

Геоморфометрическое моделирование нанорельефа по данным атомно-силовой микроскопии

Дедкова А.А.^{1,2}, Флоринский И.В.²

¹Национальный исследовательский университет «МИЭТ», 124498, Зеленоград, Москва, Россия

²Институт математических проблем биологии РАН – филиал Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 142290, Пушино, Московская обл., Россия

¹dedkova@ckp-miet.ru; ²iflor@mail.ru

В статье представлены результаты геоморфометрического моделирования нанорельефа поверхности по данным измерений методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). В качестве исходных данных использованы результаты измерений поверхности образца фотогальванической смеси РТВ7:РС₇₁ВМ. Размер анализируемой области сканирования образца 2 x 2 мкм; перепад высот 109 нм. Цифровая модель рельефа (ЦМР) образца включает 66049 точек (матрица 257 x 257); шаг сетки ЦМР 7.8 нм. Для геоморфометрического моделирования был применен универсальный спектрально-аналитический метод с использованием полиномов Чебышева и суммирования Фейера. Были рассчитаны цифровые модели 12-ти морфометрических величин, входящих в полную систему кривизн: горизонтальная, вертикальная, разностная, избыточная горизонтальная, избыточная вертикальная, аккумуляционная, кольцевая, минимальная, максимальная, средняя, Гауссова кривизны и несферичность, а также индексы изогнутости и формы. Геоморфометрическое моделирование и анализ нанорельефа поверхности, измеренной методом АСМ, позволяют выявлять тонкие неоднородности нанорельефа, которые не отображаются на картах исходных ЦМР.

Ключевые слова: геоморфометрия, атомно-силовая микроскопия, поверхность, рельеф, кривизна.

Geomorphometric Modeling of Nanotopography Using Data from Atomic Force Microscopy

Dedkova A.A.^{1,2}, Florinsky I.V.²

¹National Research University of Electronic Technology (MIET), Zelenograd, Moscow, 124498, Russia

²Institute of Mathematical Problems of Biology, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Pushchino, Moscow Region, 142290, Russia

The article presents results of geomorphometric modeling of the nanotopography based on measurements by atomic force microscopy (AFM). As initial data, we used measurements of the surface of a РТВ7:РС₇₁ВМ photovoltaic blend sample. The size of the analyzed scanning area of the sample was 2 x 2 μm; the elevation difference of the sample was 109 nm. A digital elevation model (DEM) of the sample included 66,049 points (a matrix 257 x 257); a DEM grid spacing was 7.8 nm. For geomorphometric modeling, we applied a universal spectral analytical method using Chebyshev polynomials and Fejér summation. We derived digital models and maps of twelve morphometric variables of the complete system of curvatures, such as: horizontal, vertical, difference, horizontal excess, vertical excess, accumulation, ring, minimum, maximum, mean, Gaussian curvatures and unsphericity, as well as curvedness and shape indices. Geomorphometric modeling and analysis of the nanotopography measured by AFM make it possible to reveal subtle nanotopographic inhomogeneities that are not displayed on the original DEM maps.

Key words: geomorphometry, atomic force microscopy, surface, topography, curvature.

1. Введение

Геоморфометрия – научная дисциплина с развитой физико-математической теорией и мощным аппаратом вычислительных методов,

предметом которой является математическое моделирование и анализ рельефа, а также взаимосвязей между ним и другими компонентами геосистем [1–4]. Исходными данными для моделирования являются цифровые модели рельефа

(ЦМР). Объектами моделирования обычно являются рельеф суши, подводный рельеф, рельеф поверхности ледников, подледный рельеф, рельеф врезанных территорий, а также рельеф стратиграфических горизонтов и геологических тел [5]. Эти негладкие объекты аппроксимируются топографической поверхностью, которой называется замкнутое ориентированное бесконечно дифференцируемое двумерное многообразие в трехмерном евклидовом пространстве [2, 5].

В настоящее время аппарат геоморфометрии широко применяется для решения различных разномасштабных задач геоморфологии, гидрологии, почвоведения, геоботаники, геологии, океанологии, климатологии, планетологии, археологии и других наук. Пространственное разрешение используемых ЦМР находится в широком диапазоне: от миллиметров и сантиметров до десятков и сотен метров и десятков километров. Международный опыт исследований в области геоморфометрии обобщен в серии аналитических обзоров и монографий [5–16].

Хотя геоморфометрия нашла наибольшее применение в науках о Земле, предметом ее изучения является моделирование и анализ рельефа вне зависимости от его происхождения и способов получения исходных данных о нем. В начале 21 века Ричард Пайк аргументировал возможность и целесообразность применения математического и методического аппарата геоморфометрии в промышленной метрологии для контроля обрабатываемой поверхности различных деталей и изделий [17].

В недавней серии наших работ была показана высокая перспективность использования геоморфометрического моделирования для анализа и метрологического контроля изделий микроэлектроники (кремниевых пластин, структур, мембран и пр.), то есть для анализа ЦМР поверхности изделий с микрометровым и нанометровым разрешением и амплитудой высот аналогичного порядка; ЦМР при этом создаются с помощью методов и оборудования оптической профилометрии [18–20].

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является известным, технологически развитым и популярным во многих областях методом получения количественной информации о нанорельефе поверхности образцов различных материалов [21–24]. Методы АСМ основаны на измерении силы взаимодействия микроиглы сканирующего зонда – кантилевера – с поверхностью образца. Кантилевер движется по поверхности образца и взаимодействует с атомами поверхности, а возникающая сила отклоняет кантилевер от нулевого положения. Величина отклонения измеряется и фиксируется прибором. Таким образом, по точкам строятся цифровые модели различных физических величин, характеризующих поверхность образца, в том числе – ЦМР.

При обработке ЦМР, получаемых в результате

измерений методом АСМ, иногда используются подходы, известные в моделировании рельефа, в частности – декомпозиция исходной поверхности на ее трендовую, низко- и высокочастотную составляющие и их отдельный анализ [25]. Вместе с тем, методы геоморфометрии, в основе которых лежит теория топографической поверхности в поле гравитации и аппарат дифференциальной геометрии [2, 4] для анализа результатов измерений методом АСМ до сих пор не применялись.

В данной статье нами представлены первые результаты изучения возможностей геоморфометрического моделирования нанорельефа поверхности, измеренной методом АСМ.

2. Материалы и методы

В качестве исходных данных нами были использованы результаты измерений поверхности образца фотоактивного слоя полимерного солнечного элемента на основе смеси производной политиофена РТВ7 и фуллерена PC₇₁BM – Poly({4,8-bis[(2-ethylhexyl)oxy]-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl}{3-fluoro-2-[(2-ethylhexyl)carbonyl]thieno [3,4-b]thiophenediyl}) и [6,6]-phenyl-C71-butyric acid methyl ester, соответственно [26, 27].

Измерения проводились с помощью сканирующего зондового микроскопа Solver Next (NT-MDT). Описание методики измерений приведено в статьях [26, 27].

Размер использованной для сканирования и геоморфометрического моделирования области образца составляет 2 x 2 мкм; перепад высот в пределах этой области – 109 нм. ЦМР исследуемой области образца включает 66049 точек (матрица 257 x 257); шаг сетки (разрешение) ЦМР составляет 7.8 нм. Карта нанорельефа фрагмента образца (карта высот) представлена на рис. 1.

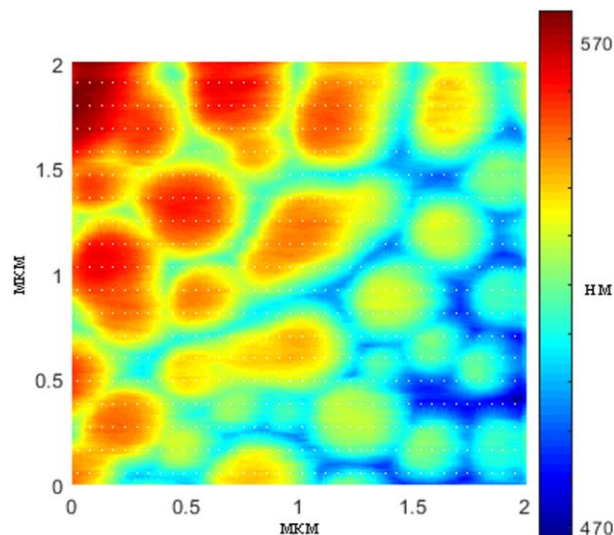


Рис. 1. Нанорельеф (высоты) поверхности образца.

Для геоморфометрического моделирования нами был применен универсальный спектрально-аналитический метод с использованием полиномов

Чебышева I рода и суммирования Фейера [28]. Метод предназначен для обработки регулярных ЦМР в рамках единой схемы, включающей глобальную аппроксимацию ЦМР, генерализацию и подавление шума в ЦМР, а также расчет морфометрических характеристик на основе аналитического вычисления частных производных. При моделировании использовались 50, 100 и 300 коэффициентов разложения исходной функции высоты по полиномам Чебышева.

Были рассчитаны цифровые модели и построены карты следующих двенадцати морфометрических величин, входящих в полную систему кривизн [2]:

горизонтальная кривизна, вертикальная кривизна, разностная кривизна, избыточная горизонтальная кривизна, избыточная вертикальная кривизна, аккумуляционная кривизна, кольцевая кривизна, минимальная кривизна, максимальная кривизна, средняя кривизна, Гауссова кривизна и несферичность (рис. 2–4). Кроме того, были рассчитаны модели и построены карты ряда других морфометрических величин, в частности – индексы изогнутости и формы (рис. 5, 6).

Определения, формулы, а также физико-математические интерпретации указанных морфометрических величин приводятся в публикациях [2–5].

Обработка данных осуществлена с помощью программы Matlab.

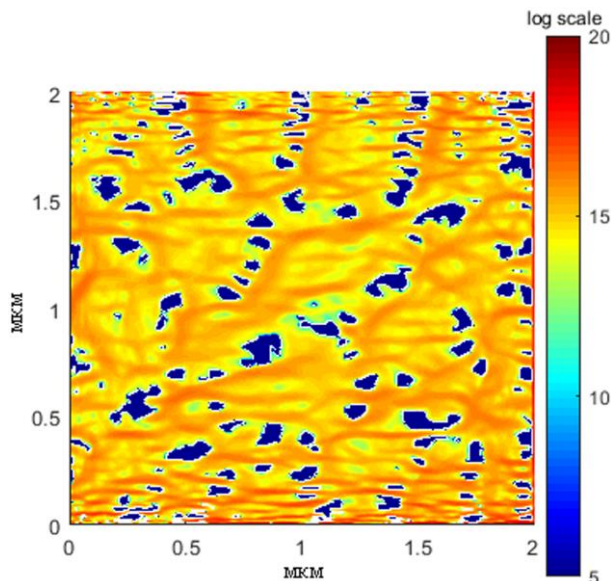


Рис. 2. Максимальная кривизна.

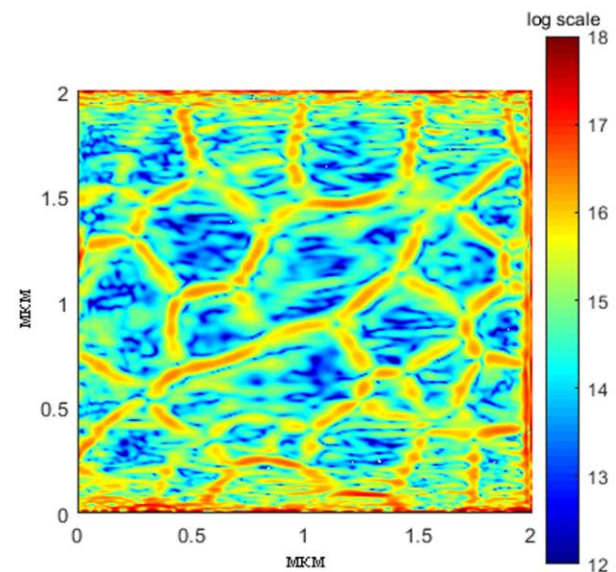


Рис. 4. Несферичность.

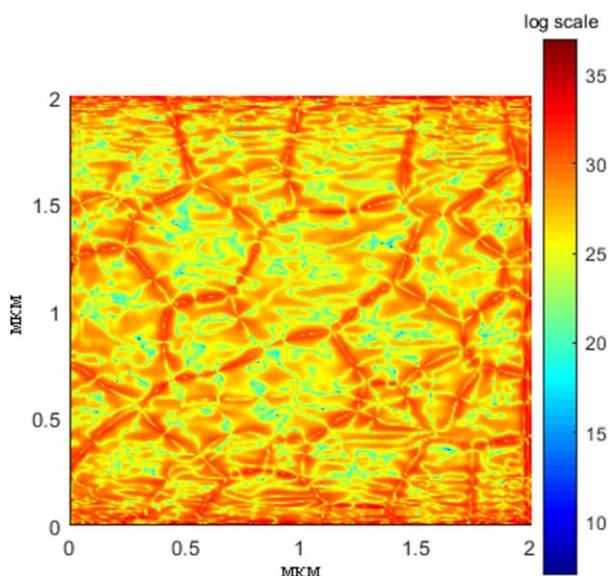


Рис. 3. Кольцевая кривизна.

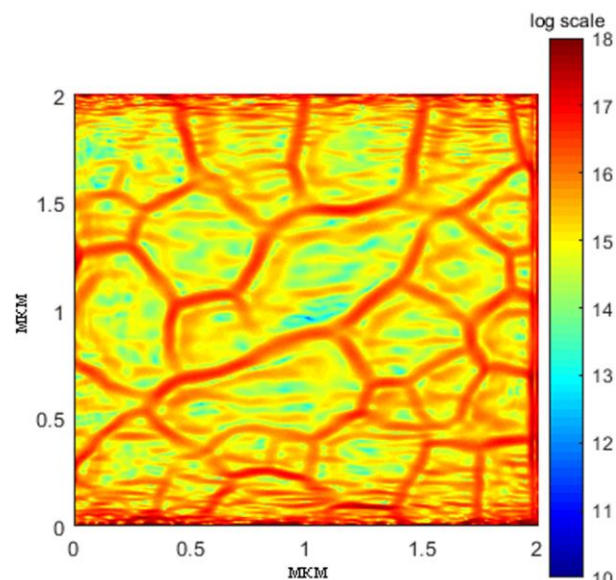


Рис. 5. Индекс изогнутости.

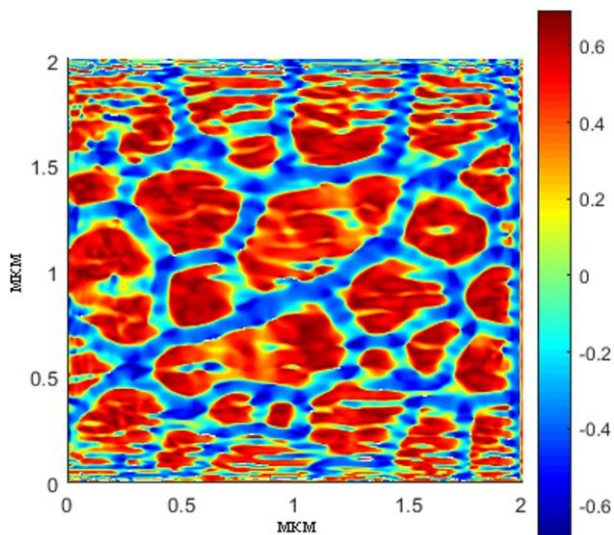


Рис. 6. Индекс формы.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2–6 представлены примеры карт рассчитанных морфометрических величин для исследуемого фрагмента образца для случая 100 коэффициентов разложения исходной функции высоты. Различные морфометрические величины отображают особенности нанорельефа образца по разному, в соответствии с физико-математическим смыслом той или иной величины [2–5].

Положительные значения максимальной кривизны (рис. 2) выделяют вытянутые выпуклые формы рельефа, а отрицательные значения – локальные вогнутые структуры.

Кольцевая кривизна (рис. 3) является мерой степени извилистости поверхностных потоков.

Несферичность (рис. 4) показывает, насколько форма элемента рельефа отклоняется от сферической.

Индекс изогнутости (рис. 5) определяет величину изгиба поверхности. Плоские участки имеют низкие значения индекса, а участки с резким изгибом имеют высокие его значения.

Индекс формы (рис. 6) является непрерывным выражением дискретной гауссовой классификации форм поверхности. Его положительные значения относятся к выпуклым формам рельефа, а отрицательные — к вогнутым формам рельефа; его абсолютные значения от 0,5 до 1 соответствуют эллиптическим поверхностям (холмы и замкнутые впадины), а от 0 до 0,5 — гиперболическим (седла).

Общей характеристикой полученных морфометрических карт является тот факт, что на них удается отобразить тонкие детали нанорельефа поверхности образца, которые не читаются на карте высот (рис. 1). Это связано, в том числе, с высокой чувствительностью частных производных высоты (которые используются для расчета значительной части морфометрических величин) к незначительным изменениям значений функции высоты. В результате мелкие детали, незаметные на карте высот, выявляются на картах кривизн и

морфометрических индексов. Это может быть полезно как для уточнения геометрии наноструктур поверхности образцов и детального анализа неоднородностей нанорельефа, так и для анализа иных физических характеристик поверхности.

Разнообразие механизмов взаимодействия зонда и образца определяет широкий спектр возможностей сканирующей зондовой микроскопии: контактный, полуконтактный и бесконтактный режимы АСМ, сканирующая емкостная микроскопия, магнитная силовая микроскопия и др. Например, используя намагниченный кантилевер, можно определить силу его взаимодействия с магнитным полем образца и построить карту распределения магнитных доменов на поверхности. Мы полагаем, что применение методов геоморфометрии может быть перспективно для тонкого анализа моделей такого типа.

В статье [29] отмечено, что смесь РТВ7:РС₇₁ВМ активно изучалась различными методами, и ее структура в целом достаточно хорошо изучена. Мы полагаем, что геоморфометрическое моделирование в перспективе может дополнить существующие знания как об этой полимерной смеси, так и об иных исследуемых методами АСМ структурах.

4. Заключение

Предложен подход геоморфометрического анализа нанорельефа поверхности, измеренной методом АСМ. Подход апробирован на фотоактивной структуре РТВ7:РС₇₁ВМ. Подход позволяет выявлять тонкие неоднородности нанорельефа, которые не всегда отображаются на картах исходных ЦМР, а также уточнять геометрию наноструктур поверхности изучаемых образцов.

Математический и методический аппарат геоморфометрии перспективен для детального анализа неоднородностей нанорельефа поверхности, так как рассчитываемые морфометрические величины имеют ясный физический смысл и могут быть относительно легко интерпретированы.

5. Благодарности

Авторы признательны А.М. Алексееву (Национальная лаборатория Астана, Назарбаев Университет, Астана, Казахстан) за предоставленные данные измерений методом АСМ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 22-21-00614.

6. Список литературы

1. Evans I.S. General geomorphometry, derivatives of altitude, and descriptive statistics. *Spatial Analysis in Geomorphology*. London: Methuen, 1972. P. 17–90. doi: [10.4324/9780429273346-2](https://doi.org/10.4324/9780429273346-2)
2. Shary P.A. Land surface in gravity points classification by a complete system of curvatures. *Mathematical Geology*. 1995. V. 27. No. 3. P. 373–390. doi: [10.1007/BF02084608](https://doi.org/10.1007/BF02084608)
3. Shary P.A., Sharaya L.S., Mitusov A.V.

- Fundamental quantitative methods of land surface analysis. *Geoderma*. 2002. V. 107. No. 1–2. P. 1–32. doi: [10.1016/S0016-7061\(01\)00136-7](https://doi.org/10.1016/S0016-7061(01)00136-7)
4. Florinsky I.V. An illustrated introduction to general geomorphometry. *Progress in Physical Geography*. 2017. V. 41. No. 6. P. 723–752. doi: [10.1177/0309133317733667](https://doi.org/10.1177/0309133317733667)
 5. Florinsky I.V. *Digital Terrain Analysis in Soil Science and Geology*. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier / Academic Press, 2016. 486 p.
 6. Moore I.D., Grayson R.B., Ladson A.R. Digital terrain modelling: a review of hydrological, geomorphological and biological applications. *Hydrological Processes*. 1991. V. 5. No. 1. P. 3–30. doi: [10.1002/hyp.3360050103](https://doi.org/10.1002/hyp.3360050103)
 7. Pike R.J. Geomorphometry – diversity in quantitative surface analysis. *Progress in Physical Geography*. 2000. V. 24. No. 1. P. 1–20. doi: [10.1177/030913330002400101](https://doi.org/10.1177/030913330002400101)
 8. *Terrain Analysis: Principles and Applications*. Eds. Wilson J.P., Gallant J.C. New York: Wiley, 2000. 479 p.
 9. Li Z., Zhu Q., Gold C. *Digital Terrain Modeling: Principles and Methodology*. New York: CRC Press, 2005. 323 p.
 10. Deng Y. New trends in digital terrain analysis: landform definition, representation, and classification. *Progress in Physical Geography*. 2007. V. 31. No. 4. P. 405–419. doi: [10.1177/0309133307081291](https://doi.org/10.1177/0309133307081291)
 11. *Geomorphometry: Concepts, Software, Applications*. Eds. Hengl T., Reuter H.I. Amsterdam: Elsevier, 2009. 765 p.
 12. Wilson J.P. Digital terrain modeling. *Geomorphology*. 2012. V. 137. No. 1. P. 107–121. doi: [10.1016/j.geomorph.2011.03.012](https://doi.org/10.1016/j.geomorph.2011.03.012)
 13. Minár J., Krcho J., Evans I.S. Geomorphometry: quantitative land-surface analysis. *Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences*. Amsterdam: Elsevier, 2016. doi: [10.1016/B978-0-12-409548-9.10260-X](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409548-9.10260-X)
 14. Lv G., Xiong L., Chen M., Tang G., Sheng Y., Liu X., Song Z., Lu Y., Yu Z., Zhang K., Wang M. Chinese progress in geomorphometry. *Journal of Geographical Sciences*. 2017. V. 27. No. 11. P. 1389–1412. doi: [10.1007/s11442-017-1442-0](https://doi.org/10.1007/s11442-017-1442-0)
 15. Wilson J.P. *Environmental Applications of Digital Terrain Modeling*. Chichester: Wiley-Blackwell, 2018. 360 p.
 16. Флоринский И.В. Геоморфометрия сегодня. *ИнтерКарто. ИнтерГИС*. 2021. Т. 27. № 2. С. 394–448. doi: [10.35595/2414-9179-2021-2-27-394-448](https://doi.org/10.35595/2414-9179-2021-2-27-394-448)
 17. Pike R.J. Digital terrain modeling and industrial surface metrology: converging realms. *Professional Geographer*. 2001. V. 53. No. 2. P. 263–274. doi: [10.1111/0033-0124.00284](https://doi.org/10.1111/0033-0124.00284)
 18. Дедкова А.А., Флоринский И.В., Дюжев Н.А. Подходы к определению кривизны пластин по рельефу их поверхности. *Успехи физических наук*. 2022. Т. 192. № 7. С. 754–771. doi: [10.3367/UFNr.2021.10.039076](https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.10.039076)
 19. Дедкова А.А., Флоринский И.В., Дюжев Н.А. Методика исследования изменения формы пластин и тонкопленочных мембран с использованием геоморфометрических подходов. *Журнал технической физики*. 2022. Т. 92. Вып. 8. С. 1113–1123. doi: [10.21883/JTF.2022.08.52771.101-22](https://doi.org/10.21883/JTF.2022.08.52771.101-22)
 20. Дедкова А.А., Флоринский И.В., Гусев Е.Э., Дюжев Н.А., Фомичев М.Ю., Штерн М.Ю. Методика анализа объемных дефектов по цифровой модели рельефа поверхности. *Дефектоскопия*. 2021. № 11. С. 41–48. doi: [10.31857/S0130308221110051](https://doi.org/10.31857/S0130308221110051)
 21. Binning G., Quate C.F., Gerber Ch. Atomic force microscope. *Physical Review Letters*. 1986. V. 56. No. 9. P. 930–933. doi: [10.1103/PhysRevLett.56.930](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.930)
 22. Meyer E. Atomic force microscopy. *Progress in Surface Science*. 1992. V. 41. No. 1. P. 3–49. doi: [10.1016/0079-6816\(92\)90009-7](https://doi.org/10.1016/0079-6816(92)90009-7)
 23. Giessibl F. Advances in atomic force microscopy. *Reviews of Modern Physics*. 2003. V. 75. No. 3. P. 949–983. doi: [10.1103/RevModPhys.75.949](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.949)
 24. Eaton P., West P. *Atomic Force Microscopy*. Oxford: Oxford University Press, 2010. 248 p.
 25. Ужегова Н.И., Свистков А.Л. Многоуровневый анализ рельефа поверхности образца, полученного методами атомно-силовой микроскопии. *Вычислительная механика сплошных сред*. 2016. Т. 9. № 3. С. 366–374. doi: [10.7242/1999-6691/2016.9.3.30](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2016.9.3.30)
 26. Alekseev A., Hedley G.J., Al-Afeef A., Ageev O.A., Samuel I.D.W. Morphology and local electrical properties of PTB7:PC₇₁BM blends. *Journal of Materials Chemistry A*. 2015. V. 3. P. 8706–8714. doi: [10.1039/C5TA01224D](https://doi.org/10.1039/C5TA01224D)
 27. Hedley G.J., Ward A.J., Alekseev A., Howells C.T., Martins E.R., Serrano L.A., Cooke G., Ruseckas A., Samuel I.D.W. Determining the optimum morphology in high-performance polymer-fullerene organic photovoltaic cells. *Nature Communications*. 2013. V. 4. # 2867. doi: [10.1038/ncomms3867](https://doi.org/10.1038/ncomms3867)
 28. Florinsky I.V., Pankratov A.N. A universal spectral analytical method for digital terrain modeling. *International Journal of Geographical Information Science*. 2016. V. 30. No. 12. P. 2506–2528. doi: [10.1080/13658816.2016.1188932](https://doi.org/10.1080/13658816.2016.1188932)
 29. Алексеев А.М., Ал-Афеэф А., Хедли Г.Д., Харинцев С.С., Ефимов А.Е., Едрисов А.Т., Дюжев Н.А., Самуэль И.Д.В. Исследование структуры объемного гетероперехода в полимерных солнечных элементах с помощью комбинации ультрамикротомирования и атомно-силовой микроскопии. *Физика и техника полупроводников*. 2018. Т. 52. № 1. С. 110–117. doi: [10.21883/FTP.2018.01.45328.8545](https://doi.org/10.21883/FTP.2018.01.45328.8545)