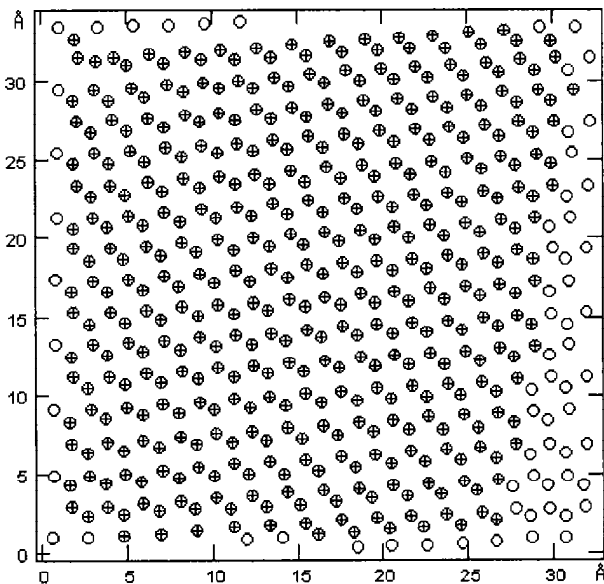


Фиг. 2

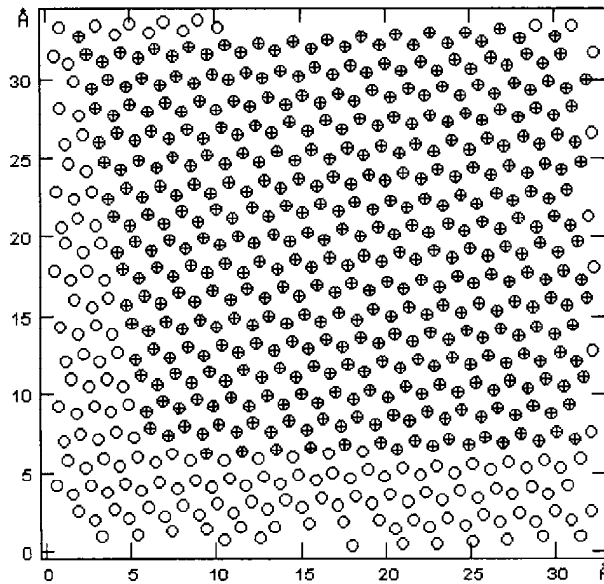




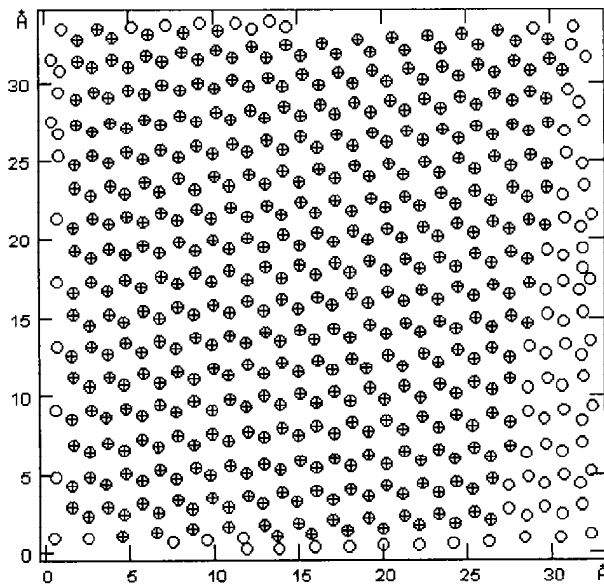
Фиг. 4



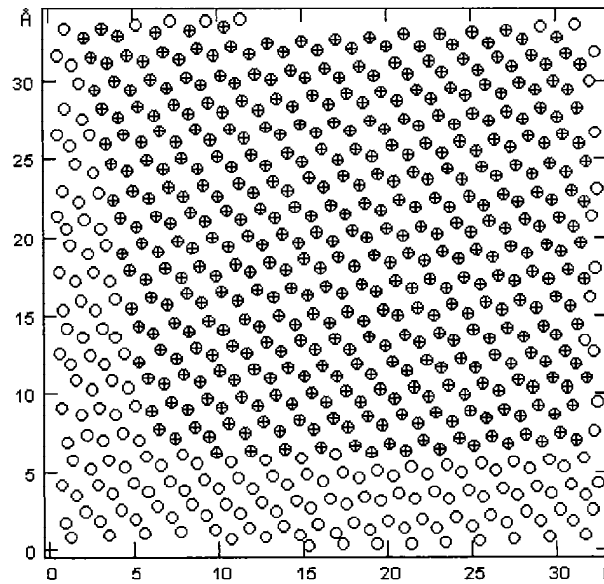
(a)



(б)

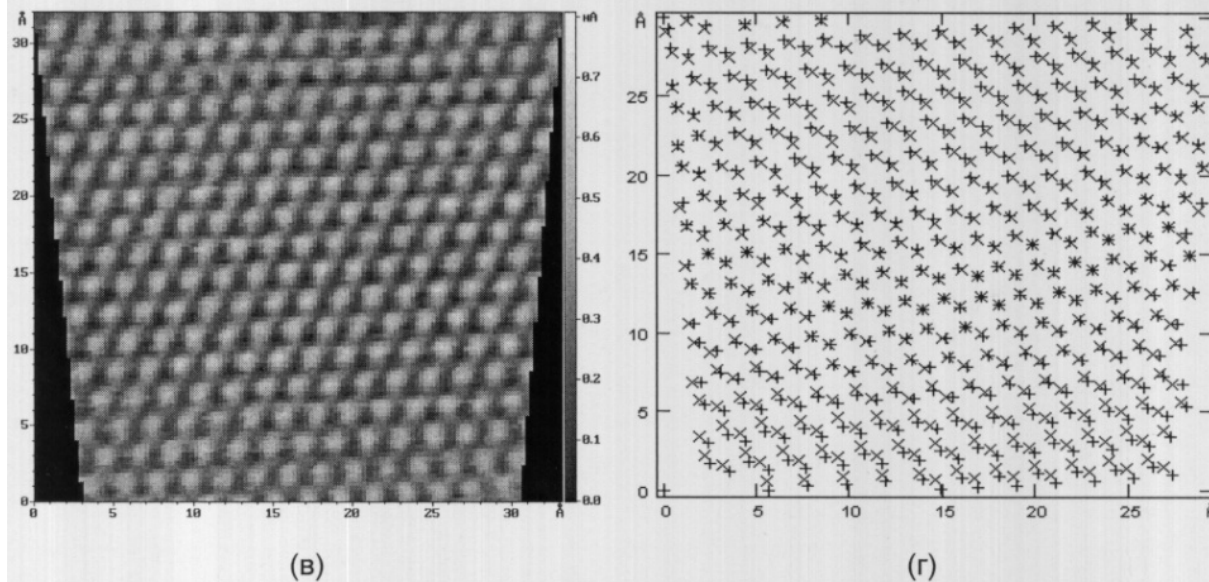
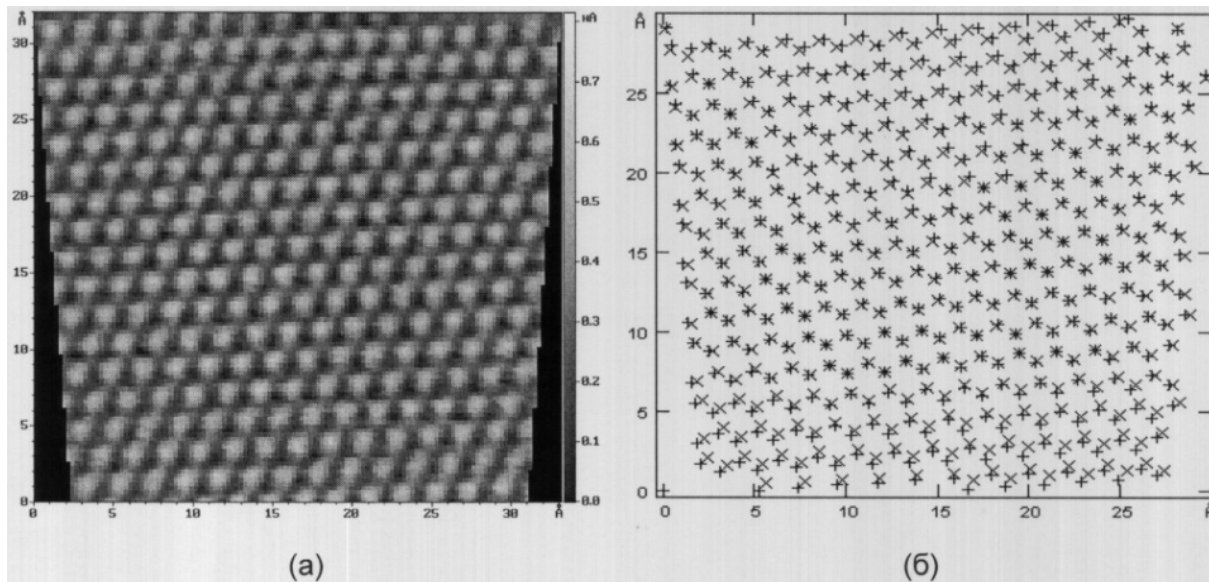


(в)

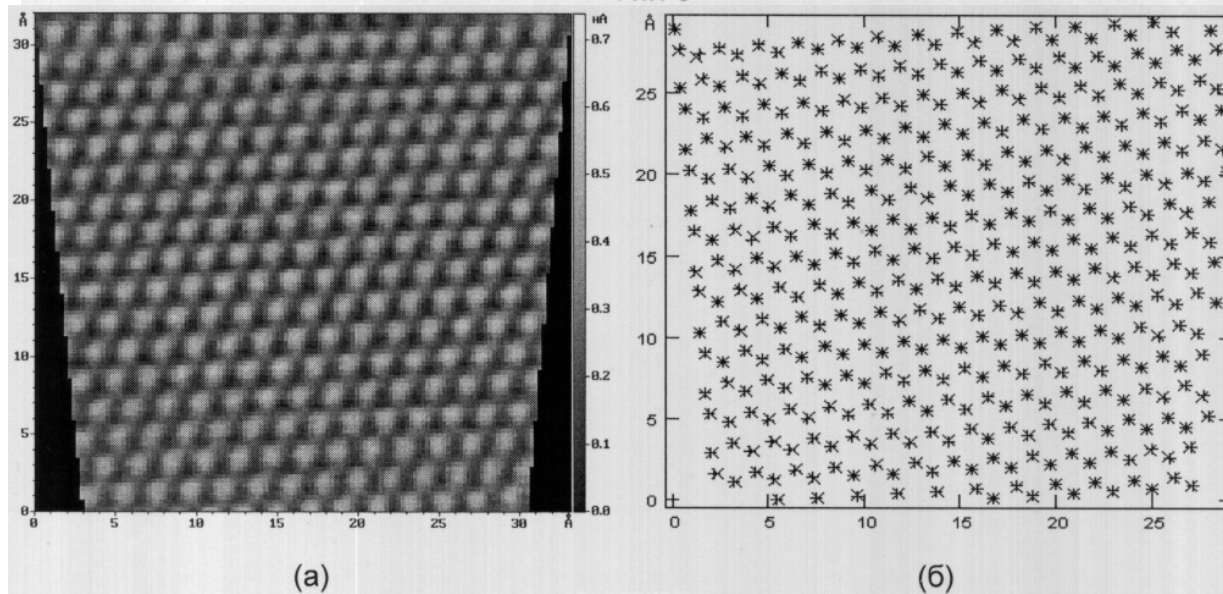


(г)

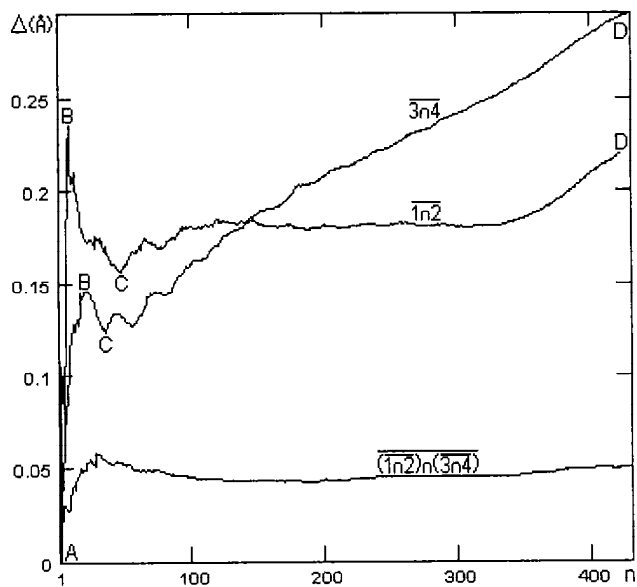
Фиг. 5



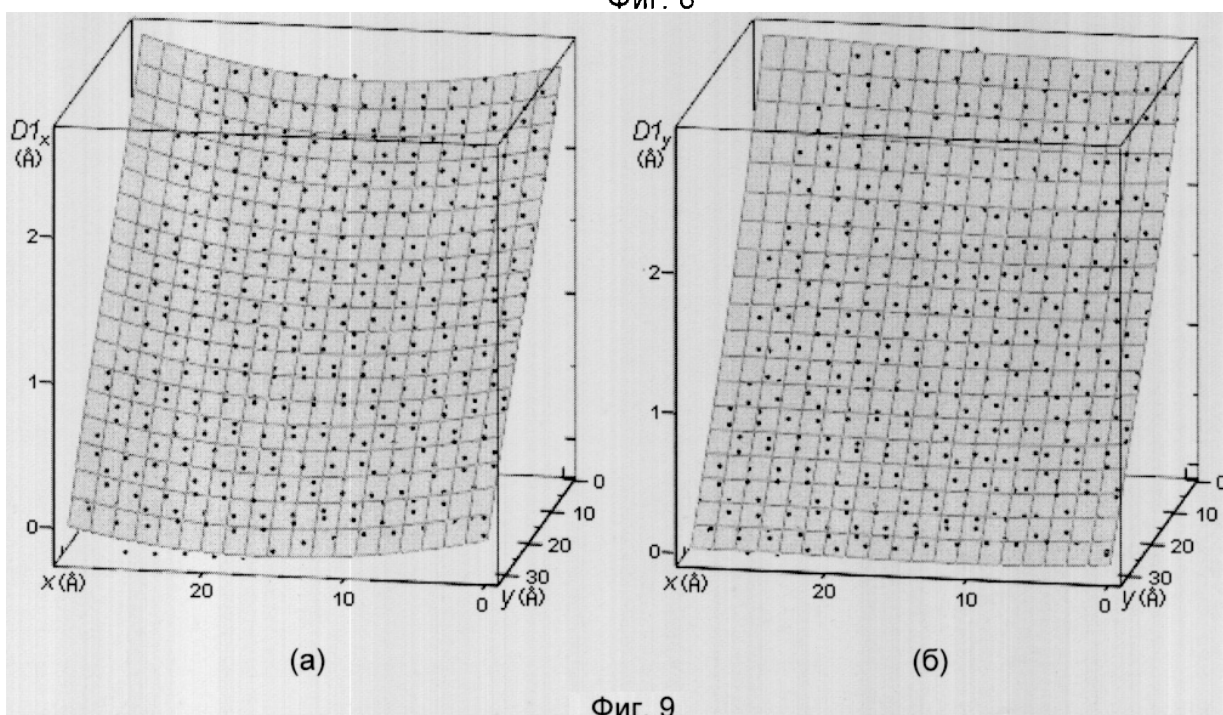
Фиг. 6



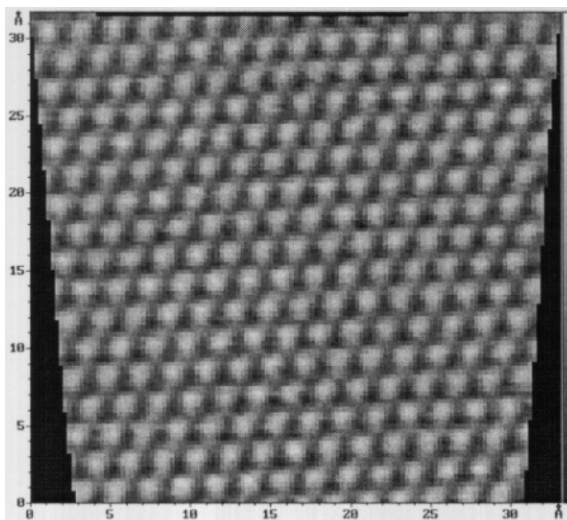
Фиг. 7



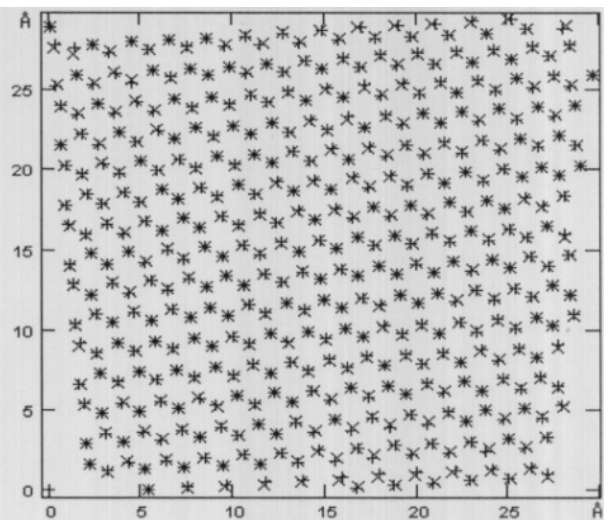
Фиг. 8



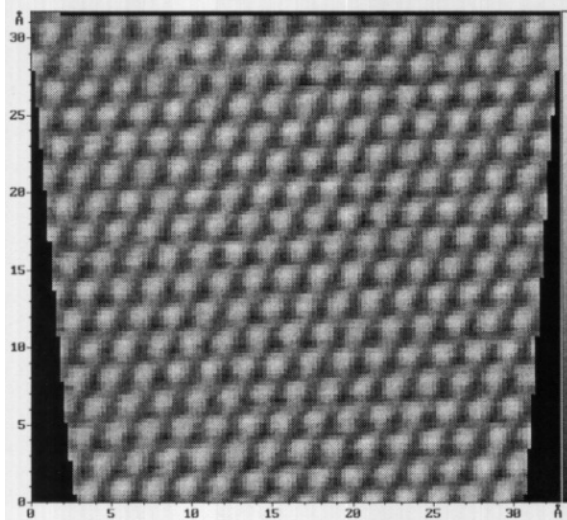
Фиг. 9



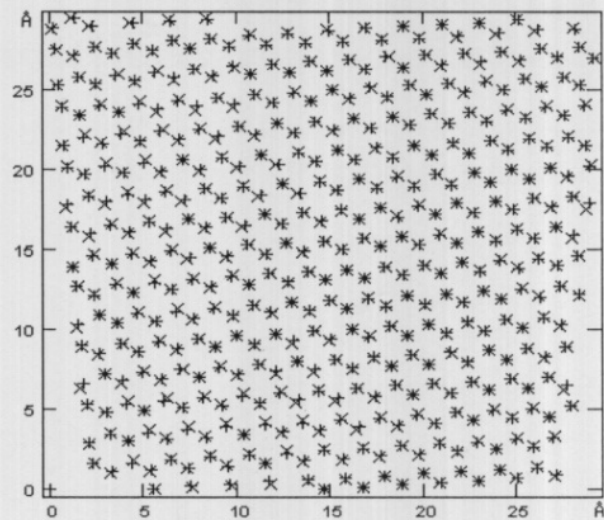
(a)



(б)

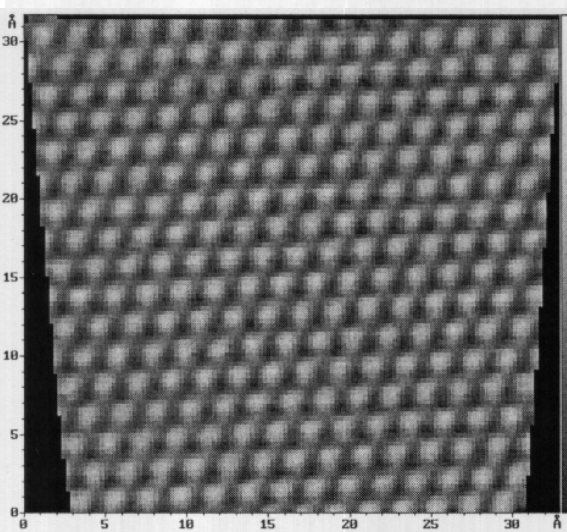


(в)

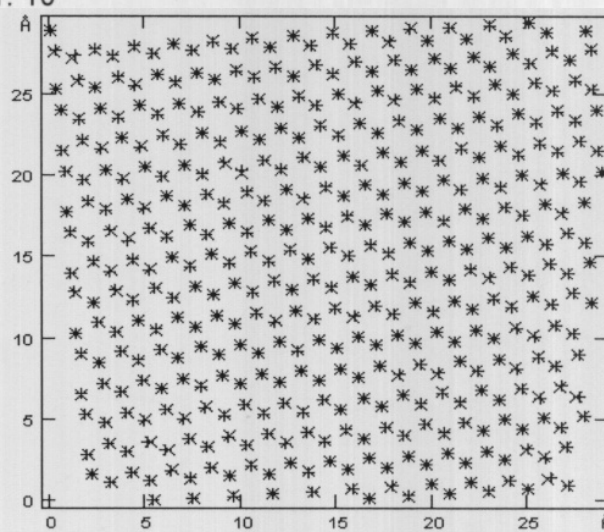


(г)

Фиг. 10

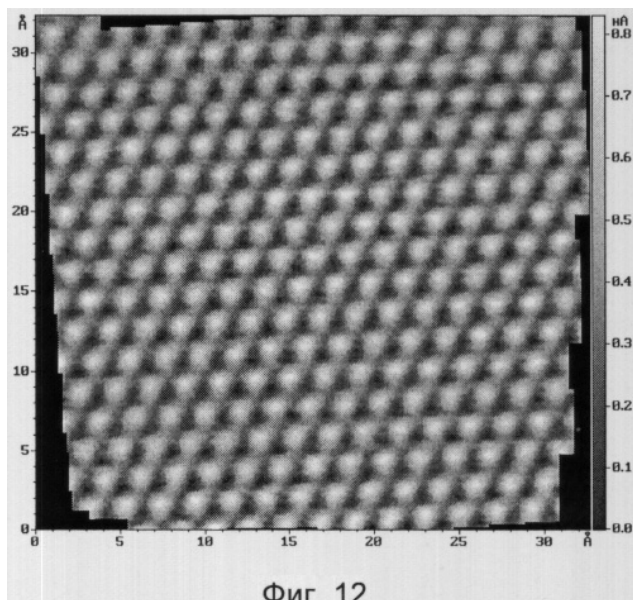


(a)

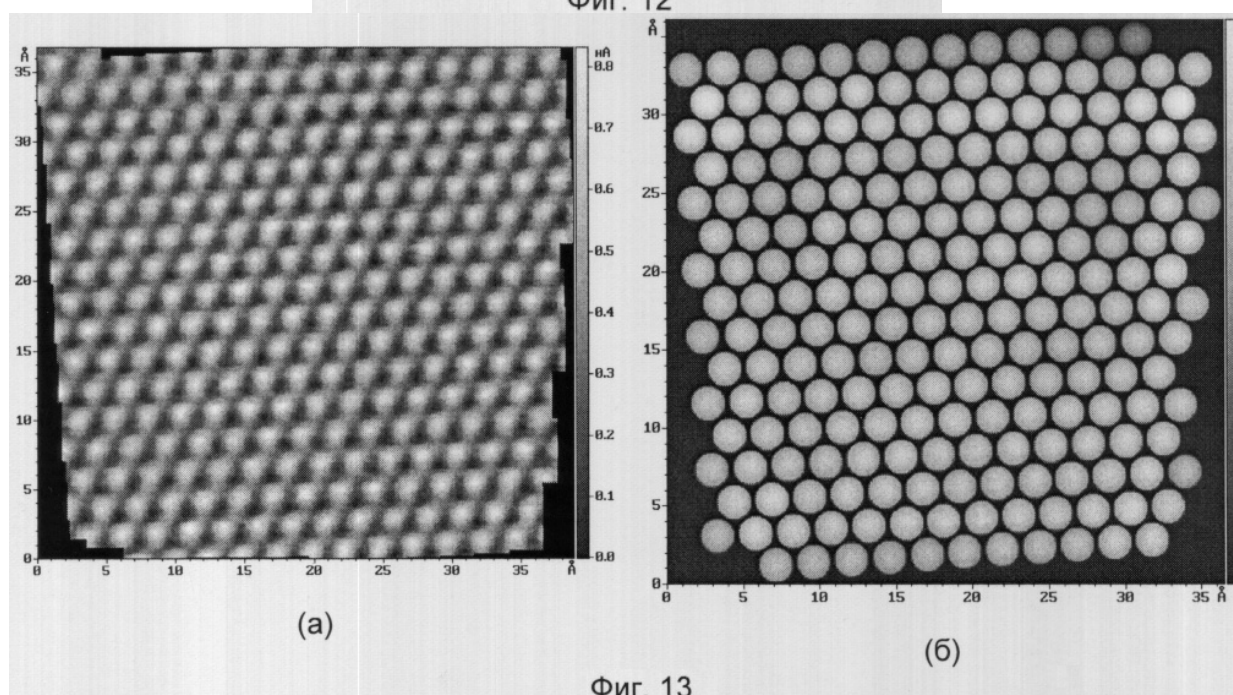


(б)

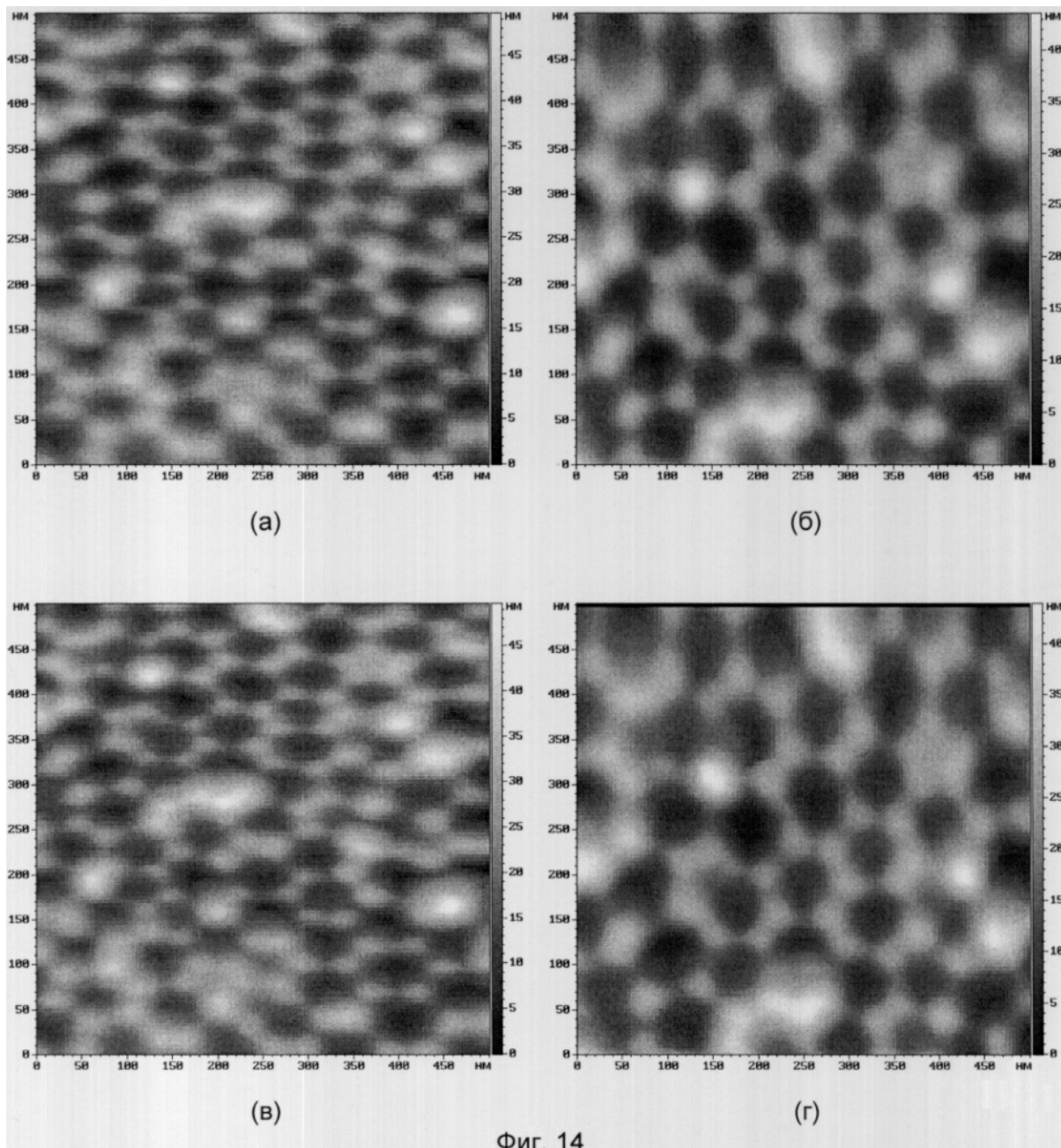
Фиг. 11



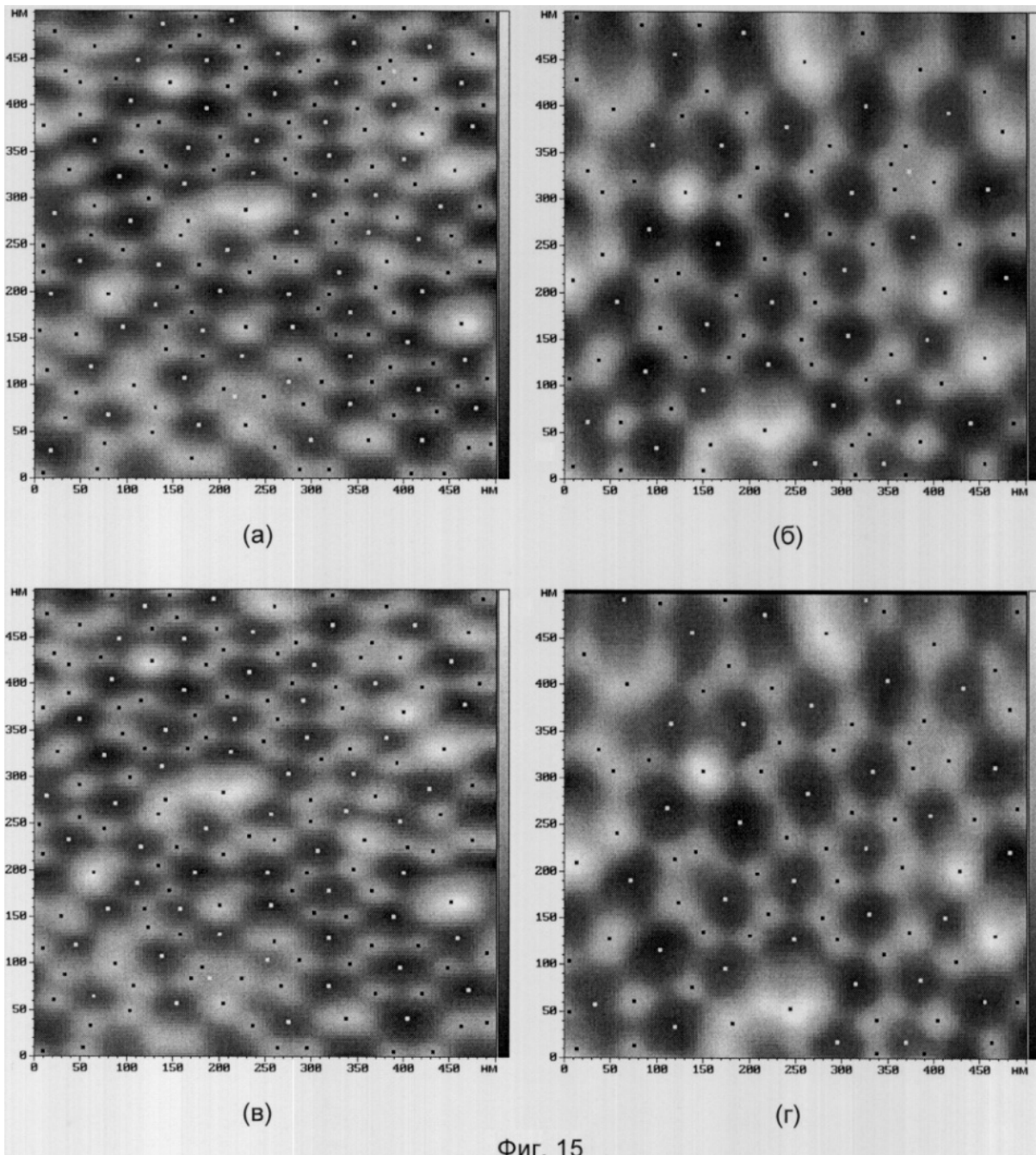
Фиг. 12



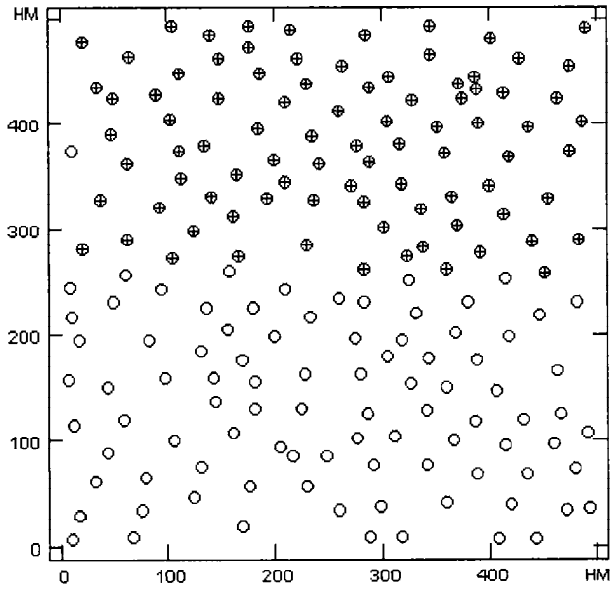
Фиг. 13



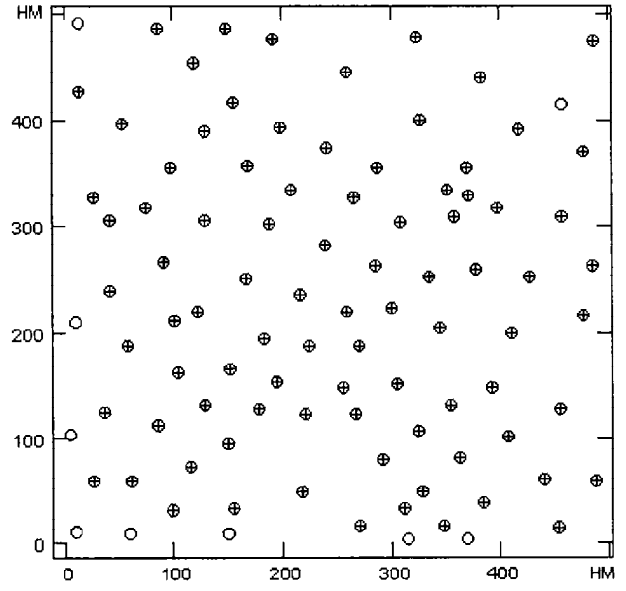
Фиг. 14



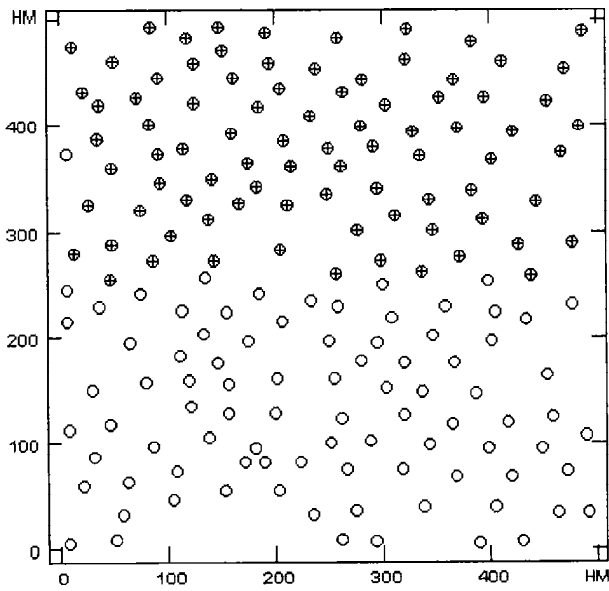
Фиг. 15



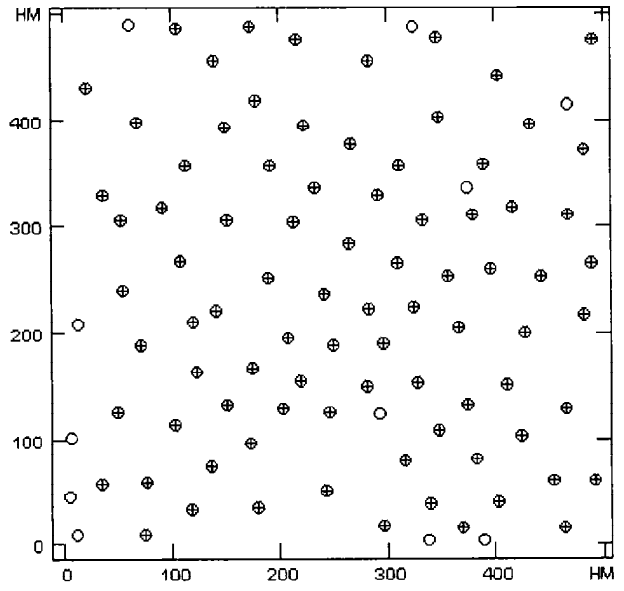
(a)



(б)

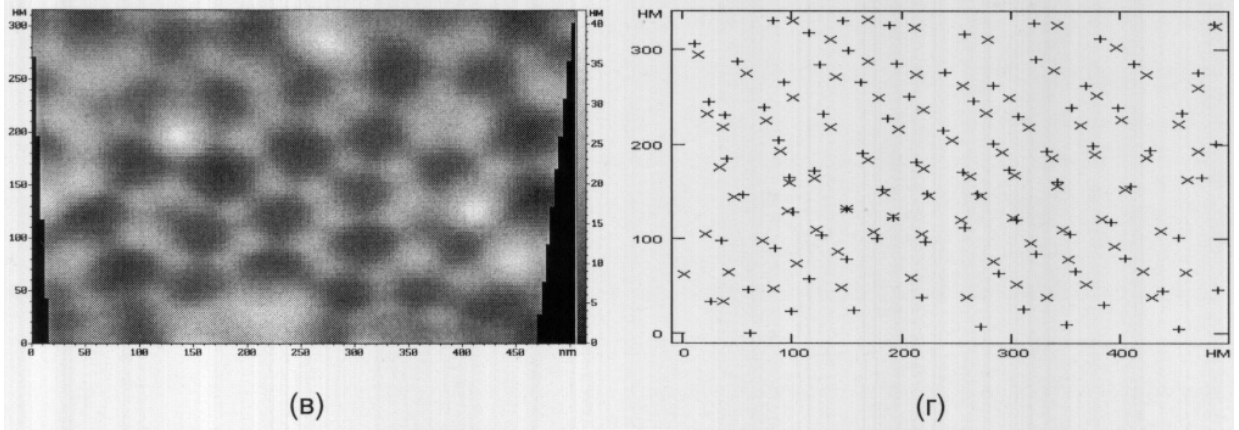
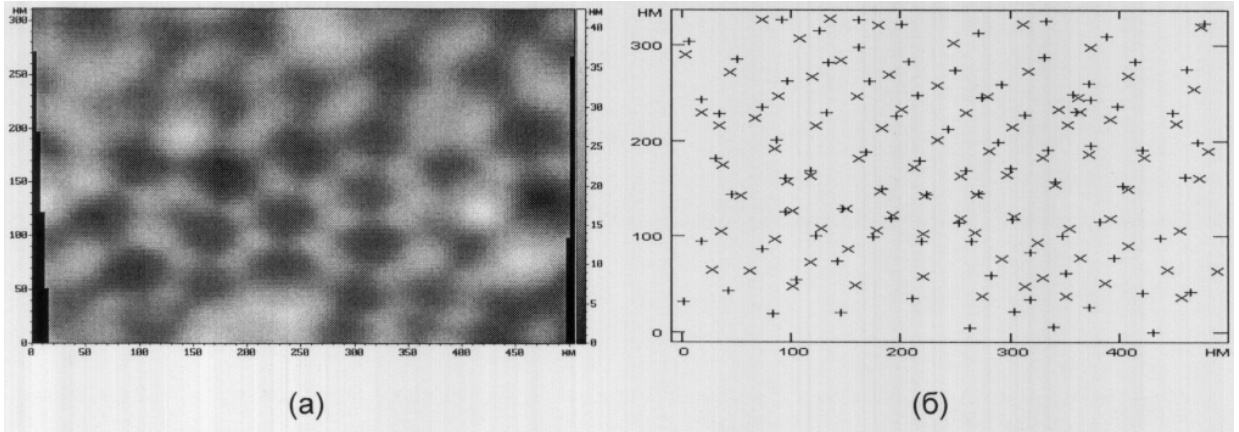


(в)

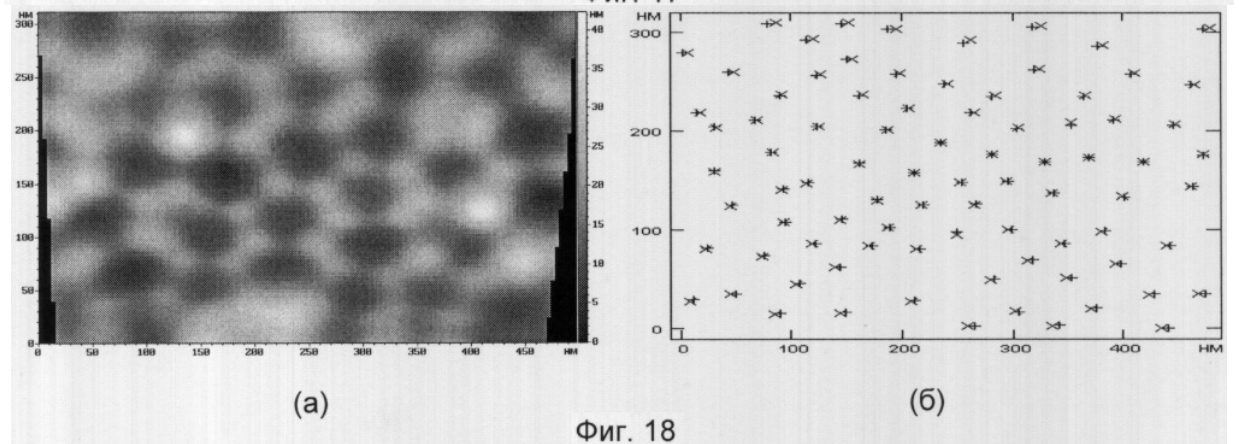


(г)

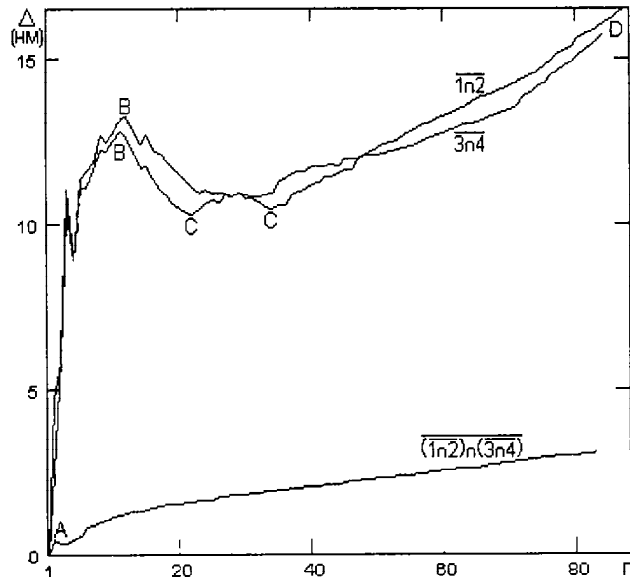
Фиг. 16



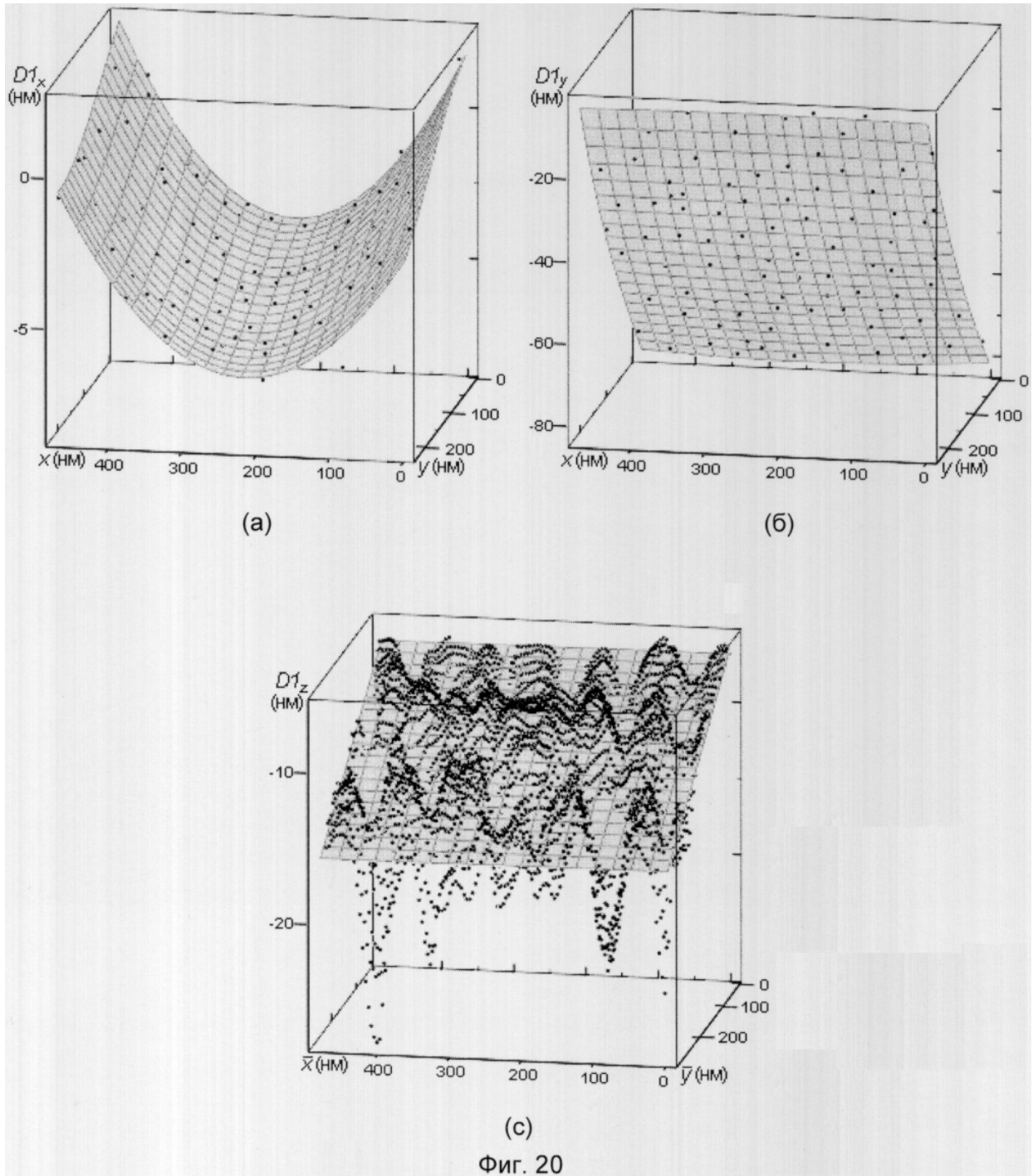
Фиг. 17

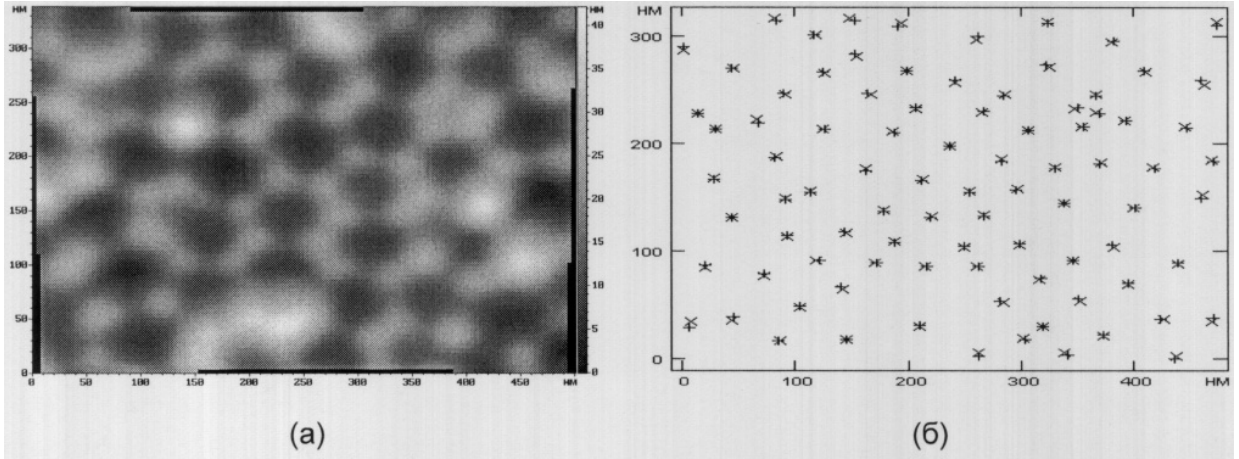


Фиг. 18



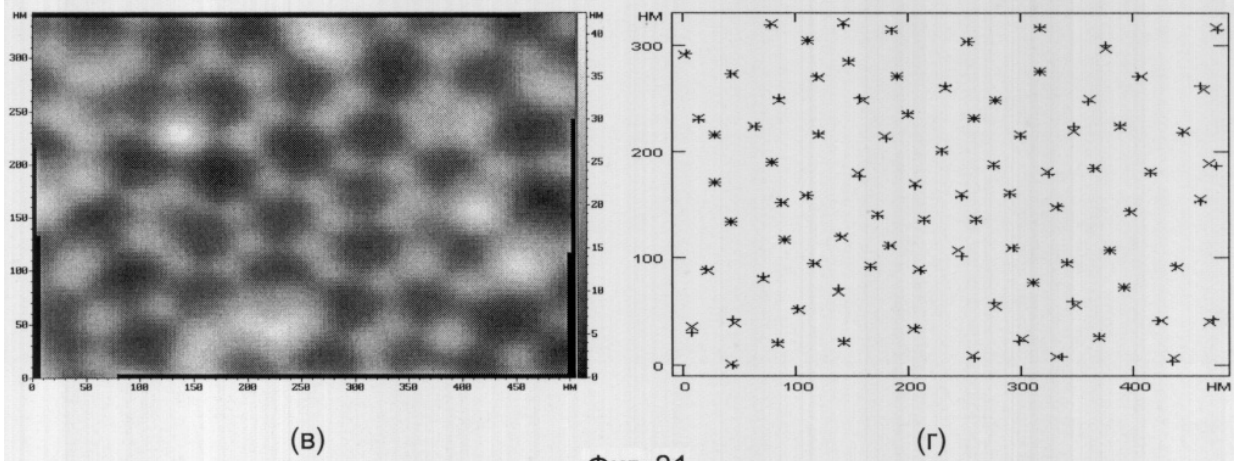
Фиг. 19





(a)

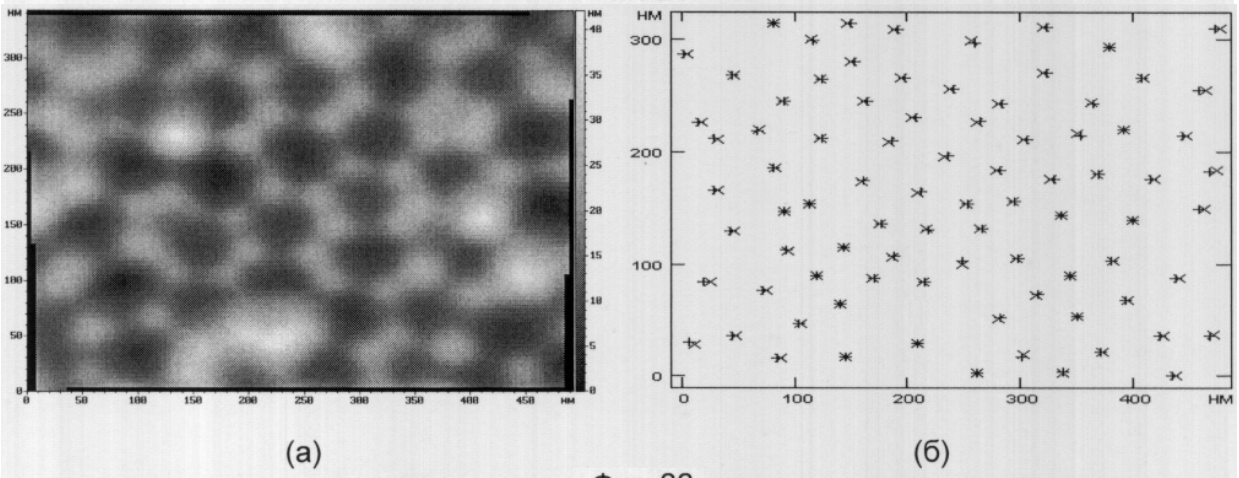
(б)



(в)

(г)

Фиг. 21



(a)

(б)

Фиг. 22

