

# 基于数学形态学方法的 AFM 探针建模研究<sup>\*</sup>

袁 帅<sup>1,2</sup>, 董再励<sup>1</sup>, 缪 磊<sup>1</sup>, 王志迁<sup>1,2</sup>, 许 可<sup>1,2</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

2 中国科学院研究生院 北京 100039)

**摘 要:** AFM 扫描图像可被认为是探针针尖的形貌和扫描样品表面形貌的数学形态学卷积结果, 需要用反卷积的方法排除扫描图像中探针形貌引起的失真影响。本文在已有基于数学形态学的探针盲建模算法基础上, 提出了一种可快速实现特征点优化提取的方法, 同时提出了一种可降低最优降噪阈值估计复杂性的基于临界阈值搜索新方法。最后给出了仿真与 CNT 扫描图像的重构实验结果。实验表明, 本文介绍的方法提高了探针建模的计算速度和建模精度, 可以对 AFM 成像质量进行有效的失真修正和改善。

**关键词:** AFM; 探针模型; 盲建模算法; 图像重构; Douglas-Peucker

中图分类号: O 793 TN 16 文献标识码: A 国家标准学科分类代码: 460 4010

## AFM tip estimation based on mathematical morphology

Yuan Shuai<sup>1,2</sup>, Dong Zaili<sup>1</sup>, Miao Lei<sup>1</sup>, Wang Zhiqian<sup>1,2</sup>, Xu Ke<sup>1,2</sup>

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

2 Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

**Abstract** Atomic force microscope (AFM) images can be considered as the convolution of the geometry of the sample and the shape of the tip. Therefore the geometry of the tip should be known for eliminating the contributions of the tip shape in the scanning image using deconvolution. Blind tip evaluation based on mathematical morphology is used widely in the existing methods for estimating the tip shape. A new blind tip estimation method is proposed to quickly extract the feature points in the image, which can save calculation time and determine the optimal noise threshold based on the critical threshold. This paper demonstrates the improvement of the new method on speed and precision. Simulation and reconstruction experiment of carbon nano-tube (CNT) scanning image are given. Experiment results indicate that the proposed method improves the calculation speed and modeling precision of tip estimation.

**Key words** AFM; tip model; blind tip estimation algorithm; image reconstruction; Douglas-Peucker

## 1 引 言

在纳米技术研究领域中, 原子力显微镜 (AFM) 已成为纳米科技研究中观测与操控的主要工具<sup>[1]</sup>。AFM 是基于样品表面和探针之间的微观力作用下成像, 具有垂直分辨率高的特点, 由于 AFM 探针具有形状和尺寸, 在

成像时存在展宽效应, 导致水平分辨率不足, 严重地影响了 AFM 的成像质量。AFM 成像可从数学形态学解释为探针针尖形貌和样品表面形貌卷积 (膨胀运算) 而成, 因此在样品表面的高度图中产生了明显的失真。所以必须获得准确的探针形貌, 然后利用针尖模型和数学形态学腐蚀算法修正和重构扫描图像。探针针尖形貌可以被 SEM 扫描电子显微镜观测得到, 但是很难使用 SEM 直接

收稿日期: 2009-07 Received Date: 2009-07

\* 基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (60635040)、国家 863 计划 (2009AA03Z316、2009AA04Z313)、“中国科学院、国家外国专家局创新团队国际合作伙伴计划”资助项目

和精确地建立探针三维形貌<sup>[2]</sup>。

自 1993 年, D. J Keller 等人<sup>[3]</sup>提出扫描已精确标定的参考表面可以建立探针形貌以来, 许多人进行了基于盲建模算法的探针建模方法研究<sup>[2-11]</sup>。

目前研究探针建模的主要方法有两类。第一类方法使用精确标定的参考表面建立探针形貌, 然而很难在纳米精度下标定参考表面, 因此也很难通过这类方法来建立探针模型。所以有学者提出第二类方法, 即基于数学形态学的盲建模算法。该算法不需要使用精确标定的参考表面即可建立探针模型, 目前得到广泛的研究和应用。但是基于盲建模算法的探针建模方法普遍存在计算时间长, 建模精度受采样数据噪声影响大等问题。这些问题依然限制了探针扫描成像的图像修正、重构的速度和表征精度, 也难以适应纳米操作的在线误差修正需求。

本文提出了一种可快速实现特征点优化提取的方法, 同时提出了可降低最优降噪阈值估计复杂性的基于临界阈值搜索新方法。最后给出了仿真与 CNT 扫描图像的重构实验。实验表明, 本文介绍的方法提高了探针建模的计算速度和建模精度, 可以对 AFM 成像质量进行有效的失真修正和改善。

## 2 探针建模算法原理

### 2.1 Douglas-Peuker 算法原理

Douglas-Peuker 算法<sup>[12]</sup>是一种用于 2 维曲线形状化简的方法。该方法的特点是从形状复杂的曲线点列中, 通过相对简单的全局性递归运算, 能选出那些反映曲线总体及局部形态的主要特征点可以用来提取 AFM 扫描线中的特征点, 算法的基本原理如下:

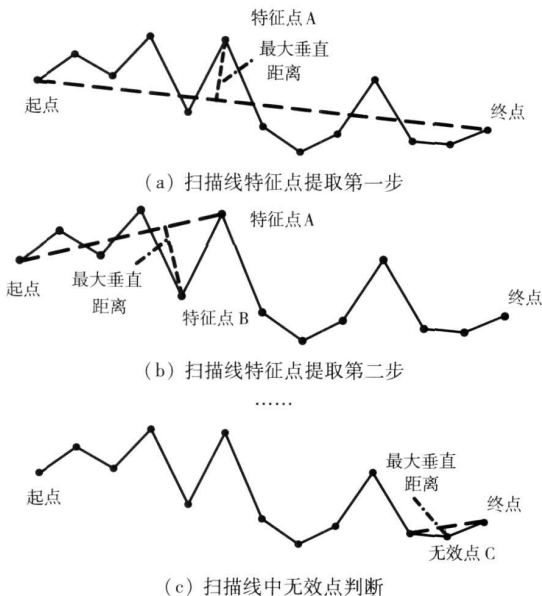


图 1 Douglas-Peuker 算法示意图

Fig. 1 Douglas-Peuker algorithm

1) 在顺序排列的一组曲线点列中 (如图 1 中粗黑线), 选取起点和终点用直线连接起来, 该直线称为基线 (虚线), 如图 1(a)。

2) 若基线中间点数非零, 依次算出中间各点到基线的距离。选出到基线的垂直距离最大的点, 记为称为特征点 A, 同时将该组曲线点列分为左右两个区域, 先左后右按步骤 3 迭代处理这些区域, 如图 1(b)。

3) 若该距离小于或等于预先规定的阈值  $\delta$  则该基线间所有的中间点都被删除 (如图 1(c)), 若该距离大于  $\delta$  则特征点就被选取, 并被插入到已被选取的点列之中。按照该原则处理下一个区域。

### 2.2 盲建模算法原理

AFM 探针扫描成像的过程可以用数学形态学式 (1)<sup>[4]</sup>来描述。

$$I = S \ominus P \quad (1)$$

式中:  $S$  为样品形貌,  $I$  为扫描成像。  $P$  为探针轮廓  $T$  的映像。

由于探针效应, SPM 成像和样品真实形貌有很大差别, 所以需要重构扫描后的图像。可用式 (2)<sup>[4]</sup>描述:

$$S' = I \oplus P \quad (2)$$

由式 (2) 可知重构 SPM 扫描图像需要知道探针针尖的形貌。本文中算法的理论基础是基于数学形态学的盲建模算法, 其基本原理是样品 (参考) 表面  $S$  中存在非常陡峭、急剧变化的特征形貌, 如图 2(b) 中的  $\alpha$  和  $\beta$  黑色轮廓, 在扫描成像 (红色轮廓) 中,  $\alpha'$  和  $\beta'$  不仅反映了  $\alpha$  和  $\beta$  的形状信息, 而且描述了探针针尖形貌映像的上界。

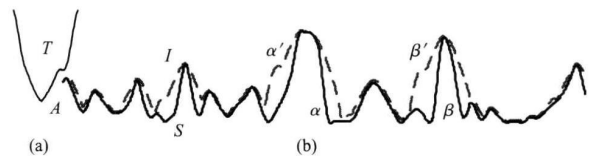


图 2 盲建模算法原理

Fig 2 The principle of blind tip estimation

#### 2.2.1 盲建模算法

在 AFM 扫描成像中, 每一像素点及其邻域都可以提供描述探针针尖局部形貌的信息, 盲建模算法就是基于各个像素点及其邻域来计算探针针尖附近的某一局域形貌, 并将这些探针局域形貌集成完整的探针形貌。在扫描成像  $I$  中, 若像素点  $x$  满足式 (3)<sup>[4]</sup>:

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

式中:  $d$  是对应  $P$  在  $I$  中  $x$  处的位置变换矢量。该算法就可以在该像素点及其邻域计算探针的局部轮廓信息, 利用算法核心公式 (4) 计算探针的精确轮廓<sup>[4]</sup>。

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

式中:  $P_{i+1}$  是第  $i+1$  次迭代运算的结果,  $P_i^d(x)$  在  $x$  位置

计算探针上界  $P_i$  在扫描图像中的位移矢量集合。在  $I$  中的所有  $x$  点运算之后, 将所得到的  $P_{i+1}$  带入上式中重新运算, 也就是第  $i+2$  次运算, 当  $P_{i+2}$  和  $P_{i+1}$  相同时, 说明已获得在  $I$  中蕴涵的探针针尖形貌。由于这种计算通常要遍历  $I$ , 所以运算量很大。

本文针对这一情况提出新算法, 减少运算次数, 同时保证计算结果精度和原运算相同。

### 2.2.2 盲建模算法计算精度

AFM 扫描图像  $I$  中的噪声对盲建模算法有很大影响, 因此在原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>[13]</sup>。在文献[13]中, 扫描光栅边缘(不能严格保证为直角)提取探针标准轮廓处理复杂而且具有较大误差, 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 新探针建模算法

### 3.1 计算速度的改进方法

探针盲建模算法是通过 AFM 扫描图像的所有像素点计算来估计探针的形貌。若在算法中, 这些像素点位置参与计算的顺序不同, 则算法运算速度也存在差

异<sup>[6]</sup>。若优先计算那些能够有效可以大大提高探针建模的运算速度。这些特征点如图 3(a) 中所示。

#### 3.1.1 探针针尖形貌预估计

在标定探针形貌的参考表面扫描成像  $I$  中, 特征点提取算法分为三步处理:

1) 基于 Douglas-Peucker 曲线特征点提取算法搜索图像  $I$  中的特征点。

扫描图像  $I$  可认为是由多条数据线组成的图像, 按 Douglas-Peucker 算法对行和列的方向分别提取数据线的特征点(如图 3(b) 所示), 定义在行和列方向同时为局部极大值的顶点为特征点集合(如图 3(c) 所示), 在该定义下计算得到的图像  $I$  中所有特征点如图 3(d) 所示。

2) 提取反映探针形貌信息的特征点。

图像  $I$  中由噪声带来的特征点(噪声特征点), 该类特征点会影响探针建模的结果, 需要进行排除。鉴于噪声特征点所在特征形貌的高度变化范围较小, 因而先在图像  $I$  中等间距提取等高线, 再将包围 2 条以上等高线的顶点定义为特征点(如图 3(f) 所示)。

3) 确定算法中记录探针的数据结构

在特征点的位置上, 按  $x$  和  $y$  的方向分别估算  $I$  中反映探针信息的范围  $W$  ( $x$  方向) 和  $H$  ( $y$  方向), 算法中预定义  $W$  和  $H$  的长度为图像  $I$  的高度和宽度。

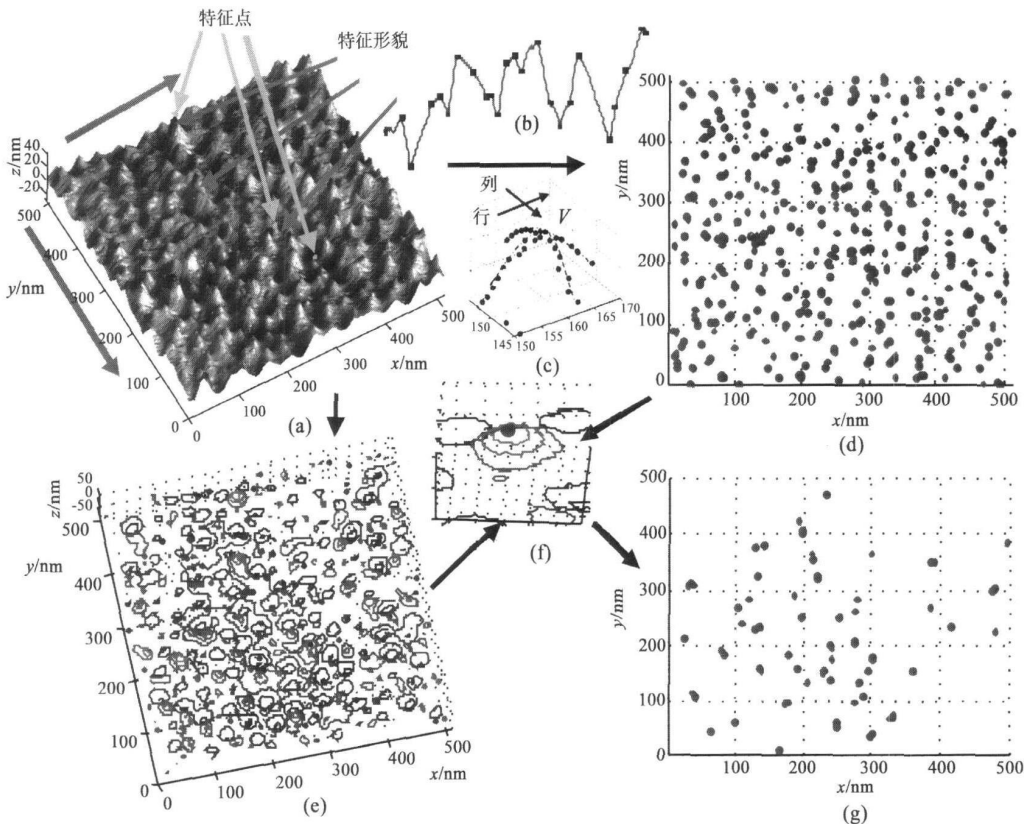


图 3 图像  $I$  中特征点提取

Fig 3 Extracting the feature points from image  $I$

估算  $x$  和  $y$  方向的探针轮廓如图 4 所示, 因为探针针尖是锥形的形状, 所以在探针轮廓中心顶点的  $x$ 、 $y$  方向寻找距离轮廓中主瓣顶点最近的局部最低点  $V_{xb}$ 、 $V_{yb}$ 、 $V_{xp}$ 、 $V_{yp}$  (如图 4 所示)。这样就确定了  $l$  中反映探针针尖信息反映探针针尖信息的范围, 同时也确定了算法中记录探针针尖的数据结构大小。

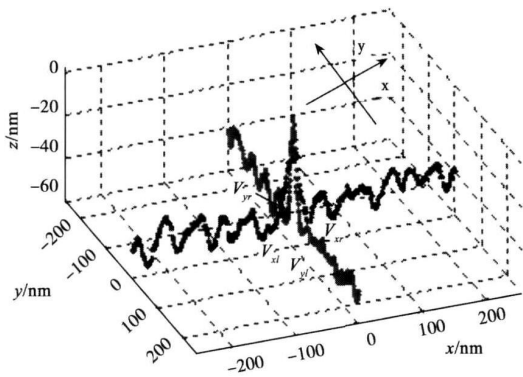


图 4 探针估算范围示意图

Fig 4 Estimation range of the tip model

### 3.1.2 基于排除无效计算点和探针模型更新判据的迭代改进算法

在新算法中可以记录以前迭代运算中无效的点, 在以后的迭代运算中, 这些无效点不再参与计算。这样就减小了算法的计算量。

在原算法中需要对  $P_i^d$  (如式 (5)) 中的全部  $d$  进行  $P_i^d(x) = \{d \mid d \in P_i \wedge 0 \in I - x + d\}$  (5) 计算, 而在新算法中, 当  $x$  变化时, 相应  $P_i^d(x)$  中  $d$  就可能不必全部参与运算, 这样也就减少了算法的计算量, 见表 1 (在另一篇已录用的科学通报论文中详细论述)。

表 1 盲建模算法改进前后的计算时间比较

Table 1 comparison of the computing time between the original and improved algorithms

数据量 (像素点)	原算法计算时间 /s	改进后计算时间 /s
4 × 900	1 780	24
9 × 900	2 843	29
16 × 900	6 322	36
25 × 900	8 537	43
36 × 900	12 169	44

### 3.2 提高建模计算精度

标定探针的扫描图像中的噪声对探针模型建模的结果有决定性影响, 所以需要最优估计图像中的噪声阈值。本仿真在图 1 的扫描线中加入随机噪声, 当算法中的降噪阈值从 0 变化到 3.0 时, 对应的探针模型如图 5 (b) 所示, 从图中可看出降噪阈值从小到大变化时, 探针针尖形

貌由尖变钝, 当  $TH$  为最优降噪阈值时, 克服了噪声对探针建模的干扰, 会产生一个突变, 即相邻阈值间探针轮廓包围面积的变化率  $\delta$  存在极大值, 同时探针顶部的最高点由于降噪阈值的影响, 也会变为多个。算法中将探针顶部最高点从一个变为多个 (当  $TH = 2.0$  时, 如图 5 (a) 和图 5 (c) 的降噪阈值定义为临界降噪阈值。从该临界值开始, 寻找  $\delta$  的极大值 (如图 5 (d)), 从仿真图中得到对应的降噪阈值为最优, 相应的探针模型和真实的探针形状差异最小 (在图 5 (e) 中,  $TH = 2.2$ )。

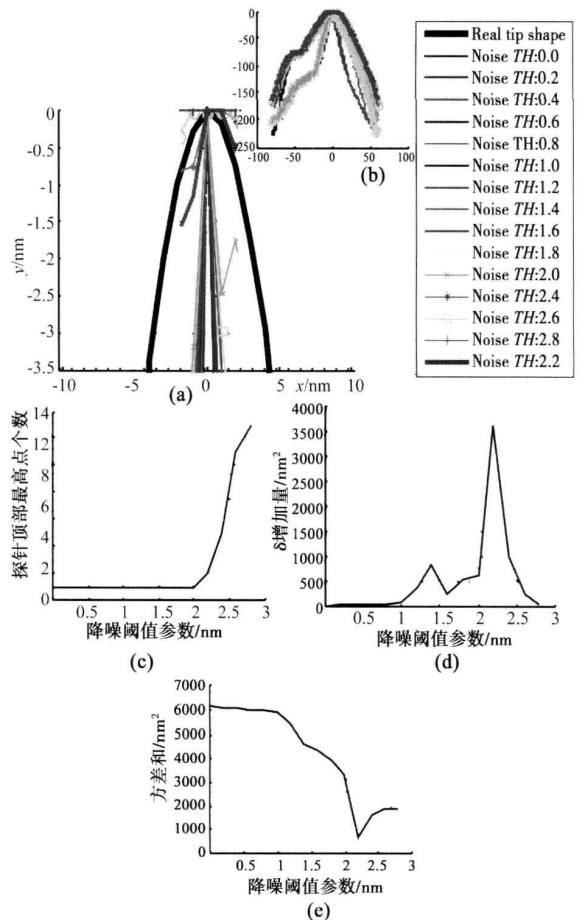


图 5 不同降噪阈值的探针模型分析图

Fig 5 Simulating the tip model using different TH values

## 4 试验验证

本实验的平台为 Veeco dimension 3100 SPM 设备, 探针为 Veeco 公司的 MPP-11100-1Q 扫描的样品为多空铝和碳纳米管。

在多孔铝 PA01 成像 (如图 3 (a)) 的基础上, 使用盲建模算法计算探针针尖形貌 (如图 6 (d) 所示)。当降噪阈值不同时, 探针形貌在某个方向上的剖面图如图 6 (a) 所示。在图 6 (b), (c) 中, 探针模型顶部中心顶点  $O$  的坐标是  $(0, 0)$ , 分别考虑  $O$  与其邻域点在  $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$ ,

135°方向上的空间拓扑关系,若在某一方向上,顶点  $O$  比两侧的邻域点高,则认为该探针模型对应的降噪阈值是临界降噪阈值 ( $TH = 1.9$ )。

从临界降噪阈值开始,根据相邻阈值间探针轮廓(三维轮廓)包围体积的变化率  $\delta$ 和降噪阈值的关系图 6(e),当  $TH = 2.0$  时,  $\delta$ 为极大值,因此确定  $TH = 2.0$  为最优降噪阈值,同时得到最优探针模型。

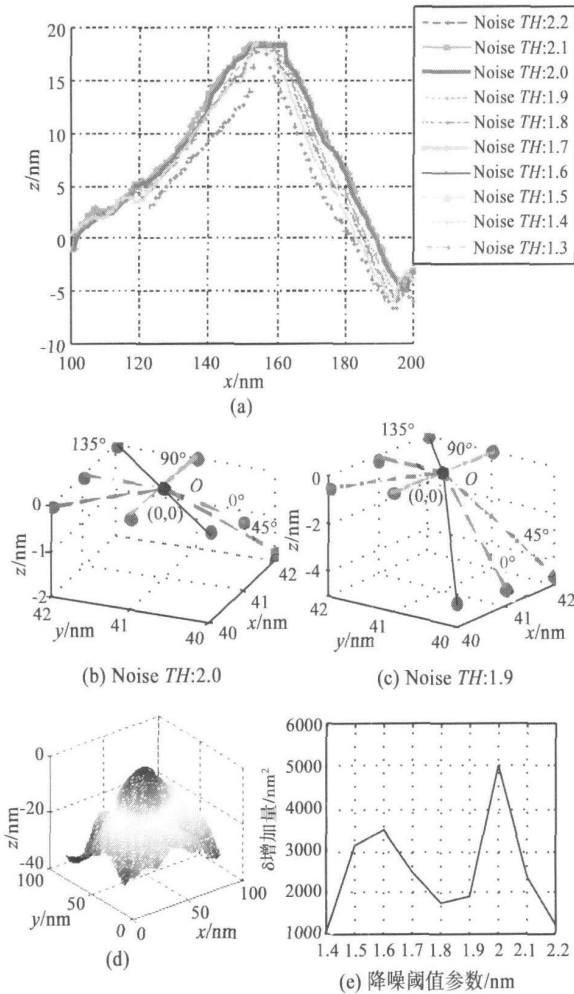


图 6 探针建模试验分析图

Fig 6 Estimating the tip model using the optimum  $TH$  value

在探针建模基础上,分别用钝针和新针扫描高度约 20 nm 的两根碳纳米管,如图 7(a) (钝针扫描),图 7(b) (新针扫描)。图 7(a)图中的碳纳米管三维图像为图 7(c),重构纳米管如图 7(d)所示,纳米管宽度相差约 20 nm,提高了 AFM 图像的精度。图 7(e)是用新针扫描相同高度的纳米管图像(纳米管宽度约 20 nm),图 7(f)是这三幅图中截取一条扫描线进行比较的结果。图 7(f)中的粗黑线是钝针的扫描线,细红线是基于探针模型对粗黑线的重构线,绿虚线是新(尖)针扫描线。可以看到重构线逼近绿虚线。

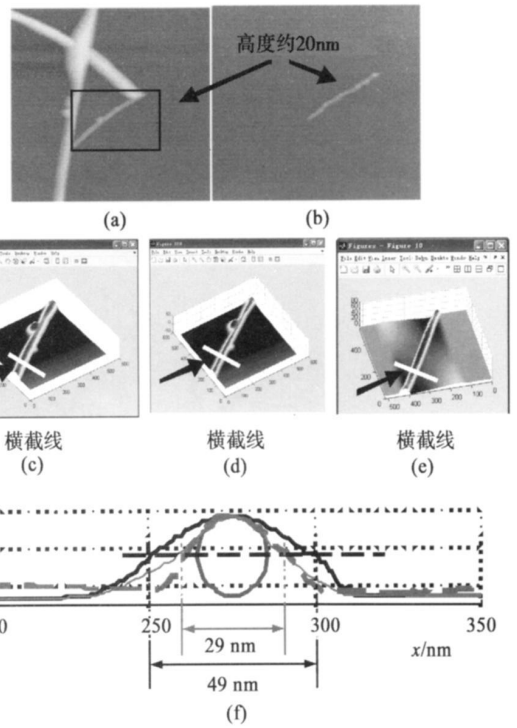


图 7 碳纳米管扫描图像重构图

Fig 7 The reconstruction of carbon nano-tube in age

### 5 结 论

AFM 扫描图像重构计算中需要建立探针的形貌。盲建模算法目前是最合适的算法,但是该算法需要较长的计算时间,且容易受到探针标定图像中噪声的影响。本文提出新盲建模算法对探针针尖进行有效的预估计,排除图像中不能反映探针信息的无效点,对算法的核心进行改进,提高了算法的运算时间。同时为了保证算法的精度,提出在临界降噪阈值附近寻找最优降噪阈值,获得最优的探针估算形貌,论文最后通过仿真计算和扫描纳米管图像的重构结果验证该方法的有效性。

### 致 谢

于海波同学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 ] Bhushan Springer handbook of nano-technology[ Z]. Springer 2005.  
 [ 2 ] DONGMO L S, V LLARRUBIA J S, JONES S N, et al Experimental test of blind tip reconstruction for scanning probe microscopy [ J ]. Ultramicroscopy, 2000, 85: 141-153.  
 [ 3 ] Keller D J, FRANKE F S Envelope reconstruction of probe microscope images[ J ]. Surface Science, 1993 ( 294 ): 11.

- [ 4 ] VILLARRUBIA J S Morphological estimation of tip geometry for scanned probe microscopy [ J ]. Surf Sci 1994, 321( 3 ): 287-300
- [ 5 ] VILLARRUBIA 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
- [ 6 ] VILLARRUBIA J S Strategy for faster blind reconstruction of tip geometry for scanned probe microscopy [ C ]. SPIE 1998, 3332 10-18
- [ 7 ] TODD B A, EPELLE S J A method to improve the quantitative analysis of SFM images at the nanoscale [ J ]. Surface Science, 2001.
- [ 8 ] ABDELHADY H G, ALLEN S, EBBENS S J et al Towards nanoscale metrology for biomolecular imaging by atomic force microscopy [ J ]. Nanotechnology, 2005, 8.
- [ 9 ] TRANCH DA D, PICCAROLO S, DEBLECK 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
- [ 10 ] KEN-CHIS, SHUN CHIM, TAMAKI S et al Tip artifact in atomic force microscopy observations of InAs quantum dots grown in Stranski-Krastanow mode [ J ]. Journal of Applied Physics, 2007, 101(3): 5
- [ 11 ] ZENG ZH G, ZHU G D, GUO ZH, et al A simple method for AFM tip characterization by polystyrene spheres [ J ]. Ultramicroscopy, 2008, 108( 9 ): 975-980
- [ 12 ] LI D L, ZHANG H G, HUANG W G. Method of multi-scale transformation: an experiments of coastline [ C ]. Geoscience and Remote Sensing Symposium, 2005. IGARSS' 05 Proceedings 2005 IEEE International 2005, 8 5357-5360
- [ 13 ] YUAN SH, DONG Z L, MIAO L, et al AFM image reconstruction based on accurate tip model [ J ]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2009, 30 ( 6 ): 1117-1122

### 作者简介



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

E-mail: yuanshua@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



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 is in charge of the Micro and Nano Automation Lab. He majors in pattern recognition, machine vision robot system, sensor system, micro and nano operation system and manufacturing technology.