

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

DIPLOMOVÁ PRÁCE



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ

INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

**KALIBRACE A INTERPRETACE OBRAZOVÝCH DAT
MĚŘENÝCH ZAŘÍZENÍM LEEM**

CALIBRATION AND INTERPRETATION OF IMAGES MEASURED BY LEEM

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. ZDENĚK ENDSTRASSER

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. JAN ČECHAL, Ph.D.

BRNO 2021

Zadaní diplomové práce

Ústav: Ústav fyzikálního inženýrství
Student: **Bc. Zdeněk Endstrasser**
Studijní program: Fyzikální inženýrství a nanotechnologie
Studijní obor: bez specializace
Vedoucí práce: **doc. Ing. Jan Čechal, Ph.D.**
Akademický rok: 2020/21

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Kalibrace a interpretace obrazových dat měřených zařízením LEEM

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Nízkoenergieová elektronová mikroskopie (LEEM) a difrakce (LEED) jsou metody studia povrchů, které umožňují jejich zobrazování a určování struktury v reálném čase, např. v průběhu depozice, expozice plynem či žíhání. Ke kvantitativní interpretaci dat je třeba pečlivé sesazení a korekce obou metod. Cílem práce je vytvořit software na korekci a snadnou interpretaci videosekvencí, s jehož pomocí budou vyhodnoceny časové série měření získané metodou LEEM.

Cíle diplomové práce:

- (1) Stručně popište metodu LEEM a studované dynamické jevy na površích.
- (2) Navrhněte metodologii kalibrace sekvence obrazců.
- (3) Vytvořte software pro korekci obrazových sekvencí.
- (4) Vyhodnoťte daná experimentální data.

Seznam doporučené literatury:

OURA, K. , LIFSHITS, V.G., SARANIN, A.A., ZOTOV, A.V., KATAYAMA, M. Surface science, An Introduction. Heidelberg: Springer, 2004.

ATKINS, P., de PAULA, J., KEELER, J. Atkin's Physical Chemistry, 11th edition, New York: Oxford University Press, 2018.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2020/21

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Tomáš Šíkola, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Tato práce se zabývá vývojem softwaru určeného ke kalibraci a interpretaci obrazových dat měřených zařízením LEEM. Vzhledem k tomu, že je tato zobrazovací metoda vhodná zejména pro in-situ studie dynamických procesů probíhajících na površích, je pozornost věnována zejména metodám umožňujícím vyhodnocení časových sérií měření. Pro kompenzaci teplotního posunu mezi po sobě jdoucími snímky je navržena metoda fázové korelace založená na Fourierově transformaci obrazů. Dále jsou popsány metody filtrace aditivního a impulsního šumu, vizualizace obrazu, filtrace sekundárních elektronů a stanovení I-V křivek ze změřených obrazových dat. Implementované metody jsou popsány nejen z hlediska jejich matematického původu, ale důraz je kladen rovněž na odhalení kritických aspektů spojených s jejich použitím. Obsahem práce je rovněž aplikace vytvořeného algoritmu na obrazová data zachycující prostorový a časový vývoj povrchových fází 4,4'-bifenyl-dikarboxylové kyseliny indukovaných žíháním vzorku. Na základě těchto vyhodnocení je poté stanoven vhodný postup pro provedení přesné detekce a kompenzace zmíněného teplotního posunu.

Summary

This thesis deals with the software development to calibration and interpretation of image data measured by a LEEM device. As the imaging technique is uniquely suited for in-situ studies of surface dynamical processes, the attention is mainly paid to methods enabling the evaluation of measurement time series. The phase correlation method based on Fourier transform of images is proposed to temperature shift correction between consecutive frames. The thesis describes the methods of additive and impulse noise filtering, image visualization, the filtration of secondary electrons and the determination of I-V curves from measured image data. Implemented methods are described not only in terms of their mathematical origin, but also with emphasis on the revealing of critical aspects associated with their use. The thesis also focuses on the application of the created algorithm to image data capturing the spatial and temporal evolution of 4,4'-biphenyl-dicarboxylic acid surface phases induced by sample annealing. Based on these evaluations, a suitable procedure is then determined to perform accurate detection and compensation of temperature shift said.

Klíčová slova

Analýza obrazu, fázová korelace, korekce posunu, LEEM, LEED, in-situ měření.

Keywords

Image analysis, phase correlation, shift correction, LEEM, LEED, in-situ measurement.

ENDSTRASSER, Z. *Kalibrace a interpretace obrazových dat měřených zařízením LEEM*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2021. 49 s. Vedoucí práce doc. Ing. Jan Čechal, Ph.D..

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a veškeré podklady, ze kterých jsem čerpal, jsou uvedeny v seznamu použité literatury.

Bc. Zdeněk Endstrasser

Na tomto místě bych rád poděkoval svému vedoucímu panu doc. Ing. Janu Čechalovi, Ph.D. za cenné rady, vstřícnost a pozitivní přístup, kterým dopomohl k vypracování této práce. Dále chci poděkovat panu Ing. Pavlu Procházkovi, Ph.D. za jeho čas a pomoc při vytváření programu. V neposlední řadě ze srdce děkuji své rodině za podporu, lásku a porozumění, jimiž mě provází nejen mým studijním životem.

Tato práce byla provedena za podpory výzkumné infrastruktury CzechNanoLab (ID LM2018110, MŠMT, 2020–2022), CEITEC Vysoké učení technické v Brně.

Bc. Zdeněk Endstrasser

Obsah

1	Úvod	3
2	Nízkoenergieová elektronová mikroskopie	5
2.1	Experimentální zařízení	5
2.2	Difrakce nízkoenergieových elektronů	7
2.3	Teorie vzniku obrazu	8
2.3.1	Interakce pomalých elektronů s materiálem	8
2.3.2	Kontrastní mechanismy	11
2.3.3	Rozlišení	12
3	Návrh softwaru pro kalibraci a interpretaci obrazových dat LEEM	15
3.1	Metody pro zpracování obrazových dat	16
3.1.1	Fourierova transformace a konvoluce	16
3.1.2	Filtrace šumu	18
3.1.3	„Image Sharpening“	24
3.1.4	Korekce posunu snímků ve videosekvenci	25
3.2	Metody pro analýzu obrazových dat	29
3.2.1	Měření I-V křivek	29
4	Vyhodnocení dat	33
4.1	Studované dynamické procesy	33
4.2	Proces vyhodnocení dat	34
5	Diskuze	39
6	Závěr	41
7	Seznam použitých zkratk a symbolů	47

1. Úvod

Nízkoenergieová elektronová mikroskopie patří mezi relativně nové, avšak velmi nadějně metody zobrazení povrchů. Na rozdíl od konvenčních elektronových mikroskopů využívá pro ozáření vzorků elektrony o velmi nízké energii. Důsledkem toho vykazuje velkou povrchovou citlivost, a jelikož elektrony mají vlnovou délku splňující podmínky pro difrakci na atomech, je možná snadná kombinace s nízkoenergieovou elektronovou difrakcí. Tato technika však vyniká zejména rychlostí pořízení obrazu, díky níž je unikátně vhodná pro zobrazování a určování struktury v reálném čase, např. v průběhu růstu vrstev, žíhání apod.

Jednou z velkých nevýhod této metody je však skutečnost, že zatímco samotné měření je velmi rychlé a efektivní, proces vyhodnocení získaných experimentálních dat je zdoluhavý a mnohdy velmi komplikovaný. Pro analýzu dat jsou zpravidla používány volně dostupné softwary, které však nejsou vyvinuty specificky pro tuto metodu, a neobsahují tak funkce potřebné pro řešení konkrétních problémů spojených s jejím použitím. Mezi nejvážnější problémy patří zejména vzájemný posun, k němuž dochází mezi jednotlivými snímky videosekvencí, které zachycují dynamické jevy probíhající na studovaném povrchu. Bez pečlivého sesazení těchto snímků jsou možnosti provedení korektní kvantitativní analýzy jen velmi omezené.

V této diplomové práci se proto zaměříme na vývoj softwaru určeného ke korekci a interpretaci obrazových dat získaných metodou LEEM. Důraz přitom bude kladen zejména na implementaci funkcí, které umožní odstranění (popř. alespoň potlačení) nežádoucích artefaktů znemožňujících vyhodnocení měření. Mezi ně patří zejména metody filtrace šumu, jenž je přítomný v každém obraze, dále metody vizualizace umožňující zlepšit kontrast obrazu a v neposlední řadě metoda kompenzace již zmíněného posunu snímků. Z analytických funkcí se pak budeme zabývat zejména stanovením I-V křivek z obrazových dat.

Úvodní kapitola bude věnována metodám LEEM a LEED. Stručně se zde pokusíme vyložit vývoj těchto technik, experimentální aparaturu, procesy difrakce a interakce pomalých elektronů s pevnou látkou a zejména mechanismy vedoucí ke vzniku kontrastu v obraze.

Převážná část této práce však bude orientována na detailní popis námi navrženého algoritmu. Zaměříme se přitom nejen na pochopení matematického pozadí implementovaných funkcí, ale rovněž na možnosti jejich použití a na odhalení jejich eventuálních nedostatků a omezení. Případný budoucí uživatel tak získá základní představu o vlastnostech těchto metod a situacích, kdy jsou užitečné.

Popsaný software bude následně použit pro vyhodnocení časových sérií měření získaných metodou LEEM. Na základě vyhodnocení reprezentativní sady experimentálních dat pak budou stanoveny nejvhodnější postupy pro provedení korekce videosekvencí.

Závěrem se pokusíme dosažené výsledky zhodnotit a nastínit budoucí vývoj a využití předloženého programu.

2. Nízkoenergieová elektronová mikroskopie

Nízkoenergieová elektronová mikroskopie (Low Energy Electron Microscopy – LEEM) je v současnosti jednou z nejperspektivnějších metod povrchového zobrazení. Tato technika je založena na vlnové povaze částic a k tvorbě obrazu využívá elektrony elasticky odražené od povrchu. Oproti konvenčním elektronovým mikroskopům se však liší zejména tím, že při interakci se vzorkem mají elektrony velmi nízkou energii v rozsahu 0–100 eV. Výsledkem je značná povrchová citlivost metody, přičemž hloubka průniku může být snadno laděna změnou energie primárního svazku.

Myšlenka použít k zobrazení povrchu vzorku elektrony o nízké energii se objevila již na konci 20. let minulého století, kdy bylo objeveno, že pomalé elektrony jsou po dopadu na krystalickou látku difraktovány podobně jako rentgenové záření [1]. Ve své době se jednalo o významný objev v oblasti fyziky volných elektronů, který potvrzoval deBroglieho teorii o vlnové povaze částic (elektronů). Vlnově-optický popis byl pak do teorie formování obrazu zaveden ve 30. letech [2], i když v souvislosti s rozvojem jiné experimentální techniky – transmisní elektronové mikroskopie. Již v roce 1933 však bylo ukázáno, že zobrazování je možné také elektronovým bombardováním povrchu [3]. Při tomto experimentu byly navíc použity elektrony o velmi nízké energii (20 eV), a kontrast v získaném obrazu byl tak způsoben rozdílnou odrazivostí materiálů vzorku (stejně jako je tomu u dnešních nízkoenergieových mikroskopů).

S rozvojem fyziky povrchů se stále více zvyšovaly požadavky na vakuovou techniku. Skleněné vakuové komory z raných studií byly v průběhu 60. let nahrazovány celokovovými systémy vybavenými různými typy vakuových vývěv umožňujících dosáhnout podmínek velmi vysokého vakua (UHV). Díky tomu bylo zabráněno rychlé kontaminaci vzorku, k níž docházelo v důsledku vysokého tlaku zbytkového plynu.

Požadavky UHV nakonec vedly k novému vývoji v oblasti povrchového zobrazování s pomalými elektrony, který započal Ernst Bauer v roce 1962 [4]. První konstrukce nízkoenergieového elektronového mikroskopu poskytující kvalitní obraz nicméně pochází až z poloviny 80. let [5, 6]. V průběhu posledního desetiletí 20. století došlo v oblasti technologie LEEM k prudkému rozvoji, který zahrnoval např. implementaci spinově polarizovaného zdroje [7] nebo snahy o zlepšení rozlišení [8].

Dnes jsou přístroje LEEM často kombinovány s dalšími analytickými technikami, jako je zrcadlová elektronová mikroskopie (MEM) nebo fotoemisní elektronová mikroskopie (PEEM), a aberačně korigované přístroje jsou schopné dosáhnout rozlišení, které se blíží teoretickému limitu [9]. Nové vývojové trendy v této oblasti pak zahrnují např. kryogenní LEEM využívající chlazení heliem [10].

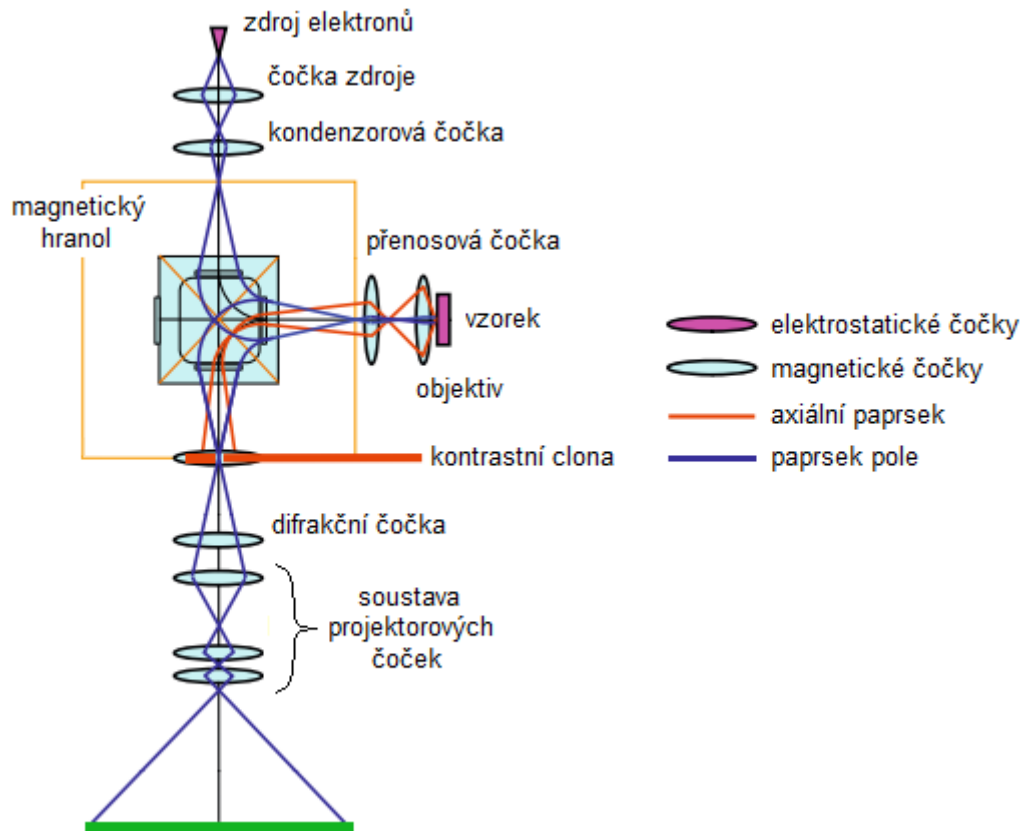
V posledních letech se metoda LEEM vyvinula v jednu z předních technik studia povrchů. V této kapitole proto nastíníme její konstrukci, základní vlastnosti a zejména teorii vzniku obrazu, která je nezbytná pro pochopení problematiky řešené v této práci.

2.1. Experimentální zařízení

Měření vyhodnocovaná v rámci této práce byla provedena za použití zařízení *FE-LEEM P90* od firmy *SPECS GmbH* (Berlín) dostupného v laboratořích CEITEC. Jedná

2.1. EXPERIMENTÁLNÍ ZAŘÍZENÍ

se o aparaturu kombinující metody LEEM a PEEM, jež byla navržena v roce 1998 jako *IBM LEEM-II* [11]. Samotná podstata účelu LEEM, tj. zobrazování dobře definovaných povrchů, vyžaduje podmínky UHV se základním tlakem pod úrovní 10^{-10} mbar [12]. Experimentální sestava, jejímuž popisu se nyní budeme věnovat, je zobrazena na obr. 2.1.



Obrázek 2.1: Schematický diagram aparatury LEEM. Oranžový rámec kolem magnetického hranolu vyznačuje symetricky umístěné difrakčních roviny. Oranžový kříž pak roviny obrazové. Obrázek přejat z [9].

Primární osvětlovací svazek je vytvořen za pomoci autoemisního elektronového zdroje schopného dosáhnout energetické šířky maximálně 300 meV [12]. Emitované elektrony však neprocházejí tubusem mikroskopu při nízké energii, ale jsou obvykle urychlovány na 15 keV.

Za zdrojem je umístěna magnetická čočka pomáhající formovat svazek. Následuje čočka kondenzorová, která mění zvětšení osvětlovacího systému a zaostruje elektronový paprsek do vstupní roviny magnetického hranolu. Ten elektrony vychýlí o 90 stupňů a stigmaticky refokusuje do symetricky umístěné výstupní roviny. Zde je umístěna přenosová čočka, která zobrazuje křížiště zdroje do zadní ohniskové roviny objektivové čočky tak, aby byl vzorek osvětlen paralelním svazkem [13, 11].

Obraz je pak získán prostou projekcí širší plochy vzorku a nikoli po jednotlivých pixelech jako je tomu u rastrovacích mikroskopů. Velikost zorného pole lze přitom měnit v relativně širokém rozsahu od 800 nm po $100\ \mu\text{m}$ [12]. Aperturní úhel paprsku v zadní ohniskové rovině, a tedy i osvětlená oblast na vzorku, jsou řízeny clonou umístěnou ve středu vychylovacího systému.

Samotný objektiv je katodová čočka, jejíž součástí je i vzorek. Ten je udržován na vysokém potenciálu, aby zpomalil dopadající elektronový paprsek. Po zpomalení dopadá na vzorek dobře definovaný, kolimovaný elektronový svazek s nízkou energií, která je určena

rozdílem urychlovacího napětí elektronů a potenciálu vzorku. Nízkoenergetické elektrony poté na krystalickém povrchu difraktují a po odrazu jsou zpětně urychleny do objektivové čočky. Vzorky proto mohou být silné a není potřeba žádná speciální úprava. V zadní ohniskové rovině objektivu se vytváří obrazec nízkoenergetické elektronové difrakce (LEED). Objektiv rovněž vytváří obraz vzorku (v reálném prostoru) ve větší vzdálenosti.

Přenosová čočka poté přeastřuje difrakční obrazec do vstupní roviny magnetického hranolu a reálný obraz do jeho úhlopříčné roviny. Skutečnost, že odražené elektrony sledují dráhu primárního svazku, představovala jeden z hlavních problémů při návrhu aparatury LEEM [11]. Pokud má být vytvořen obraz, musí být osvětlovací a projektorová optika, které se shodují v rameni objektivu, vhodným způsobem odděleny, jinak je možná pouze difrakce [13]. Právě k tomu účelu je využíván magnetický hranol, který opět vychýlí elektronový paprsek o 90 stupňů. Ve výstupní rovině magnetického hranolu je umístěna přenosová čočka, do jejíhož středu je promítnut obrazec LEED.

Zde je také možné za použití kontrastní clony zvolit difrakční paprsek pro tvorbu obrazu. Zvolíme-li paprsek zrcadlově odražených elektronů (z angl. specular beam) hovoříme o zobrazení ve světlém poli (tzv. bright-field). Podobně lze použít jiné difrakční paprsky pro zobrazení v tmavém poli (tzv. dark-field).

Přenosová čočka dále přenáší reálný obraz z úhlopříčné roviny hranolu do předmětové roviny první projektorové čočky, jejíž kombinací s dalšími dvěma magnetickými čočkami je na detektoru vytvořen obraz s proměnným zvětšením. Alternativně lze pro zobrazení difrakce aktivovat difrakční čočku, která do předmětové roviny první projektorové čočky umístí obrazec LEED. Tímto způsobem lze tedy snadno přepínat mezi režimy LEEM a LEED.

Kromě toho, že magnetický hranol odděluje dopadající a zobrazovací paprsky, zobrazuje také chromatickou disperzi elektronů přenášených ze vstupní do výstupní difrakční roviny. Díky tomu ho lze použít jako jednoduchý energiový filtr pro spektroskopické studie v reálném i recipročním prostoru [14].

Podrobnější informace o používané aparatuře lze nalézt na oficiálních stránkách výrobce [12].

2.2. Difrakce nízkoenergetických elektronů

V předešlé kapitole jsme se přesvědčili o tom, že metoda LEEM je neodmyslitelně spjata s metodou difrakce nízkoenergetických elektronů (LEED). Spojení s touto experimentální technikou je velmi praktické, neboť nám umožňuje charakterizovat strukturu studovaných povrchů.

Difrakční vzor je výsledkem elastické interakce elektronů se studovaným povrchem. S reciprokou mřížkou charakterizovanou vektorem $\vec{G}_{h,k,l}$ je pak spojen přes Laueho podmínku:

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}_{h,k,l}, \quad (2.1)$$

kde $\vec{k}_0$ je primární vlnový vektor a $\vec{k}$ vlnový vektor rozptýleného svazku. Je zřejmé, že tato podmínka je vyjádřením zákona zachování hybnosti. Vzhledem k tomu, že se jedná o elastickou kolizi, platí dále zákon zachování energie, tj.:

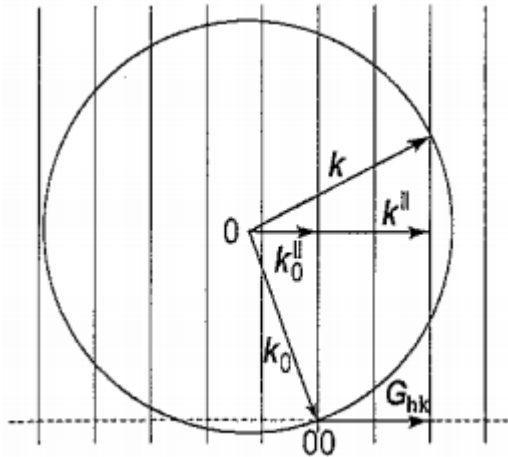
$$|\vec{k}| = |\vec{k}_0|. \quad (2.2)$$

2.3. TEORIE VZNIKU OBRAZU

Graficky lze difrakci elektronů ilustrovat pomocí tzv. *Ewaldovy konstrukce*. Ta zohledňuje podmínky difrakce, kdy důsledkem použití elektronů o nízké energii poskytuje LEED převážně informace o 2D atomové struktuře povrchu vzorku. Laueho podmínka 2.1 je pak důsledkem vícenásobného rozptylu, nízké hloubky průniku a povrchové relaxace platná pouze pro vektorové komponenty rovnoběžné s povrchem [15], tedy:

$$\vec{k}^{\parallel} - \vec{k}_0^{\parallel} = \vec{G}_{h,k}. \quad (2.3)$$

Kolmé komponenty vlnových vektorů se při tomto procesu nezachovávají.



Obrázek 2.2: Ewaldova koule pro elastický odraz na 2D povrchové mřížce. Obrázek přejat z [16].

Ewaldova konstrukce modifikovaná pro případ elastického rozptylu na 2D povrchové mřížce je znázorněna na obr. 2.2. Za předpokladu, že je do rozptylu zapojena jen jedna monovrstva, je každému bodu 2D reciproké mřížce přiřazena reciproká mřížková přímka, tzv. δ -rods. Zmíněný předpoklad totiž odpovídá situaci, kdy jsou od sebe jednotlivé monovrstvy v kolmém směru vzájemně nekonečně vzdálené. Vzdálenost bodů reciproké mřížky se naopak limitně blíží nule a body tak v kolmém směru vytváří ony přímky. Díky elastickému rozptylu má Ewaldova konstrukce tvar koule (viz vztah 2.2). Vektor dopadající vlny $\vec{k}_0$ končí na některé přímce reciproké mřížky. Průsečíky δ -rods s Ewaldovou koulí pak definují vlnové vektory difraktovaných paprsků.

Prostorové rozložení difraktovaných paprsků, tudíž tvar vzniklého difrakčního vzoru, odpovídá krystalové mříži studovaného povrchu. Jejich intenzita pak obsahuje informace o uspořádání atomů v rámci jednotkové buňky. O krystalografické kvalitě vzorku vypovídá ostrost difrakční stopy, tj. kontrast vůči pozadí. Mřížové nedokonalosti se poté promítají do profilu stop, tedy do příčného rozdělení intenzity.

2.3. Teorie vzniku obrazu

2.3.1. Interakce pomalých elektronů s materiálem

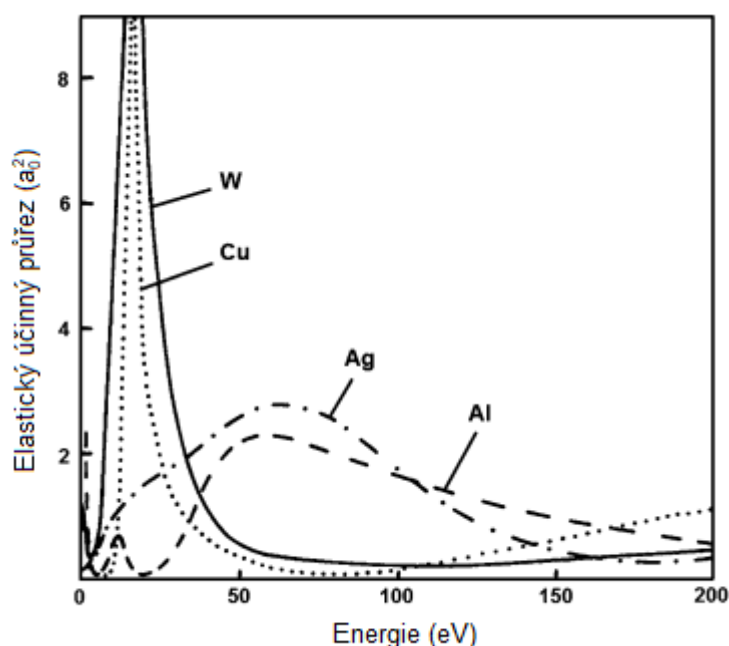
Zobrazení povrchu metodou LEEM je výsledkem elastického rozptylu elektronů, jimiž je studovaný vzorek ozařován. Elektrony rozptýlené povrchem se přitom používají nejen k tvorbě obrazu v reálném prostoru, ale rovněž k zobrazení difrakčního obrazce. Ten je

přítom v experimentální praxi velmi důležitý, neboť je používán k řízení kontrastních mechanismů (viz kap. 2.3.2).

Energie zobrazovacího elektronového svazku zpravidla zůstává pod 100 eV, což odpovídá hloubce průniku 0,5–5 nm [11]. Metoda tedy vykazuje skvělou povrchovou citlivost, a naopak není schopna zobrazit vnitřní strukturu vzorku.

Samotná teorie vzniku obrazu se pak opírá o výsledky interakčních procesů mezi pomalými elektrony a pevnou látkou. Právě tomuto tématu se proto budeme věnovat v této úvodní kapitole.

Prvotní studie zabývající se zobrazováním za použití nízkoenergetických elektronů vycházely z předpokladu, že získaný obraz je tvořen sekundárními elektrony, jež jsou jedním z produktů interakce s povrchem [3]. Dnes však víme, že výtěžek sekundárních elektronů při nízkých energiích je příliš malý na to, aby mohly být použity k tvorbě obrazu [4].

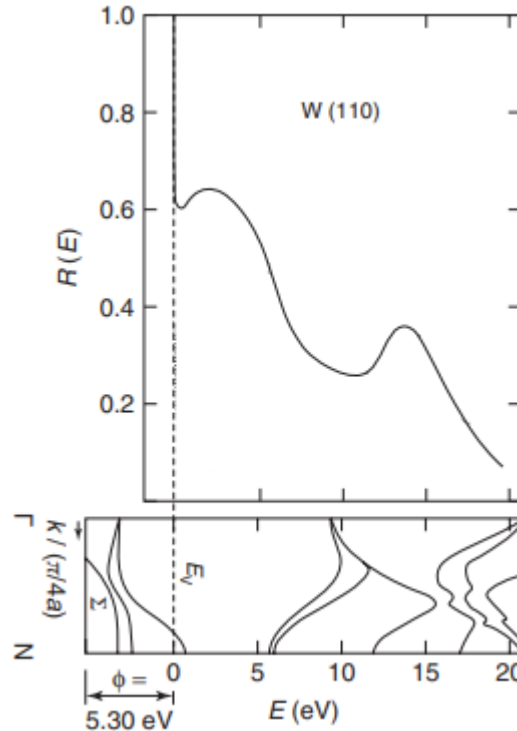


Obrázek 2.3: Účinné průřezy elastického rozptylu atomů wolframu (W), mědi (Cu), stříbra (Ag) a hliníku (Al) při zpětném rozptylu do úhlové oblasti od 180 do 150 stupňů. Obrázek přejat z [4].

Naopak intenzita zpětně rozptýlených elektronů je pro tento účel dostatečná. Skutečnost, že různé materiály mají při nízkých energiích vysoký účinný průřez elastického rozptylu, pak názorně ilustruje obr. 2.3. Nízkoenergetický rozptyl přitom, na rozdíl od vysokoenergetického, nezávisí monotónně na energii ani na protonovém čísle Z prvku rozptylujícího atomu. Z obrázku je dále zřejmé, že zatímco prvky jako wolfram nebo měď rozptylují elektrony v relativně úzkém pásu energií (zato poměrně silně), u zbylých prvků (stříbro a hliník) dochází ke slabšímu rozptylu v širokém energetickém rozsahu. Tyto materiály proto vytváří kontrastní finální obraz, na němž jsou snadno rozlišitelné.

Vznik energeticky závislého kontrastu z rozdílů ve složení lze poté snadno vysvětlit za pomoci vztahu odrazivosti a pásové struktury vytvořené periodickým rozložením atomů v prostoru. Elektrony v objemu materiálu pak mohou setrávat v některém z povolených energetických stavů $E(k)$ závislých na vlnovém vektoru k . Tyto stavy jsou poté odděleny zakázanými pásy, které jsou dominantní na hranicích Brillouinovy zóny.

2.3. TEORIE VZNIKU OBRAZU



Obrázek 2.4: Závislost reflexního koeficientu povrchu W(110) na energii primárního svazku (při zrcadlovém odrazu) a pásová struktura wolframu v příslušném směru. Obrázek přejat z [17].

Jako příklad nyní použijeme obr. 2.4 zobrazující energetickou závislost koeficientu odrazu a příslušnou pásovou strukturu povrchu wolframu. Dopadne-li na tento povrch elektron s energií v rozsahu 1–5 eV, ocitne se v oblasti, kde neexistují povolené stavy. Důsledkem toho je dopadající vlna silně tlumena a odrazena. S použitím difrakční teorie lze tento výsledek vysvětlit tak, že vlnový vektor dopadajícího elektronu k_0 splnil Laueho podmínku 2.3, a elektron byl tedy povrchem difraktován. Hodnota koeficientu odrazu by v takovém případě měla teoreticky dosáhnout hodnoty 1, tj. mělo by docházet k totálnímu odrazu. Z obrázku je nicméně jasné, že k takové situaci nedochází, a to z několika důvodů. Jsou jimi nepružný rozptyl evanescentní vlny pronikající do vzorku, dále existence povrchových stavů na hranici krystalu a v neposlední řadě rozptyl dopadajících elektronů povrchovými fonony a nedokonalosti jako jsou vakance apod. [13, 15, 4]. Všechny tyto procesy přispívají k poklesu odrazivosti, přičemž chybějící elektrony poté přispívají k proudu vzorkem [17]. Podobné úvahy pak platí také pro oblasti s nízkou hustotou stavů. Pokud má naopak primární elektron energii odpovídající povoleným stavům $E(k)$, může dopadající vlna proniknout hluboko do krystalu a odrazivost povrchu se může rapidně snížit.

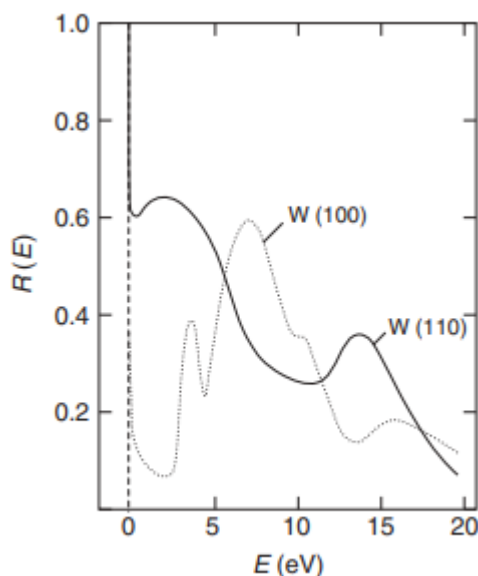
Z obr. 2.4 je navíc zřejmé že se zvyšující se energií má odrazivost obecně tendenci klesat. Příčinou je pokles elastického rozptylu při rostoucí energii, a naopak nárůst rozptylu neelastického, který ještě více snižuje koeficient odrazu [13].

Díky tomu, že v krystalických materiálech je intenzita rozptýlených elektronů koncentrována do několika difrakčních směrů, je možné pořizovat obrazy v krátkých expozičních časech. Hodnoty intenzit nám však nedávají žádné kvantitativní informace o studovaném povrchu. Význam má pro nás pouze rozdíl v intenzitě, který definuje kontrast ve výsledném obrazu. Kontrastními módy dostupnými v zařízení LEEM se budeme zabývat v následující kapitole.

2.3.2. Kontrastní mechanismy

Interakce nízkoenergetických elektronů se substrátem popsaná v předešlé kapitole vede k celé řadě mechanismů způsobujících lokální rozdíly v intenzitě, tj. kontrast v obrazu. Vzhledem ke skutečnosti, že obrazy v reálném prostoru jsou tvořeny výběrem konkrétního difrakčního paprsku (viz kap. 2.1), lze metodu LEEM pokládat za určitý „zobrazovací protějšek“ metody LEED.

Není tedy překvapivé, že hlavní kontrastní mechanismus (při zobrazení ve světlem poli) je založen na lokálních rozdílech v difrakčních podmínkách. Pokud se pro tvorbu obrazu použijí zrcadlově odražené elektrony, získaný kontrast se nazývá kontrast světlého pole. Pokud má povrch domény, které poskytují různé difrakční vzory, lze jednotlivé domény zobrazit výběrem některého difrakčního bodu příslušného vzoru. V tomto případě hovoříme o kontrastu tmavého pole.



Obrázek 2.5: Závislost reflexního koeficientu povrchu wolframu (W) pro krystalografické orientace (110) a (100) na energii primárního svazku (při zrcadlovém odrazu). Obrázek přejat z [17].

Vznik kontrastu na základě rozdílné struktury povrchu (tedy důsledkem difrakce) náznorně ilustruje obr. 2.5 zobrazující závislosti odrazivosti povrchů wolframu ve dvou krystalografických orientacích na energii osvětlovacího svazku. Je-li tato energie zvolena tak, aby byla odrazivost povrchů rozdílná, vznikne kontrastní obraz, na němž je možné oblasti s rozdílnou orientací rozlišit. Může však také dojít k situaci, kdy bude rozdíl koeficientů odrazu při nevhodně zvolené energii nulový, nebo natolik malý, že budou oblasti i přes odlišné strukturní vlastnosti na finálním obrazu nerozlišitelné. V takovém případě je nutné zvolit jinou energii, případně energii ponechat a zvolit jiný zobrazovací paprsek (resp. difrakční bod). Různým difrakčním směrům totiž odpovídají různé závislosti odrazivosti, a tedy i odlišné kontrasty v obrazu.

Dalším typem kontrastního módu metody LEEM, který však nevyžaduje krystalickou periodicitu, je tzv. fázový kontrast, jenž vzniká v důsledku elektronové interferenčních jevů. Typickým příkladem, kdy se tento mechanismus uplatňuje, jsou tenké vrstvy s ostrým rozhraním a paralelní horní a dolní hranicí deponované na substrátu. V této situaci může docházet k interferenci mezi elektrony odraženými na rozhraní se substrátem a na

2.3. TEORIE VZNIKU OBRAZU

rozhraní s vakuem. Odrazivost je poté závislá na energii (resp. vlnové délce) elektronů a tloušťce d vrstvy a nabývá maxima pro:

$$2d = n\lambda, \quad (2.4)$$

a minima pro:

$$2d = (2n + 1)\frac{\lambda}{2}, \quad (2.5)$$

kde λ je vlnová délka elektronů uvnitř vrstvy. Vzniklý kontrast nám poté umožňuje rozlišit oblasti s různými tloušťkami, případně sledovat proces růstu vrstev v reálném čase.

Obdobným způsobem lze rovněž detekovat atomární schody. Má-li takový schod výšku d , vytváří, podobně jako deponovaná vrstva, dráhový rozdíl $2d$ mezi vlnami odraženými od sousedních teras. Tyto vlny pak vykazují fázový rozdíl odpovídající rozdílu optické dráhy. Za podmínek uvedených v předešlém odstavci tak opět může docházet ke konstruktivní, resp. destruktivní interferenci těchto vln. Stanovením energií, při kterých je kontrast nejsilnější, lze pak s vysokou přesností určit výšku d schodu. Tento typ kontrastu je také velmi citlivý na adsorbáty [15].

Skutečnost, že vzorek je jednou z elektrod objektivové čočky, tj. je udržován na vysokém potenciálu, má za následek vznik posledního kontrastního mechanismu. Tím je tzv. topografický kontrast, který lze v prvním přiblížení vysvětlit zkreslením pole v důsledku lokálních odchylek od rovinnosti vzorku. Právě tyto odchylky pak ovlivňují trajektorie elektronů a produkují rozdíly v intenzitě, které se projeví ve výsledném obrazu.

2.3.3. Rozlišení

Kontrast a rozlišení jsou v částicové optice úzce propojeny skrze vlnovou povahu částic. Výpočet dosažitelného rozlišení elektronově optického systému však zpravidla nebývá prováděn vlnově mechanicky, jak bychom očekávali. Důvodem je skutečnost, že takto získané výsledky se příliš neliší od těch stanovených pomocí geometrické optiky [15]. To nám umožňuje použít při výpočtu zjednodušeného modelu, kdy celkové rozlišení δ je dáno součtem kvadrátů několika příspěvků, z nichž nejdůležitější jsou difrakční limit, chromatická aberace a sférická aberace. Dominantně je přitom rozlišení limitováno zmíněnými vadami objektivové čočky [15, 9], zatímco příspěvky ostatních komponentů jsou zanedbatelné.

Sférická aberace bývá obvykle částečně minimalizována důsledkem použití kontrastní clony pro výběr zobrazovacího svazku. Chromatickou aberaci lze pak obecně snížit použitím zdroje elektronů s menším energetickým rozptylem. Laterální rozlišení je pak omezeno na rozsah cca 4–10 nm, kdy horní hranice odpovídá přístrojům s termoemisními zdroji, zatímco dolní hranice je dosaženo při použití zdrojů autoemisních [10]. V našem případě výrobce garantuje rozlišení $\delta < 5$ nm [12].

Ve snaze korigovat zmíněné vady objektivu a přispět tak k dalšímu zlepšení rozlišení bylo v posledních několika dekádách vyvinuto několik elektronově-optických systémů, mezi které patří také elektrostatické elektronové zrcadlo [18]. To je schopno vykazovat sférickou i chromatickou vadu, jejichž velikosti lze společně s ohniskovou vzdáleností zrcadla nezávisle ladit tak, aby odpovídaly a korigovaly aberace rotačně symetrických čoček. Tímto způsobem bylo v roce 2010 dosaženo rozlišení kolem 2 nm u přístroje se základním rozlišením 4,1 nm [9]. Tento výsledek je přitom velmi blízký teoretickému limitu [13].

2. NÍZKOENERGIOVÁ ELEKTRONOVÁ MIKROSKOPIE

LEEM tedy nedosahuje atomárního laterálního rozlišení jako některé rastrovací mikroskopy (např. STM), ale jeho hloubkové rozlišení je srovnatelné – za příznivých podmínek dosahuje úrovně sub-angstromů [13]. Důvodem je princip vzniku topografického kontrastu důsledkem lokálních změn pole, jak bylo diskutováno v předešlé kapitole.

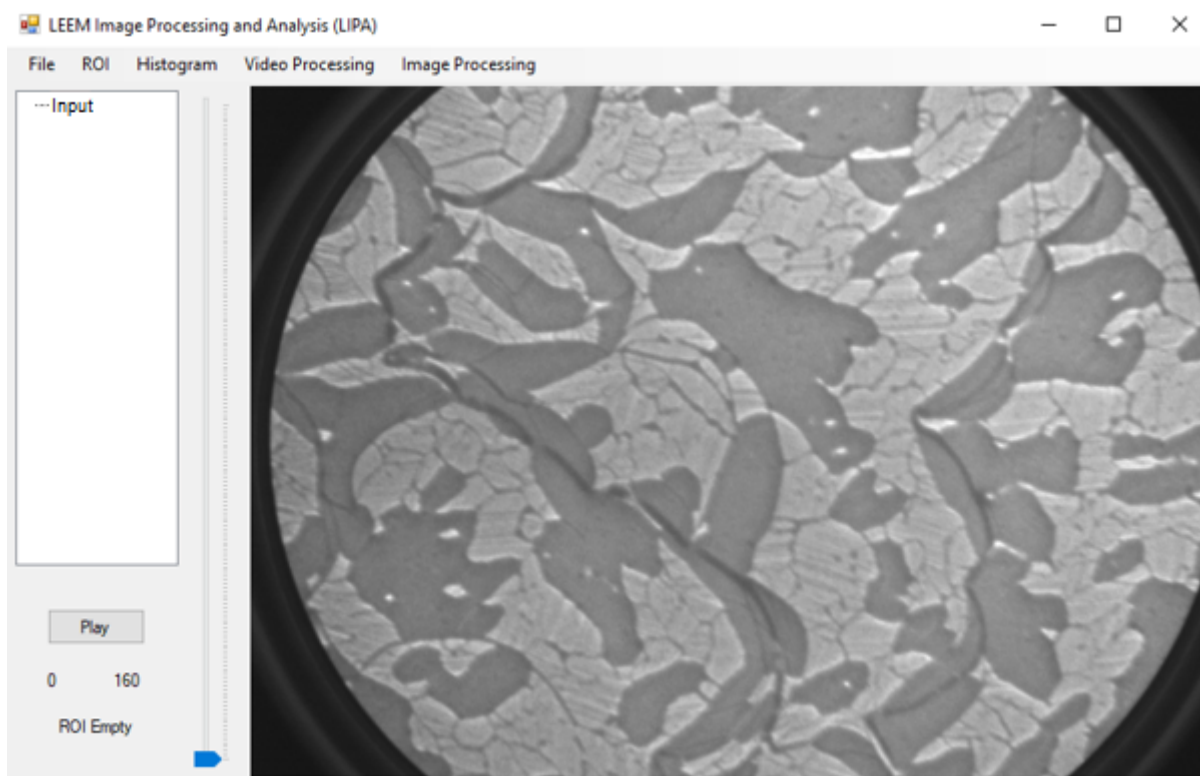
Pro řadu aplikací jsou tyto hodnoty rozlišení, v kombinaci s velkým zorným polem a rychlostí pořízení obrazu, zcela dostatečné. Proto má LEEM širokou škálu aplikací zahrnující mj. studium dynamických procesů v reálném čase.

2.3. *TEORIE VZNIKU OBRAZU*

3. Návrh softwaru pro kalibraci a interpretaci obrazových dat LEEM

V této kapitole se budeme zabývat námi navrženým softwarem pro zpracování a analýzu obrazových dat měřených zařízením LEEM. Před samotným návrhem bylo přitom nezbytné zhodnotit klíčové vlastnosti, jež budou po softwaru požadovány, a těm poté podřídit finální zpracování.

Metody analýzy obrazu zpravidla vyžadují objektově orientovaný přístup programování. Ten je charakteristický snahou o simulaci reality, kdy reálným objektům (jako jsou obrazy) přiřazujeme objekty virtuální. Vzorem pro vytváření objektů je poté třída, která definuje atributy (vlastnosti, data), kterými jsou objekty charakterizovány, a metody, které je objekt schopný vykonávat. Jedním z objektově orientovaných programovacích jazyků je také *C#*, který byl použit pro vytvoření navrženého programu. Tento jazyk pracuje na platformě *.NET Framework*, jež je založena na sadě knihoven umožňujících efektivní tvorbu programů. Mezi tyto knihovny patří také *EmguCV*, jež nám poskytla základní funkce pro manipulaci s obrazem.



Obrázek 3.1: Grafické uživatelské rozhraní navrženého softwaru.

Pro zajištění snadné obsluhovatelnosti bylo vytvořeno jednoduché uživatelské rozhraní (viz obr. 3.1) založené na systému Windows (tzv. *formulář*). Obrazová data jsou zobrazována v pravé části formuláře a jejich zpracování je řízeno pomocí hlavního menu, jehož prvky reprezentují jednotlivé metody. Vstupní i zpracovaná data přitom zůstávají do ukončení programu uložena ve stromové datové struktuře, jejíž ovládací prvek zobrazující

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT

názvy vnořených dat je umístěn v levé části formuláře. Přepínáním mezi jednotlivými uzly pak uživatel řídí, který prvek je zobrazen a případně zpracováván. Vzhledem k tomu, že je LEEM schopen měřit videosekvence stejně jako jednotlivé snímky, bylo třeba zahrnout do návrhu také několik ovládacích prvků určených k přehrávání videa, případně k manuálnímu přecházení mezi jednotlivými snímky příslušné videosekvence. Tyto prvky se objevují v levé části formuláře v případě, že je nahrán adekvátní vstupní soubor. Jsou-li zpracovávány samostatné obrazy, zůstávají tyto nástroje naopak skryty.

Dále bylo třeba vzít v úvahu vlastnosti analyzovaných obrazů. Zařízení LEEM vytváří černobílé obrazy povrchů, jejichž rozlišení je buď 1376×1040 , nebo poloviční, tedy 688×520 . Důležitým parametrem je však pro nás zejména bitová hloubka určující počet bitů, jež jsou vyhrazeny k popisu barvy jednotlivých pixelů. Větší bitová hloubka tedy znamená větší škálu barev (v našem případě stupňů šedi) ale přirozeně také větší paměťovou náročnost. Obrazy získané metodou LEEM jsou buď 8 bitové, nebo 16 bitové. Při načítání vstupních dat tak musí být tento parametr programem zhodnocen. Implementované metody je pak možné užívat bez omezení.

Poledním aspektem, který byl zahrnut do návrhu softwaru, je skutečnost, že zpracování obrazových dat vyžaduje v mnoha situacích možnost definovat pouze určitou oblast obrazu, případně část video sekvence, jež bude upravena nebo použita při výpočtu. Z toho důvodu byly implementovány metody pro výběr oblasti zájmu, tzv. ROI (z angl. Region Of Interest), a v případě práce s video soubory metody stříhu videa umožňující rozdělovat a potažmo slučovat sekvence snímků se stejným rozlišením.

Po dokončení návrhu programu byla postupně implementována řada metod umožňujících kalibraci a interpretaci změřených dat. Těmito metodami se budeme zabývat v následujících sekcích, přičemž se zaměříme zejména na pochopení matematické podstaty a vlivu zvolených parametrů na zpracovaný obraz. Přčtením této kapitoly tak případný uživatel získá základní povědomí o možnostech předkládaného algoritmu.

3.1. Metody pro zpracování obrazových dat

3.1.1. Fourierova transformace a konvoluce

Fourierova transformace, jejíž základy položil francouzský matematik Jean B. J. Fourier na počátku 19. století [19], je jedním z nejčastěji používaných nástrojů v oblasti zpracování obrazu. Obecně nám umožňuje vyjádřit absolutně integrovatelné funkce jako integrál sinů a/nebo kosinů vynásobených váhovou funkcí. Vzhledem k tomu, že obrazy lze chápat jako prostorově omezené funkce dvou proměných, je Fourierova transformace pro jejich zpracování snadno použitelná.

Označíme-li $\mathcal{L}(\mathbb{R}^2)$ jako prostor všech funkcí $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$, pro které:

$$\iint_{\mathbb{R}^2} |f(x, y)| \, dx \, dy, \quad (3.1)$$

existuje a je konečný, pak Fourierova transformace $\mathcal{F}\{f\}(\xi, \eta) = F(\xi, \eta)$ funkce $f(x, y) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^2)$, někdy též označovaná jako Fourierovo spektrum funkce f , je definována jako [20, 19]:

$$F(\xi, \eta) = \iint_{\mathbb{R}^2} f(x, y) e^{-i(x\xi + y\eta)} \, dx \, dy. \quad (3.2)$$

3. NÁVRH SOFTWARE PRO KALIBRACI A INTERPRETACI OBRAZOVÝCH DAT LEEM

Funkci $A(\xi, \eta): \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ danou vztahem:

$$A(\xi, \eta) = |\mathcal{F}\{f(x, y)\}| = |F(\xi, \eta)|, \quad (3.3)$$

pak označujeme jako amplitudové spektrum funkce f [20, 19], a funkci $\Phi(\xi, \eta): \mathbb{R}^2 \rightarrow \langle 0, 2\pi \rangle$, pro kterou:

$$\Re\{F(\xi, \eta)\} = A(\xi, \eta) \cos \Phi(\xi, \eta), \quad (3.4)$$

$$\Im\{F(\xi, \eta)\} = A(\xi, \eta) \sin \Phi(\xi, \eta), \quad (3.5)$$

jako fázové spektrum funkce f [20, 19].

Jednou z nejdůležitějších vlastností Fourierovy reprezentace je skutečnost, že původní funkce může být plně zrekonstruována inverzním procesem, a to beze ztráty informací. Inverzní Fourierovou transformací funkce $G(\xi, \eta) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^2)$ je pak míněna funkce $\mathcal{F}^{-1}\{G\}(x, y) = g(x, y)$ definovaná vztahem [20, 19]:

$$g(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \iint_{\mathbb{R}^2} G(\xi, \eta) e^{i(x\xi + y\eta)} d\xi d\eta. \quad (3.6)$$

V předešlém textu jsme uvažovali funkce definované na $\mathbb{R}^2$. Obrazy však mají konečný rozměr a jsou tedy definované na ohraničené oblasti $\{0, 1, \dots, M-1\} \times \{0, 1, \dots, N-1\}$, kde konstanty $M, N \in \mathbb{N}$ určují rozlišení. Při výpočtech pak používáme diskrétní verze Fourierovy transformace a inverzní Fourierovy transformace definované vztahy [20, 19]:

$$\mathcal{D}\{f\}(\xi, \eta) = F(\xi, \eta) = \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} f(x, y) \exp \left[-2\pi i \left(\frac{x\xi}{M} + \frac{y\eta}{N} \right) \right], \quad (3.7)$$

$$\mathcal{D}^{-1}\{F\}(x, y) = \frac{1}{MN} \sum_{\xi=0}^{M-1} \sum_{\eta=0}^{N-1} F(\xi, \eta) \exp \left[2\pi i \left(\frac{x\xi}{M} + \frac{y\eta}{N} \right) \right]. \quad (3.8)$$

Pro funkci $f(x, y)$ a její Fourierovo spektrum $F(\xi, \eta)$ (nejen diskrétní, ale i spojitě) dále platí vztah:

$$\mathcal{D}^{-1}\{\mathcal{D}\{f(x, y)\}\} = f(x, y), \quad (3.9)$$

označovaný jako Fourierův inverzní teorém [20].

Rovnice 3.7, 3.8 definují $F(\xi, \eta)$ a $\mathcal{D}^{-1}\{F\}(x, y)$ pro všechny body $(x, y), (\xi, \eta) \in \mathbb{Z}^2$. Je tedy možné zavést periodizaci Fourierova spektra, $\tilde{F}(\xi, \eta)$, a periodizaci původní funkce, $\tilde{f}(x, y)$, jako [20]:

$$\tilde{F}(\xi, \eta) = \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} f(x, y) \exp \left[-2\pi i \left(\frac{x\xi}{M} + \frac{y\eta}{N} \right) \right], \quad (3.10)$$

$$\tilde{f}(x, y) = \frac{1}{MN} \sum_{\xi=0}^{M-1} \sum_{\eta=0}^{N-1} F(\xi, \eta) \exp \left[2\pi i \left(\frac{x\xi}{M} + \frac{y\eta}{N} \right) \right]. \quad (3.11)$$

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT

Účinným nástrojem při zpracování obrazu je vyjma Fourierovy transformace také konvoluce. Vezmeme-li funkce $f(x, y), g(x, y) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^2)$ je jejich konvolucí $f * g$ funkce [20]:

$$f * g = \iint_{\mathbb{R}^2} f(s, t)g(x - s, y - t) ds dt. \quad (3.12)$$

V případě funkcí reprezentujících obraz, tj. $f(x, y), g(x, y): \{0, 1, \dots, M-1\} \times \{0, 1, \dots, N-1\} \rightarrow \mathbb{C}$, kde $M, N \in \mathbb{N}$, získáváme diskrétní periodickou konvoluci podle vztahu [20]:

$$f * g = \sum_{\xi=0}^{M-1} \sum_{\eta=0}^{N-1} f(s, t)\tilde{g}(x - s, y - t). \quad (3.13)$$

Konvoluce a Fourierova transformace jsou pak propojeny následujícím vztahem:

$$\mathcal{D}\{f(x, y) * g(x, y)\} = F(\xi, \eta) \cdot G(\xi, \eta), \quad (3.14)$$

kde F, G jsou Fourierova spektra funkcí $f, g: \{0, 1, \dots, M-1\} \times \{0, 1, \dots, N-1\} \rightarrow \mathbb{C}$, kde $M, N \in \mathbb{N}$ [20]. Poznamenejme, že tvrzení 3.14 platí analogicky pro spojitě funkce.

3.1.2. Filtrace šumu

Jedněmi z nejčastěji používaných metod při zpracování obrazu jsou metody určené k potlačení šumu. Šum lze obecně definovat jako náhodnou složku vyskytující se v každém obrazu. Jeho příčin, a stejně tak způsobů filtrace, existuje celá řada. V této kapitole uvedeme dva základní typy šumu, a sice aditivní a impulsní, a zejména několik metod používaných k jejich eliminaci.

Označíme-li $f(x, y)$ jako dokonalý a $g(x, y)$ jako reálný obraz, pak o obrazu g prohlásíme, že obsahuje aditivní šum [21], pokud platí:

$$g(x, y) = f(x, y) + a(x, y), \quad (3.15)$$

kde $a(x, y)$ je obraz, jehož pixely jsou stochasticky nezávislé realizace náhodné veličiny X , jejíž charakteristiky poté nazýváme charakteristikami aditivního šumu. V případě digitálních čipů má aditivní šum většinou normální rozdělení.

Tento typ šumu je přítomen v každém reálném obraze a přispívá tak k nekorektní analýze. Proto je žádoucí jeho efektivní potlačení. Jak bylo zmíněno v kap.3.14, ostré přechody mezi hodnotami pixelů, jež mohou být způsobeny mj. aditivním šumem, odpovídají vysokofrekvenčním složkám příslušného Fourierova spektra. Jednou z možností filtrace obrazu je tedy utlumení příslušných komponent. K tomu účelu bývají použity dva typy filtrů, a sice filtr dolní propusti (z angl. low-pass filter) a filtr horní propusti (z angl. high-pass filter).

Filtr dolní propusti, jak název napovídá, zachovává nízké prostorové frekvence a naopak utlumuje ostré změny a příslušné frekvenční komponenty. Obecně lze filtraci ve frekvenční doméně popsat následujícím vztahem:

$$g = \mathcal{D}^{-1}\{\mathcal{D}\{f\} \cdot W\}, \quad (3.16)$$

3. NÁVRH SOFTWARE PRO KALIBRACI A INTERPRETACI OBRAZOVÝCH DAT LEEM

kde g je vyfiltrovaný obraz, f původní obraz a W je tzv. váhová funkce [19]. Ta musí být obecně klasající a symetrická kolem bodu $(0, 0)$, tj. počátku Fourierovy transformace. Jednou z nejčastěji používaných alternativ je Gaussova funkce:

$$G_\sigma = \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}\right). \quad (3.17)$$

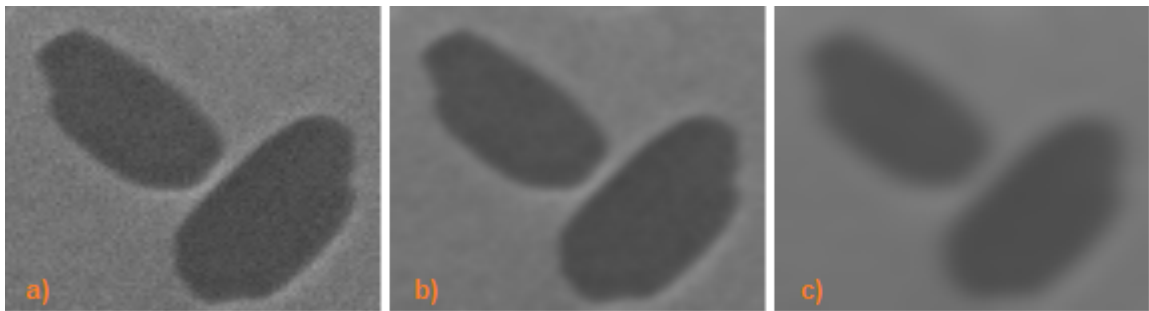
Vzhledem k tomu, že výpočet prostým dosazením do vzorce 3.16 by byl v důsledku použití Fourierovy transformace relativně pomalý, je pro nás výhodné vztah upravit dosazením vzorce:

$$G_\sigma = \mathcal{D}\{G_{\frac{1}{\sigma}}\}. \quad (3.18)$$

Důsledkem platnosti 3.14 a Fourierova inverzního teorému 3.9 poté dostáváme:

$$g = f * G_{\frac{1}{\sigma}}. \quad (3.19)$$

Filtrace obrazu je tak prováděna jeho konvolucí s gaussovským jádrem, jehož velikost může být obecně různá. Uživatel má tak při použití tohoto nástroje nezávislou kontrolu nad čtyřmi parametry, jimiž jsou výška a šířka gaussovského jádra a jeho směrodatné odchylky ve směru x a y . Ty mohou být obecně různé, ale pro většinu aplikací je pokládáme za totožné. Pokud tedy uživatel zadá směrodatnou odchylku pouze pro jeden směr (druhou položí rovnu 0), je stejná hodnota automaticky nastavena i pro druhý směr. Program zároveň vykazuje jistou míru autonomie. V případě, že si uživatel není jistý jaké hodnoty pro konkrétní případ zadat, postačí když nastaví velikost jádra konvoluce, ze které jsou poté směrodatné odchylky automaticky dopočítány. Obecně je však doporučováno zadávat všechny parametry manuálně, a mít tak plnou kontrolu nad výsledným obrazem.



Obrázek 3.2: Vliv směrodatné odchylky σ na filtraci zašuměného (a) obrazu. Použity byly hodnoty $\sigma = 1,0$ (b), resp. $\sigma = 3,0$ (c). Pološířka symetrického filtračního jádra pak činila 10 pixelů.

Z parametrů gaussovského jádra má největší vliv na výsledný obraz směrodatná odchylka, jak ilustruje obr. 3.2. Pro jednoduchost přitom předpokládáme $\sigma_x = \sigma_y$. Větší směrodatná odchylka znamená efektivnější potlačení aditivního šumu, ale zároveň dochází k rozmazání obrazu. Pokud naopak zvolíme příliš malou hodnotu, zůstane obraz ostrý, ale zároveň bude stále obsahovat velké množství šumu. Naším cílem je tedy nalézt vhodný kompromis mezi těmito aspekty.

Při zpracování obrazu je někdy účelné vysokofrekvenční složky Fourierova spektra naopak zachovat. K tomu účelu se využívá již zmíněný filtr horní propusti, který, na

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT

rozdíl od svého protějšku, zachovává aditivní šum, ale naopak zvýrazňuje hrany a jiné ostré přechody. Výsledný obraz g lze poté vyjádřit ve tvaru [21]:

$$g = \frac{M}{2} \left(f - f * G_{\frac{1}{\sigma}} \right), \quad (3.20)$$

kde konstanta $M = 256$ pro 8 bitové a $M = 65536$ pro 16 bitové obrazy zajišťuje, aby hodnoty pixelů odpovídaly dynamickému rozsahu obrazu.

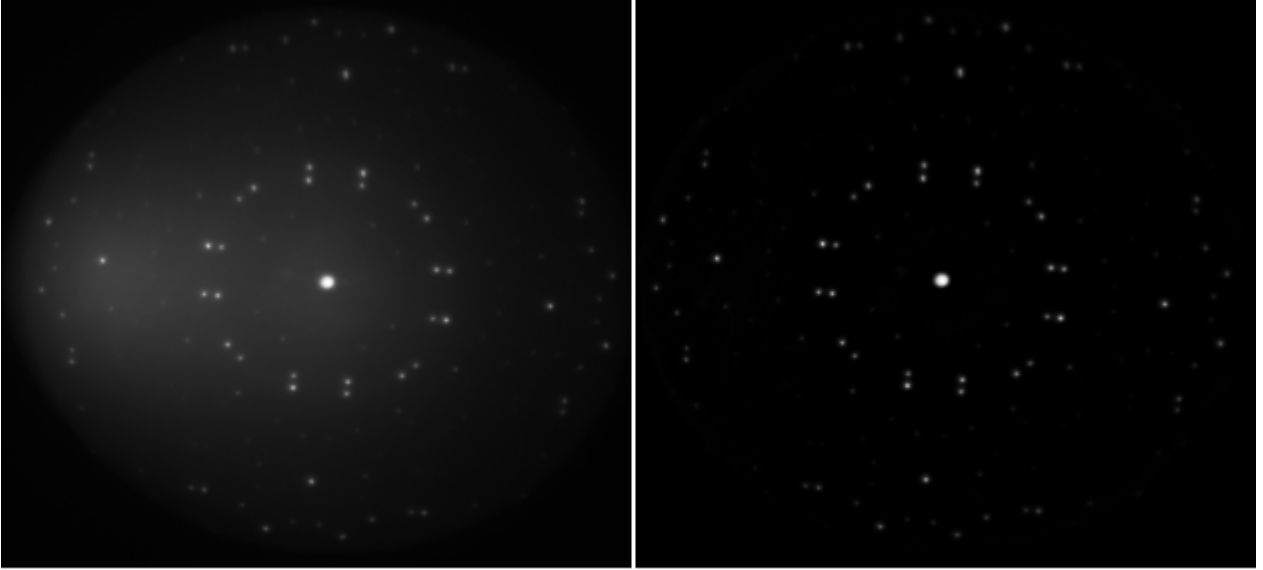
Alternativně lze pro zjednodušení použít tzv. Diracovo konvoluční jádro:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Obraz po filtraci je pak dán jako:

$$g = \frac{M}{2} \left[f * \left(D - G_{\frac{1}{\sigma}} \right) \right] = \frac{M}{2} \left(f * H_{\frac{1}{\sigma}} \right). \quad (3.22)$$

Parametry, které uživatel zadává, a jejich dopad na výsledný obraz jsou poté analogické jako v případě filtru dolní propusti. Použití filtru horní propusti v tomto tvaru však nemá pro obrazy LEEM v reálném prostoru valný význam. V praxi se používá zejména pro „ostření“ obrazu, jak ukážeme v kap. 3.1.3, případně pro detekci hran.



Obrázek 3.3: Filtrace sekundárních elektronů z difrakčního obrazce použitím symetrického gaussovského filtru horní propusti o pološířce 50 pixelů.

Daleko významnější je tento nástroj pro zpracování difrakčních obrazců. V zařízení LEEM totiž velmi často dochází k průniku sekundárních elektronů do detekčního systému. Jak již víme, intenzita tohoto druhu signálu není při používaných energiích elektronového svazku dostatečná pro zobrazení povrchu. Detekce sekundárních elektronů však způsobuje vznik zašuměných oblastí, které v mnoha případech zcela znemožňují jakoukoli analýzu změřených dat. Jak je patrné z obr. 3.3, vzniklé „šmouhy“ v difrakčním obrazci jsou charakteristické pomalu se měnící intenzitou, zatímco u difrakčních spotů dochází ke skokové změně. Sekundární elektrony lze tedy ze získaného obrazu snadno vyfiltrovat

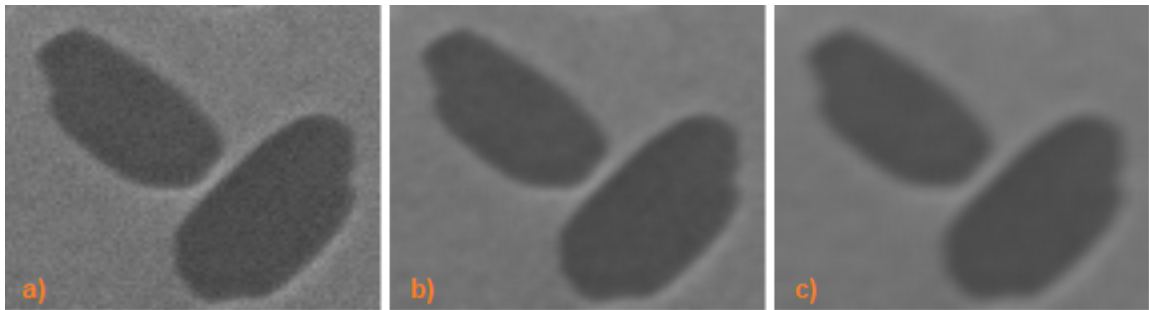
3. NÁVRH SOFTWARE PRO KALIBRACI A INTERPRETACI OBRAZOVÝCH DAT LEEM

použitím filtru horní propusti, jak názorně zobrazuje obr. 3.3. Difrakční vzor přitom není nijak porušen, a jeho následná analýza je tak zcela korektní.

Doposud jsme při výpočtech vycházeli z konvoluce výchozího obrazu a Gaussovske funkce. Jako jádro konvoluce však může být použita celá řada odlišných matic [22], někdy též označovaných jako masky, určených nejen k filtraci šumu, ale též k detekci hran, doostření obrazu apod. Zřejmě nejjednodušší maskou umožňující filtraci obrazu je maska průměrová, kterou je obecně možné zapsat takto:

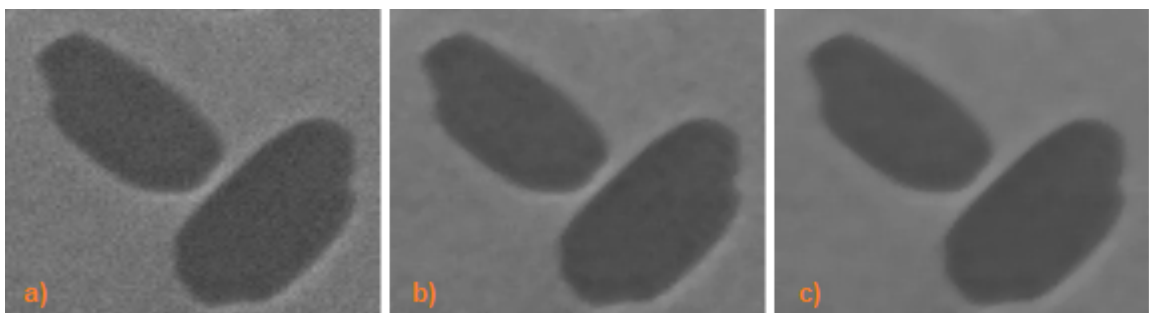
$$A = \frac{1}{MN} \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

kde M, N jsou rozměry matice. Při konvoluci pak dochází k výpočtu hodnoty průměru všech pixelů pod oblastí jádra, již je poté nahrazen centrální prvek.



Obrázek 3.4: Vliv velikosti jádra na účinnost filtrace průměrováním. Původní (a) obraz byl upraven filtrem 3×3 (b), resp. 5×5 (c).

Rozměry jádra konvoluce jsou poté jedinými parametry, jimiž uživatel ladí výsledný obraz. Použití tohoto filtru vede opět k filtraci aditivního šumu a vyhlazení (rozostření) obrazu. Vliv velikosti jádra je pak ilustrován na obr. 3.4. Pro jednoduchost uvažujeme opět symetrický případ.



Obrázek 3.5: Vliv velikosti jádra na účinnost medianového filtru. Původní (a) obraz byl upraven filtrem 3×3 (b), resp. 5×5 (c).

Centrální pixel však nemusí být nahrazen pouze průměrem pixelů pod oblastí jádra. Velmi užitečný je také tzv. medianový filtr, kdy, jak název napovídá, je hodnota centrálního pixelu nahrazena medianem. Zajímavé je, že zatímco ve všech předešlých případech docházelo vždy k přepsání pixelu na nově vypočtenou hodnotu, která nemusela být v originálním obrazu přítomna, zde je pixel vždy přepsán na některou ze sousedních hodnot

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT

z oblasti jádra. Výsledkem je efektivní redukce šumu, kterou uživatel ovlivňuje skrze velikost jádra (viz obr. 3.5). V tomto případě, je však jádro vždy symetrické.

Na rozdíl od předchozích filtrů je pak medianový filtr citlivý hlavně na tzv. impulsní šum. Po aditivním šumu se jedná o druhý významný příspěvek, jenž je přítomen v každém reálném obrazu. Jeho definice je nicméně na rozdíl od aditivního šumu poměrně komplikovaná. Pro úplnost ji však uvedeme. Označme opět $f(x, y)$ jako dokonalý obraz a definujme obraz $g(x, y)$ jako:

$$g(x, y) = \begin{cases} f(x, y), & Y(x, y) = 0, \\ m(x, y), & Y(x, y) = 1, \end{cases} \quad (3.24)$$

kde $Y(x, y)$ jsou realizace náhodné veličiny X s Bernoulliho rozdělením a $m(x, y)$ jsou nezávislé realizace náhodné veličiny Z (její rozdělení zpravidla neznáme). Jsou-li i $Y(x, y)$ nezávislé realizace X , řekneme, že obraz g obsahuje impulsní šum [21]. Pokud nezávislé nejsou, řekneme, že g obsahuje defekty. Jestliže pro obrazy pořízené krátce po sobě za stejných podmínek (nastavení expozice, zařízení apod.) obdržíme stejné realizace X , označujeme impulsní šum jako konstantní. V opačném případě o něm hovoříme jako o proměnném.

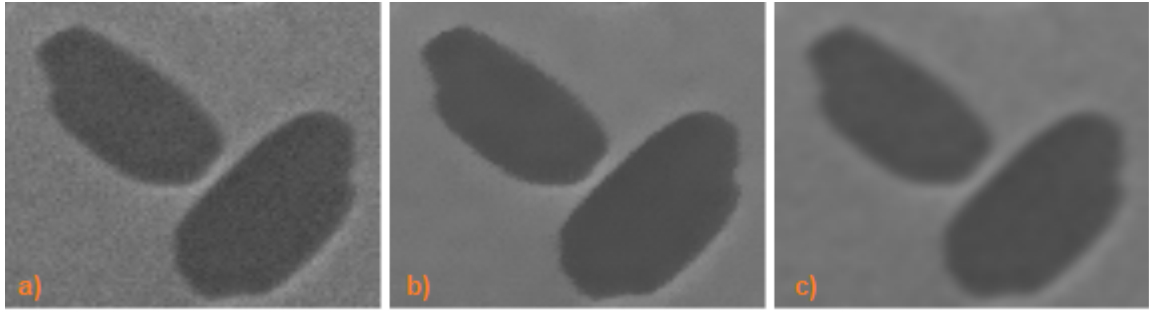
Poznamenejme ještě, že v případě nutnosti filtrace obou typů šumu je nejprve nezbytné potlačit impulsní šum, a teprve poté je možné přejít k filtraci šumu aditivního.

Veškeré doposud zmíněné filtry (vyjma filtru horní propusti) mají společné to, že potlačují ostré přechody mezi hodnotami pixelů. Vycházejí totiž z předpokladu, že změna barvy (resp. stupně šedi) v reálném obrazu nastává postupně. Blízké pixely tedy vykazují podobné hodnoty a mohou být zprůměrovány (popř. jinak transformovány) při zachování signálu, zatímco hodnoty šumu, které pixely náhodně poškozují, jsou tímto způsobem potlačeny. Tento přístup však selhává na hranách, které jsou, stejně jako šum, spojeny se skokovou změnou intenzity, a tudíž dochází k jejich nežádoucímu rozmazání. V průběhu několika desetiletí byla nicméně vyvinuta řada metod snažících se tento nedostatek odstranit [23, 24]. Jednou z nich je také bilaterální filtr představený v roce 1998 [25].

V předešlém textu byl již diskutován gaussovský filtr dolní propusti. Ten je funkcí prostorových souřadnic, takže vážený průměr je počítán z okolí centrálního pixelu. V případě bilaterálního filtru je tento prostorový gaussovský filtr také využíván, ale zároveň je doplněn ještě jedním identickým filtrem, který je však funkcí rozdílu hodnot pixelů. Prostorový filtr pak zajišťuje, že do výpočtu gaussovského váženého průměru jsou zahrnuty pouze blízké pixely, tj. ty v oblasti jádra konvoluce, zatímco funkce rozdílu intenzity odstraní z výpočtu pixely s intenzitou, která je příliš odlišná od hodnoty centrálního pixelu. Je-li tedy centrální pixel hranový, nedojde v jeho případě k transformaci hodnoty, která by vedla k rozmazání hran.

Parametry, které jsou v případě bilaterálního filtru zadávány uživatelem, jsou poté tři. Rozměr filtru (jádra) a prostorová směrodatná odchylka mají stejný význam a vliv na výsledek jako v případě běžného gaussovského filtru. Intenzitní směrodatná odchylka pak udává povolený rozdíl hodnoty sousedních pixelů oproti centrálnímu. Větší hodnota tak znamená zprůměrování většího rozsahu barev, resp. stupňů šedi, v oblasti jádra. Srovnání účinnosti bilaterálního filtru a běžného filtru dolní propusti je ilustrováno na obr. 3.6.

Poslední námi implementovanou filtrační metodou je metoda „nelokálního průměrování“ známější pod svým angl. názvem — *Non-Local Means Denoising* [26, 27] (dále jen NLMD). Jak již bylo řečeno aditivní šum má v případě digitálních čipů většinou normální rozdělení. Jeho střední hodnota je pak zpravidla pokládána za nulovou. Budeme-li



Obrázek 3.6: Srovnání účinnosti bilaterálního (b) a gaussovského (c) filtru na originální (a) snímek. Pološířka bilaterálního filtru činila 3 pixely, hodnoty σ pak shodně 10. Gaussovské jádro o rozměru 10×10 definováno hodnotou $\sigma = 1,2$.

tedy předpokládat, že skutečná hodnota pixelu je porušena příspěvkem šumu, pak se při zprůměrování dostatečného množství podobných pixelů různě velké poruchové příspěvky vzájemně eliminují, a my tak obdržíme onu skutečnou hodnotu.

Na tomto jednoduchém principu je metoda NLMD založena. Matematicky lze transformaci hodnoty $u(p)$ pixelu v bodě p popsat následujícím způsobem [27]:

$$u(p) = \frac{1}{N(p)} \sum_{q \in \Omega} v(q) f(p, q), \quad (3.25)$$

kde $v(q)$ je hodnota pixelu q nacházejícího se uvnitř oblasti Ω , $f(p, q)$ je váhová funkce a $N(p)$ je normovací konstanta definovaná jako součet jednotlivých „vah“, tj.:

$$N(p) = \sum_{q \in \Omega} f(p, q). \quad (3.26)$$

Hodnoty pixelů jsou tedy, stejně jako v případě předešlých filtrů, nahrazovány váženými průměry z oblastí, které je obklopují. Váhová funkce však tentokrát nezohledňuje polohu jednotlivých pixelů vůči centrálnímu pixelu, ale vzájemnou podobnost intenzit, jež navíc není počítána pro samostatné pixely, ale pro určité okolí každého z nich. Označíme-li obecně okolí $O(k) \subseteq \Omega$ pixelu $k \in \Omega$ a průměrnou intenzitu pixelů v tomto okolí jako $\overline{O}(k)$, pak lze gaussovskou váhovou funkci, jež patří mezi nejčastěji používané, zapsat ve tvaru:

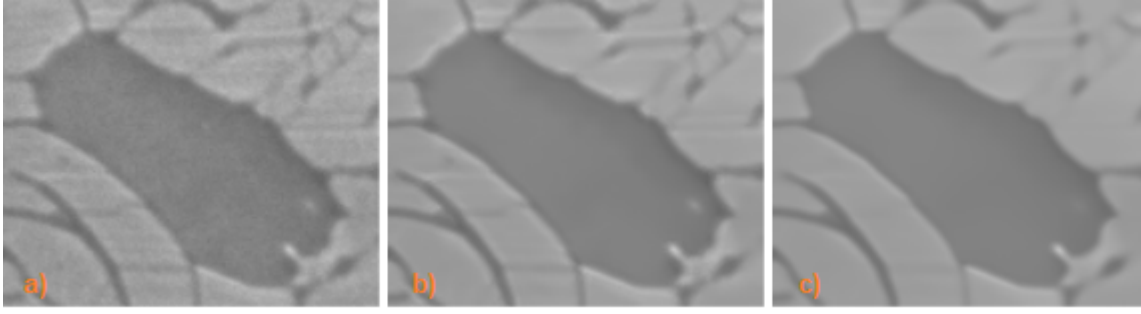
$$f(p, q) = \exp \left[-\frac{(\overline{O}(q) - \overline{O}(p))^2}{h^2} \right], \quad (3.27)$$

kde h je směrodatná odchylka regulující sílu filtru.

Zamysleme se nyní znovu nad významem vztahů 3.25–3.27. Hodnota centrálního pixelu p oblasti Ω je podle vztahu 3.25 nahrazena váženým průměrem této oblasti. Větší váhu mají přitom v souladu se vztahem 3.27 ty pixely q , jejichž okolí $O(q)$ se podobá okolí $O(p)$ centrálního pixelu. Hranici podobnosti pak v jistém smyslu definuje směrodatná odchylka h – větší hodnota znamená toleranci větších rozdílů průměrných intenzit okolí.

Uživatel má v případě použití metody NLMD kontrolu nad třemi nezávislými parametry. Nejdůležitějším z nich je parametr h , který kontroluje pokles exponenciály váhové funkce 3.27, a stanovuje tak stupeň filtrace. Jeho vliv je ilustrován na obr. 3.7. Velká hodnota znamená účinnější filtraci šumu, ale zároveň dochází k odstranění jemných detailů obrazu (jako jsou atomové schody v obr. 3.7). Je-li naopak zadána menší hodnota,

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT



Obrázek 3.7: Vliv parametru h na originální (a) obraz. Nastavena byla hodnota $h = 4$ (b), resp. $h = 8$ (c). Se zvyšující se hodnotou dochází k odstranění detailní struktury substrátu.

detaily zůstávají zachovány, avšak účinnost filtrace se tímto snižuje. Zbylé dva parametry regulují velikost oblasti Ω a okolí $O(k)$. Velikost oblasti Ω ovlivňuje lineárně výkon algoritmu. Jako doporučená hodnota je zpravidla uváděn poloměr oblasti 10 pixelů [26]. Velikost okolí je vhodné nastavit tak, aby vykazovalo dostatečnou robustnost vůči šumu, ale zároveň zachovávalo detaily a jemnou strukturu obrazu. Jako ideální byl identifikován poloměr okolí 3 pixely [26].

3.1.3. „Image Sharpening“

V předešlé kapitole jsme zmínili, že gaussovský filtr horní propusti může být využit pro doostření obrazu, tzv. *image sharpening*. Jedná se o metodu vizualizace obrazu, jejímž cílem je zvýraznění jemných detailů, případně vylepšení oblastí, které byly při pořizování obrazu rozmazány nebo jinak znehodnoceny. Jak již víme, filtry horní propusti zeslabují nízkofrekvenční složky Fourierovy transformace, zatímco vysokofrekvenční zůstávají nenařušeny. Vzhledem k tomu, že jsou právě s těmito složkami spojeny náhlé změny úrovně šedé (jako jsou hrany apod.), lze tímto způsobem dosáhnout doostření obrazu ve frekvenční doméně.

Doostřený obraz lze poté s využitím vztahu 3.22 vyjádřit ve tvaru:

$$g = f + f * H_{\frac{1}{\sigma}}. \quad (3.28)$$

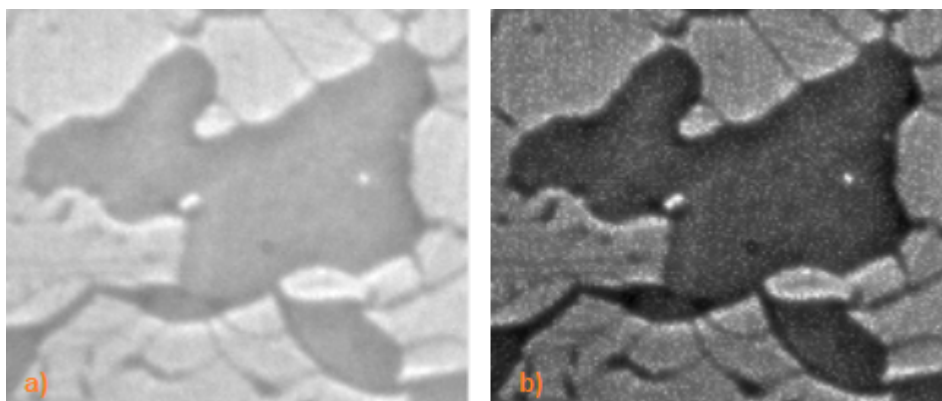
Podobně jako v kap. 3.1.2 lze pro zrychlení výpočtu vzorec přepsat za použití Diracova jádra 3.21 do komplexnějšího tvaru:

$$g = f * D + f * \left(D - G_{\frac{1}{\sigma}} \right) = f * \left(2D - G_{\frac{1}{\sigma}} \right). \quad (3.29)$$

Při použití předchozího vztahu pro vizualizaci obrazu bychom se museli smířit se skutečností, že zesílení vysokých frekvencí je fixní. Abychom uživateli umožnili kontrolu nad zesílením, je třeba použít při výpočtu konstantu k , skrze kterou je ono zesílení laděno, a to vztahem:

$$g = f + k \cdot f * H_{\frac{1}{\sigma}} = f * \left[(k + 1)D - k \cdot G_{\frac{1}{\sigma}} \right]. \quad (3.30)$$

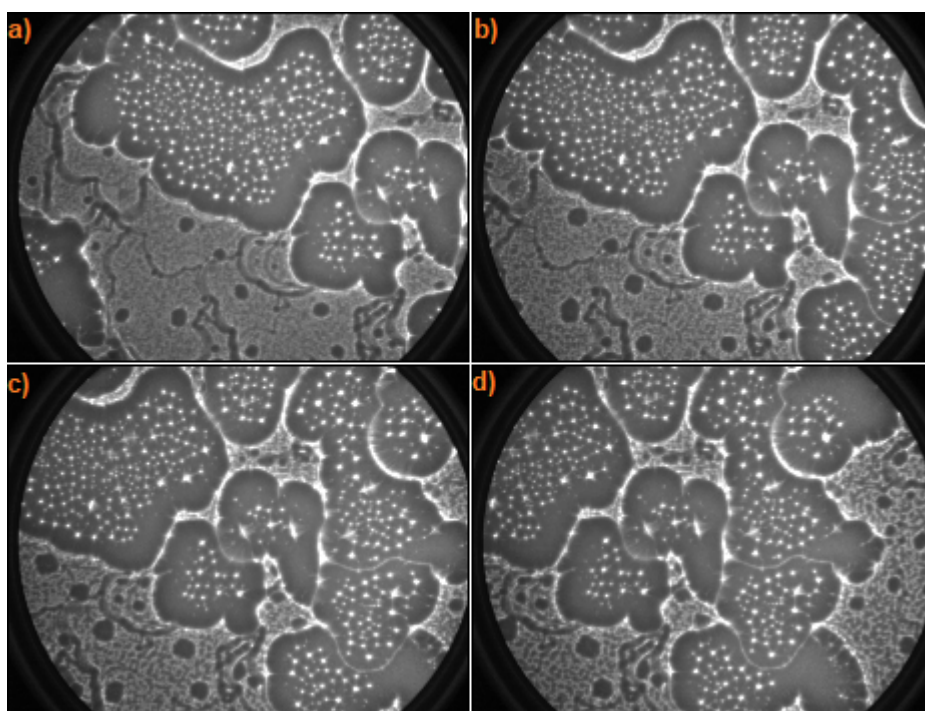
Konstantu k pak uživatel zadává spolu s parametry filtru horní propusti. Použití diskutované metody je poté ilustrováno na obr. 3.8.



Obrázek 3.8: Originální (a) zaostřený (b) snímek. Použito bylo symetrické gaussovské jádro o pološířce 10 pixelů a $\sigma = 0,8$. Konstanta k nabývala hodnoty 3.

3.1.4. Korekce posunu snímků ve videosekvenci

Jednou z největších předností metody LEEM je velká rychlost pořizování snímků, jež umožňuje studium povrchových dynamických procesů v reálném čase. K tomuto účelu je také uzpůsobena UHV komora pro analýzu vzorků, která poskytuje vybavení pro jejich přípravu a in-situ zpracování za vysokých teplot [12]. Zahřívání, resp. chlazení, vzorku nám umožňuje sledovat strukturní změny na površích, kinetiku růstu vrstev při adsorpci atomů z plynné fáze a jiné zajímavé jevy.



Obrázek 3.9: Ukázka teplotního posunu. Snímky byly pořízeny při chlazení vzorku elektronovým svazkem o energii 1,1 eV. Průměr apertury je $10\ \mu\text{m}$.

Při měření videosekvencí za vysokých teplot však zaznamenáváme posuny mezi jednotlivými snímky, jak názorně demonstruje obr. 3.9. V důsledku teplotní roztažnosti konstrukčních materiálů totiž dochází k posunu držáku se vzorkem vůči zornému poli mik-

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT

roskopu. Tento nežádoucí artefakt poté v mnoha případech zcela znemožňuje následnou analýzu získaných dat, a je proto nezbytné jej efektivně odstranit.

Pro tento účel byla implementována metoda korekce posunu snímků založená na fázové korelaci, jež je v současné době osvědčenou a široce používanou technikou pro sesazení obrazů. Původně byla metoda fázové korelace navržena pouze pro měření relativního posunutí mezi obrázky [28]. Dnes se však používá také k registraci obrazů, které jsou vzájemně otáčeny [29], případně u nich došlo ke změně měřítka [30]. Jiné geometrické transformace jsou při použití stejného zařízení pro pořízení obrazů obvykle zanedbatelné.

Fázová korelace je založena na výpočtu Fourierovy transformace obrazů určených k registraci. Díky tomu, že je při korelaci využívána pouze fázová informace, není metoda příliš citlivá na změny osvětlení [31]. Při odhadování pohybu je pak využíváno skutečnosti, že translaci v prostorové doméně odpovídá jistý protějšek v doméně frekvenční.

Mějme nyní dva obrazy $f(x, y)$, $g(x, y)$, kdy obraz g je posunut vůči f o vektor (x_0, y_0) , tj. platí:

$$g(x, y) = f(x - x_0, y - y_0). \quad (3.31)$$

Dále označme odpovídající Fourierova spektra obrazů (viz kap. 3.14) jako $F(\xi, \eta)$, $G(\xi, \eta)$. Pak definujeme tzv. křížové spektrum (z angl. cross-power spectrum) $C(\xi, \eta)$ jako [32]:

$$C(\xi, \eta) = F(\xi, \eta)G^*(\xi, \eta), \quad (3.32)$$

kde G^* je komplexně sdružený obraz ke G , a normované křížové spektrum $N(\xi, \eta)$ jako [32]:

$$N(\xi, \eta) = \frac{C(\xi, \eta)}{|F(\xi, \eta)G(\xi, \eta)|}. \quad (3.33)$$

V souladu s tzv. posunovým teorémem (viz např. [20], str. 42), lze poté extrahovat fázi normovaného křížového spektra N . Platí tedy:

$$N(\xi, \eta) = \exp \left[i2\pi \left(\frac{\xi x_0}{M} + \frac{\eta y_0}{N} \right) \right], \quad (3.34)$$

kde M , N jsou rozměry obrazu.

Definujeme-li pak funkci $n(x, y)$ vztahem [32]:

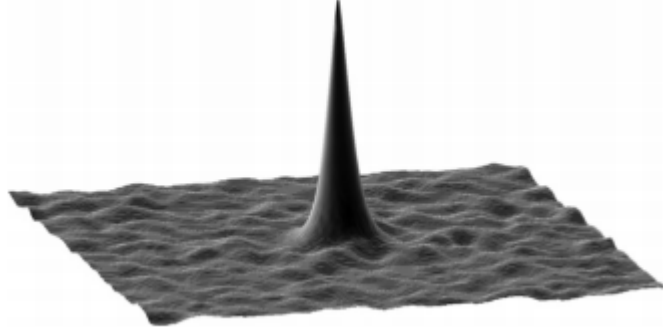
$$n(x, y) = \mathcal{D}^{-1}\{N(\xi, \eta)\}, \quad (3.35)$$

pak n , někdy též označovaná jako funkce fázové korelace, je delta funkce posunutá o vektor $(-x_0, -y_0)$ [20]:

$$n(x, y) = \delta(x + x_0, y + y_0). \quad (3.36)$$

Nalezení vektoru (x_0, y_0) vzájemného posunu mezi dvěma obrazy pak v praxi znamená nalezení souřadnic nenulového prvku obrazové matice n .

Pro reálné obrazy však přesnou delta funkci podle vztahu 3.36 zpravidla nezískáme. Důvodem je skutečnost že obrazy f , g většinou obsahují šum, jsou různě kontrastní a obecně nemusejí být zcela totožné (zejména jedná-li se o po sobě jdoucí snímky videosekvence). V obrazu n pak pozorujeme jakýsi „korelační povrch“ s lokálním maximem v oblasti bodu $(-x_0, -y_0)$, a řadou vedlejších píků lokalizovaných na různých souřadnicích.



Obrázek 3.10: 3D reprezentace korelačního píku v obraze n (oblast (15×15) pixelů). Obrázek přejat z [32].

Abychom zajistili přesnou detekci posunu, je žádoucí aby v obraze n vznikl na translačních souřadnicích ostrý, dobře definovaný pík, jako na obr. 3.10. K tomu účelu je nutné provést filtraci nežádoucího šumu, jež probíhá v několika krocích.

Použití Fourierovy transformace při výpočtu vede k periodizaci vstupního signálu [31], kdy se protilehlé okraje obrazu efektivně spojují. Vzhledem k tomu, že intenzita na protilehlých stranách je zpravidla různá, dochází ve výsledné funkci ke vzniku ostrých přechodů v místech hran původního obrazu. Tyto skokové změny jsou pak zpravidla nejkontrastnějšími strukturami funkce, a mohou tak způsobovat vznik rušivých píků. Vynásobíme-li vstupní obrazy f , g funkcí w , jejíž hodnoty se blíží nule na hranách obrazu a uvnitř obrazu nabývá hodnoty 1, vyhladíme tak tyto nežádoucí ostré přechody. Funkce w bývají zpravidla označovány anglickým názvem *window functions* a v praxi je používána celá řada různých typů [33]. V našem případě použijeme patrně nejznámější z nich, tzv. Hanningovu funkci, kterou je možné definovat (pro 1D případ) takto [33]:

$$w(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{2\pi x}{M} \right) \right], & |x| \leq \frac{M}{2}, \\ 0, & |x| \geq \frac{M}{2}, \end{cases} \quad (3.37)$$

kde M je šířka obrazu.

Dalším zdrojem poruch mohou být nízké amplitudy některých prostorových frekvencí, které způsobují, že křížové spektrum C je normováno hodnotami blízkými nule [32]. Problém lze snadno vyřešit tak, že k jednotlivým modulům Fourierových obrazů v rovnici 3.33 přičteme kladnou konstantní hodnotu (p, q) , tedy [32]:

$$N_{p,q}(\xi, \eta) = \frac{C(\xi, \eta)}{(|F(\xi, \eta)| + p)(|G(\xi, \eta)| + q)}. \quad (3.38)$$

Námi korelované obrazy f , g obsahují vždy určitý podíl aditivního šumu, který rovněž přispívá k rozmazání translačního píku v obraze n . Metodami filtrace šumu jsme se již zabývali v kapitole 3.1.2. Jedním z námi diskutovaných filtrů byl také gaussovský filtr dolní propusti, kdy ve frekvenční doméně aplikujeme podle vztahu 3.16 gaussovskou váhovou funkci 3.17. Stejným mechanismem lze poté odstranit aditivní šum i ze semi-normovaného křížového spektra $N_{p,q}(\xi, \eta)$. Funkci (semi-)fázové korelace pak můžeme vyjádřit ve tvaru:

$$n_{p,q,\sigma}(x, y) = \mathcal{D}^{-1} \{ N_{p,q}(\xi, \eta) G_{\sigma}(\xi, \eta) \}. \quad (3.39)$$

Předešlými postupy lze dosáhnout ostrého globálního maxima na souřadnicích $(-x_0, -y_0)$, jak ilustruje obr. 3.10. Při vyhodnocování modelových dat však bylo zjištěno, že i přes

3.1. METODY PRO ZPRACOVÁNÍ OBRAZOVÝCH DAT

zjevný vzájemný posun mezi jednotlivými snímky byl pík při korelaci často situován na souřadnicích $(0, 0)$ odpovídajících nulovému posunu. Obraz n je totiž reprezentován maticí a hledané souřadnice tak mají celočíselnou hodnotu. Tato přesnost však pro mnohé aplikace není dostačující, a je proto nezbytné ji rozšířit na subpixelovou úroveň.

K tomuto účelu bylo vyvinuto několik metod založených zejména na interpolaci korelačního povrchu [34, 35]. Jako velmi robustní se však ukázala metoda založená na výpočtu geometrických momentů $M_{r,s}$ [32]. Subpixelové souřadnice $(\bar{x}_0, \bar{y}_0)$ vektoru posunu zde získáme jako:

$$(\bar{x}_0, \bar{y}_0) = \left(\frac{M_{1,0}}{M_{0,0}}, \frac{M_{0,1}}{M_{0,0}} \right), \quad (3.40)$$

kde momenty $M_{r,s}$ jsou počítány pro okolí bodu (x_0, y_0) s poloměrem $\epsilon \in \mathbb{R}^+$ podle vztahu:

$$M_{r,s} = \sum_{x^2+y^2 < \epsilon^2} x^r y^s n_{p,q,\sigma}(x_0 + x, y_0 + y). \quad (3.41)$$

Bod $(\bar{x}_0, \bar{y}_0)$ pak můžeme pokládat za těžiště okolí píku s poloměrem ϵ .

Kompenzace posunu snímků ve videosekvenci LEEM je při použití námi navrhovaného softwaru prováděna ve dvou krocích, jimiž je nejprve detekce posunových vektorů a následně samotná korekce. Při detekci uživatel nejprve definuje oblast snímku (ROI), která bude použita při výpočtu vzájemného posunu. Výběrem oblasti je přitom podstatným způsobem ovlivněna rychlost výpočtu, neboť časová složitost $O(K)$ algoritmů stanovující jejich operační náročnost se zvětšuje spolu s veličinou K popisující velikost vstupních dat (v našem případě lze tuto hodnotu ztotožnit s celkovým počtem pixelů). Zvolená oblast by však měla být dostatečně velká, aby byla zajištěna přesnost výpočtu. Uživatel má následně kontrolu nad čtyřmi parametry: p , q , σ a ϵ , jejichž význam je definován vztahy 3.38, 3.39, 3.41.

Citlivost metody na parametry p , q naštěstí není příliš velká. Tyto hodnoty jsou zadávány v procentech maximální amplitudy Fourierovy transformace, a jako typické byly identifikovány hodnoty v rozsahu $\langle 0,01; 0,1 \rangle$ [32]. Defaultně nastavená hodnota 0,01 je pak vyhovující pro většinu videosekvencí LEEM.

Naopak citlivost vůči parametru σ je značná, a je proto nezbytné jej volit velmi pečlivě. Je-li zvolena příliš vysoká hodnota, může docházet k nesprávné identifikaci maxima. Naopak nastavení na příliš nízkou hodnotu způsobuje silné potlačení vysokých prostorových frekvencí, čímž se opět snižuje přesnost sesazení.

Rovněž parametr ϵ je nutné volit velmi obezřetně. Velká hodnota znamená, že pro výpočet subpixelového rozšíření je použita větší oblast, což může být účelné v případě širšího translačního píku. Příliš velký poloměr oblasti však může, např. v případě nesymetrického píku, způsobit nepřesné sesazení. Obvyklé hodnoty se pak pohybují v rozsahu 3 až 8 [20].

Obecně doporučujeme nejprve provést „hrubé“ sesazení pro výchozí hodnoty p (q), ϵ nalezením vhodné směrodatné odchylky σ , a následně výsledek doladit zbylými parametry.

Vzhledem k tomu, že výpočet je prováděn pro celou videosekvenci najednou, je často velmi zdoluhavý. Důvodem je značná časová složitost jednotlivých procesů, zejména (inverzní) Fourierovy transformace. Z toho důvodu je metoda prováděna asynchronně, tj. na jiném vlákne, než na které běží samotná aplikace. Díky tomu je program (potažmo celý počítač) i v průběhu výpočtu stále interaktivní.

Výhodou detekce posunu v rámci celé videosekvence najednou je, že stanovené vektory posunu jsou po ukončení výpočtu uloženy v paměti. Při samotné korekci videosekvence, kdy uživatel opět nejprve definuje oblast, která má být korigována, tak může sesazení snímků provádět opakovaně pro různé oblasti. Korekce je pak navíc, na rozdíl od detekce, okamžitá.

Sesazení definovaných oblastí je prováděno prostým posunem daného ROI podél vektoru posunu, jenž odpovídá příslušné dvojici snímků. Pokud dojde k tomu, že ROI zasáhne mimo oblast obrazu, je proces zastaven, a počet snímků korigované videosekvence je tak oproti vstupu snížen. Tento fakt by měl být uživatelem brán v potaz při definici oblasti určené ke korekci s ohledem na posun ve zkoumané videosekvenci, aby pro pozdější analýzu bylo využito maximální množství experimentálních dat (snímků).

3.2. Metody pro analýzu obrazových dat

V tuto chvíli se přesuneme od zpracování obrazových dat, jež bylo předmětem předešlé kapitoly, k metodám obrazové analýzy. Při zpracování obrazu bylo naším hlavním cílem odstranění nežádoucích artefaktů, které by bránily korektní interpretaci dat. Tohoto cíle bylo zpravidla dosaženo vhodnou transformací hodnot pixelů, která však zároveň narušila charakter obrazu.

Při analýze obrazových dat se však již zaměříme na extrakci informací, které jsou v obrazech obsaženy. Mezi základní analytické techniky patří zejména techniky segmentační, jejichž cílem je rozlišit pozadí obrazu od objektů našeho zájmu.

Mezi nejpoužívanější metody segmentace pak patří zejména tzv. prahování a detekce hran. Tyto metody však z časových důvodů nebyly do námi předkládaného programu implementovány. Jedná se však o mocné nástroje, které by našly uplatnění zejména při studiu kinetiky dynamických procesů. Zásadní jevy, jež jsou předmětem našeho zkoumání, se totiž zpravidla odehrávají na hranicích ostrůvků deponovaného materiálu. Binarizace obrazu procesem prahování a následná segmentace hran by tedy vedly ke značnému zjednodušení problému a ke snadné interpretaci experimentálních dat. Implementace těchto metod tak do budoucna zůstává jistým příslibem.

V rámci navrhovaného softwaru jsme se zaměřili na možnosti měření tzv. I-V křivek, jež jsou tématem následující kapitoly.

3.2.1. Měření I-V křivek

V úvodní kapitole této práce (kap. 2) jsme měli možnost odhalit úzkou spojitost mezi metodou LEEM, určenou k zobrazení povrchů, a metodou LEED, jež nám umožňuje strukturní analýzu zkoumaného vzorku. Zároveň jsme zmínili, že intenzita difraktovaných paprsků obsahuje informace o uspořádání atomů v rámci elementární buňky krystalu.

Abychom však mohli tyto informace extrahovat a vyhodnotit tak skutečné polohy atomů, je nutné přistoupit k analýze intenzity spotu difrakčního obrazce jako funkce energie primárních elektronů. Tato závislost bývá označována jako I-V křivka (I – intenzita, V – akcelerační napětí elektronů).

Měření I-V křivek v samostatných systémech LEED je prováděno buď přímým měřením proudu svazku pomocí pohyblivého Faradayova detektoru (*Faraday cup*), nebo pomocí kamery doprovázené počítačem řízeným zpracováním dat. V námi používané apa-

3.2. METODY PRO ANALÝZU OBRAZOVÝCH DAT

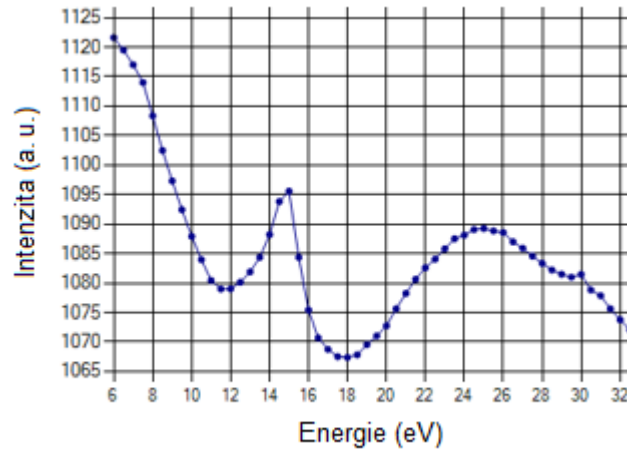
ratuře LEEM jsou zaznamenávány videosekvence difrakčních obrazců. Jednotlivé snímky jsou přitom pořizovány prostřednictvím elektronového svazku, jehož energie se s každým snímkem zvětšuje o předem nastavený krok.

Samotnou I-V křivku pak získáme na základě analýzy těchto videosekvencí. Provedení korektní analýzy je pak většinou spojeno s nutností použít před vyhodnocením dat některou z metod filtrace šumu, diskutovaných v kap. 3.1.2. Nejčastěji bývá používán filtr horní propusti pro potlačení vlivu sekundárních elektronů.

Námi navržená implementace určená k vyhodnocení experimentálních dat je poté, podobně jako korekce posunu, prováděna ve dvou krocích. Nejprve jsou uživatelem v obrazu definovány kruhové oblasti („spoty“), ve kterých bude prováděno následné měření. Program přitom umožňuje určení až pěti oblastí najednou, přičemž jejich poloměr ϕ je stanoven v jednotkách pixelů. Následuje samotné měření intenzity difrakčního paprsku. Uživatel nejprve specifikuje podmínky měření, tj. počáteční energii svazku a energetický krok, načež je pro každý i -tý snímek f_i videosekvence stanovena intenzita I_i jako součet hodnot pixelů uvnitř definovaných spotů se středem v bodu (x_s, y_s) , tedy:

$$I_i = \sum_{x^2+y^2 \leq \phi^2} f_i(x_s + x, y_s + y). \quad (3.42)$$

Množina hodnot I_i je poté zobrazena v grafu v energetické škále odpovídající zadaným podmínkám měření. Pro účely vizualizace výsledků, byl přitom pro metodu navržen zvláštní formulář (uživatelské rozhraní systému Windows).

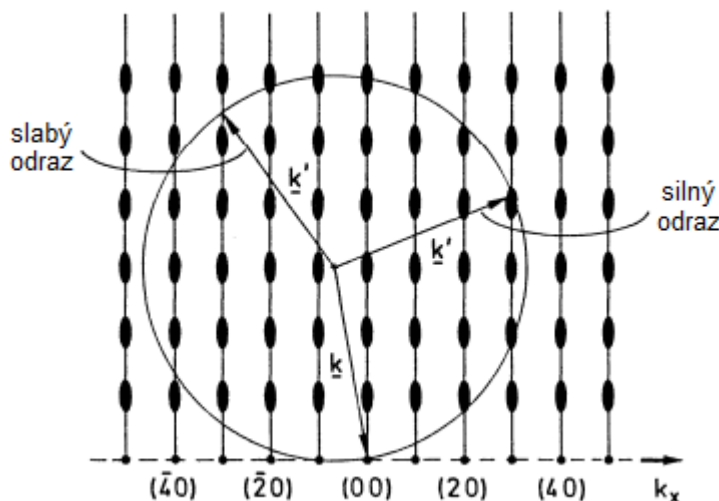


Obrázek 3.11: I-V křivka pro zrcadlový svazek měřená v oblasti o poloměru 10 pixelů. Před měřením byl aplikován gaussovský filtr horní propusti o pološířce 80 pixelů (symetrický).

Jedna z námi změřených I-V křivek je zobrazena na obr. 3.11. Získané výsledky lze přitom názorně interpretovat pomocí Ewaldovy konstrukce.

V kap. 2.2 jsme uvedli konstrukci pro případ, kdy je do rozptylu zapojena jen jedna monovrstva povrchu vzorku (viz obr. 2.2). V reálném experimentu LEED však primární elektrony pronikají do pevné látky skrze několik atomových vrstev. Se zvětšující se hloubkou průniku se zvyšuje také počet rozptylů, které přispívají k difrakčnímu vzoru. To vede k modulaci intenzit ve všech difrakčních směrech ve srovnání s dříve zmíněným případem „čistého“ 2D rozptylu. Ta se v Ewaldově konstrukci 2.2 projeví tak, že se podél jednotlivých δ -rods bude intenzita periodicky měnit.

Ewaldova koule pro rozptyl na této kvazi-2D mřížce povrchu, kdy bereme v úvahu nejen nejsvrchnější rovinu mřížky, ale také několik spodních rovin, je vyobrazena na obr. 3.12.



Obrázek 3.12: Ewaldova konstrukce pro elastický rozptyl na kvazi-2D povrchové mřížce. Obrázek přejat z [36].

Právě tento obrázek kvalitativně vystihuje námi změřenou I-V křivku. Se zvětšující se energií primárních elektronů se zvětšuje velikost vlnového vektoru, tedy i poloměr Ewaldovy koule. Její okraj poté postupně prochází silnějšími a slabšími oblastmi δ -rods, což vede k periodické změně intenzity příslušných difrakčních spotů. Píky v obr. 3.11 tak odpovídají maximům podél příslušné δ -rod, které vznikají důsledkem Laueho podmínky pro složku kolmou k povrchu, která není v tomto případě zanedbatelná [36].

Jak jsme již zmínili, na základě změřených I-V křivek lze odhalit skutečné uspořádání atomů v jednotkové buňce povrchu. Stanovení polohy atomů je však netriviální proces, kdy je nejprve navržena struktura konzistentní se symetrií difrakčního vzoru, a následně jsou spočítány I-V křivky pro několik difrakčních směrů, které jsou porovnány s experimentálními daty. Na základě výsledku pak může být model upraven, a vyhodnocení iterativně pokračuje dokud není dosaženo uspokojivé shody. V takovém případě je navržený model prohlášen za námi zkoumanou strukturu. Korektně změřená experimentální data jsou tak pro tento postup stěžejní.

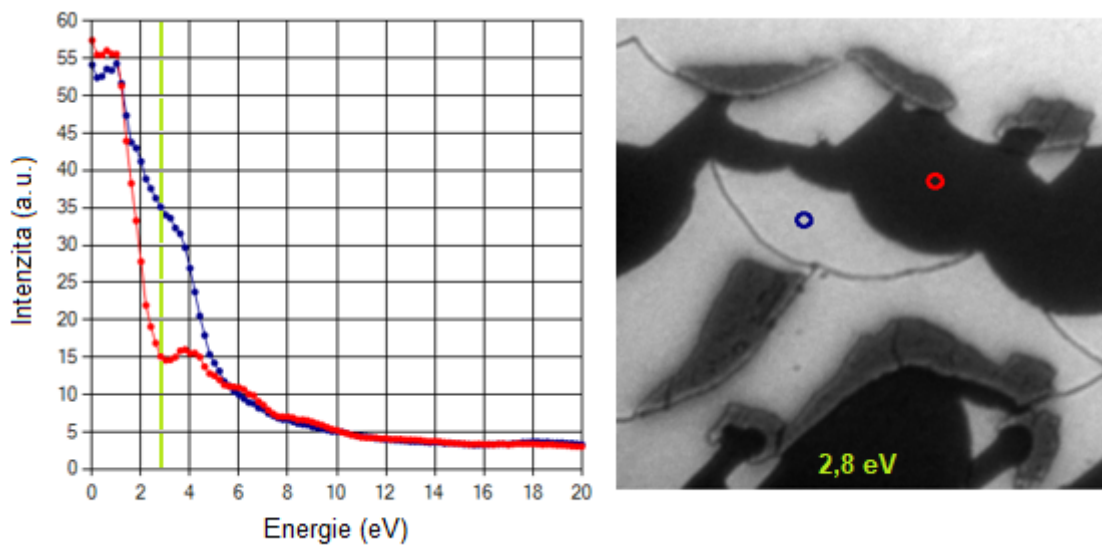
Měření I-V křivek však není v zařízení LEEM limitováno pouze na reciproký prostor, ale je možné je provádět i pro konkrétní difrakční směr. Podobně jako v předešlém případě je však nutné nejprve odstranit z experimentálních dat nežádoucí artefakty, které by bránily korektní analýze. Jedná se zejména o vzájemný posun mezi jednotlivými snímky, který by, v případě, že by nebyl odstraněn, způsoboval vznik šumu ve stanovené I-V křivce.

V kapitole 3.1.4 jsme jako nejčastější příčinu tohoto posunu označili teplotní roztažnost konstrukčních materiálů. Ta se však projevuje pouze při teplotně závislých měřeních. Měření I-V křivek tak bude ovlivněno hlavně vadami v zobrazení, které je obecně poměrně složité efektivně korigovat. Samotný posun je nejspíš způsoben nakloněním studovaného vzorku. Primární svazek tak nedopadá na povrch v kolmém směru, což se při změně energie elektronů projeví tímto způsobem.

Výsledkem vyhodnocení korigované sekvence snímků reálného prostoru je poté závislost intenzity svazku odraženého od definované oblasti povrchu na primární energii, tedy v přeneseném významu energetická závislost odrazivosti. Stanovení této závislosti nám poté může pomoci zvolit vhodné experimentální podmínky, vedoucí k pořízení kontrast-

3.2. METODY PRO ANALÝZU OBRAZOVÝCH DAT

ního snímku studovaného povrchu. Ukázka námi změřené I-V křivky a nejkontrastnějšího obrazu (s ohledem na definované oblasti) je vyobrazena na obr. 3.13.



Obrázek 3.13: I-V křivka (a) změřená v reálném prostoru, snímek povrchu vzorku (b) s maximálním kontrastem (rozdílem odrazivostí) mezi definovanými spoty o poloměru 10 pixelů.

4. Vyhodnocení dat

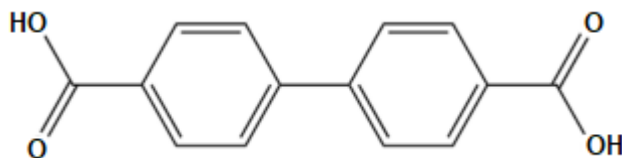
V rámci aplikace námi navrženého softwaru jsme se zaměřili na použití metody pro kompenzaci vzájemného posunu mezi jednotlivými snímky změřených videosekvencí. Při studiu dynamických procesů probíhajících na površích totiž nejčastěji právě tento artefakt ztěžuje a v mnoha případech zcela znemožňuje korektní interpretaci experimentálních dat. Algoritmus fázové korelace proto vnímáme jako stěžejní příspěvek této diplomové práce.

4.1. Studované dynamické procesy

Přestože v oblasti povrchové vědy je za jeden z nejslibnějších materiálů tradičně považován grafen [37], stále více vědců upíná v posledních letech svou pozornost ke studiu organických, potažmo organokovových vrstev s laditelnými funkčními vlastnostmi [38, 39]. Mezi rozšířené postupy přípravy takovýchto vrstev patří molekulární samouspořádávání (tzv. *self-assembly*) [40]. Klíčovým předpokladem pro výrobu organických filmů s přesně definovanými vlastnostmi je však pochopení jejich vzniku a kinetiky růstu. Tyto procesy lze přitom snadno studovat pomocí metody LEEM.

Pro testování implementovaných metod zpracování a analýzy obrazu jsme proto zvolili experimentální data zachycující procesy transformace v samouspořádaných systémech. Zaměřili jsme se přitom na vyhodnocení videosekvencí fázových transformací bifenyldikarboxylové kyseliny (dále jen BDA), jež byla předmětem několika studií [42, 41, 43, 44] probíhajících v laboratořích CEITEC. Zde zpracovaná data byla změřena v rámci projektů [42, 43, 44].

Při experimentech byl jako substrát použit monokrystal stříbra s orientací (001). Před depozicí byl povrch Ag očištěn iontovým odprašováním (použity byly ionty Ar^+) a žíháním při 550°C . Substrát byl následně pomalu ochlazen a udržován na pokojové teplotě. Na takto upravený povrch byly poté deponovány molekuly BDA. Olejem zahříváný kalíšek s molekulárním prekurzorem byl přitom udržován na teplotě 185°C . Tento způsob ohřevu zajistil velmi přesnou kontrolu teploty, která je při depozici organických materiálů klíčová.



Obrázek 4.1: Strukturní vzorec molekuly 4,4'-bifenyldikarboxylové kyseliny (BDA).

Na obr. 4.1 je vyobrazen strukturní vzorec molekuly BDA. Ta obsahuje dvě koncové karboxylové skupiny, které mohou zprostředkovávat vodíkové můstky, a umožňují tak tvorbu supramolekulárních systémů. Tyto intermolekulární vazby v samouspořádaných strukturách však mohou být modifikovány prostřednictvím tzv. deprotonace, tj. disociací vodíkových atomů z karboxylových skupin BDA. To vede ke změně chemické povahy těchto funkčních skupin, která se projeví v přeuspořádání molekulárních sítí.

K deprotonaci karboxylových skupin dochází při žíhání. Při zvyšování teploty tak na povrchu pozorujeme řadu fází, které mohou být tvořeny nedotčenými a částečně nebo plně deprotonovanými molekulami BDA. Transformace mezi těmito fázemi pak probíhá buď nukleací a růstem ostrůvků nové fáze s odlišnou strukturou na volném povrchu substrátu, nebo v rámci ostrůvků stávající fáze v případě, že se jejich struktura podobá [43].

4.2. PROCES VYHODNOCENÍ DAT

Velmi komplexní popis možných fází molekulárních vrstev BDA je uveden v [42, 44]. V následujícím textu uvedeme pouze základní vlastnosti některých z nich. Fáze budou uvedeny v pořadí, v jakém vznikají při postupující deprotonizaci.

Jsou-li molekuly BDA deponovány způsobem popsaným v předešlém textu, vzniká na substrátu fáze skládající se z nedotčených molekul BDA (jako na obr. 4.1), tj. s nedeponovanými karboxylovými skupinami. Tuto fázi budeme označovat α [44]. Prostřednictvím vodíkových vazeb mezi atomy vodíku a kyslíku sousedních molekul se vytvářejí prodloužené řetězce. Ty jsou k sobě slabě vázány, a formují tak ostrůvky, které poté pozorujeme na obrazech LEEM. Tyto ostrůvky mají protáhlý tvar a při zobrazení ve světlém poli vykazují tmavý kontrast vůči světlému substrátu.

Se zvyšující se teplotou dochází nejprve ke zmenšování ostrůvků fáze α . Postupná deprotonace molekul BDA poté indukuje fázovou transformaci $\alpha \rightarrow \beta$ [44]. Nukleace nově vzniklé fáze β přitom probíhá na různých místech vzorku mimo ostrůvky fáze α . Nukleované ostrůvky β fáze poté rostou na úkor domén fáze α a prekursorové molekuly se přednostně připojí právě k nim, tj. nedochází k další nukleaci. Po úplné transformaci je na povrchu přítomna pouze fáze β .

Ta je uspořádána do řetězců především skrze vodíkový můstek, jenž se formuje mezi vodíkem karboxylové skupiny a kyslíkem karboxylátu vzniklého disociací atomu vodíku. Zbývající kyslíkové atomy pak zprostředkovávají vazby mezi jednotlivými řetězci. V β fázi jsou přítomny nedotčené, ale i částečně a plně deprotonované molekuly BDA, které jsou náhodně uspořádány do periodické mřížky. Na rozdíl od α fáze, která je chemicky uniformní, ale strukturálně narušená, tak fáze β naopak vykazuje pravidelné strukturní uspořádání na velké vzdálenosti, ovšem za cenu určité chemické nejednotlosti.

Je-li vzorek žíhán dlouho, resp. na vysokou teplotu, vzniká na povrchu fáze tvořená plně deprotonovanými molekulami BDA. Tuto fázi budeme označovat δ [42, 44]. Jednotlivé molekuly BDA jsou v tomto případě umístěny ve vrcholech trojúhelníků, přičemž u každého vrcholu se střetává celkem šest takových trojúhelníků. Karboxylátové skupiny jednotlivých molekul směřují k benzenovému jádru sousední BDA. V tomto uspořádání byly navíc identifikovány dvě molekulární struktury, které vykazují chiralitu uspořádání jednotlivých molekul [42]. Tato fáze pak tvoří na substrátu ostrůvky řádově mikrometrických rozměrů.

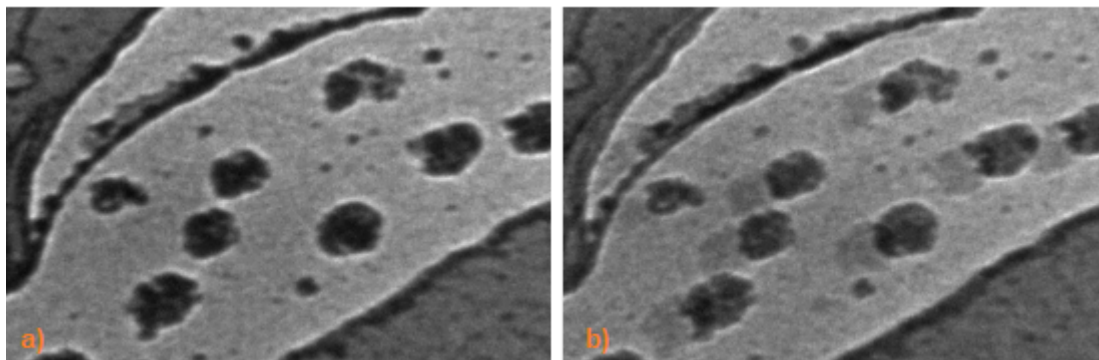
Během žíhání byl vzorek monitorován pomocí metody LEEM. Získaná obrazová data tak demonstrují prostorový a časový vývoj povrchových fází popsaných v předešlém textu během jejich transformace.

4.2. Proces vyhodnocení dat

Detekci posunu metodou fázové korelace předcházela zběžná vizuální inspekce změřených dat. Jejím cílem bylo odstranění těch snímků videosekvence, které by potenciálně mohly způsobovat nejistoty ve stanovených vektorech posunu, nebo které neobsahovaly žádné relevantní informace.

Při měření fázových transformací na vzorcích s neúplným pokrytím substrátu je žádoucí vyhledat ta místa na vzorku, kde můžeme pozorovat všechny procesy, které jsou předmětem našeho zájmu. Během měření a jedné videosekvence je tak z praktických důvodů běžné makroskopické přesouvání na zcela jiné místo povrchu. Sekvence snímků, které zaznamenávají tyto přeskoky, je poté vhodné odstranit a s ohledem na následnou

analýzu je účelné videosekvence v tomto místě rozdělit. Jednotlivé části pak reprezentují časoprostorový vývoj povrchových fází na námi vybraných místech vzorku.



Obrázek 4.2: Snímek skutečných struktur deponovaných na povrchu (a) a zdvojení těchto struktur (b) způsobené posunem obrazu v průběhu expozice.

Přesnost analýzy posunu rapidně snižují zejména defektní snímky. Ty mohou vznikat např. důsledkem posunutí obrazu v průběhu expozice. Je-li expoziční čas kupříkladu 1 s a k posunutí dojde před uplynutím této doby, řekněme po 0,5 s, pak v pořízeném snímku pozorujeme zdvojení struktur jako na obr. 4.2. Vzhledem k tomu, že metoda fázové korelace je definována pro snímky, které se liší pouze posunem (viz rovnice 3.31, kap. 3.1.4), byly by vektory posunu pro několik okolních snímků stanoveny nesprávně. Opět je tedy nutné tyto poruchy před vyhodnocením odstranit.

Námi studovaná experimentální data zachycují transformaci $\alpha \rightarrow \beta$ a fázi δ . Abychom mohli posoudit vliv odlišné příčiny vzniku posunu, zahrnuli jsme také vyhodnocení I-V křivek (v reálném prostoru) pro fázi δ .

Obrazová data zachycující δ fázi jsme označili jako δ_1 , δ_2 a δ_3 . Všechny tyto sekvence byly měřeny elektronovým svazkem o energii 1,1 eV. Průměr apertury činil $10\ \mu\text{m}$. Vzorky δ_1 , δ_3 byly při měření chlazeny, vzorek δ_2 naopak zahříván.

Videosekvence zobrazující fázovou transformaci $\alpha \rightarrow \beta$ vyvolanou zahříváním budou dále značeny β_1 , β_2 a β_3 . Vzorky β_1 , β_2 byly ozařovány svazkem se stejnou energií, 1,5 eV, ovšem velikost zorného pole byla rozdílná, a sice 7, resp. $10\ \mu\text{m}$. V případě β_3 byly parametry měření 3 eV a $5\ \mu\text{m}$.

Snímky určené pro stanovení I-V křivek byly pořízeny elektrony s počáteční energií 0 eV, jež se postupně zvětšovala s krokem 0,2 eV. Zobrazena přitom byla oblast o průměru $3\ \mu\text{m}$. Vyhodnoceny byly dvě videosekvence pojmenované IV_1 , IV_2 .

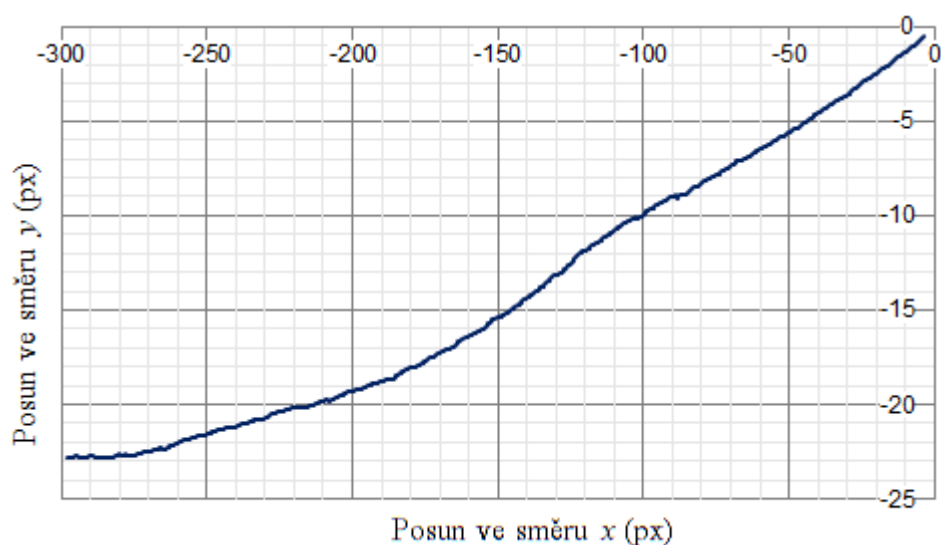
Kompensace posunu snímků ve studovaných videosekvencích byla provedena metodologií popsanou v kapitole 3.1.4. Před spuštěním detekce byla definována oblast obrazu, pro kterou má být proveden výpočet. Velikost oblasti přitom ovlivňuje rychlost výpočtu, ale, jak bylo námi potvrzeno, také jeho výsledek. Pro všechna vyhodnocovaná data byla ze zjevných důvodů definována největší možná oblast nezahrnující aperturu mikroskopu. Tuto oblast jsme poté při hledání vhodných parametrů výpočtu neměnili, neboť hodnoty parametrů by se pro různé oblasti obecně lišily. Při rozlišení obrazů 688×520 pak výpočet trval v rozmezí 8–25 s v závislosti na počtu snímků v konkrétní videosekvenci. Poznamenejme, že při rozlišení 1376×1040 je doba výpočtu při stejném počtu snímků přibližně dvojnásobná.

Jak bylo zmíněno v kap. 3.1.4, z parametrů výpočtu, jimiž jsou směrodatná odchylka σ , poloměr okolí ϵ a parametr $p(q)$, má největší vliv na výsledek σ . Jako dobrý postup

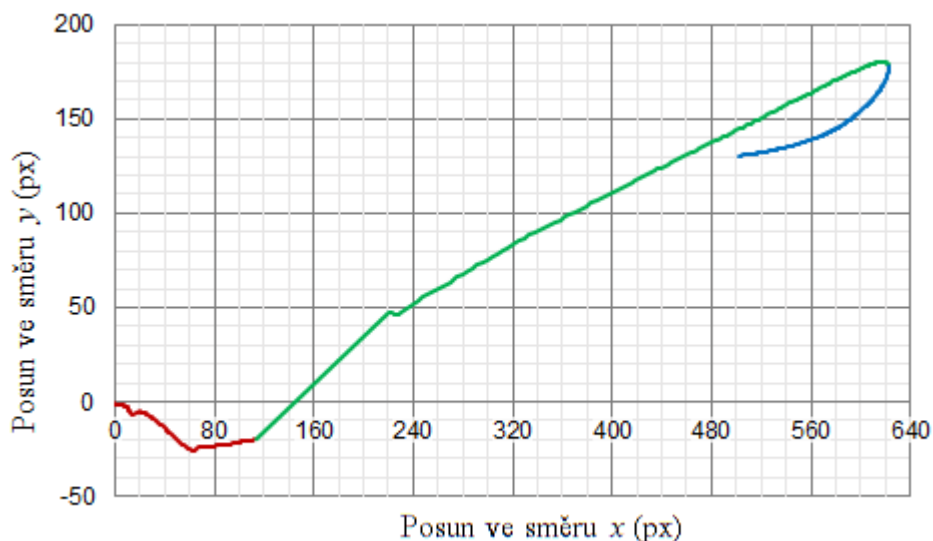
4.2. PROCES VYHODNOCENÍ DAT

Tabulka 4.1: Parametry fázové korelace pro vyhodnocená data

Typ vzorku	Označení	Korelační parametry		
		σ	p(q)	ϵ
δ -faze	δ_1	0,92	0,010	4
	δ_2	0,67	0,010	5
	δ_3	0,86	0,010	5
		0,86	0,010	5
		0,86	0,010	5
$\alpha \rightarrow \beta$	β_1	0,87	0,010	5
	β_2	0,83	0,010	5
	β_3	0,87	0,010	5
I-V křivky	IV_1	0,85	0,190	3
	IV_2	1,50	0,220	5



Obrázek 4.3: Ilustrace posunu snímků ve videosekvenci δ_1 .



Obrázek 4.4: Ilustrace posunu snímků ve videosekvenci δ_3 . Jednotlivé barevné sekce odpovídají tomu, jak byla sekvence rozdělena. Každá tato část pak byla vyhodnocena zvlášť.

se tedy jevílo provedení počátečního hrubého sesazení nalezením vhodné směrodatné odchylky σ při výchozích hodnotách zbylých parametrů, a následné doladění jemného posunu skrze proměnné ϵ a $p(q)$. Námi nalezené hodnoty parametrů pro jednotlivá měření jsou shrnuty v tab. 4.1.

Ukázka posunu detekovaného mezi po sobě jdoucími snímky ve videosekvencích δ_1 a δ_3 je ilustrována na obr. 4.3, 4.4. Je zřejmé, že v případě sekvence δ_1 byl posun vůči prvnímu snímku víceméně lineární. Naproti tomu ve videosekvenci δ_3 byl posun velmi „divoký“, tj. docházelo k časté změně směru pohybu obrazu podél osy x i y . Možné dopady tohoto aspektu, a také celkové zhodnocení dosažených výsledků podrobně rozebereme v následující kapitole.

4.2. PROCES VYHODNOCENÍ DAT

5. Diskuze

Software, jehož vytvoření bylo hlavním cílem této diplomové práce, byl použit pro vyhodnocení časových sérií měření získaných metodou zobrazení nízkonoenergiiovými elektrony. Důraz byl přitom kladen zejména na korekci posunu snímků ve videosekvencích, který v mnoha případech zcela znemožňuje kvantitativní interpretaci dat. Pro tento účel byla implemetována metoda korekce posunu snímků založená na fázové korelaci, jež patří mezi spolehlivé a široce používané techniky. Na základě provedeného vyhodnocení experimentálních dat jsme nyní schopni posoudit vhodnost této metody a stanovit přiměřené postupy pro provedení přesné detekce a kompenzace zmíněného posunu.

Zhodnotme však nejprve námi dosažené výsledky. Volbou vhodných parametrů fázové korelačního výpočtu bylo u všech vyhodnocených videosekvencí dosaženo uspokojivé přesnosti sesazení snímků. Poznamenejme však, že o správnosti výsledku bylo rozhodováno pouze na základě našeho subjektivního posouzení. Nicméně vzhledem ke skutečnosti, že byly korigované sekvence pozorovány při značném zvětšení, byla i sebemenší nepřesnost snadno odhalitelná.

K velmi kvalitním výsledkům jsme dospěli zejména v případech, kdy detekovaný posun vykazoval jistou míru linearity, jak ilustruje obr. 4.3. Tento aspekt splňovaly v podstatě všechny námi vyhodnocované sekvence vyjma těch zachycujících I-V křivky, a také série δ_3 , u níž docházelo k relativně časté změně směru pohybu obrazu podél obou souřadnicových os (viz obr. 4.4).

Videosekvence δ_3 byla proto před analýzou rozdělena, jak je naznačeno na obr. 4.4. V jejích jednotlivých částech tak byla opět zajištěna určitá linearita posunu. Na základě předchozích zkušeností jsme předpokládali, že tento krok povede ke zpřesnění detekce. Naš předpoklad byl však provedením analýzy jednotlivých částí δ_3 vyvrácen. Jak je patrné z tab. 4.1, byly při vyhodnocení všech částí δ_3 pro detekci použity stejné parametry. Videosekvenci tak nebylo vůbec nutné dělit a mohla být vyhodnocena jako celek se stejnými parametry výpočtu při zachování přesnosti sesazení. Velmi dobrých výsledků je tedy možné dosáhnout nejen v případech, kdy je posun lineární v celém rozsahu sekvence, ale i pokud je linearita vykazována lokálně v rámci několika sekcí.

Na základě provedené analýzy jsme dále zjistili, že kvalita korekce je do jisté míry ovlivněna také velikostí posunu. Ta se nepříznivě projevila zejména při vyhodnocování sérií IV_1 , IV_2 , ve kterých byl detekován velmi malý, řádově pouze subpixelový pohyb snímků, jehož směr se navíc velmi dynamicky měnil. Vzhledem k tomu, že je možné vzájemně korigovat pouze posuny o celé pixely, dochází při větším počtu po sobě jdoucích subpixelových detekcích k zaokrouhlovacím chybám, které se projeví „chvěním“ ve výsledném videu. Jedná se však o artefakt, který není možné zcela odstranit, a lze jej proto považovat za jistou limitu fázové korelace. Kalibrovaná videa však i přesto vykazují řádově mnohem menší nežádoucí pohyb, než byl zaznamenán před jejich korekcí. Uklidnit nás navíc může skutečnost, že v případě lineárního subpixelového posunu, který byl odhalen i v sekvenci δ_2 , jsou nejistoty způsobené zaokrouhlením minimální a obdržené výsledky jsou tak více než obstojné.

Zaměřme se nyní na posouzení námi stanovených hodnot jednotlivých parametrů výpočtu, které jsou shrnuty v tab. 4.1. V kap. 3.1.4 jsme uvedli, že metoda fázové korelace je citlivá zejména na volbu směrodatné odchylky σ . Tomuto dogmatu, které potvrdily i naše analýzy, jsme také uzpůsobili postup vyhodnocení. Pro většinu experimentálních dat se hodnoty σ pohybovaly v relativně úzkém rozsahu 0,83–0,87. Výjimkou byly pouze vzorky

δ_2 a IV_2 . V případě druhého jmenovaného jde zřejmě o důsledek naší snahy potlačit zakrouhlovací chyby diskutované v předešlém textu. U série δ_2 však není důvod odchylky příliš zřejmý, můžeme jej však kvalitativně vysvětlit následovně.

Velikost σ určuje intenzitu filtrace aditivního šumu prostřednictvím gaussovského filtru dolní propusti. Vedlejším efektem filtrace je ovšem také rozmazání hran, které je ve většině případů nežádoucí. Při aplikaci v algoritmu detekujícím posun je však paradoxně v určitém smyslu prospěšné. Nesmíme totiž zapomínat na to, že metoda fázové korelace je definována pro obrazy, které se liší pouze posunem (viz rovnice 3.31, kap. 3.1.4). Po sobě jdoucí snímky sledující dynamické procesy na površích jsou však jistě odlišné a rozmazání výrazných struktur může tuto odlišnost do jisté míry potlačit. Vráťme-li se nyní k sekvenci δ_2 , ve které, jak jsme již zmínili, byl detekován jen velmi malý posun, je na základě předešlé úvahy zřejmé, proč došlo u této série k výraznému poklesu hodnoty σ – podobnost po sobě jdoucích snímků byla natolik velká, že nebylo třeba je více rozostřovat.

Jako vhodná se ukázala být defaultně nastavená hodnota parametru $p(q)$, jež vyhovovala naprostě většině studovaných dat. Velmi zajímavý je však rapidní nárůst $p(q)$ při korekci posunu snímků určených ke stanovení I-V křivek. K vysvětlení tohoto jevu se však musíme podrobně zamyslet nad charakterem studovaných dat. Snímky sekvencí I-V křivek jsou vždy 16 bitové. Tímto parametrem je určen rozsah hodnot, jichž může pixel nabývat, tedy v přeneseném významu maximální počet elektronů, které mohou být jednotlivými pixely detekovány. 16 bitů na pixel znamená, že maximální hodnota pixelu je omezena na 65535. V praxi však pixely obrazů LEEM vzhledem ke krátké expozici využívají jen zlomek tohoto rozsahu a při maximální odrazivosti povrchu nabývají hodnot nanejvýš několika tisíc. Při měření I-V křivek dochází při zvyšující se energii primárního elektronového svazku k poklesu odrazivosti ozářených povrchů, a tedy i k poklesu intenzity snímaného signálu. Při vysokých energiích jsou tak hodnoty pixelů omezené na rozsah cca 70-140. U těchto obrazů je mnohem pravděpodobnější, že některé prostorové frekvence, zejména ty vysoké, budou zastoupeny jen nepatrně, tj. s nízkou amplitudou. Vysoká hodnota parametru $p(q)$ pak tyto nízké amplitudy při normování spektra posiluje.

Rovněž parametr ϵ se ukázal být pro většinu dat shodný. Jeho relativně vysoká hodnota je pravděpodobně způsobena tím, že korelační píky jednotlivých dvojic snímků ve videosekvencích mají větší pološířku a nejsou příliš ostré. Pro dosažení subpixelové přesnosti v určení vrcholu je proto nezbytné pracovat v okolí s větším poloměrem. Odchylka v případě sekvencí IV_1 případně δ_1 zřejmě nemá žádný zvláštní důvod – korelační píky mají v těchto případech příznivější tvar.

Výše zmíněné závěry je možné vnímat jako určitý sled doporučení, jimiž by se měl připadáný uživatel námi navrženého programu řídit. Samozřejmě je však také nezbytné posuzovat vlastní výsledky pro konkrétní měření a případně jim proces vyhodnocení přizpůsobit.

Dosažené výsledky lze v každém případě vnímat jako velký úspěch. Předkládaný program proto považujeme za použitelný pro vyhodnocení rutinních měření LEEM.

V budoucnu bychom program rádi rozšířili o další funkce, které by zjednodušily kvantitativní interpretaci experimentálních dat. V kap. 3.2 jsme již zmínili možné výhody segmentačních metod, které jsou určeny k rozlišení pozadí obrazu od objektů našeho zájmu. Další vývoj poté bude jistě zahrnovat metodologie umožňující studium kinetiky dynamických procesů. Postupně tak může vzniknout komplexní analytický nástroj umožňující rozšířit naše znalosti v oblasti teorie povrchů.

6. Závěr

Hlavním cílem této diplomové práce bylo vyvinutí algoritmu určeného k efektivní kalibraci a interpretaci obrazových dat měřených zařízením LEEM. K tomu účelu byla vytvořena aplikace s uživatelským rozhraním založeným na systému Windows, kde jednotlivé metody jsou spouštěny skrze hlavní menu a zadávání případných parametrů výpočtu je řízeno skrze vedlejší formuláře.

Implementovány byly funkce pro zpracování obrazu, jmenovitě filtry umožňující efektivní odstranění šumu, vizualizační metody zlepšující kontrast a zejména metoda korekce posunu snímků založená na fázové korelaci. Poslední zmíněná metoda byla poté, vzhledem ke své výpočetní náročnosti, implementována asynchronně. V rámci analytických nástrojů jsme se zaměřili na určení I-V křivek z videosekvencí měřených při změně energie elektronů.

Navržený program byl testován na sadě různorodých experimentálních dat. Aplikace námi navržených funkcí přitom vždy vedla k velmi dobrým výsledkům. V rámci podrobnější analýzy jsme se zaměřili zejména na použití fázové korelace pro kompenzaci posunu. Tato metoda byla použita pro korekci videosekvencí zachycujících fázové transformace indukované žíháním povrchu.

Získané výsledky nám ukázaly, že metoda fázové korelace je velmi robustní a umožňuje velmi přesnou detekci, potažmo korekci posunu. Precizního sesazení bylo dosaženo zejména v případech, kdy detekovaný posun vykazoval jistou linearitu ať už v celém rozsahu sekvence, nebo pouze lokálně v rámci několika sekcí. Uspokojivých výsledků však bylo dosaženo také tehdy, kdy byl posun malý a jeho směr se dynamicky měnil. V takovém případě však v důsledku zaokrouhlovacích chyb docházelo k drobnému „chvění“ v korigovaném videu, které by nicméně mohlo být v některých případech zdrojem chyb při další analýze.

Přesto však můžeme prohlásit, že metoda fázové korelace byla na základě provedených měření shledána vhodným nástrojem pro detekci a korekci posunu, a vnímáme ji proto jako stěžejní příspěvek této diplomové práce.

Dosažené výsledky nás rovněž vybízejí k dalšímu rozvoji navrženého softwaru, který by měl směřovat k možnostem jeho aplikace při studiu kinetiky růstu a fázových transformací molekulárních systémů.

Literatura

- [1] DAVISSON, C. J. a L. H. GERMER. Diffraction of electrons by a crystal of nickel. *Physical Review*. 1927, 30(6), 705-740. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.30.705
- [2] BOERSCH, H. Über das primäre und sekundäre Bild im Elektronenmikroskop. I. Eingriffe in das Beugungsbild und ihr Einfluß auf die Abbildung. *Annalen der Physik*. 1936, 418(7), 631-644. ISSN 00033804. Dostupné z: doi:10.1002/andp.19364180705
- [3] ZWORYKIN, V. K. On electron optics. *Journal of the Franklin Institute*. 1933, 215(5), 535-555. ISSN 00160032. Dostupné z: doi:10.1016/S0016-0032(33)90168-4
- [4] BAUER, E. *Surface microscopy with low energy electrons*. New York: Springer, [2014]. ISBN 978-1-4939-0934-6.
- [5] BAUER, E. The resolution of the low energy electron reflection microscope. *Ultramicroscopy*. 1985, 17(1), 51-56. ISSN 03043991. Dostupné z: doi:10.1016/0304-3991(85)90176-7
- [6] TELIEPS, W. a E. BAUER. An analytical reflection and emission UHV surface electron microscope. *Ultramicroscopy*. 1985, 17(1), 57-65. ISSN 03043991. Dostupné z: doi:10.1016/0304-3991(85)90177-9
- [7] GRZELAKOWSKI, K., T. DUDEN, E. BAUER, H. POPPA a S. CHIANG. A new surface microscope for magnetic imaging. *IEEE Transactions on Magnetics*. 1994, 30(6), 4500-4502. ISSN 00189464. Dostupné z: doi:10.1109/20.334129
- [8] FINK, R., M. R. WEISS, E. UMBACH, et al. SMART: a planned ultrahigh-resolution spectromicroscope for BESSY II. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 1997, 84(1-3), 231-250. ISSN 03682048. Dostupné z: doi:10.1016/S0368-2048(97)00016-9
- [9] TROMP, R. M., J. B. HANNON, A. W. ELLIS, W. WAN, A. BERGHAUS a O. SCHAFF. A new aberration-corrected, energy-filtered LEEM/PEEM instrument. I. Principles and design. *Ultramicroscopy*. 2010, 110(7), 852-861. ISSN 03043991. Dostupné z: doi:10.1016/j.ultramic.2010.03.005
- [10] DE LA FIGUERA, J. a K. F. MCCARTY. Low-Energy Electron Microscopy. BRACCO, G. a B. HOLST, ed. *Surface science techniques*. Berlin: Springer, [2013]., s. 531-561. Springer series in surface sciences. ISBN 978-3-642-34242-4.
- [11] TROMP, R. M., M. MANKOS, M. C. REUTER, A. W. ELLIS a M. COPEL. A New Low Energy Electron Microscope. *Surface Review and Letters*. 1998, 05(06), 1189-1197. ISSN 0218-625X. Dostupné z: doi:10.1142/S0218625X98001523
- [12] FE-LEEM/PEEM P90. *SPECS* [online]. Berlin: SPECS Surface Nano Analysis [cit. 2021-5-6]. Dostupné z: <https://www.specs-group.com/nc/specs/products/detail/fe-leempeem-p90/>

LITERATURA

- [13] BAUER, E. Low-Energy Electron Microscopy. VAN TENDELOO, G., D. VAN DYCK a S. J. PENNYCOOK, ed. *Handbook of nanoscopy*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH, c2012, s. 673-696. ISBN 9783527317066.
- [14] TROMP, R. M., Y. FUJIKAWA, J. B. HANNON, A. W. ELLIS, A. BERGHAUS a O. SCHAFF. A simple energy filter for low energy electron microscopy/photoelectron emission microscopy instruments. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009, 21(31), 314007-314020. ISSN 0953-8984. Dostupné z: doi:10.1088/0953-8984/21/31/314007
- [15] BAUER, E. Low energy electron microscopy. *Reports on Progress in Physics*. 1994, 57(9), 895-938. ISSN 0034-4885. Dostupné z: doi:10.1088/0034-4885/57/9/002
- [16] OURA, K. *Surface science: an introduction*. Berlin: Springer, c2003. Advanced texts in physics. ISBN 35-400-0545-5.
- [17] HERLT, H.-J. *Elastische Rückstreuung sehr langsamer Elektronen an reinen und an gasbedeckte Wolfram-Einkristalloberflächen*. Clausthal-Zellerfeld, 1982. Disertační práce. TU Clausthal.
- [18] ROSE, H. a W. WAN. Aberration Correction in Electron Microscopy. In: *Proceedings of the 2005 Particle Accelerator Conference*. Knoxville, USA: IEEE, 2005, s. 44-48. ISBN 0-7803-8859-3. Dostupné z: doi:10.1109/PAC.2005.1590354
- [19] GONZALEZ, R. C. a R. E. WOODS. *Digital image processing*. 2nd ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, c2002. ISBN 02-011-8075-8.
- [20] DRUCKMÜLLEROVÁ, H. *Phase-correlation based image registration*. Brno, 2010. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství.
- [21] DRUCKMÜLLER, M. *Numerické metody analýzy obrazu [přednáška]*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2020.
- [22] OpenCV: Open Source Computer Vision. *OpenCV documentation index* [online]. 2021 [cit. 2021-5-9]. Dostupné z: <https://docs.opencv.org/master/index.html>
- [23] NAGAO, M. a T. MATSUYAMA. Edge preserving smoothing. *Computer Graphics and Image Processing*. 1979, 9(4), 394-407. ISSN 0146664X. Dostupné z: doi:10.1016/0146-664X(79)90102-3
- [24] RAMPONI, G. A rational edge-preserving smoother. *Proceedings., International Conference on Image Processing*. IEEE Comput. Soc. Press, 1995, 151-154. ISBN 0-7803-3122-2. Dostupné z: doi:10.1109/ICIP.1995.529062
- [25] TOMASI, C. a R. MANDUCHI. Bilateral filtering for gray and color images. *Sixth International Conference on Computer Vision (IEEE Cat. No.98CH36271)*. Narosa Publishing House, 1998, 839-846. ISBN 81-7319-221-9. Dostupné z: doi:10.1109/ICCV.1998.710815

- [26] BUADES, A., B. COLL a J.-M. MOREL. A Non-Local Algorithm for Image Denoising. *2005 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR'05)*. IEEE, 2005, 60-65. ISBN 0-7695-2372-2. Dostupné z: doi:10.1109/CVPR.2005.38
- [27] BUADES, A., B. COLL a J.-M. MOREL. Non-Local Means Denoising. *Image Processing On Line*. 2011, 1, 208-212. ISSN 2105-1232. Dostupné z: doi:10.5201/ipol.2011.bcm_nlm
- [28] KUGLIN, C. D. a D. C. HINES. The phase correlation image alignment method. *Proceeding of IEEE International Conference on Cybernetics and Society*. New York: IEEE, 1975, , 163-165.
- [29] DE CASTRO, E. a C. MORANDI. Registration of Translated and Rotated Images Using Finite Fourier Transforms. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 1987, PAMI-9(5), 700-703. ISSN 0162-8828. Dostupné z: doi:10.1109/TPAMI.1987.4767966
- [30] REDDY, B.S. a B.N. CHATTERJI. An FFT-based technique for translation, rotation, and scale-invariant image registration. *IEEE Transactions on Image Processing*. 1996, 5(8), 1266-1271. ISSN 1057-7149. Dostupné z: doi:10.1109/83.506761
- [31] BROWN, L. G. A survey of image registration techniques. *ACM Computing Surveys*. 1992, 24(4), 325-376. ISSN 0360-0300. Dostupné z: doi:10.1145/146370.146374
- [32] DRUCKMÜLLER, M. Phase correlation method for the alignment of total solar eclipse images. *The Astrophysical Journal*. 2009, 706(2), 1605-1608. ISSN 0004-637X. Dostupné z: doi:10.1088/0004-637X/706/2/1605
- [33] HARRIS, F.J. On the use of windows for harmonic analysis with the discrete Fourier transform. *Proceedings of the IEEE*. 1978, 66(1), 51-83. ISSN 0018-9219. Dostupné z: doi:10.1109/PROC.1978.10837
- [34] ARGYRIOU, V. a T. VLACHOS. A study of sub-pixel motion estimation using phase correlation. *Procedings of the British Machine Vision Conference 2006*. British Machine Vision Association, 2006, 40.1-40.10. ISBN 1-901725-32-4. Dostupné z: doi:10.5244/C.20.40
- [35] SHEKARFOROUSH, H., M. BERTHOD a J. ZERUBIA. Subpixel image registration by estimating the polyphase decomposition of cross power spectrum. *Proceedings CVPR IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. IEEE, 1996, 532-537. ISBN 0-8186-7259-5. Dostupné z: doi:10.1109/CVPR.1996.517123
- [36] LÜTH, H. *Surfaces and interfaces of solid materials*. Third edition. Berlin: Springer, 1995. Springer study editions. ISBN 35-405-8576-1.
- [37] GEIM, A. K. Graphene: Status and Prospects. *Science*. 2009, 324(5934), 1530-1534. DOI: 10.1126/science.1158877. ISSN 0036-8075. Dostupné také z: <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1158877>

- [38] WANG, Y., H. ZHANG, G. ZHANG a Y. GUO. Mechanical and electronic properties of 2D-phthalocyanines under external strain. *RSC Advances*. 2015, 5(115), 94645-94649. DOI: 10.1039/C5RA20063F. ISSN 2046-2069. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C5RA20063F>
- [39] ZHOU, J. a Q. SUN. Magnetism of Phthalocyanine-Based Organometallic Single Porous Sheet. *Journal of the American Chemical Society*. 2011, 133(38), 15113-15119. DOI: 10.1021/ja204990j. ISSN 0002-7863. Dostupné také z: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja204990j>
- [40] ELEMANS, J.A.A.W., S. LEI a S. DEFEYTER. Molecular and Supramolecular Networks on Surfaces: From Two-Dimensional Crystal Engineering to Reactivity. *Angewandte Chemie International Edition*. 2009, 48(40), 7298-7332. ISSN 14337851. Dostupné z: [doi:10.1002/anie.200806339](https://doi.org/10.1002/anie.200806339)
- [41] KORMOŠ, L., P. PROCHÁZKA, T. ŠIKOLA a J. ČECHAL. Molecular Passivation of Substrate Step Edges as Origin of Unusual Growth Behavior of 4,4-Biphenyl Dicarboxylic Acid on Cu(001). *The Journal of Physical Chemistry C*. 2018, 122(5), 2815-2820. ISSN 1932-7447. Dostupné z: [doi:10.1021/acs.jpcc.7b11436](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b11436)
- [42] KORMOŠ, L., P. PROCHÁZKA, A. O. MAKOVEEV a J. ČECHAL. Complex k-uniform tilings by a simple bitopic precursor self-assembled on Ag(001) surface. *Nature Communications*. 2020, 11(1). ISSN 2041-1723. Dostupné z: [doi:10.1038/s41467-020-15727-6](https://doi.org/10.1038/s41467-020-15727-6)
- [43] PROCHÁZKA, P., L. KORMOŠ, A. SHAHSAVAR, V. STARÁ, A. O. MAKOVEEV, T. SKÁLA, M. BLATNIK a J. ČECHAL. Phase transformations in a complete monolayer of 4,4-biphenyl-dicarboxylic acid on Ag(001). *Applied Surface Science*. 2021, 547. ISSN 01694332. Dostupné z: [doi:10.1016/j.apsusc.2021.149115](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149115)
- [44] PROCHÁZKA, P., M. A. GOSALVEZ, L. KORMOŠ, et al. Multiscale Analysis of Phase Transformations in Self-Assembled Layers of 4,4-Biphenyl Dicarboxylic Acid on the Ag(001) Surface. *ACS Nano*. 2020, 14(6), 7269-7279. ISSN 1936-0851. Dostupné z: [doi:10.1021/acsnano.0c02491](https://doi.org/10.1021/acsnano.0c02491)

7. Seznam použitých zkratek a symbolů

λ	vlnová délka elektronu
d	tloušťka vrstvy, nebo výška atomárního schodu
$\vec{k}$	vlnový vektor rozptýleného elektronového svazku
$\vec{k}_{ }$	komponent vlnového vektoru rozptýleného elektronového svazku rovnoběžný s povrchem
$\vec{k}_0$	vlnový vektor primárního elektronového svazku
$\vec{k}_0^{ }$	komponent vlnového vektoru primárního elektronového svazku rovnoběžný s povrchem
$\vec{G}_{h,k,l}$	vlnový vektor reciproké mřížky
$\vec{G}_{h,k}$	komponent vlnového vektoru reciproké mřížky rovnoběžný s povrchem
$\mathcal{L}(\mathbb{R}^2)$	prostor všech funkcí $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$
$\mathcal{F}, \mathcal{D}$	spojitá a diskrétní verze Fourierovy transformace
$\mathcal{F}^{-1}, \mathcal{D}^{-1}$	spojitá a diskrétní verze inverzní Fourierovy transformace
$A(\xi, \eta)$	amplitudové spektrum
$\Phi(\xi, \eta)$	fázové spektrum
$f(x, y), g(x, y)$	funkce z $\mathcal{L}(\mathbb{R}^2)$, nebo funkce reprezentující obraz
$a(x, y)$	funkce reprezentující aditivní šum v obrazu
$F(\xi, \eta), G(\xi, \eta)$	Fourierova spektra funkcí $f(x, y), g(x, y)$
$\tilde{f}, \tilde{F}$	periodizace funkce f a jejího Fourierova spektra F
$f * g$	konvoluce funkcí f, g
M, N	konstanty určující rozlišení obrazu
σ	směrodatná odchylka gaussovského filtračního jádra
G_σ	Gaussova funkce s pološířkou σ
A	průměrová filtrační maska
D	Diracovo konvoluční jádro
W	váhová funkce pro filtraci ve frekvenční doméně

Ω	oblast obrazu použitá při filtraci NLMD
$u(p), v(q)$	hodnoty pixelů v bodech p, q
$O(k)$	okolí pixelu k
$\overline{O}(k)$	průměrná hodnota pixelů v okolí $O(k)$
h	směrodatná odchylka NLMD filtru
(x_0, y_0)	vektor posunu mezi dvěma obrazy
$(\overline{x}_0, \overline{y}_0)$	subpixelové souřadnice vektoru posunu
(x_s, y_s)	souřadnice středu definovaného spotu
I_i	intenzita definovaného spotu se středem v (x_s, y_s)
ϵ	poloměr okolí korelačního píku, které je použito pro subpixelovou detekci
p, q	parametry semi-normovaného křížového spektra a funkce semi-fázové korelace
$C(\xi, \eta)$	křížové spektrum
$N(\xi, \eta)$	normované křížové spektrum
$N_{p,q}(\xi, \eta)$	semi-normované křížové spektrum
$n(x, y)$	funkce fázové korelace
$n_{p,q,\sigma}(x, y)$	funkce semi-fázové korelace
w	<i>window function</i>
$M_{r,s}$	geometrické momenty používané pro subpixelovou detekci
α, β, δ	fáze 4,4'-bifenyl-dikarboxylové kyseliny
$\alpha \rightarrow \beta$	transformace fáze α na fázi β
$\delta_1, \delta_2, \delta_3$	označení videosekvencí zobrazujících fázi δ
$\beta_1, \beta_2, \beta_3$	označení videosekvencí zobrazujících transformaci $\alpha \rightarrow \beta$
IV_1, IV_2	označení videosekvencí určených pro stanovení I-V křivek
BDA	4,4'-bifenyl-dikarboxylové kyseliny (4,4'- b iphenyl- d icarboxylic a cid)
LEEM	nízkoenergieová elektronová mikroskopie (L ow E nergy E lectron M icroscopy)
LEED	nízkoenergieová elektronová difrakce (L ow E nergy E lectron D iffraction)
MEM	zrcadlová elektronová mikroskopie (M irror E lectron M icroscopy)
NLMD	metoda „nelokálního průměrování“ (N on- L ocal M eans D enoising)

7. SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

PEEM	fotoemisní elektronová mikroskopie (P hoto e mission E lectron M icroscopy)
ROI	oblast zájmu (R egion O f I nterest)
STM	rastrovací tunelový mikroskopie (S canning T unneling M icroscopy)
UHV	ultra vysoké vakuum (U ltra H igh V acuum)