

第 3 章 実験データ画像処理プロセッサ(Analyzer)

実験データ画像処理プロセッサ Analyzer は、走査型プローブ顕微鏡(SPM)実験装置から直接出力されるデータファイルを読み込み、実験画像データに様々な画像処理を施すことによって、新たな知見を得ることを目的としたソフトウェアである。また、シミュレーションで得られた SPM 画像と実験データ画像との比較を行い、シミュレーション結果の妥当性を評価するとともに、試料形状についてより確実な推測を行うこともできる。

Analyzer の起動方法は、以下の通りである。SPM Simulator 本体の GUI において、“Menu Bar”の[Tool]→[Analyzer]をクリックする。すると、Analyzer 専用のウィンドウが現れる。

3.1 実験データの読み込みと一般的な画像処理

3.1.a 読み込み可能な実験データのファイルフォーマット一覧

Analyzer は、表 2 に示すフォーマットのファイルを、画像データとして読み込むことが可能である。

表 2 Analyzer が読み込み可能なデータファイル・フォーマット

ファイルフォーマット	メーカー名	拡張子
Unisoku 形式(.dat, .hdr)	Unisoku	.dat
Scala 形式	Omicron	.par
Asylum Research 形式	Asylum Research	.ibw
Digital Surf 形式	Digital Surf	.sur
JEOL 形式	JEOL	.tif
PicoSPM 形式	Agilent Technologies (Molecular Imaging)	.stp
Nanonis 形式	Nanonis	.sxm
RHK Technology 形式	RHK Technology Inc.	.sm4
RHK Technology 形式	RHK Technology Inc.	.sm3
RHK Technology 形式	RHK Technology Inc.	.sm2
Hitachi(SEIKO)形式	Hitachi(SEIKO)	.xqd
Shimadzu 形式	Shimadzu Corporation	.*
PSIA 形式	Park Systems Corp.	.tiff
SPIP 形式		.asc
WSxM(ASCII XYZ)形式		.txt
Gwyddion(ASCII)形式		.txt
bitmap 画像データ		.bmp
JPEG 画像データ		.jpg, .jpeg
PNG 画像データ		.png
TIFF 画像データ		.tif

画像データの読み込み方は以下の通りである。Analyzer の GUI において、“Menu Bar” の[File]→[Open...]をクリックする。すると、“Open File”用のダイアログが現れるので、そこで開きたいデータファイルを指定すれば良い。

3.1.b 基板面の傾き補正

通常のSPM計測実験において、探針が走査する2次元平面と、試料が載せられている基板面とは、互いに平行であるとは限らない。むしろ、走査する2次元平面に対して、基板面は傾いているのが普通である。すると、試料表面の高低差よりも、基板面の傾きによって生じる高低差の方が大きい場合、試料表面の凹凸は目立たなくなってしまう、結果として、実験データ画像を見ても試料表面の様子が良く分からない、といった不都合が生じてしまう。

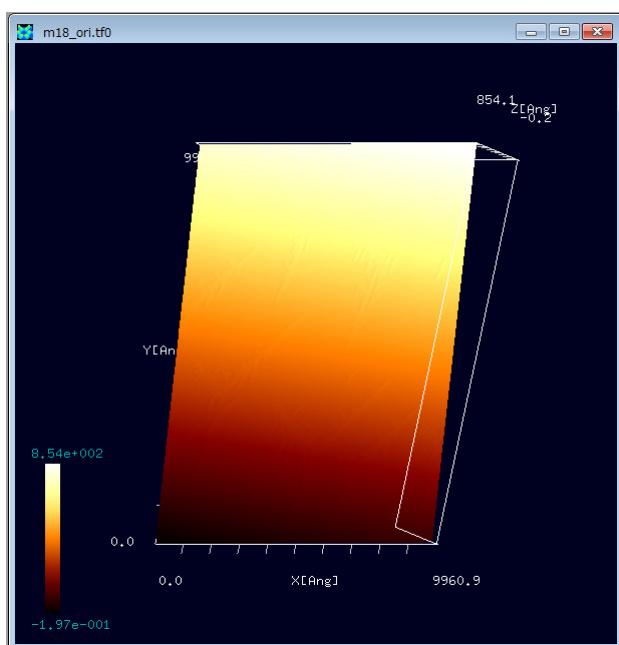


図 3 傾き補正前の実測 AFM 画像

この問題を克服するために、Analyzer には、基板面の傾き補正機能が備えられている。傾き補正機能の使い方は以下の通りである。Analyzer において、図 3 のような画像データファイルが開かれているとする。[東京大学生産技術研究所 福谷研究室 提供(Ir 結晶表面上に Au を蒸着、アニーリングしてフラクタル島状構造を自己形成させたもの)S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006); S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 474210.]図の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Correct tilt]を選んでクリックする。

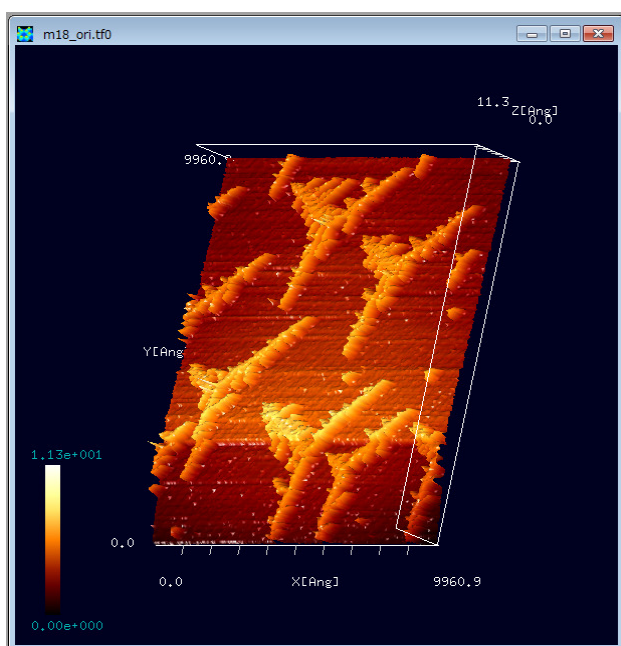


図 4 傾き補正後の実測 AFM 画像

すると、データ画像は、図 4 に示されるように、基板の傾き補正を行ったものに切り替わる。この操作により、試料表面の細かな凹凸がはっきりと見えるようになったことが分かる。

この傾き補正機能の、補正角度計算方法は以下の通りである。まず、 x 方向、 y 方向のそれぞれの走査線上のデータを、最小二乗法フィッティングで直線近似する。次に、得られた近似直線の平面に対する傾きの平均を取る。最後に、傾きの角度の平均値を補正するように、画像データは変換される。

3.1.c 画像のフーリエ解析

Analyzer には、画像データに対して 2 次元フーリエ解析を行い、高周波を強調した画像、もしくは、低周波を強調した画像に変換する機能が用意されている。高周波を強調した画像は、オリジナル画像の輪郭線を強調することに対応する。低周波を強調した画像は、オリジナル画像の背景の変化を強調することに対応する。

ここで、画像データに対する 2 次元フーリエ変換とは、どのような操作かを説明する。オリジナル画像の画素数を、 x 方向に N 、 y 方向に M とする。 x 方向に n 番目、 y 方向に m 番目の画素に与えられる数値を $z(n, m)$ とする。 $z(n, m)$ は、試料表面の高さ情報に相当する。 $z(n, m)$ のフーリエ変換は、以下の式で与えられる。

$$\tilde{z}(u, v) = \frac{1}{NM} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{M-1} z(n, m) \exp\left[-2\pi i \left(\frac{nu}{N} + \frac{mv}{M}\right)\right]$$

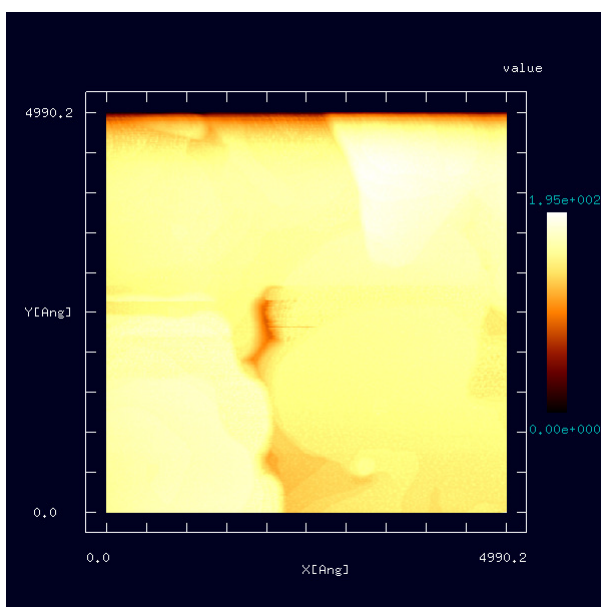


図 5 フーリエ解析前の実測 AFM 画像

ここでは、例として、図 5 の画像データをフーリエ解析することを考える。(大阪大学・大学院基礎工学研究科、物質創成専攻、機能物質化学領域、表面・界面機能化学講座、福井研究室提供)図の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Image Processing]を選んでクリックする。すると、フーリエ解析用の新しいウィンドウが現れ、白黒の画像が表示される。

フーリエ解析用ウィンドウにおいては、[Cartesian], [Fourier], [Power spectrum]の三種類のモードが用意されており、以下の図 6、図 7、図 8 の三種類の画像が表示される。

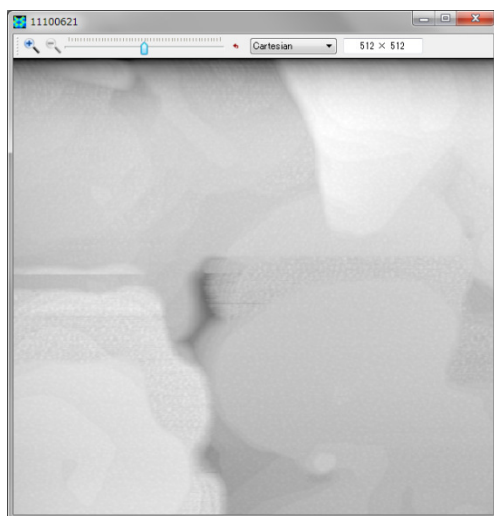


図 6 オリジナル AFM 画像の[Cartesian]表示

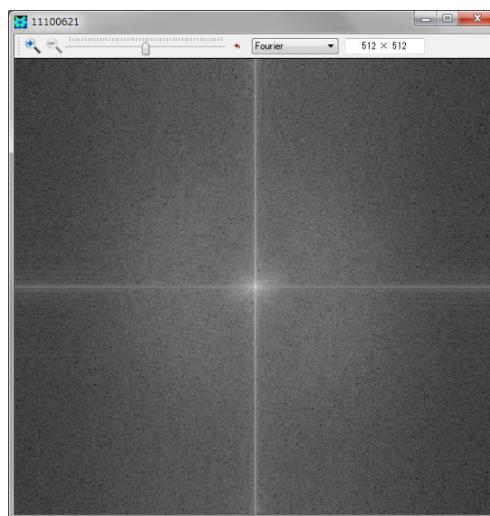


図 7 オリジナル AFM 画像の[Fourier]表示

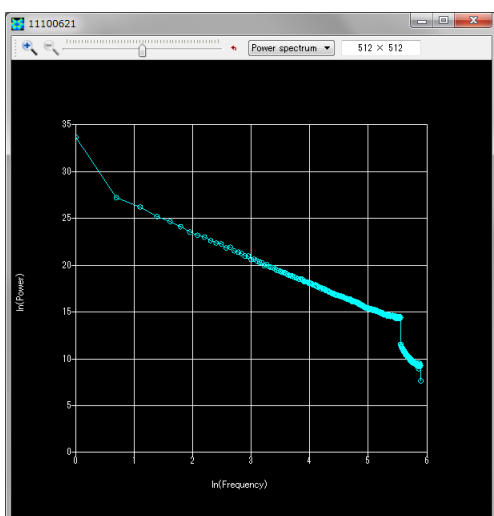


図 8 オリジナル AFM 画像の[Power spectrum]表示

フーリエ解析用ウィンドウの上部にあるスライダーのつまみを動かすことで、強調する周波数成分を変化させることが出来る。スライダーのつまみを右に動かすと、高周波が強調された画像が、以下のように得られる。図 9、図 10、図 11 を見ると分かるように、オリジナル画像に比べて、輪郭線がはっきりした画像となっている。

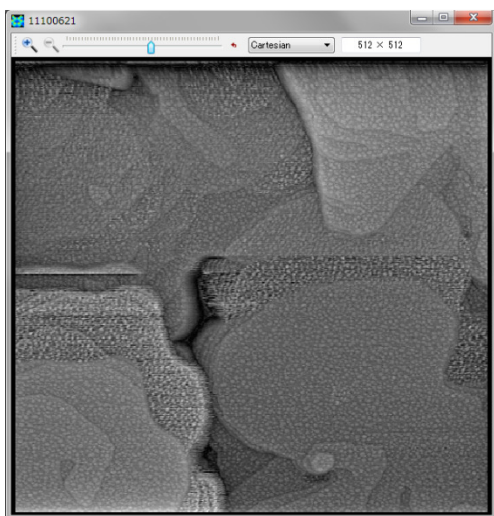


図 9 高周波を強調した AFM 画像の [Cartesian]表示

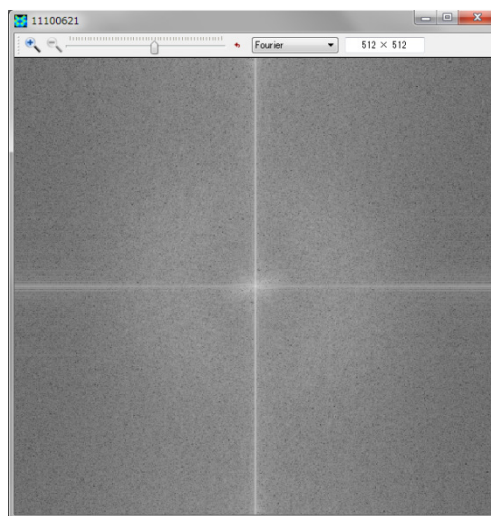


図 10 高周波を強調した AFM 画像の [Fourier]表示

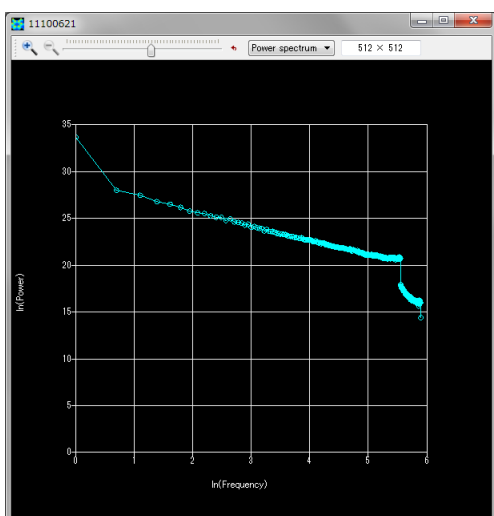


図 11 高周波を強調した AFM 画像の[Power spectrum]表示

オリジナル画像と高周波強調画像のパワースペクトルのグラフを比較すると、スライダーのつまみの移動によって、パワースペクトルのグラフの傾きが連続的に変化しているのが見てとれる。このことから、高周波強調画像においては、特定の周波数成分の強度を変化させているのではなく、周波数分布全体を連続的に変化させる操作がなされていることが理解される。これは、パワースペクトルの分布に関して、周波数の広い領域にわたって補間が自動的に行われていることを意味する。

また、スライダーのつまみを左に動かすと、低周波が強調された画像が、以下のように得られる。図 12、図 13、図 14 を見ると分かるように、オリジナル画像に比べて、背景の変化が強調された画像となっている。

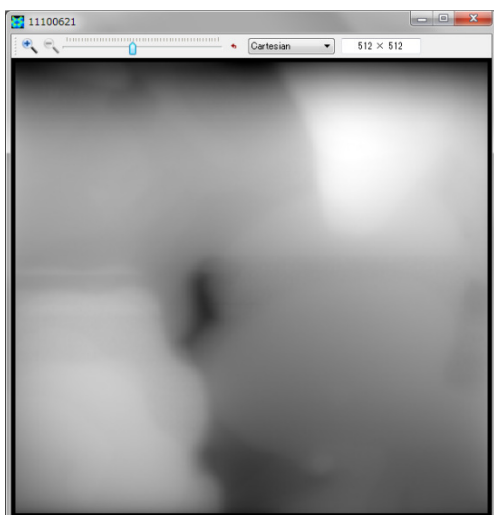


図 12 低周波を強調した AFM 画像の [Cartesian]表示

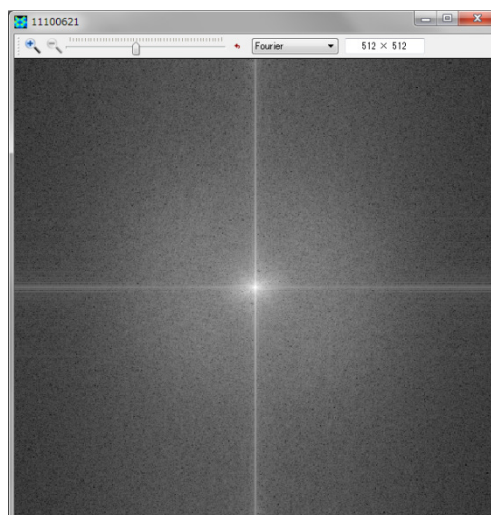


図 13 低周波を強調した AFM 画像の [Fourier]表示

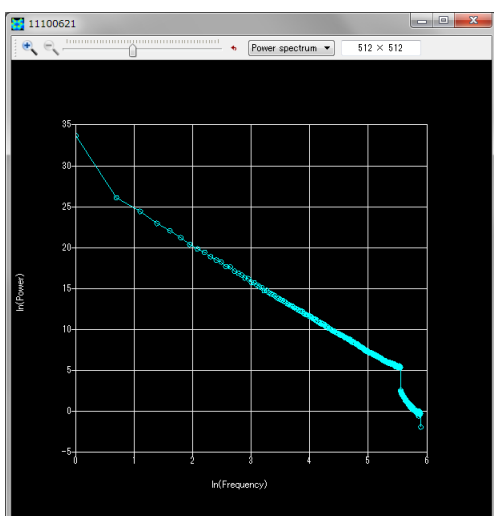


図 14 低周波を強調した AFM 画像の[Power spectrum]表示

3.1.d 画像の高解像度化(Lanczos 補間法)

Analyzer には、Lanczos ($n=3$) 補間法による画像の高解像度化機能が用意されている。具体的には、以下の補間関数を使用する。

$$L(x) = 1 \quad \text{if } x = 0,$$

$$L(x) = \frac{3 \sin(\pi x) \sin(\pi x / 3)}{\pi^2 x^2} \quad \text{if } 0 < |x| < 3,$$

$$L(x) = 0 \quad \text{otherwise,}$$

$$S(x, y) = \sum_{i=\lfloor x \rfloor - 2}^{\lfloor x \rfloor + 3} \sum_{j=\lfloor y \rfloor - 2}^{\lfloor y \rfloor + 3} s_{ij} L(x - i) L(y - j).$$

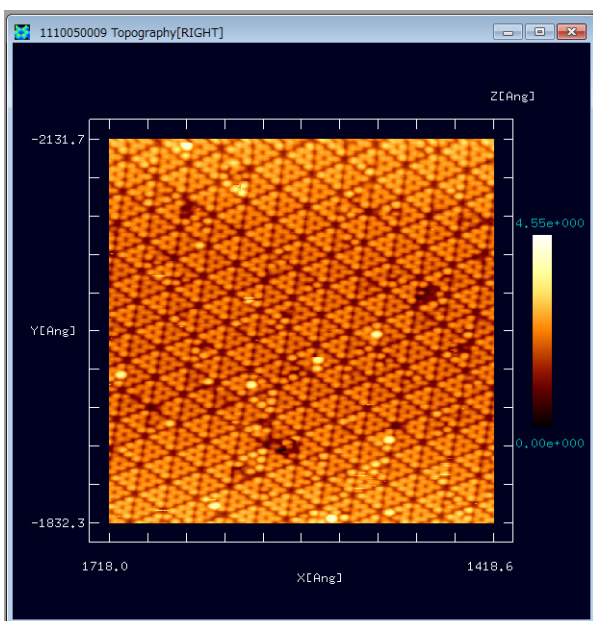


図 15 高解像度化する前の実測 AFM 画像

例として、図 15 の実験画像を高解像度化する。(東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供)

図の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Image Processing]を選んでクリックする。すると、フーリエ解析用の新しいウィンドウが現れ、モノトーンの画像が図 16 のように表示される。

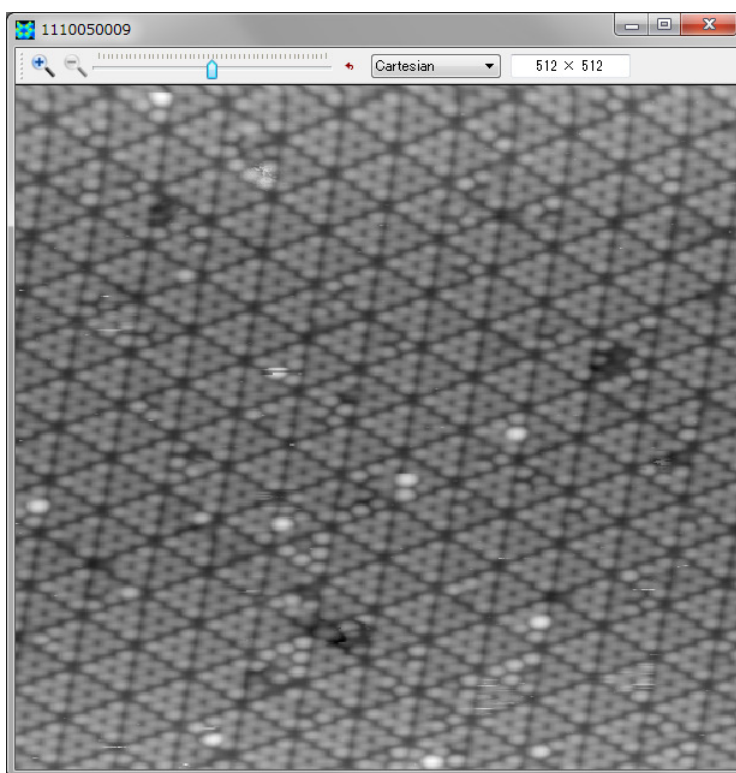


図 16 高解像度化する前の実測 AFM 画像(モノトーン表示)

この図 16 で示されるモノトーン画像を、高解像度化する。それには、ウィンドウ上部にあるツールバーの左端の、拡大を示す虫メガネのアイコンをマウスでクリックする。

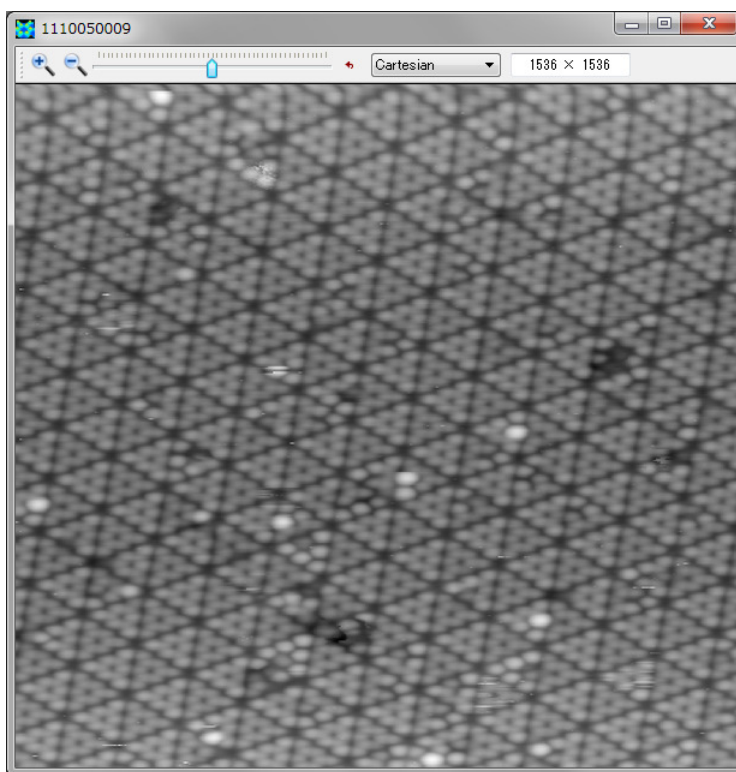


図 17 高解像度化された AFM 画像

すると、図 17 に示される高解像度化された画像に切り替わる。

3.2 ニューラルネットワーク学習法による像補正

ケーススタディとして以下の問題を考える。鎖状高分子 collagen に対して、先端が二股になった探針(double-tip)を使って AFM 観察を行い、アーティファクトを含んだ実験画像データが得られたとする。このアーティファクトを含んだ実験画像データをニューラルネットワーク学習の素材として、他のアーティファクトを含んだ画像データを補正することを試みる。

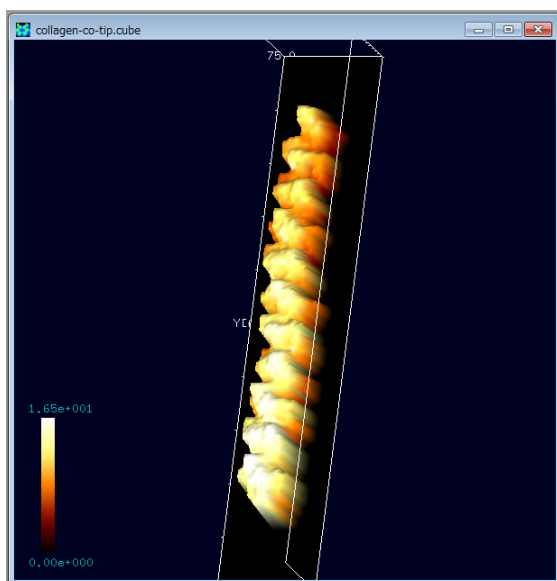


図 18 CO 分子を探針として得られる collagen の AFM 像(これを、ほぼ理想的な AFM 画像と見なす)

まず、CO 分子を探針として collagen を AFM 観察して得られる像を図 18 に示す。この画像データは、GeoAFM によって得られたものである。探針として CO 分子を選んだ場合、探針先端部は非常に小さくとがったものとなるので、ほぼ理想的な AFM 画像と判断して構わない。

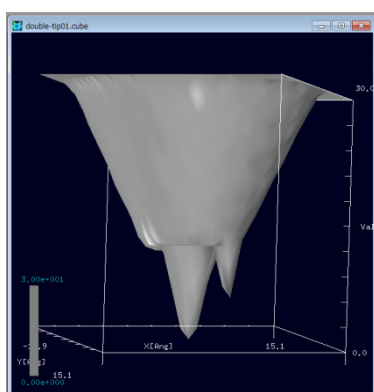


図 19 先端が二股になってしまった探針の像

一方、図 19 のように、劣化により先端が二股になってしまった探針(double-tip)を考える。

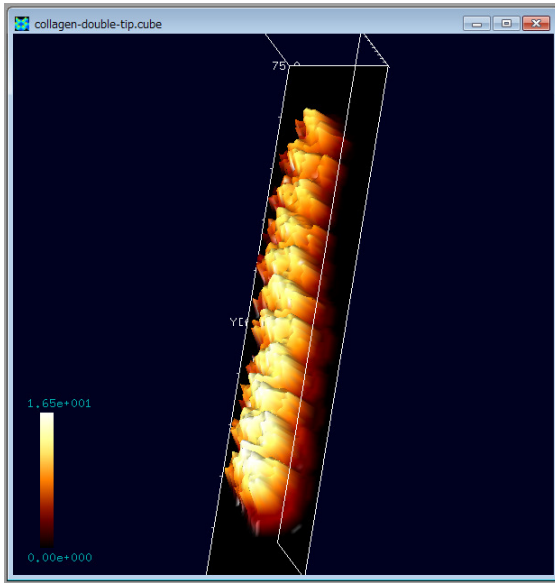


図 20 先端が二股になった不完全な探針から得られる、collagen の AFM 測定画像

このような不完全な探針によって得られる collagen の AFM 測定画像は、図 20 のようになる。この画像データも GeoAFM で得られたものである。図を良く見ると、探針先端部の二股形状によって、collagen 表面の AFM 画像は凹凸が激しくなっている。このようなアーティファクトを、ニューラルネットワーク学習によって除去することを試みる。

ニューラルネットシミュレータの起動方法は、次の通りである。まず、Analyzer のメニューバーから、[Tool]→[Neuralnet Simulator]をクリックする。これにより、“Neuralnet simulator”ウィンドウが現れる。次に、“Neuralnet simulator”ウィンドウのメニューバーから、[File]→[Open]をクリックする。

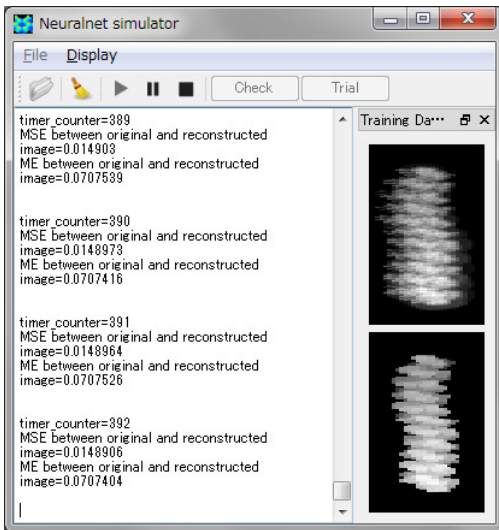


図 21 Neuralnet simulator の実行画面

すると、まず初めに、“Select observed images”というダイアログが現れるので、ここで、double-tip によって得られた collagen の AFM 画像データファイルを選択する。ここでは、データファイルは、Cube 形式で与えられるとする。次に、“Select original images”というダイアログが現れるので、ここで、CO 分子の探針で得られた collagen の理想的な AFM 画像データファイルを選択する。このデータファイルも、Cube 形式で与えられているとする。この時点で、図 21 のようなウィンドウが現れる。

ニューラルネットワークの学習を開始するために、このウィンドウ上部のツールバーの、三角形の[Start]ボタンをクリックする。これにより、学習が開始される。

ニューラルネット学習が終了した時点で、ウィンドウ上部ツールバーの、縦長長方形二個の[Pause]ボタンをクリックする。ここで、学習の効果を確認するために、ツールバーの[Check]ボタンをクリックする。すると、以下の三つの画像、図 22、図 23、図 24 が現れる。

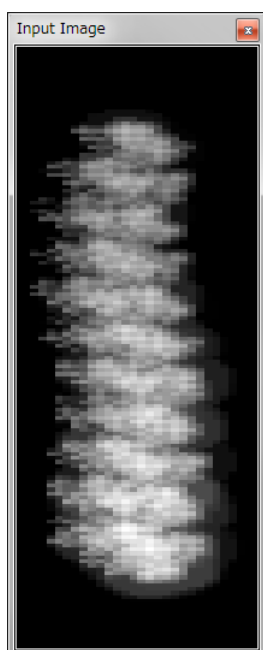


図 22 Neuralnet simulator における Input Image

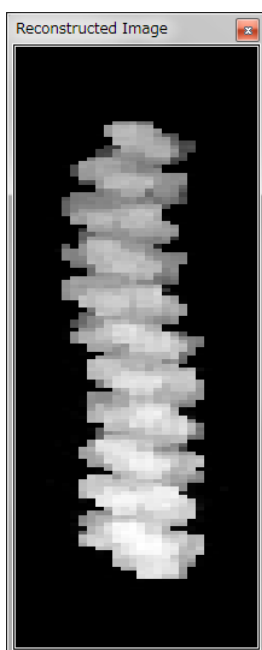


図 23 Neuralnet simulator における Reconstructed Image



図 24 Neuralnet simulator における Difference Image

図 22、図 23、図 24 は、左から、“Input Image”, “Reconstructed Image”, “Difference Image”である。Input Image は、学習前の入力画像、すなわち、double-tip で collagen を AFM 観察することによって得られた画像である。Reconstructed Image は、学習結果を反映した再構成画像、すなわち、学習前の入力画像から double-tip によるアーティファクトを除去した画像である。Difference Image は、Input Image と Reconstructed Image の差分画像を表している。Difference Image に何も表示されていない状態が、学習によってアーティファクトを完全に除去したことに対応する。

学習結果ファイルは、メニューバーの、[File]→[Save Weight File]をクリックすることで、保存可能である。

最後に、これまでの学習結果を利用して、別の新たな実験画像データのアーティファクトを除去する。ツールバーの[Trial]ボタンを押して、アーティファクトを含んだ実験画像データの Cube 形式ファイルを選択する。ここでは、例として、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite : 高配向熱分解黒鉛) 上に配置された一個のラクトン系高分子量ポリマー(CLG : ϵ カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)を double-tip で AFM 観察して得られた画像データを使うことにする。この画像データは、GeoAFM で得られたものである。すると、図 25、図 26 が表示される。

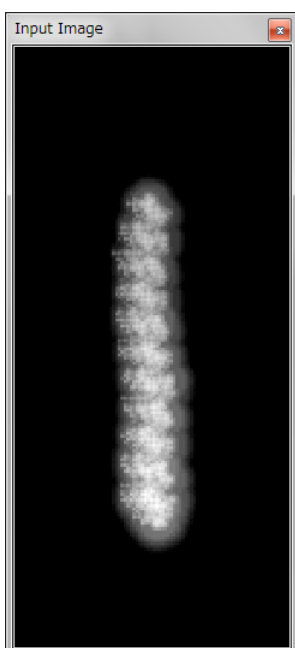


図 25 高分子を double-tip で AFM 観察して得られた画像

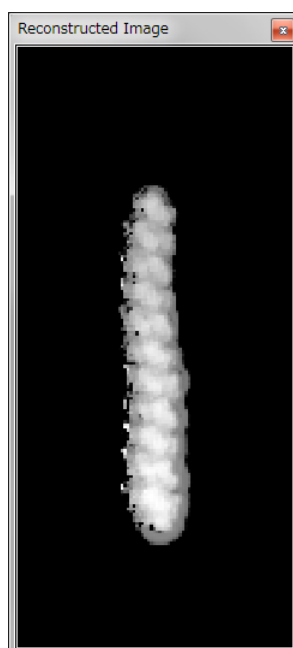


図 26 ニューラルネット学習の結果に基づいて修正して得られた画像

図 25 は、高分子を double-tip で AFM 観察して得られた画像である。図 26 は、図 25 をニューラルネット学習の結果に基づいて修正して得られた画像である。アーティファクトが除去されているかを確認するために、図 25、図 26 を Cube 形式データとして Analyzer で表示することにする。それには、図の上にカーソルを置いてマウスを右クリックして、[Export to Analyzer]を選択する。これにより、図 27、図 28 が表示される。

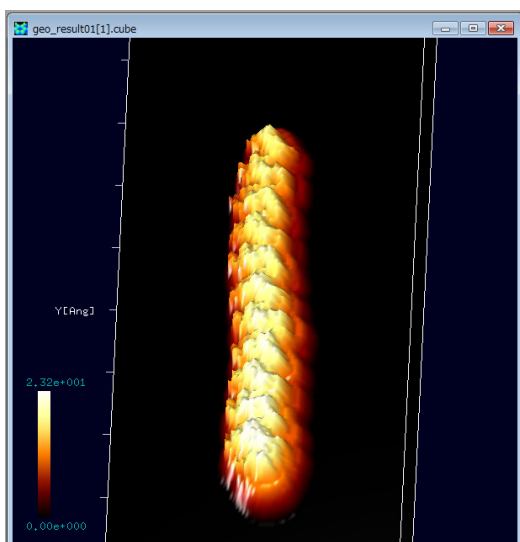


図 27 高分子を double-tip で AFM 観察して得られた画像

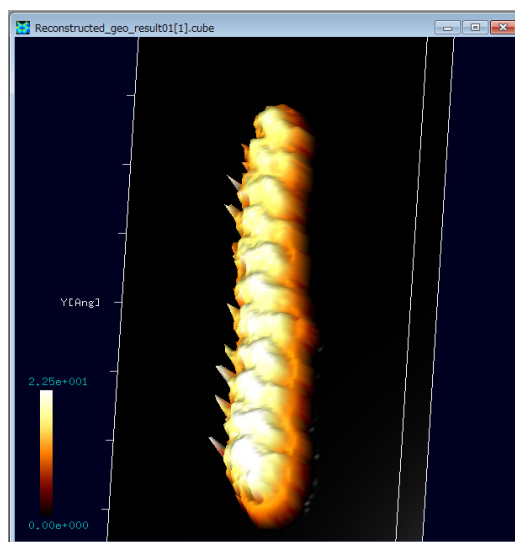


図 28 ニューラルネット学習の結果に基づいて修正して得られた画像

図 27 は、高分子を double-tip で AFM 観察して得られた画像である。図 28 は、上の左の図をニューラルネット学習の結果に基づいて修正して得られた画像である。図 27、図 28 を見比べると、アーティファクトは除去されたが、そのかわりに、高分子鎖

の左側に不自然な突起が現れてしまっていることに気づく。このような不都合は、ニューラルネットワーク学習が、まだ十分でないことを意味する。学習に使用する画像の数を増やすことで、このような不都合は避ける事が可能である。

3.3 探針形状推定と探針影響除去

AFM 実験画像から、直接、探針の形状を推定する方法として、Blind Tip Reconstruction 法が知られている。この節では、この Blind Tip Reconstruction 法の原理を簡単に説明し、その後、この方法によって、探針の欠損に由来する AFM 実験画像のアーティファクトを除去する方法を紹介する。

3.3.a 探針形状推定法(Blind Tip Reconstruction Method)の仕組み

まず、例として、探針先端部が二つの突起になっている double-tip の場合を考える。このような探針で、以下の三つの試料を走査(スキャン)したとする。

(a)全く平らな表面形状の試料(図 29)

(b)針のように鋭い突起が並んでいる試料(図 30)

(c)上の二つの試料の中間で、なだらかな突起が分布する試料(図 31)

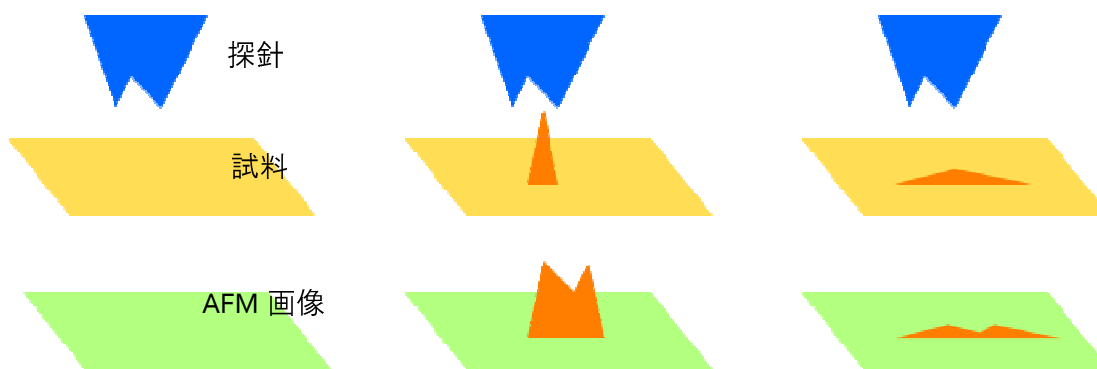


図 29 二股の探針による、全く平らな表面形状の試料の AFM 画像

図 30 二股の探針による、鋭い突起が並んでいる試料の AFM 画像

図 31 二股の探針による、なだらかな突起が分布する試料の AFM 画像

図 29、図 30、図 31 をみると、AFM 画像は、探針の形状を反映していることが分かる。そこで、Blind Tip Reconstruction Method では、実験で得られた測定 AFM 画像の、複数の突起状の部分の形状データを、サンプルデータとして切り離して、図 32 のように重ね合わせる操作を行う。

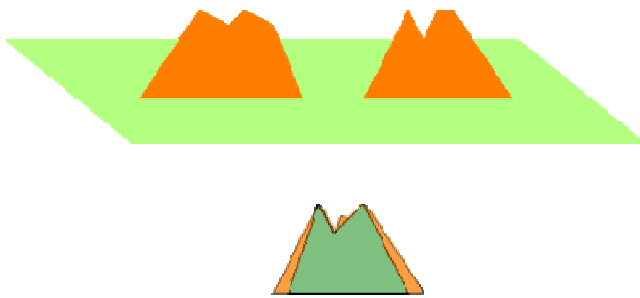


図 32 複数の突起状の部分の形状データの重ね合わせ操作

重ね合わせた突起部の画像データの、共通部分が、探針形状に近いと考えるのである。従って、突起物の多い試料を使って AFM 画像を測定し、たくさんの個数のサンプルデータを重ね合わせて、共通部分を取れば、それだけ、精度の高い探針形状データが得られることになる。

もう少し詳しい説明を以下に述べる。図 33 のように、AFM 画像の突起部を一定の幅の領域で分割する。この際、突起部の最も高い部分が、領域の中央に来るように、領域の取り方を調整する。

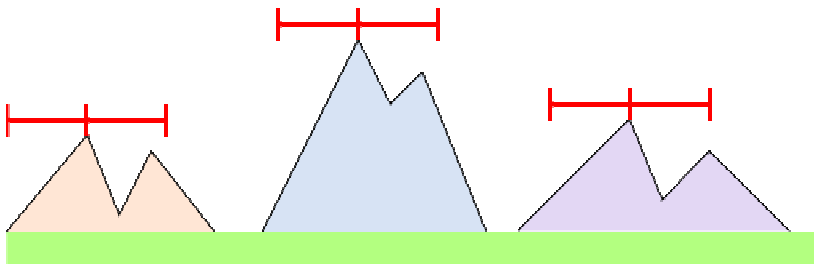


図 33 AFM 画像の突起部を一定の幅の領域で分割

次に、図 34 のように、各領域に切り出した AFM 画像データを重ね合わせる。この際、領域中央の突起部の位置を合わせて、画像データを重ね合わせることにする。そして、全ての領域の画像データが重なり合った共通部分を取り出して、これを探針形状と見なすのである。

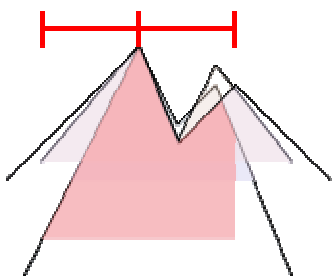


図 34 領域中央の突起部の位置を合わせて、画像データを重ね合わせる

上記の手順が、一般的な Blind Tip Reconstruction Method であるが、この考え方をさらに発展させた探針形状推定の方法も有り得る。上で説明した Blind Tip Reconstruction Method では、切り出す領域の中央に、突起部の最も高い部分が来るように調整したが、このような調整を行わないという考え方である。

すなわち、AFM 画像データを、取捨選択することなく、あらゆる方法で一定幅の領域に切り分け、これらのデータを全て重ね合わせるという方法である。具体例として図 35 のような状況を考える。図 35 では、AFM 画像に対して、青い線分で示される四つの領域が取られている。実際には、AFM 実験画像の画素に応じて、重なり合うことを許して、あらゆる領域の取り方を考慮に入れるのだが、ここでは特に四つの領域に注目することにする。

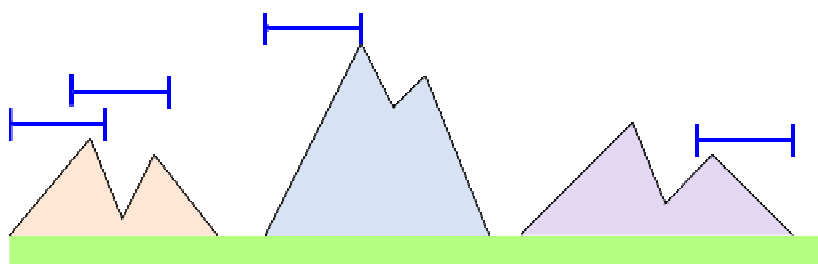


図 35 AFM 画像データを、取捨選択することなく、あらゆる方法で一定幅の領域に切り分ける

これら四つの領域の AFM 画像に対して、図 36 に示す処理を行う。四つの領域を切り出して、領域内の AFM 画像の最も高い部分が、領域の中央に来るように画像を平行移動させる。画像を平行移動させたことによって空白となった領域には、領域中央と同じ高さの詰め物をする。こうして得られた領域内の AFM 画像を、中央を合わせて重ね合わせる。そして、全ての領域の画像データが重なり合った共通部分を取り出して、これを探針形状と見なすのである。このようにして得られた探針形状は、一般に、通常の Blind Tip Reconstruction Method よりも鋭く尖っている。

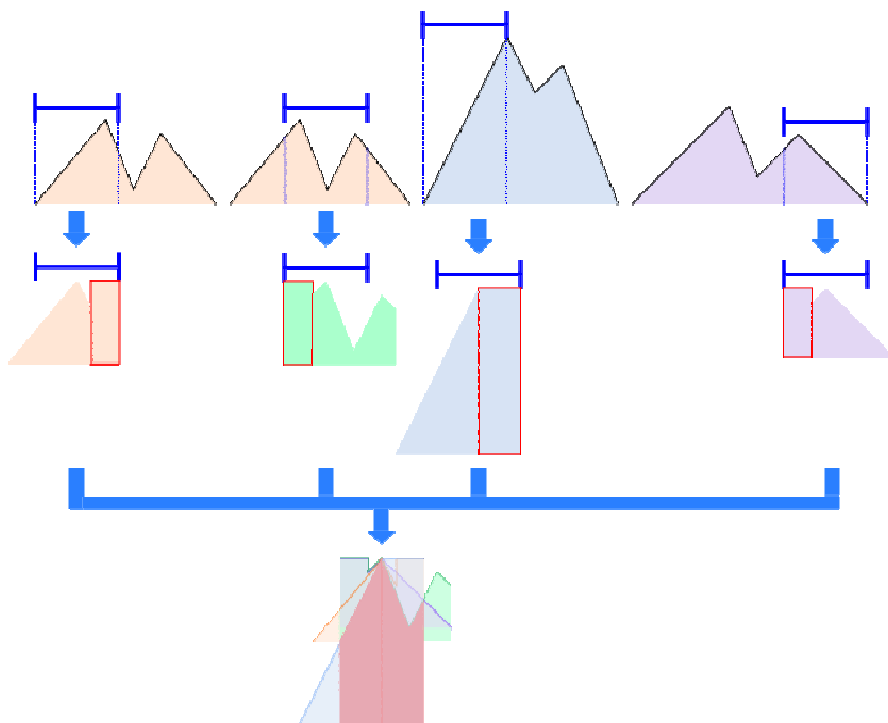


図 36 領域内の AFM 画像の最も高い部分が、領域の中央に来るように画像を平行移動させてから、重ね合わせる

これまでの議論から、次の二つの探針形状が得られた。

1. Blind Tip Reconstruction Method によって得られる探針形状[これを、探針形状 A と呼ぶことにする]
2. AFM 実験画像のあらゆる領域を重ね合わせることで得られる探針形状[これを、探針形状 B と呼ぶことにする]

Analyzer の探針形状推定機能においては、パラメータ $x \in [0,1]$ が導入されており、以下の計算処理を行うオプションが備えられている。パラメータの値によって、探針形状 A と探針形状 B の重ね合わせが出力されるようになっている。 $x=0$ のときは探針形状 A が、 $x=1$ のときは探針形状 B が出力される。さらに、 $0 < x < 1$ のときは、探針形状 A を割合 $(1-x)$ で、探針形状 B を割合 x で重ね合わせた探針形状が出力される。

3.3.b アーティファクト除去の仕組み

AFM 実験画像から探針形状推定を行った場合、AFM 実験画像データおよび探針形状データから、試料のオリジナル形状を推定することが可能となる。この手法は、GeoAFM ソルバーでも採用されており、詳しい計算の仕組みについて、ここでは説明しない。

以下に、AFM 実験画像から探針形状を推定し、さらに、試料のオリジナル形状を求めるまでの操作手順を、具体例を使って説明する。

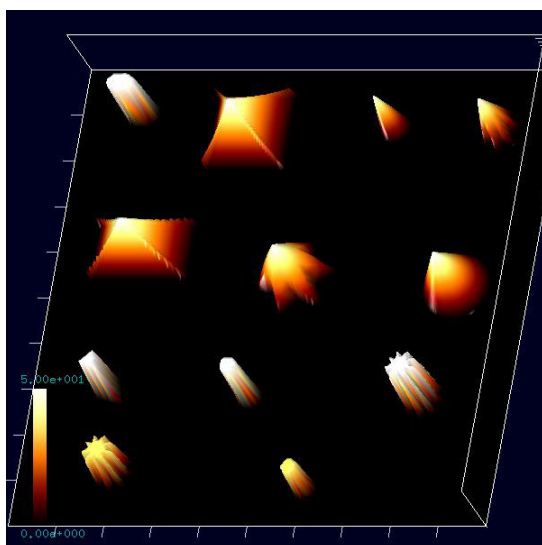
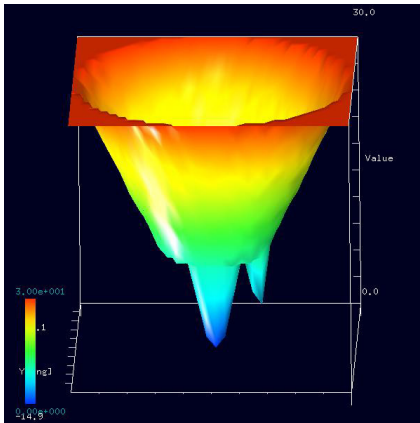


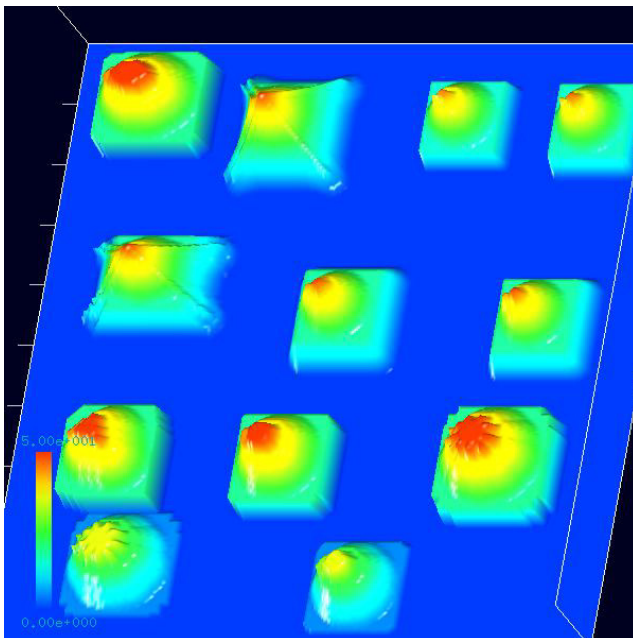
図 37 人工的な立体構造によるオリジナル試料データ

まず、オリジナル試料データとして、図 37 に示される人工的な立体構造を考える。



また、使用する探針として、図 38 のような先端が二股に分かれてしまった double-tip を用意する。

図 38 先端が二股に分かれてしまった double-tip



上の人工的立体構造を持つ試料データに対して、double-tip で AFM 観察すると、左の図のような AFM 画像が得られる。突起部の先端が二股に分かれていて、double-tip のアーティファクトとして現れているのが確認できる。(この AFM 画像は、試料のオリジナル形状データと double-tip 形状データを元にして、GeoAFM で作成されたものである。)

図 39 人工的立体構造を持つ試料データに対して、double-tip で AFM 観察して得られる画像

図 39 の AFM 画像から探針形状推定を行うことにする。上の AFM 画像が Cube 形式で与えられているとする。Analyzer のツールバーの[File]→[Open...]により、Cube 形式の上の AFM データファイルを画像表示する。

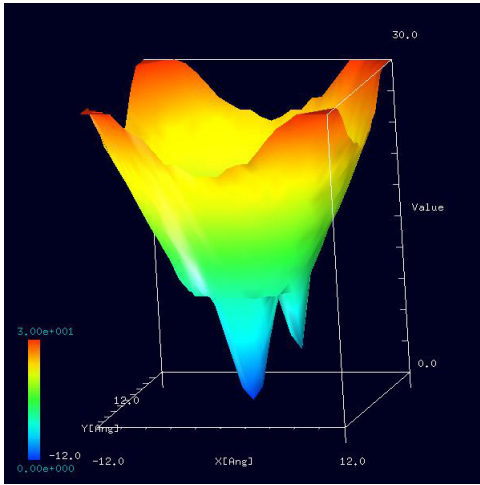


図 40 探針形状推定の結果、得られた画像
 画像である。実際、ここで得られた探針形状は、前に示したオリジナルの探針形状と非常によく似ている。

画像が表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて、マウスを右クリックする。すると、コンテキストメニューが現れるので、[Tip Estimation]を選択する。[Tip Nx]として 25、[Tip Ny]として 25、[Parameter]として 0.0 を指定する。すると、探針形状推定の結果、図 40 の画像を得る。(ただし、図 40 の画像は、得られた探針形状推定データ tip_result.cube を、3D-View、z-range Normalize をオフ、[Color]を Rainbow として表示したものである。)

図 40 は、[Tip Estimation]の[Parameter]を 0.0

に指定しているので、通常の Blind Tip Reconstruction Method によって得られた探針形状

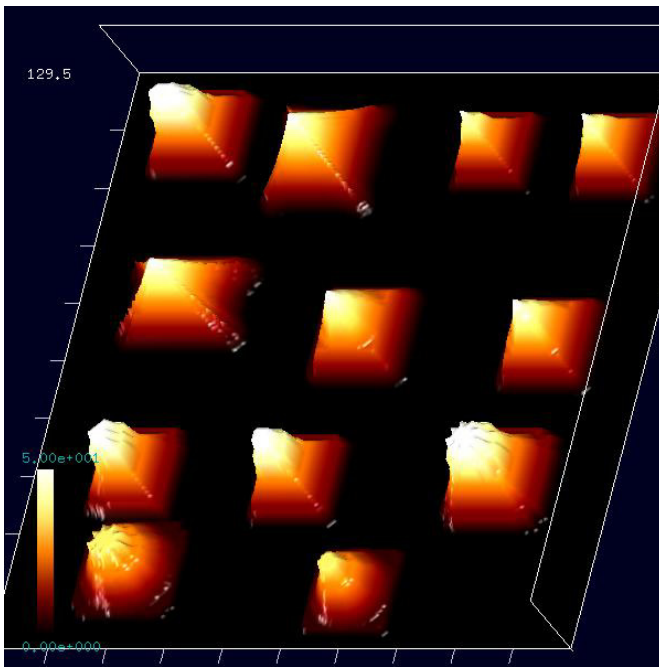


図 41 探針形状推定データを元に、AFM 画像データからアーティファクトを除去して得られた画像

AFM 画像データからアーティファクトを除去する手順は以下の通りである。アーティファクトを除去したい画像が表示されているウィンドウの上に、カーソルを置いてマウスを右クリックする。コンテキストメニューが現れるので、[Eliminate Tip Effect]を選択する。[Select Tip]ダイアログで、先ほど生成した探針形状推定データ tip_result.cube を選択する。すると、図 41 が表示される。

図 41 は、前に示した AFM 画像から double-tip 由来のアーティファクトを除去した図である。実際、図 41 においては、突起部の先端の二股が取り除かれていることが見てとれる。

ここまでの説明では、Parameter を 0.0 とした通常の Blind Tip Reconstruction Method を行った場合であった。次に、[Tip Estimation]の Parameter を 1.0 にした場合はどうなるかについて調べてみる。

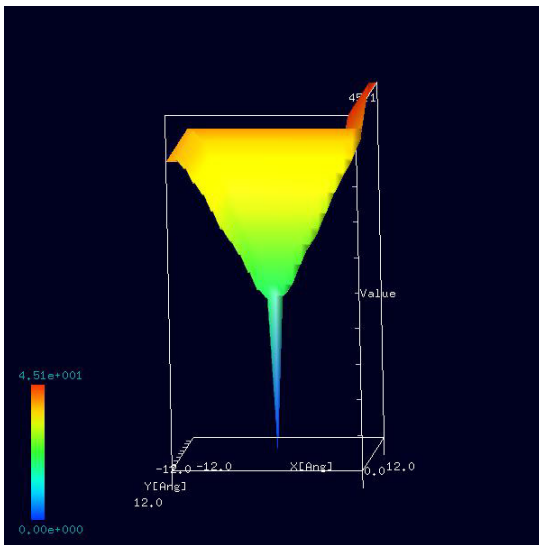


図 42 Parameter を 1.0 として得られた、推定探針形状

左の画像は、前に示した AFM 画像に対して、Parameter を 1.0 として [Tip Estimation] を行った結果得られた、推定探針形状である。非常に鋭い探針になっていることが分かる。

この探針形状を仮定して、AFM 画像データからアーティファクトを除去したものが、図 43 である。図 43 を見ると、突起部先端の二股のアーティファクトが除去し切れていないのが分かる。

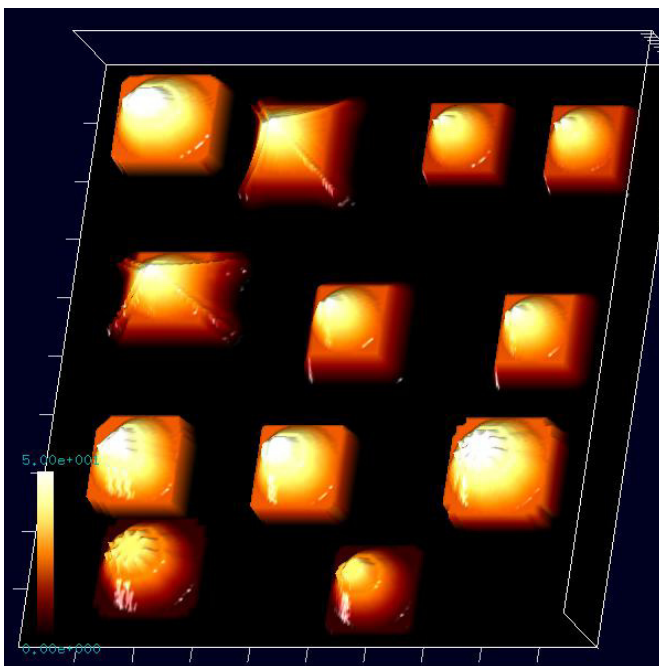


図 43 Parameter を 1.0 として得られた推定探針形状を元にして、AFM 画像データからアーティファクトを除去して得られる画像

以上、説明したように、[Tip Estimation]における Parameter 値の設定は非常に重要である。ユーザの好みに応じて、この値を調節することが望ましい。

3.4 実験データ・シミュレーション結果の比較のための画像処理機能

Analyzer には、実験画像データとシミュレーション計算画像を比較し、物理的知見を得るための画像処理機能が用意されている。この節では、それらを紹介する。

3.4.a 閾値による画像データの二値化

SPM 画像データに対して、データの二値化、すなわち、白黒画像への変換が行える。全画素の高さの平均値を h_{average} 、高さの最大値を h_{max} 、高さの最小値を h_{min} とする。一般に、以下の関係式は成立しないことに注意する。

$$h_{\text{average}} = \frac{1}{2}(h_{\text{max}} + h_{\text{min}})$$

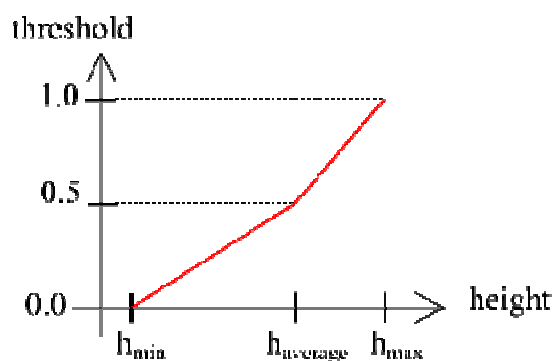


図 44 画像データの二値化における、高さとパラメータ値の対応

そこで、図 44 のように、高さとパラメータ値を対応させることにする。閾値 (threshold) を指定することにより、閾値より高さが大きい画素は白、高さが小さい画素は黒に、画像を変換する。

以下に、操作の手順を具体的に示す。なお、閾値は、0 以上 1 以下で、デフォルトで 0.5 が設定されている。

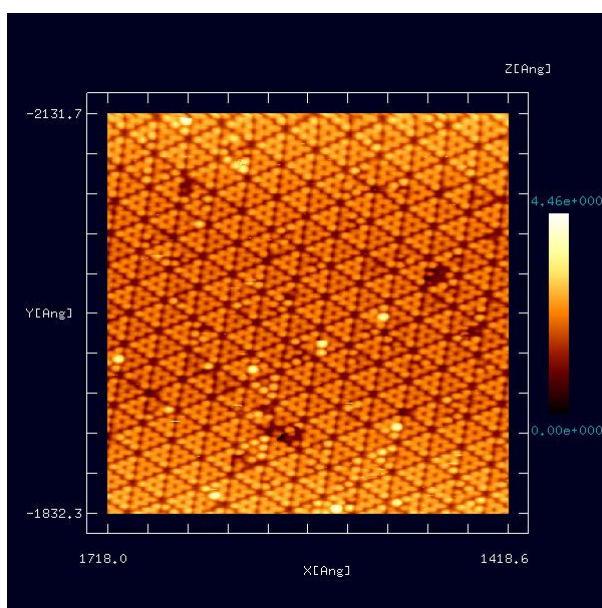


図 45 二値化される前の、オリジナル AFM 実測画像

図 45 は、白黒画像変換前のオリジナルな SPM 実験画像データとする。画像データは、Cube 形式であり、Analyzer 上で表示されているとする。(東京工业大学・大学院総合理工学研究科、材料物理学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供)

図 45 が表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて右クリックする。コンテキストメニューが現れるので、[Black and white] を選択する。[Threshold] を要求するウィンドウが現れるので、所望の閾値を代入する。

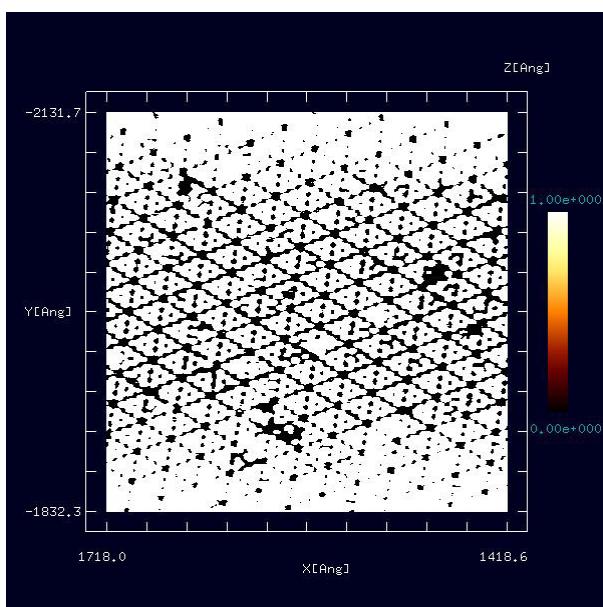


図 46 オリジナル画像に対して、閾値を 0.4 として二値化変換を行って得られた画像

図 46 は、オリジナル画像に対して、閾値を 0.4 として白黒画像変換を施したものを表している。

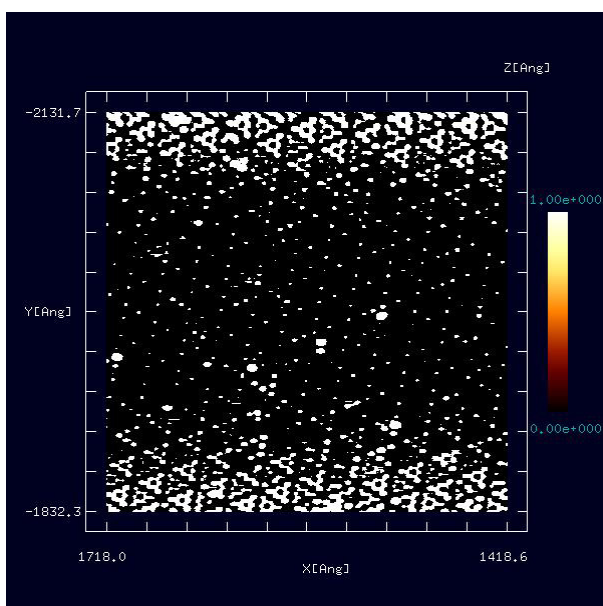


図 47 オリジナル画像に対して、閾値を 0.6 として二値化変換を行って得られた画像

図 47 は、オリジナル画像に対して、閾値を 0.6 として白黒画像変換を施したものを表している。

3.4.b コントラストの調整(ガンマ補正)

SPM 画像データに対して、コントラスト調整が行える。画素値の変換には、ガンマ補正と呼ばれる方法を採用している。その変換規則は次の通りである。まず、全画素の高さの最大値を h_{\max} 、高さの最小値を h_{\min} とする。ある画素において定義されている高さの値を h とする。ガンマ補正は、以下の式に従って、 h を h' に変換する。

$$h' = \left(\frac{h - h_{\min}}{\Delta h} \right)^{1/\gamma} \Delta h + h_{\min}$$

ただし、 $\Delta h = h_{\max} - h_{\min}$ 、また、 γ はユーザが与えるパラメータ値である。入力可能なパラメータ値の範囲は、 $0.25 \leq \gamma \leq 4$ に設定されており、デフォルト値は1.0である。

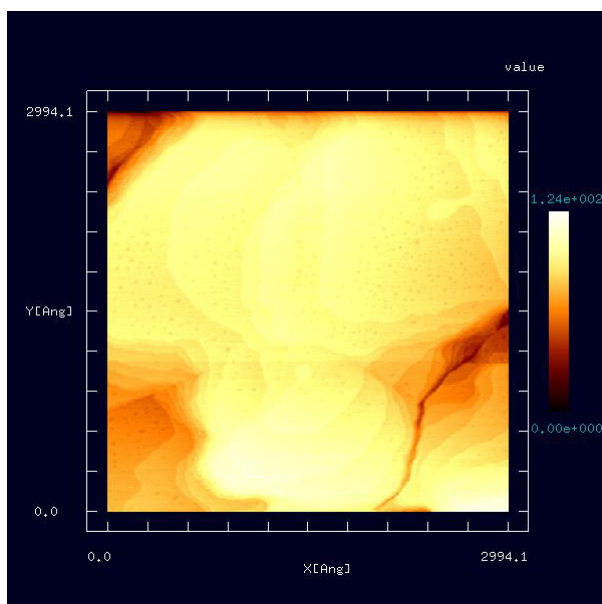


図 48 コントラスト調整前のオリジナルAFM実測画像

図 48 は、コントラスト調整前のオリジナルデータ画像を表しているとする。画像データは、Cube 形式であり、Analyzer 上で表示されているとする。(大阪大学・大学院基礎工学研究科、物質創成専攻、機能物質化学領域、表面・界面機能化学講座、福井賢一教授より提供)画像が全体的に明るく、そのため、細かな高低差が分かりにくくなっている。

図 48 が表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて右クリックする。コンテキストメニューが現れるので、[Contrast adjustment (Gamma correction)]を選択する。[Gamma]を要求するウィンドウが現れるので、所望のパラメータ値を代入する。

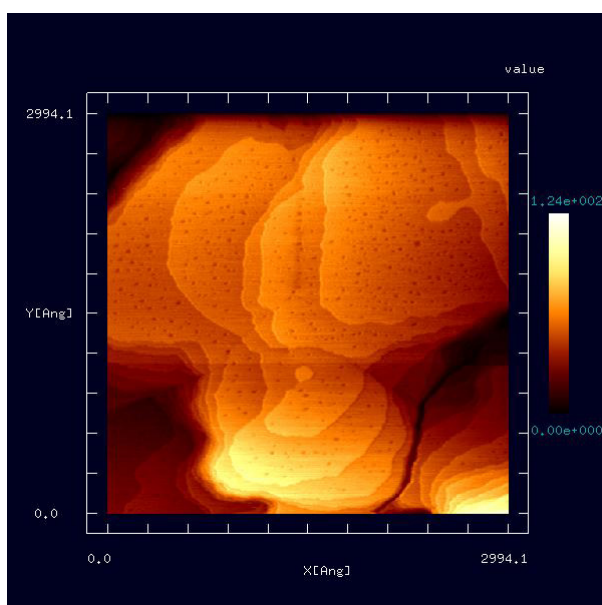


図 49 オリジナル画像に対して、 $\gamma = 0.33$ でコントラスト変換を施して得られた画像

図 49 は、図 48 のオリジナル画像に対して、 $\gamma = 0.33$ でコントラスト変換を施したものである。対象物の細かな高低差の構造が良く分かるように、画像が改善されている。

3.4.c エッジ抽出(Sobel フィルタ)処理

SPM 画像データに対して、エッジ抽出を行うことが可能である。

$h(-1,1)$	$h(0,1)$	$h(1,1)$
$h(-1,0)$	$h(0,0)$	$h(1,0)$
$h(-1,-1)$	$h(0,-1)$	$h(1,-1)$

エッジ抽出の原理は以下の通りである。図 50 は、2次元データ画像の中から、3×3個の画素を取り出したものを表している。画素 $h(0,0)$ の Sobel フィルタ処理とは以下の処理を指す。

図 50 2次元データ画像の中から、3×3個の画素を取り出した図

1	0	-1
2	0	-2
1	0	-1

画素 $h(0,0)$ を中心とした3×3個の画素に対して、図 51 に示された重みに従って和を取った値を x 方向の微分係数 f_x とする。

図 51 x 方向の微分係数を得るための重み

1	2	1
0	0	0
-1	-2	-1

画素 $h(0,0)$ を中心とした3×3個の画素に対して、図 52 に示された重みに従って和を取った値を y 方向の微分係数 f_y とする。

図 52 y 方向の微分係数を得るための重み

ここで、以下の量を計算する。

$$f' = (f_x^2 + f_y^2)^{1/2}$$

このようにして得られた微分係数 f' を、 $h(0,0)$ の値として新たに代入するのである。このような操作を全ての画素に対して行う。

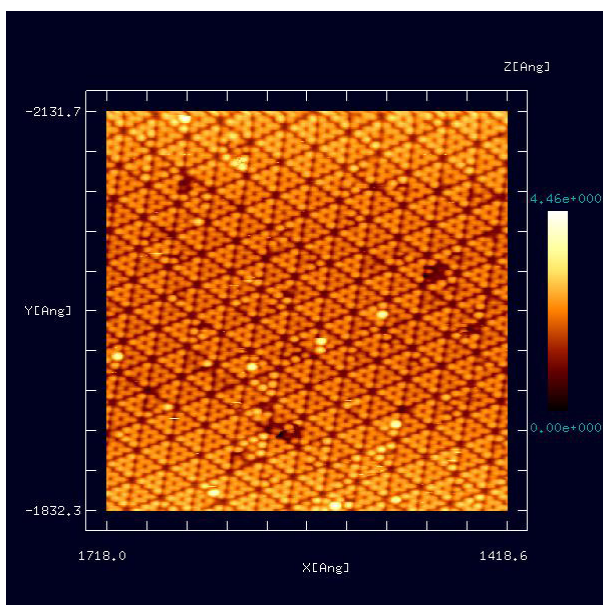


図 53 エッジ抽出前のオリジナル AFM 実測画像

図 53 は、エッジ抽出前のオリジナルデータ画像を表している。画像データは、Cube 形式であり、Analyzer 上で表示されているとする。(東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供)

図 53 が表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて右クリックする。コンテキストメニューが現れるので、[Edge detection (Sobel filter)]を選択する。

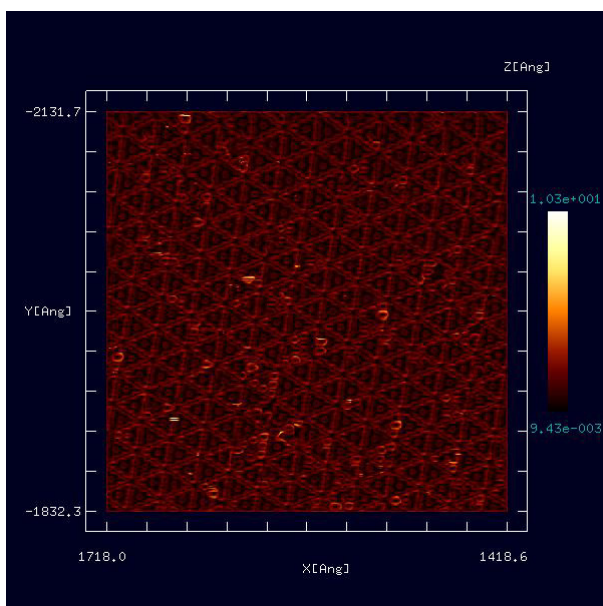


図 54 オリジナル AFM 画像に対してエッジ抽出を行って得られた画像

図 54 は、上のオリジナルデータ画像に対してエッジ抽出を行ったものである。画像が全体的に暗くなってしまったので、コントラスト調整することにする。

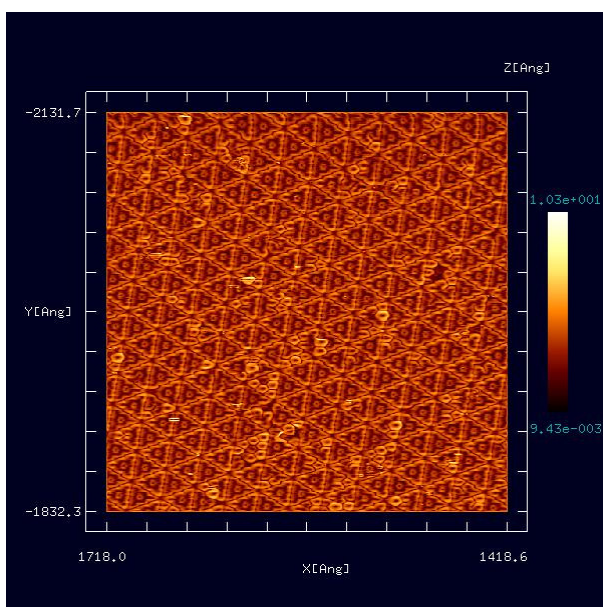


図 55 は、上のエッジ抽出を行った画像データに対して、 $\gamma=2.0$ でコントラスト変換を施した図である。エッジがより見易くなっている。

図 55 エッジ抽出を行った画像データに対して、 $\gamma=2.0$ でコントラスト変換を施して得られた画像

3.4.d ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能

データ画像に対して、ノイズ除去を行うことが可能である。

$h(-1,1)$	$h(0,1)$	$h(1,1)$
$h(-1,0)$	$h(0,0)$	$h(1,0)$
$h(-1,-1)$	$h(0,-1)$	$h(1,-1)$

図 56 2次元データ画像の中から、 3×3 個の画素を取り出す

ノイズ除去の原理は次の通りである。図 56 は、2次元データ画像の中から、 3×3 個の画素を取り出したものを表している。ここで、画素 $h(0,0)$ のメディアンフィルタ処理とは以下の処理を指す。画素 $h(0,0)$ に対して、縦横 3×3 の合計 9 個の画素の高さの値を、小さい値の順に並べて、その中央値、すなわち、前から 5 番目の値を、 $h(0,0)$ の値として新たに代入するのである。このような操作を全ての画素に対して行う。

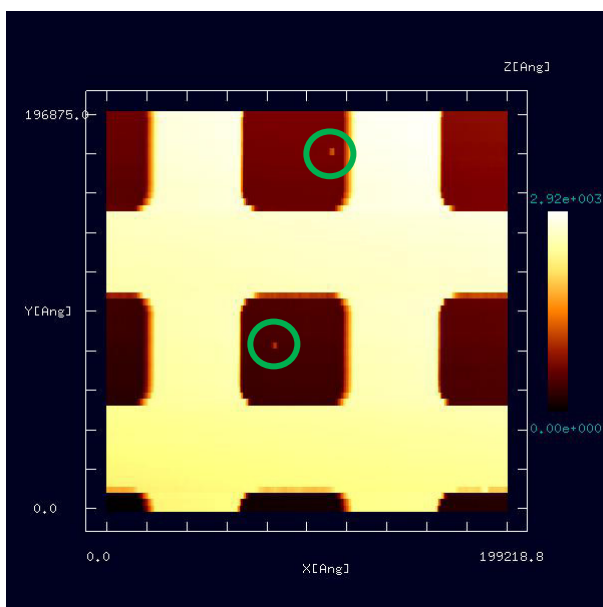


図 57 ノイズ除去前のオリジナル AFM 実測画像

図 57 は、ノイズ除去前のオリジナルデータを表している。画像データは、Cube 形式であり、Analyzer 上で表示されているとする。(東北大学・大学院理学研究科 物理学専攻、量子物性物理学講座、量子伝導物性分野、橋本克之助教より提供)緑の丸印で示した個所に、小さなノイズが有ることが分かる。

図 57 が表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて右クリックする。コンテキストメニューが現れるので、[Noise reduction (median filter)]を選択する。

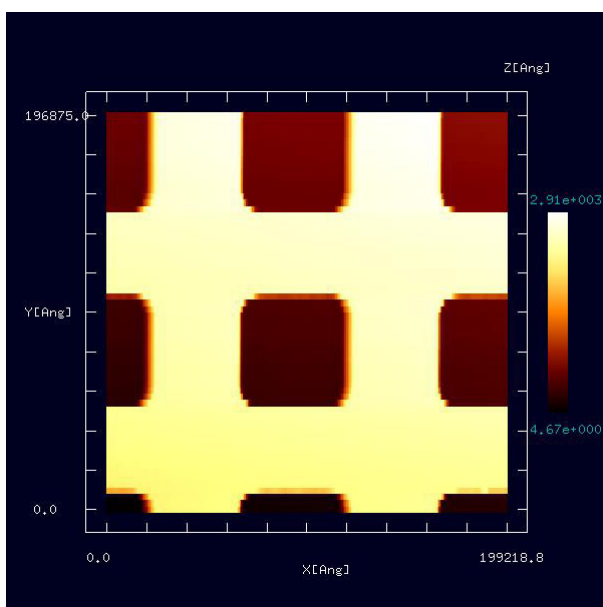


図 58 オリジナル AFM 画像に対してノイズ除去を行って得られた画像

図 58 は、図 57 のオリジナル画像データに対してノイズ除去を行ったものである。緑の丸印で表された箇所のノイズが取り除かれていることが分かる。

3.4.e 断面図の表示

SPM データ画像上で始点と終点の二つの点を指定して、二点を結ぶ線分での断面図を表示することが可能である。

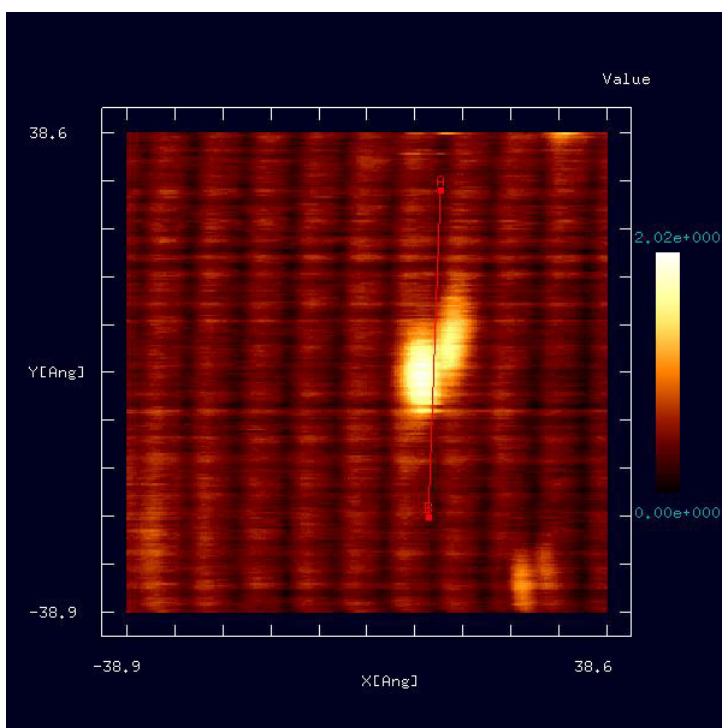


図 59 断面を指定する線分 AB が描かれた SPM 実験画像

図 59 は、SPM 実験画像データを表している。画像データは、Cube 形式であり、Analyzer 上で表示されているとする。(東京大学生産技術研究所、福谷研究室提供)この図を例にとって、断面図の表示の仕方を説明する。

まず、ウィンドウ上に示された図の上にカーソルを置いて、マウスをダブルクリックする。すると、図の上に点 A が指定される。次に、カーソルを移動させて、再びマウスをダブルクリックする。すると、図の上に点 B が指定され、線分 AB が表示される。

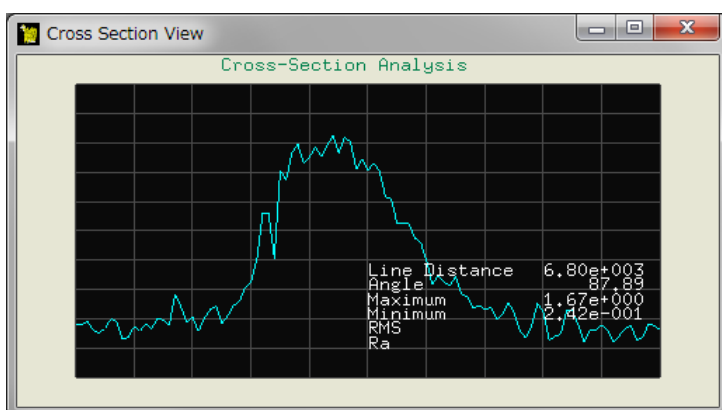


図 60 線分 AB による断面図

線分 AB が指定されると、図 60 が現れる。これは、線分 AB による断面図を表している。

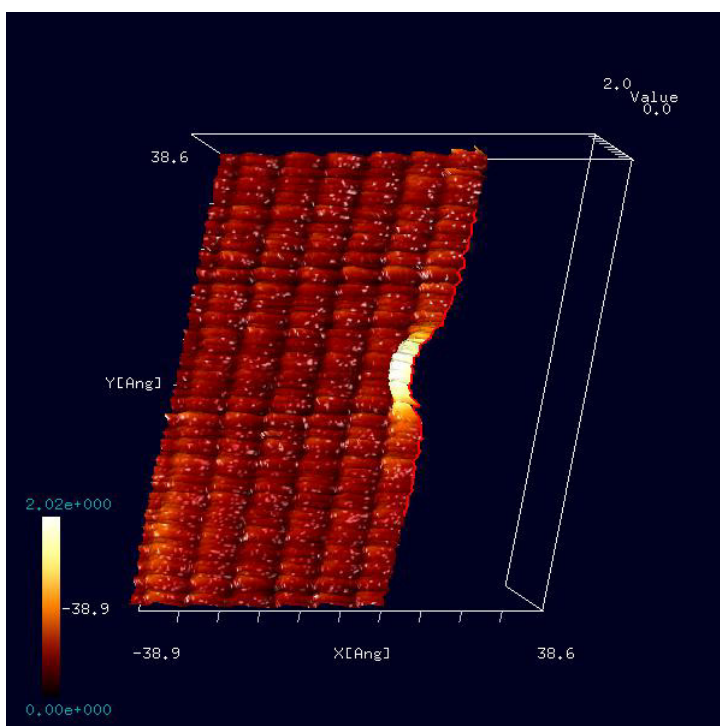


図 61 SPM 実験画像の立体的な断面図

さらに、SPM データ画像が表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて、マウスを右クリックして、コンテキストメニューの、[3D-View] および [Cross-Section (D-click)] → [Clipping] を選択すると、図 61 のような立体的な断面図が表示される。

3.4.f 三点で指定される角度の計測

SPM データ画像上において、三点 A, B, C を指定することにより、線分 AB、線分 BC の長さ、 $\angle ABC$ の角度を測定できる。

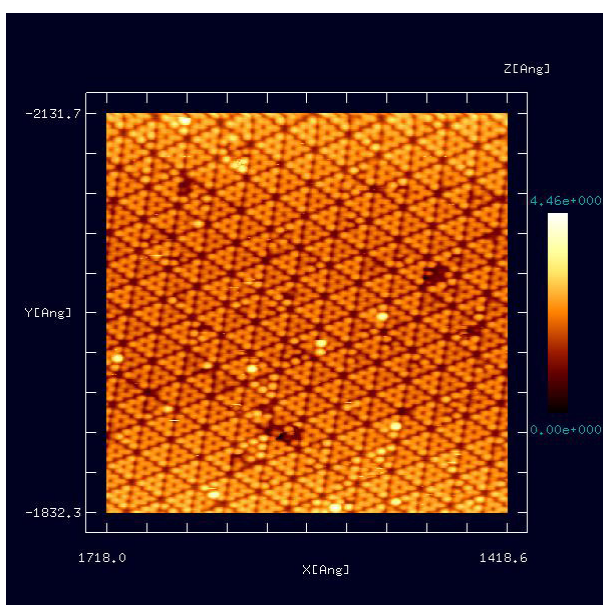


図 62 Si(111)-(7x7)DAS のオリジナル AFM 実測画像

図 62 に示される AFM 実験画像データを例として、三点 ABC の長さ及び角度の計測手順を具体的に説明する。画像データは、Cube 形式であり、Analyzer 上で表示されているとする。(東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供)

図 62 は、Si(111)-(7x7)DAS と呼ばれる構造を表している。このままでは見にくいので、エッジ抽出およびコントラスト調節($\gamma = 2.0$)を行う。さらに、マウスのホイールを使って画像を拡大、マウスを左クリックしながらドラッグすることにより画像を移動させて、左下の図を得たとする。

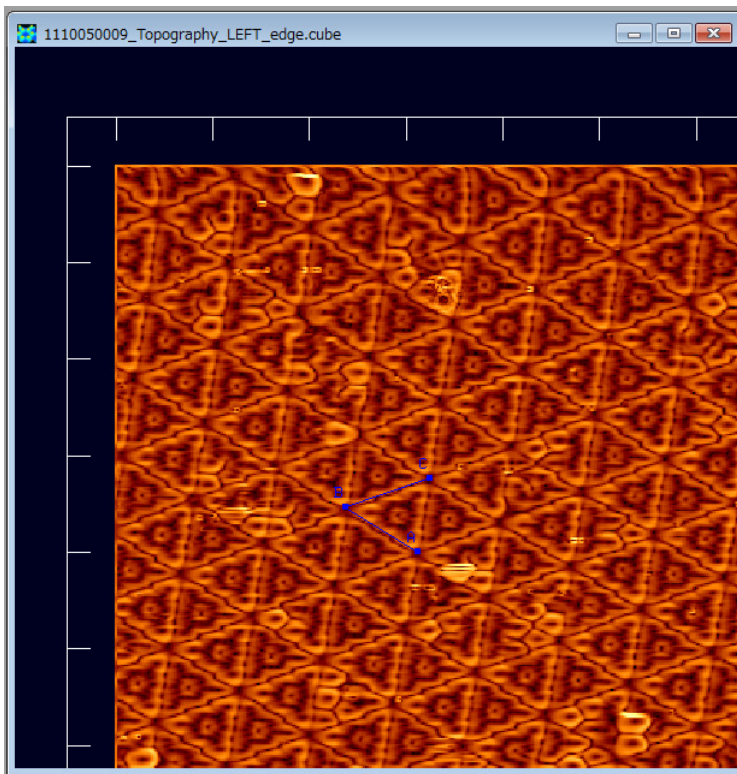


図 63 Si(111)-(7x7)DAS の AFM 画像データに対して、エッジ抽出およびコントラスト調節($\gamma = 2.0$)を行って得られた画像

図 63 の表示されているウィンドウ上にカーソルを置いて、マウスを左クリックするとコンテキストメニューが現れるので、[Measurement of lines and their angle]を選択する。図の上で、マウスをダブルクリックすることで、3点 A, B, C を指定する。線分 AB, BC が青い線で表示される。

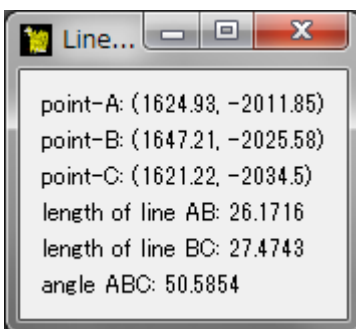


図 64 線分 AB、線分 BC の長さ、 $\angle ABC$ の角度の測定結果

この時、図 64 のような、測定結果を表示するウィンドウが現れる。今の場合、測定結果は、以下のように読める。

線分 AB: 長さ 26.1716 Å
 線分 BC: 長さ 26.4743 Å
 $\angle ABC$: 50.5854 度

3.5 Analyzer 使用法の実際

ここでは、Analyzer の使用方法の実際を紹介する。例として、Si(111)-(7x7)DAS の、GeoAFM によるシミュレーション画像と、AFM 実験画像の比較を行う。図 65 のように、Analyzer のウィンドウ上で、シミュレーション画像と実験画像を並べて表示する。(東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供)

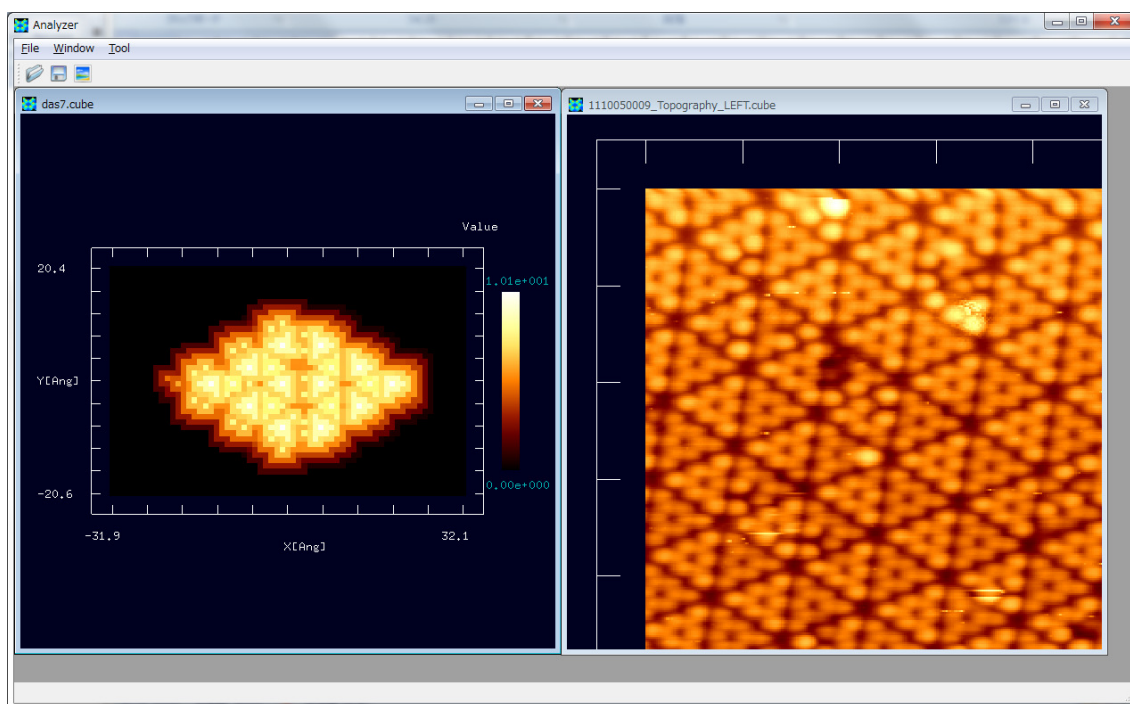


図 65 Si(111)-(7×7)DAS の、GeoAFM によるシミュレーション画像と、AFM 実測画像の比較

ただし、図 65 で表示されている AFM 実測画像は、マウスのホイールを使って拡大、マウスを左クリックしながらドラッグすることにより移動させて、得られたものである。

シミュレーション画像、実験画像、それぞれにおいて、Si(111)-(7×7)DAS 構造の辺の長さ、角度を、図 66 のように[Measurement of lines and their angle]によって測定して、比較してみる。

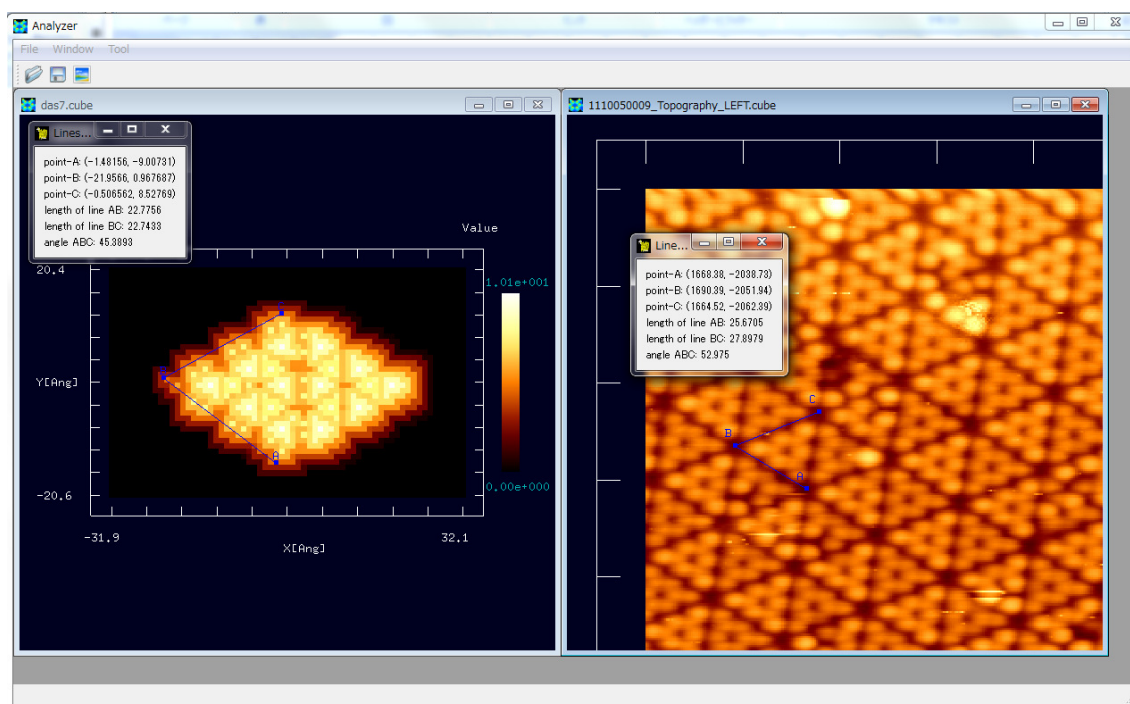


図 66 Si(111)-(7x7)DAS 構造の、シミュレーション画像、AFM 実測画像、それぞれにおいての、[Measurement of lines and their angle]による辺の長さ、角度の測定

GeoAFM シミュレーション画像では、以下の結果が得られる。

線分 AB: 長さ 22.7756 Å

線分 BC: 長さ 22.7433 Å

∠ABC: 45.3893 度

実験画像では、以下の結果が得られる。

線分 AB: 長さ 25.6705 Å

線分 BC: 長さ 27.8979 Å

∠ABC: 52.975 度

上記の結果を見ると、両者は比較的一致していると見なせる。

さらに、[Cross-Section (D-click)]を使った比較を試みる。図 67 のように、シミュレーション画像、実験データ画像の断面図の比較が可能となる。

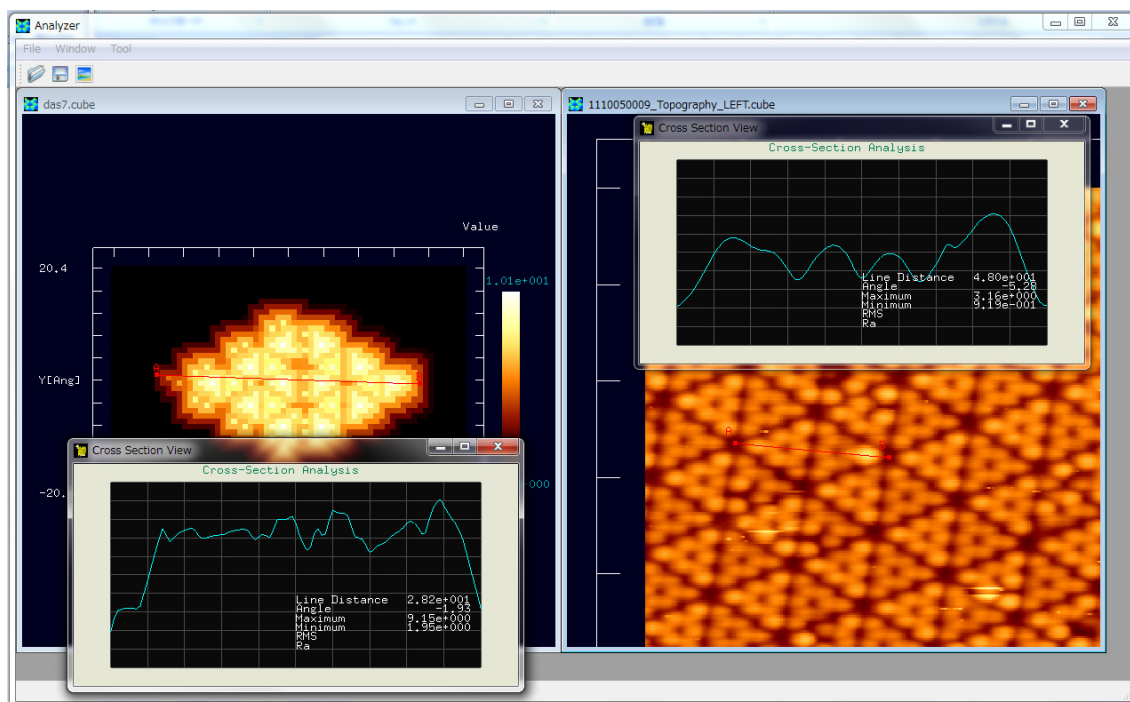


図 67 Si(111)-(7x7)DAS 構造の、シミュレーション画像、AFM 実測画像での、[Cross-Section (D-click)] を使った断面図の比較

このように、Analyzer を使えば、ユーザ自身のアイデアに従って、画像データのデジタル処理、実験・シミュレーション比較等の操作が手軽に行え、新しい知見を得る補助ツールとして役立てることができる。