

УДК 621.385.833

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА «SURFACEEXPLORER» ДЛЯ ОБРАБОТКИ, ВИЗУАЛИЗАЦИИ И АНАЛИЗА СЗМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ

А. А. Суслов, Д. И. Шашолко

ОДО «Микротестмашины», ул. Тельмана 44-6, г. Гомель, Беларусь. E-mail: microtm@mail.ru

Двадцатипятилетняя история развития средств и методов сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) продемонстрировала, что получение СЗМ-изображения – это только первый этап исследования. Следующей не менее важной задачей является корректная интерпретация данных. И в этой сфере имеются свои решения, призванные обеспечить специалистов инструментами обработки, визуализации и анализа экспериментальных результатов.

Естественно, программное обеспечение для обработки СЗМ-изображений разрабатывается практически каждым производителем аппаратных средств СЗМ. Тем не менее в мире регулярно появляются также и автономные независимые продукты – как коммерческие и некоммерческие, которые иногда обеспечивают намного более широкие возможности в плане набора функций и удобства использования. Показателен пример такого программного продукта, как SPIP (Scanning Probe Image Processor) компании “Image Metrology” [1]. Данный пакет является практически стандартом в сфере обработки, визуализации и анализа наномасштабных изображений, включая список из более пятиста доступных отдельных операций и функциональных опций. Возможно, поэтому некоторые производители аппаратного обеспечения ориентируются на применение этой программы для обработки получаемых изображений.

Тем не менее, все закладываемые в ту или иную программу обработки, визуализации и анализа СЗМ-данных функции определяются практическими потребностями работающих с ними исследователей. Поэтому наиболее распространенные программы в этой сфере обладают практически сходными возможностями, хотя и решаемыми различными путями. При этом, как показывает анализ, у каждой из них обычно присутствуют уникальные функции, необходимые для реализации тех или иных процедур.

Практические задачи определили функциональность программы обработки, визуализации и анализа СЗМ-изображений «SurfaceXplorer», разрабатываемой компанией «Микротестмашины» и поставляемой в комплекте с оборудованием. При этом в списке из более сорока ключевых функций, предусматривающих выполнение более 300 отдельных операций и процедур, присутствуют и некоторые не имеющие аналогов. В окне анализа профилей поперечного сечения, например, предусмотрено не только использование двух подвижных маркеров и расстановка текстовых меток, но и наложение неограниченного количества линий профиля из

совместных СЗМ-изображений, вырезаемых автоматически по тем же координатам, в сочетании с развитыми средствами настройки отображения этих линий.

«SurfaceXplorer» содержит стандартный для аналогичных программ набор процедур первичной обработки СЗМ-изображений, а также их визуализации в двумерном и трехмерном виде с развитыми возможностями их настройки. Функции представления и преобразования СЗМ-изображений в «SurfaceXplorer» базируются на использовании технологии OpenGL, обеспечивающей гибкий и удобный для пользователя контроль над параметрами визуализации (рис. 1). Возможность подключения к «SurfaceXplorer» внешних автономных программных модулей (plug-ins) позволяет реализовать высокую мобильность в использовании, модернизации и добавлении новых специализированных функций обработки и анализа СЗМ-изображений.

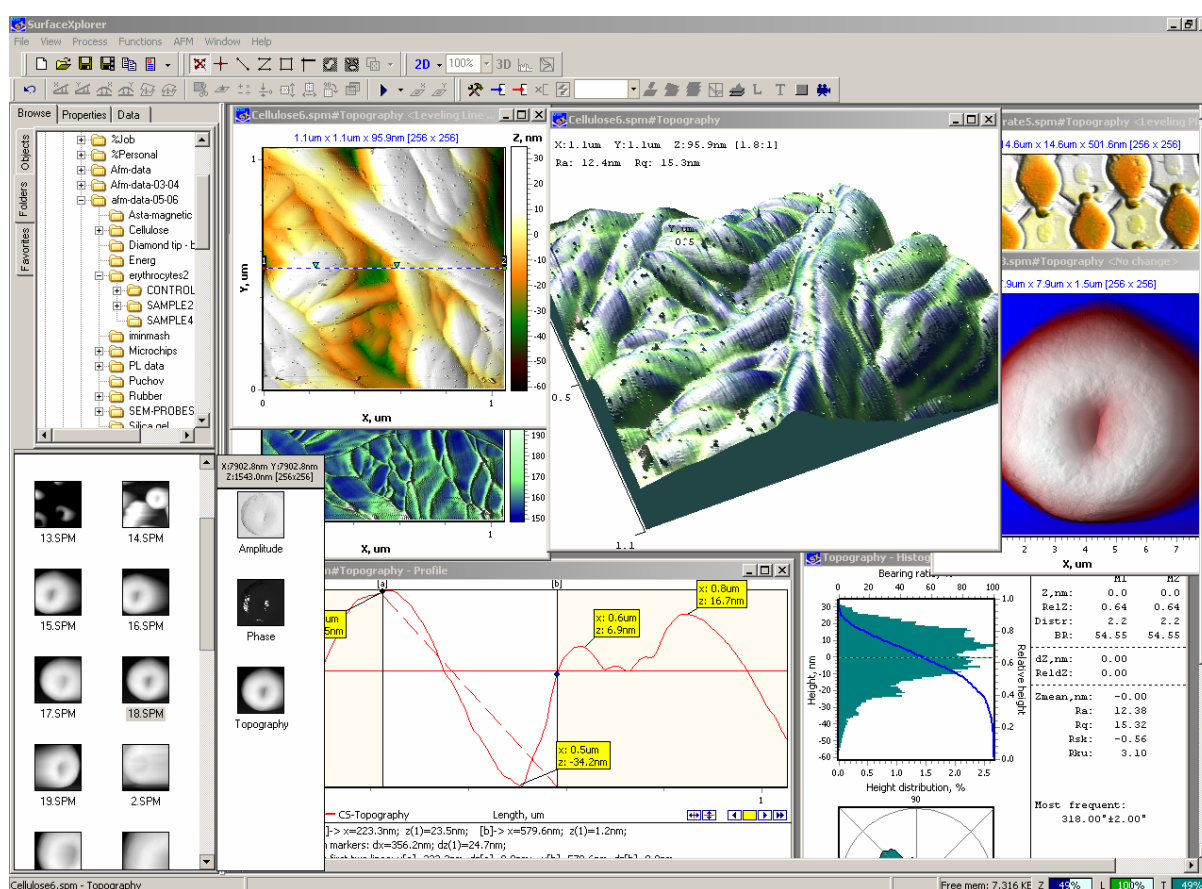


Рис. 1. Главное окно программы «SurfaceXplorer»

Программа «SurfaceXplorer» предназначена для работы с файлами СЗМ-данных специального формата, в которых в цифровом виде сохраняются результаты, полученные при измерении на сканирующем зондовом микроскопе. Однако встроенные средства не только позволяют импортировать данные в форматах других производителей СЗМ-оборудования, но и преобразовывать растровые изображения в полноценные трехмерные матрицы данных с возможностью гибкой настройки параметров и дальнейшей работы с ними как с обычными СЗМ-

изображениями. Эта возможность особенно ценна при анализе, например, РЭМ-изображений.

Остановливаясь на форматах файлов СЗМ-данных, необходимо отметить, что структуру записи (т. е. формат), как уже отмечалось выше, определяют изготовители оборудования и программного обеспечения для сканирующей зондовой микроскопии. К сожалению, на текущий момент в мире нет стандартизованных или принятых в качестве таковых форматов СЗМ-файлов, однако принципы их построения сводятся к следующим схемам.

Простая запись данных предусматривает размещение в файле одного СЗМ-изображения (т. е. единичной или отдельной матрицы значений). Структуру такой записи можно схематически представить на рис. 2.

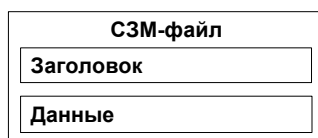


Рис. 2. Пример организации файла СЗМ-данных с простой записью

Практически файл, построенный по схеме простой записи данных, состоит из заголовка со служебной информацией и набора данных, в котором, собственно, и размещается матрица, описывающая СЗМ-изображение. Недостаток такого формата состоит в необходимости записи множества файлов, относящихся к одному измерению, если сканирующий зондовый микроскоп регистрирует одновременно несколько типов данных, как это производится в современных СЗМ (например, топографию и латеральные силы при работе в контактном режиме, изображение поверхности при первом и втором проходах при реализации двухпроходной методики и др.). В настоящее время простая запись данных для хранения СЗМ-изображений практически не используется. Тем не менее, подобная схема удобна, например, при экспорте данных в файл текстового формата, который может быть корректно использован для переноса результатов между приложениями различных производителей.

Многослойная запись данных предусматривает размещение в СЗМ-файле более одной матрицы данных, обычно относящихся к одному измерению, проведенному на сканирующем зондовом микроскопе. Каждая матрица данных записывается в отдельное адресное пространство. При этом каждую матрицу данных можно рассматривать как отдельный информационный слой. Структура файла с многослойной записью данных представлена на рис. 3.

Как видно из схемы (рис. 3), в файле содержатся:

- заголовок (служебная информация);
- информация с описанием набора данных (идентификаторы, смещение, или адреса записи соответствующих матриц данных, т. е. слоев);
- собственно матрицы данных, интерпретируемые как слои.

Каждый слой обычно представляет собой СЗМ-изображение какого-либо определенного типа, например, топографию поверхности, карту латеральных сил, данные силовой спектроскопии и др. Структура СЗМ-файла с многослойной записью может предусматривать ограниченное (как в ранних версиях форматов) и

неограниченное число совместно хранящихся слоев. Кроме того, производители СЗМ и обрабатывающих программ могут ограничивать тип и формат данных (числовых значений), записываемых в слоях. Естественно, с учетом развития СЗМ-методик и оборудования перспективной является запись неограниченного количества слоев в один файл, что позволяет сохранять в нем данные не только одного измерения, но и всего сеанса работы, и уже рассматривать его как аналог базы данных. Как показывает практика, наиболее оптимальным является принцип сохранения в одном файле набора данных, относящихся к одному измерению.

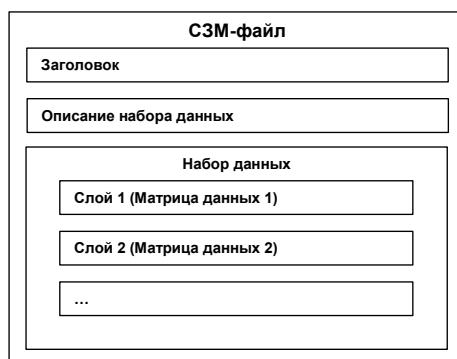


Рис. 3. Пример организации файла СЗМ-данных с многослойной записью

В программе «SurfaceXplorer» в качестве основной принята многослойная схема записи данных в СЗМ-файлах. Дополнительно в структуре этих файлов матрицы данных (слои) сгруппированы по типу, например группа данных (слоев) топографии, группа данных (слоев) сдвига фазы и т. д., как и на рис. 4. Такая структура позволяет, например, легко отслеживать и соотносить друг с другом слои, характеризующие одно состояние (примененные процедуры обработки), если в файле записаны более одного набора данных, полученных в ходе работы с СЗМ-изображениями.

В программе «SurfaceXplorer» в качестве базовых поддерживаются два формата файлов SPM2001 и MPS. Формат SPM2001 (Scanning Probe Microscopy, версия 2001 г.) предусматривает запись данных без ограничения размеров и количества слоев. Данные записываются в виде двумерных массивов (матриц) знаковых двухбайтных (16 бит) значений. Формат MPS (Multi-Purpose Set, версия 2003 г.) предусматривает многослойную запись данных без ограничения размеров полей и их количества, а также без ограничения типа и формата записываемых значений. Все эти параметры динамически определяются в описании набора данных файла и задаются при записи измерений. Таким образом, в файле данного формата могут содержаться СЗМ-матрицы (двумерные массивы) и линейные (одномерные) массивы значений (данные силовой спектроскопии), в том числе разносторонняя служебная информация о пользовательских настройках изображений, сервисных слоях с метками и выделенными областями и др. Кроме того, в формате MPS возможна запись измерений и других типов. Интересно отметить, что программа «SurfaceXplorer» использует файлы формата MPS для сохранения, например, пиктограмм содержащихся в папках СЗМ-файлов для их быстрого предварительного просмотра, представляя, таким образом, компактную базу данных.

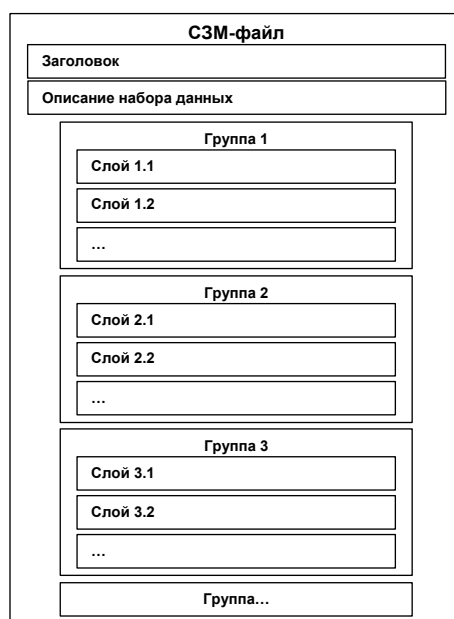


Рис. 4. Пример организации файла СЗМ-данных с многослойной записью и группировкой слоев по типам

В программе «SurfaceXplorer» предусматривается возможность управления слоями данных, в том числе копирование между файлами (рис. 5). Так, например, в один файл с многослойной записью могут быть собраны изображения (данные) для различных режимов, участков, поверхностей, и т. д., что среди прочего позволяет рассматривать такой файл как подобие базы данных или архива.

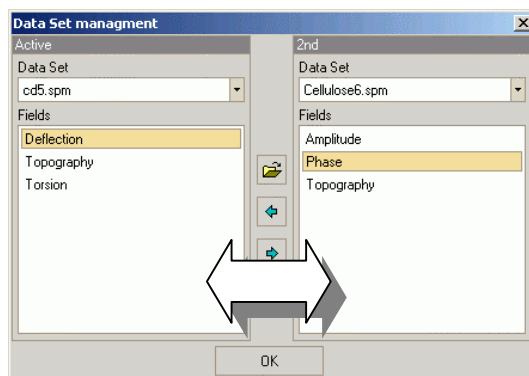


Рис. 5. Панель управления слоями данных программы «SurfaceXplorer»

Немаловажной особенностью программы можно назвать наличие встроенной функции предварительного просмотра СЗМ-изображений на жестком диске, в том числе с просмотром содержимого всех слоев данных, а также возможность организации ссылок на наиболее важные для пользователя папки с СЗМ-данными.

Концепция послойной структуры данных позволяет также реализовать простую и эффективную процедуру переноса сервисных слоев с метками и выделенными областями между совместными СЗМ-изображениями (рис. 6).

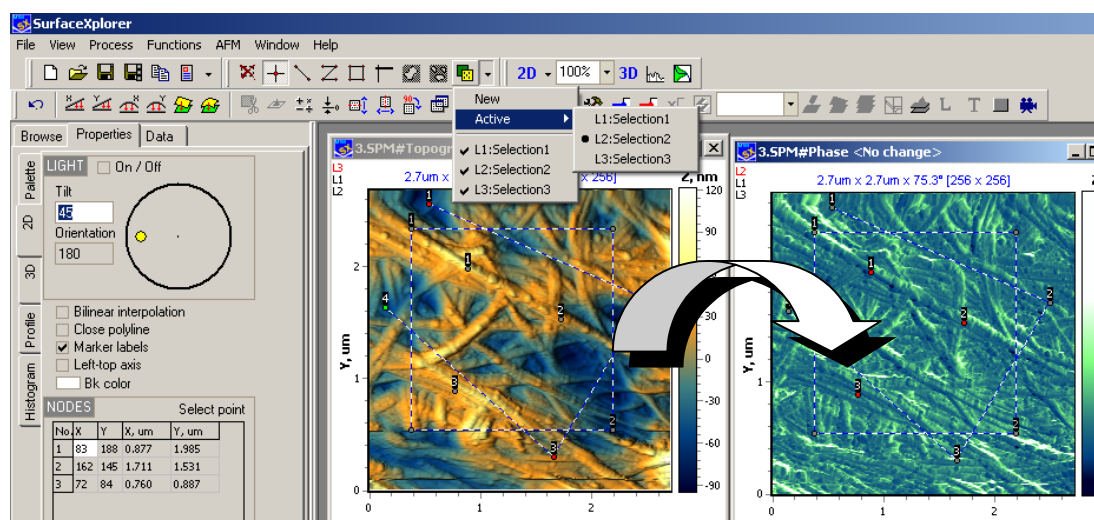


Рис. 6. Перенос сервисных слоев между совместными СЗМ-изображениями

Среди специальных возможностей программы «SurfaceXplorer» можно отметить развитые процедуры арифметических операций над матрицами данных, которые по функциональности приближаются к возможностям специализированных математических пакетов (рис. 7). В частности, помимо операций с двумя матрицами, матрицей и фиксированным числом, матрицей и задаваемой поверхностью второго порядка предусмотрено использование пользовательских сценариев, записываемых в текстовом виде и действующих не только арифметические операции, но и тригонометрические функции.

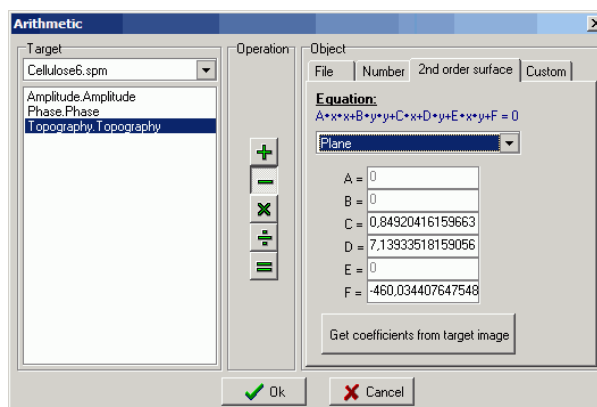


Рис. 7. Специализированная панель арифметических операций над СЗМ-изображением

Кроме стандартных функций сохранения (экспорта) данных программа «SurfaceXplorer» предоставляет возможность сформировать специальный файл отчета в формате *.doc (MS Word) или *.htm, в который включается любое количество изображений из окон визуализации и вспомогательная информация о данных изображениях. При этом вспомогательная информация сохраняется в текстовом виде, что дает пользователю возможность непосредственно применять ее как исходные данные при работе с другими программами.

Таким образом, программа «SurfaceXplorer» содержит сбалансированный набор функций обработки, визуализации и анализа, важных для интерпретации и понимания данных, полученных с помощью сканирующего зондового микроскопа, и в удобной форме реализует более 300 отдельных операций и процедур, в том числе ряд специальных методик, не имеющих аналогов.

Литература

1. <http://www.imagemet.com>
2. <http://www.microtm.com>