

# 基于精确探针模型的 AFM 图像重构研究<sup>\*</sup>

袁 帅<sup>1,2</sup>, 董再励<sup>1</sup>, 缪 磊<sup>1</sup>, 席 宁<sup>1,3</sup>, 王越超<sup>1</sup>

(1 中国科学院沈阳自动化研究所国家机器人学重点实验室 沈阳 110016 中国;

2 中国科学院研究生院 北京 100039 中国; 3 密歇根州大学电子和计算机工程系 密歇根州 美国)

**摘 要:** 原子力显微镜技术已在纳米成像中得到了普遍应用。但实验表明, AFM 图像在水平方向分辨率较低, 其中探针针尖形貌是影响扫描图像分辨率的关键因素之一。为了提高 AFM 扫描图像的分辨率, 改善成像质量, 一种可行的方法是通过建立探针模型后, 重构扫描图像。在已有的探针建模方法中, 普遍采用盲建模算法。针对目前盲建模算法中降噪阈值难以优化问题, 提出了一种降噪阈值最优估计新方法。该方法可以使盲建模算法更准确地建立扫描方向上的探针形貌轮廓, 进而完成 3D 探针模型。通过应用 AFM 探针扫描多空铝和标准栅格实验, 介绍了探针针尖形貌精确建模的方法。然后使用数学形态学的腐蚀运算对标准栅格的 AFM 成像进行了重构, 验证了上述方法的有效性。实验结果证明, 重构后的图像中降低了探针针尖形貌的失真影响, 可以显著改善扫描探针显微镜成像的水平分辨率。

**关键词:** AFM; 探针模型; 盲建模算法; 图像重构

**中图分类号:** O793 TN16 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 460.4010

## AFM image reconstruction based on accurate tip model

Yuan Shuai<sup>1,2</sup>, Dong Zaili<sup>2</sup>, Miao Lei<sup>1</sup>, Xi Ning<sup>2,3</sup>, Wang Yuechao<sup>2</sup>

(1 State Key Laboratory of Robotics, Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China;

2 Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China;

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

**Abstract:** Atomic force microscopy has been generally applied in obtaining nano-scale images. The shape and size of the tip are the key factors affecting the precision of the scanning image. In order to get high precision image, the tip shape is required to be estimated and used to reconstruct the scanning image. Recently several algorithms have been put forward, and the blind tip estimation algorithm among them is widely used. This algorithm has difficulties in estimating the optimal noise threshold to reduce the noise effects in the specimen image. A new method for determining the optimal noise threshold in the algorithm is proposed. The estimated tip is used to scan the TGZ01 and then reconstruct the scanning image. Experimental result demonstrates that the tip broad effect is decreased in the reconstructed image, which improves the scanning precision.

**Key words:** AFM; tip model; blind tip estimation algorithm; image reconstruction

## 1 引 言

随着科学研究与制造技术进入纳米时代, 在纳米尺度下“成像”质量已变得越来越重要。只有提供精确的

纳米观测“图像”, 才能对纳米世界有更深入的了解和认知。在纳米尺度下, 物体的表面形貌特征以及信息的描述在诸如: 材料学、微观物理学、表面化学、生物学、纳米装配与制造和微电子技术等许多科学技术领域起着至关重要的作用。

收稿日期: 2008-07 Received Date: 2008-07

\*基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (60635040)、国家 863 计划 (2009AA03Z316)、辽宁省博士启动基金资助项目

1982年扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscope, STM)的发明使人类获得了样品表面原子分布的图像<sup>[1]</sup>。1986年原子力显微镜 (atomic force microscope, AFM)问世,为人类提供了更有效的纳米观测工具<sup>[2]</sup>。今天,STM与AFM已发展成功能类型繁多的扫描探针显微镜 (scanning probe microscope, SPM)家族。

采用AFM探针扫描模式进行纳米尺度下的形貌观测(如Contact和Tapping)时<sup>[3]</sup>,根据AFM作用机理,当样品表面存在起伏时,由于探针的体积和形状,系统响应等因素,探针针尖无法精确反映与样品表面各点间的受力,因而扫描信号的成像与样品真实形貌并不完全一致。这种情况在探针磨损或高速扫描时尤为严重。

由于探针效应,AFM成像和样品真实形貌有很大差别,所以需要建立探针模型重构扫描后的图像。目前已有许多算法用来建立探针形貌<sup>[4-11]</sup>,如勒让德变换和偏微分方程求解等,其中使用较多的为盲建模算法。盲建模算法的优点在于不需要知道标定薄膜的表面形貌就可以计算探针的形貌<sup>[5]</sup>。

近年来用于探针形貌估计的盲建模算法得到了很多研究和应用,但是由于该算法原理上的局限性,在AFM对标定薄膜的扫描成像中,噪声对探针形貌建模有很大影响<sup>[5, 12]</sup>。因而作者提出了一个降噪阈值方法,以削弱噪声的干扰,但该算法不够精确。

本文提出了一种基于最优降噪阈值的探针形貌估计方法。该方法先通过扫描标定栅格,获取探针针尖的参考轮廓,并通过比较参考轮廓与扫描多孔铝获取的探针3D形貌,得到最优降噪阈值,进而取得探针的精确形貌。然后采用数学形态学的腐蚀算法,可获得重构的AFM图像。

## 2 探针盲建模重构理论

AFM探针扫描成像的过程可以如图1中所示,其中图1(a)给出了探针轮廓。图1(b)中黑色细虚线是样品表面形貌,黑色细实线给出探针扫描的图形。扫描图形和样品形貌的关系可以用数学形态学公式(1)来描述。式中 $s$ 为样品形貌, $P$ 为探针形貌的映像, $I$ 为扫描成像。AFM图像重构可以用数学形态学公式(2)来描述。由式(2)可知,重构AFM扫描图像需要知道探针针尖的形貌<sup>[4,5]</sup>。

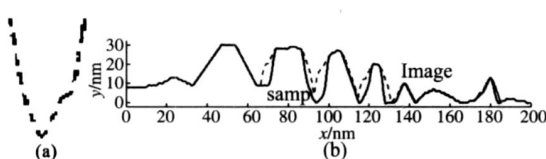


图 1 AFM扫描原理

Fig 1 The principle of AFM scanning

$$I = S \oplus P \tag{1}$$

$$S = I \ominus P \tag{2}$$

由式(1)可知,扫描图像 $I$ 中包含了探针的形貌信息,所以可以利用探针扫描特定样品(如标定薄膜),获取探针形貌。

盲建模原理:对于AFM扫描图像中的任意一点 $x$ ,只要满足式(3):

$$\forall x \in I, \exists d \in P / P \subseteq I + d - x \tag{3}$$

都可以通过探针扫描这些点后获得的局部探针轮廓信息,利用式(4)计算探针的精确轮廓<sup>[5]</sup>:

$$P_{i+1} \subseteq \bigcap_x [ (I - x) \ominus P_i^d(x) ] \ominus P_i \tag{4}$$

式中: $P_{i+1}$ 是第 $i+1$ 次迭代运算的结果, $x$ 是扫描图像中的任意一点, $P_i^d(x)$ 是在 $x$ 位置计算时探针上界 $P_i$ 在扫描图像中的位移矢量集合。

在AFM扫描图像中,任一像素及其邻域都可以提供描述探针局域形貌的信息。盲建模算法就是基于各个像素及其邻域来计算探针的某一个局域形貌,并将这些探针局域形貌集成完整的探针形貌。

在运用上述盲建模方法构建探针形貌时,通常利用样品凸起点作为特征采样点,以获得最丰富的探形貌信息。图2例中给出了基于特征采样点的盲建模探针形貌构建。图2(a)给出的一条存在、和三个凸起特征采样点(1,2,3)的样品轮廓线(细轮廓线标识),及探针扫描该样品所得扫描线(粗轮廓线标识)。采用如式(4)盲建模计算方法,利用局部顶点1,2所得邻域轮廓线形成的交集(图2(b)中阴影部分)确定了探针形貌的一个上界。进一步,如图2(c)所示,将图2(a)中特征采样点3及其邻域所得的扫描轮廓线与图2(b)所得探针形貌上界求交集,就会得到新的探针形貌上界。以此类推,将上面的处理过程扩展到扫描图像的所有点,就会得到探针形貌的精确估计。

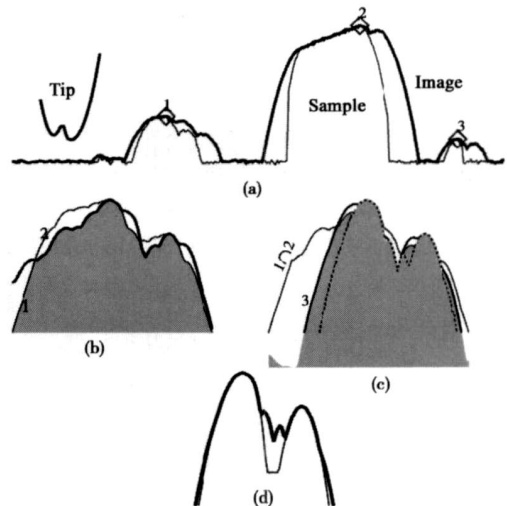


图 2 盲建模算法原理

Fig 2 Principle of blind tip estimation

AFM 扫描图像  $I$  中的噪声对盲建模算法有很大影响,因此在已有算法中采用降噪阈值的处理方法。但当降噪阈值选取不适当时,上述方法会造成探针形貌估计和真实探针形状差别很大<sup>[5]</sup>。

图 3(a)、(b)所给出的仿真实验结果说明了不同降噪阈值对探针形貌估计结果的影响。

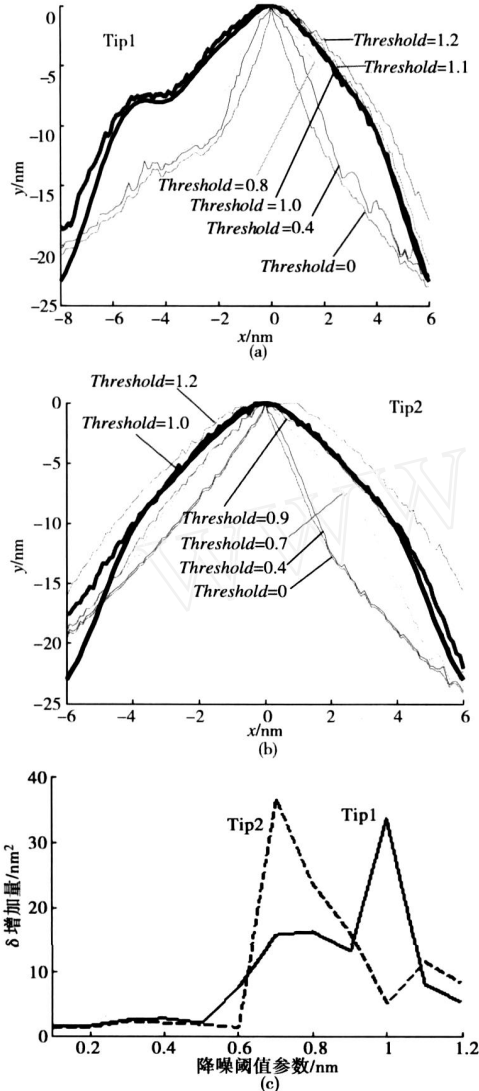


图 3 盲建模算法原理中降噪阈值的最优估计

Fig 3 Optimum estimation of the threshold in blind tip estimation algorithm

图 3(a)、(b)中,黑色粗线轮廓是探针的真实形状。采用不同降噪阈值 ( $threshold$ ) 所得的探针形貌估计也会不同,如图 3(a)、(b)所示。这种降噪阈值选定采用了基于面积变化率 (Increase volume) 的最优估计方法,即通过阈值变步长算法,计算相邻阈值间探针轮廓面积的变化率,当为最大值时, $threshold$  就为最优估计值。在文献 [5] 中,将  $threshold$  值从 0.9 变为 1.0,然后计算探

针轮廓的面积变化率,如图 3(c)所示。的变化表明了探针估计轮廓与真实轮廓的逼近程度。实验表明该方法对非对称探针形貌估计有效,如图 3(a)所示,而对具有对称形貌的探针进行形貌估计时会失效,如图 3(b)所示。二者的计算面积变化率如图 3(c)所示。因此有必要研究一个新的评价标准来确定降噪最优阈值。

### 3 降噪阈值的最优估计

AFM 扫描图像可认为是样品形貌与探针形貌的卷积运算结果,如式 (1) 所描述。基于探针形貌的 AFM 图像重构是上式的一种反运算,如式 (2) 描述。由该式可知,重构图像  $I$  依赖于探针形貌模型的正确性,而探针形貌建模需要使用盲建模算法和探针标定薄膜,其建模过程如图 4 所示。

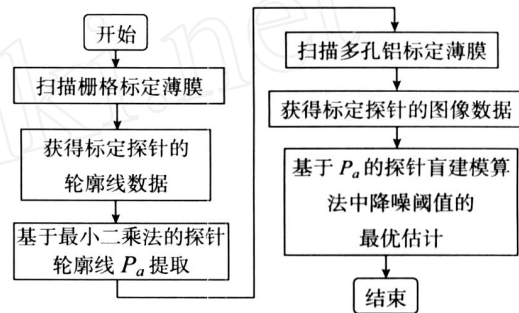
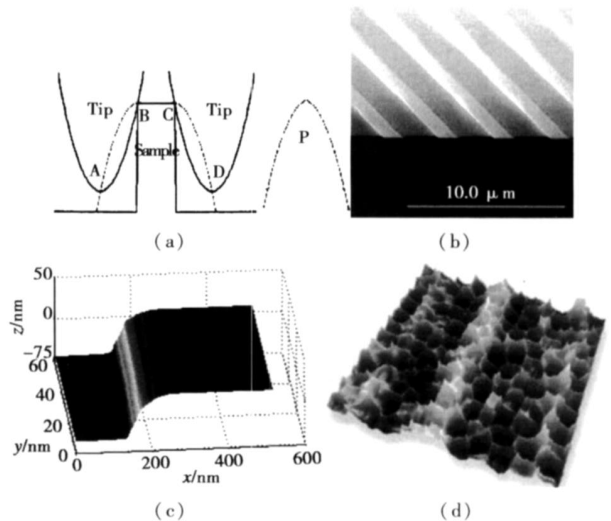


图 4 探针建模流程图

Fig 4 Tip modeling flow chart

该方法先通过 AFM 探针扫描标定模板,如栅格薄膜和多孔铝,得到含有探针边界信息的扫描图像。采用式 (4) 建立探针针尖的剖面轮廓线,如图 5(a) 所示。用该轮廓线作为标准轮廓  $P_a$ ,基于  $P_a$  建立最优降噪阈值,进而重构精确的探针针尖 3D 形貌如图 5(f) 所示。



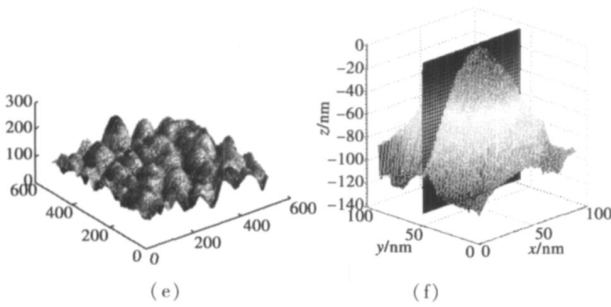


图 5 基于盲建模的探针建模改进算法示意图

Fig 5 Improvement of the blind tip estimation algorithm

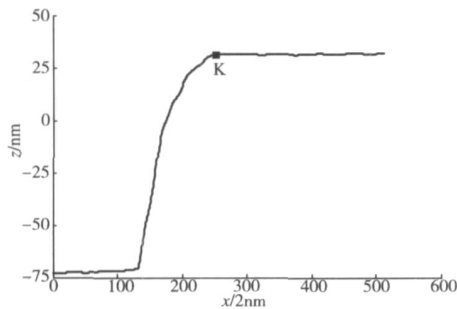
图 5(a)给出了探针 Tip 扫描栅格的示意图。图 5 (b)为 Mikromasch 公司生产的标准栅格 TGZ02 的 SEM 照片。图 5 (c)是扫描 TGZ02 的 AFM 图像。图 5 (d)、(e)为多孔铝标定薄膜 (PA01) 及其 AFM 扫描成像。图 5 (f)中存在一个剖面截取探针 3D 形貌的轮廓线,再用该轮廓和标准轮廓  $P_a$  进行比较从而决定降噪阈值的最优估计值。

对探针形貌的最优估计方法具体可分为两步:

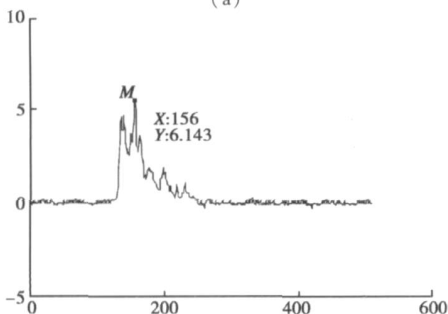
1) 标准探针轮廓  $P_a$  提取

假设标定栅格样品如图 5 (b)所示,使用 AFM 扫描栅格 (Contact 和 Tapping 模式均可),所得扫描线族中一条扫描线如图 6 (a)所示。定义该扫描线在栅格边缘的拐点为  $K_0$

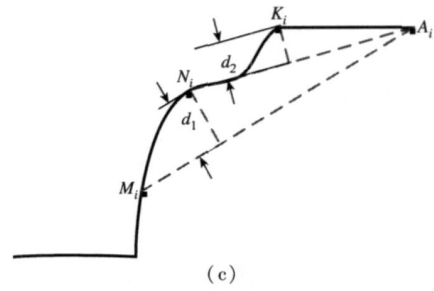
以高度为变量对扫描线 (图 6 (a)所示)做差分计算,求出极值点  $M$ ,如图 6 (b)所示。该点  $M$  给出了扫描线所描述的样品台阶边界。



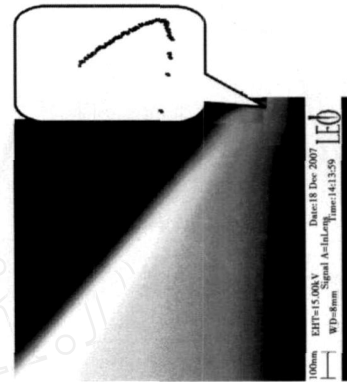
(a)



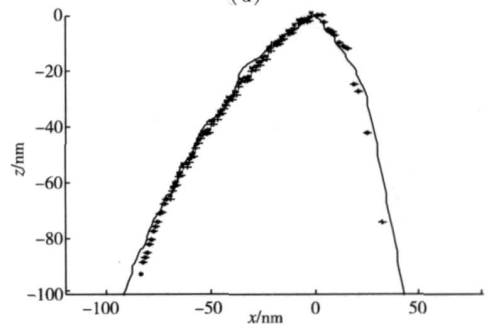
(b)



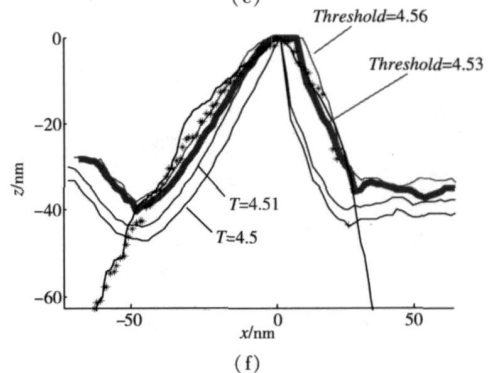
(c)



(d)



(e)



(f)

图 6 扫描 TGZ02 中的条状光栅和 PA01 建立的探针模型剖面轮廓图

Fig 6 Scanning the steps in the TGZ02 and the PA01 to construct the section profile of the tip

以  $M$  为起始点,运用最大垂距算法如式 (5)描述,求出扫描曲线族上的所有拐点  $K$ ,图 6 (c)给出了另一条扫描线的拐点  $K$  计算过程。

用上述方法对所有扫描线进行处理,将所有曲线的拐点坐标对齐,可用式 (6)算法求其交集。该交集为

探针的一侧标准轮廓线,同理可求出探针的另一侧标准轮廓。与图 6(d)给出的 SEM 观测所得探针轮廓线相比较具有较好的一致性,如图 6(e)所示,其中细实线为交集计算所得探针轮廓线,粗实点集为 SEM 观测所得部分探针轮廓。

最大垂距计算方法:

$$\{v_i(x_i, y_i) \mid d_{i\max} = d(v_i) \quad v_i \perp l_i \quad (v_i A_i) < 3, \quad (i = 1, \dots, n)\} \quad (5)$$

式中:  $v_i$  为扫描线上的一点,  $d$  为  $v_i$  到基线上  $l_i$  的垂距,  $d_{i\max}$  为最大垂距。  $(v_i A_i)$  为  $v_i A_i$  扫描区间的点在最小二乘法拟合直线后的方差。为扫描线中台阶顶部直线段的平均方差,  $i$  为第  $i$  条扫描线。图 6(c)中  $M_i A_i$  和  $N_i A_i$  为基线  $l_i$ ,  $K_i$  为拐点。  $N_i$  为伪拐点(不满足  $(N_i A_i) < 3$ )。  $i$  标识第  $i$  条扫描线。

交集计算公式:

$$\{v_i(x_i, y_i) \mid x_1 = x_2 = \dots = x_n \quad v_i \perp l_i \quad Y_{\min} = Y(v_i), \quad (i = 1, \dots, n)\} \quad (6)$$

式中:  $v_i$  同上定义,  $Y$  对  $v_i$  取  $y$  值,  $Y_{\min}$  为最小值,  $i$  标识第  $i$  条扫描线。

2)基于盲建模算法的探针针尖模型建立:

运用 AFM 探针慢速扫描多孔铝标定薄膜。对扫描成像采用式(4)的探针盲建模算法建立探针 3D 轮廓,如图 5(f)所示。

在该探针 3D 模型上,取与标准探针轮廓  $P_a$  扫描方向相同的剖面,进行降噪阈值取值的最优估计,如图 7(f)所示。实验表明,当降噪阈值取值为  $Threshold = 4.53$  时,所得探针轮廓(红色轮廓线)与探针轮廓  $P_a$  所包含的面积最接近。

基于该最优降噪阈值,应用盲建模算法构建探针 3D 形貌图形。

### 4 图像重构实验

这里采用的 AFM 系统为 Veeco dimension 3100,探针为 Veeco 公司的 MPP-11100-10,扫描的标定薄膜是 MikroMasch 公司的多孔铝 Porous Aluminum (PA01)。

1)实验方法:

使用 AFM 扫描 TGZ02 条状光栅,获取标准探针轮廓  $P_a$ 。

使用相同探针在 Tapping 模式下扫描 PA01,根据标准探针轮廓  $P_a$  进行最优降噪阈值估计,并应用盲建模算法构建该探针 3D 形貌模型如图 5(f)所示。

采用式 2 所描述的数学形态学腐蚀算法,应用已建立的 3D 探针模型,对 TGZ01 条状栅格的扫描图像进行重构。结果如图 7(a)所示。图 7(a)的上图为原始扫描图像,下图为重构图像。

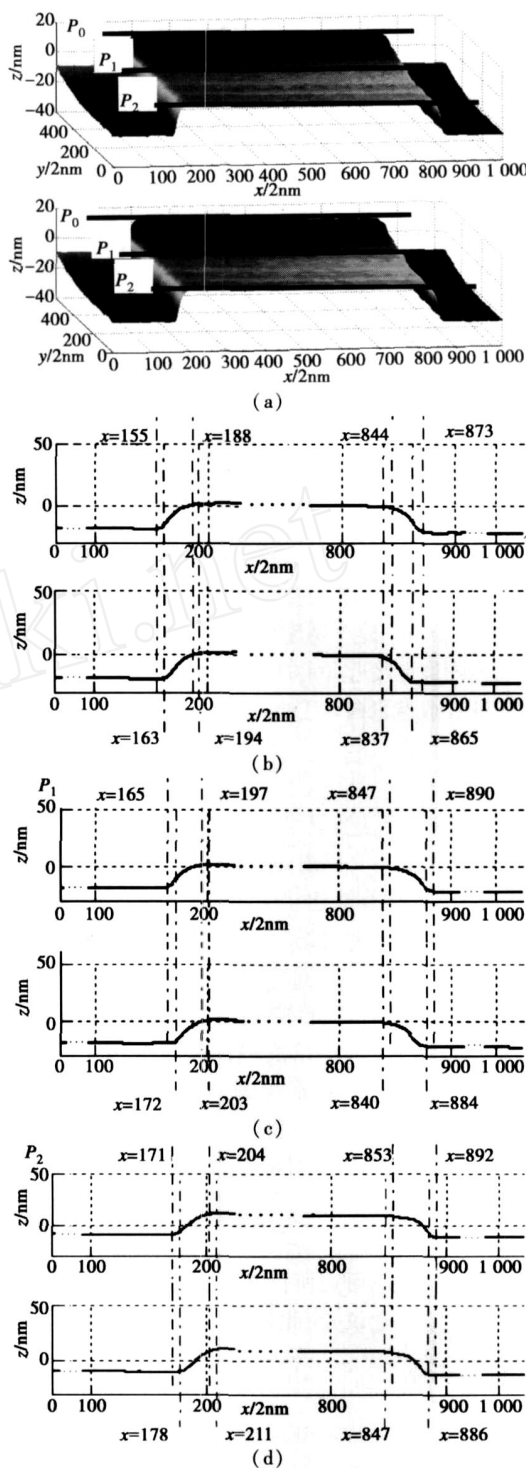


图 7 TGZ01 扫描图和重构图比较

Fig 7 Comparison of TZG01 scanning image and its reconstructed image

2)实验结果比较与分析:图像中的 3 条扫描线  $P_0$ 、 $P_1$  和  $P_2$  进行了比较。为明确重构图像与原始图像的区别,这里对栅格扫描图 7(b)、(c)和 (d)分别是  $P_0$ 、 $P_1$  和  $P_2$  这三条扫描线的对比图。其中,各图的上方曲线是原

始扫描数据图,下方曲线是重构后的扫描数据图。定义栅格台阶宽度为中段  $M_1$  和  $M_2$  的连线。 $M_1$  和  $M_2$  的分别为台阶边缘的中点。表 1 给出了这 3 条扫描线重构前后台阶宽度的变化。

表 1 扫描图像改进前后的台阶边缘宽度比较

Table 1 Comparison of the step edge widths in the image and reconstructed image

比较线的位置	直线	中间线	末线
改进图中的台阶宽度 /2nm	687	687.5	685
原图中的台阶宽度 /2nm	672.5	674.5	672

一般情况下,AFM 扫描图像在水平方向上存在探针的展宽效应等因素,因而扫描图像在水平方向上存在较大失真。通过采用本文的探针建模方法和图像重构方法,可以较大改善 AFM 的成像质量。表中数据表明, TGZ01 样品的重构扫描图像的台阶边缘宽度比原始扫描图像的台阶边缘宽度平均要窄 27 nm,这个宽度变化反映了图像失真的改善程度,使重构图像更接近真实的形状。并验证了基于精确探针模型的 AFM 成像重构算法的有效性。

## 5 结 论

探针盲建模算法容易受到图像中噪声的影响。为了最优估计降噪阈值,本文提出通过扫描标定模板(如标准栅格样品),采用盲建模算法建立探针针尖的标准轮廓。并且使用该轮廓作为判据,通过选取不同降噪阈值,比较扫描多孔铝获取的探针 3D 形貌截面轮廓,建立基于标准轮廓的最优降噪阈值,进而重构精确的探针针尖 3D 形貌。

本文通过对标准栅格的扫描图像重构实验研究,验证了基于盲建模算法和最优阈值估计方法对 AFM 成像质量改善的有效性和可行性。实验表明,本文论述的方法可在一定程度上改善 AFM 扫描图像的质量。

## 致 谢

对中科院金属研究所仁文才老师为本文实验提供的大力帮助和宝贵建议,在此表示衷心感谢。

## 参考文献

- [1] B N N G G, ROHRER H. Scanning tunneling microscopy[J]. *Helv Phys Acta*, 1982, 55(6): 726-725.
- [2] B N N G G, QUATE C F, GERBER C. Atomic force microscopy[J]. *Phys Rev Lett*, 1986, 56: 930-933.
- [3] GARCIA R, PEREZ R. Dynamic atomic force microscopy methods[J]. *Surface Science Reports*, 2002: 105.
- [4] KELLER D J, FRANKE F S. Envelope reconstruction of probe microscope images[J]. *Surface Science*, 1993, (294): 11.
- [5] V LLARRUBA J S. Morphological estimation of tip ge-

ometry for scanned probe microscopy[J]. *Surf Sci*, 1994, 321(3): 287-300.

- [6] KELLER D. Reconstruction of STM and AFM images distorted by finite-size tips[J]. *Surface Science*, 1991, 253: 353-364.
- [7] MONTELUS L, TEGENFELDT J O. Direct observation of the tip shape in scanning probe microscopy[J]. *Applied Physics Letters*, 1993, 62(21): 3.
- [8] MARKIEWICZ P, GOHM C. Atomic force microscopy probe tip visualization and improvement of images using a simple deconvolution procedure[J]. *Langmuir*, 1994, 10(1): 5-7.
- [9] MARKIEWICZ P, GOHM C. Simulation of atomic force microscope tip-sample/sample-tip reconstruction[J]. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1995, 13(3): 1115-1118.
- [10] WILLIAMS P M, SHAKESHEFF K M, DAVIES M C, et al. Blind reconstruction of scanning probe image data[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, 1996, 14(2): 6.
- [11] V LLARRUBA J S. Algorithms for scanned probe microscope image simulation surface reconstruction and tip estimation[J]. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 1997, 04(102): 425-454.
- [12] TRANCHIDA D, PICCAROLO S, DEBLIECK R A C. Some experimental issues of AFM tip blind estimation: the effect of noise and resolution[J]. *Meas Sci Technol*, 2006, 17: 2630-2636.

## 作者简介



袁帅,中科院沈阳自动化所国家机器人学重点实验室博士研究生,主要研究方向为纳米观测、建模和操作。

E-mail: yuanshuai@sia.cn

Yuan Shuai is a doctoral student in State Key Laboratory of Robotics, Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences. He majors in nano observation, modeling and manipulation.

E-mail: yuanshuai@sia.cn



董再励,现任中科院沈阳自动化研究所机器人学重点实验室研究员,微纳米自动化技术研究方向负责人,主要研究领域:模式识别、机器视觉、机器人系统、传感器系统、微纳米作业系统与制造技术等。

E-mail: dzl@sia.cn

Dong Zaili is a research fellow in State Key Laboratory of Robotics, Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, and in charge of Micro and Nano Automation Lab. He majors in pattern recognition, machine vision, robot system, sensor system, micro and nano operation system and manufacturing technology.

E-mail: dzl@sia.cn