

# A Slope Elimination Method for AFM Images Based on the Recurrent Least Square Method

Xiaokun Dong<sup>1,2</sup>, Yongchun Fang<sup>1,2</sup>, Xuebo Zhang<sup>1,2</sup>, and Xiao Ren<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Institute of Robotics and Automatic Information System, Nankai University, Tianjin, China(fangyc@nankai.edu.cn)

<sup>2)</sup> Tianjin Key Lab of Intelligent Robotics, Nankai University, Tianjin, China(fangyc@nankai.edu.cn)

**Abstract**—Atomic force microscopes (AFMs) are usually utilized for nano-scale imaging. Usually, the slide loading the samples and the stage of the AFM cannot be placed completely parallel with the motion plane of the piezoelectric actuator due to the manual operation and machining errors, which leads to the variation of imaging brightness (or height) along the slope and makes the relative topography unrealistic. Considering the fact that the introduced slopes are different for every imaging process, this paper proposes an effective and efficient real-time preprocessing approach for slope elimination, where the recurrent least square method is firstly utilized to estimate the slope, and the imaging method is then combined together to eliminate the slope and display the image in a real-time manner. Both simulation and experimental results demonstrate the superior performance of the proposed method.

**Keywords**—atomic force microscope, scanned image, slope elimination

## 一种基于递推最小二乘的 AFM 扫描图像斜面去除方法

董晓坤<sup>1,2</sup> 方勇纯<sup>1,2</sup> 张雪波<sup>1,2</sup> 任道<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> 南开大学机器人与信息自动化研究所, 天津, 中国

<sup>2)</sup> 天津市智能机器人技术重点实验室, 天津, 中国

**摘要** 当使用原子力显微镜对样品进行扫描成像时, 载玻片与载物台在机械加工、以及人工安装固定过程中, 常常会出现与压电陶瓷运动平面成一定倾斜角的情况(而并不平行), 从而导致扫描图像出现整体亮度不均的现象, 难以准确反映出样品与载玻片之间的相对高度等形貌信息。考虑到每次扫描时斜面均不同的特点, 本文提出一种可以有效去除斜面、且计算量较小的实时在线预处理方法。该方法基于在线递推最小二乘法实现对斜面的拟合, 进而结合原子力显微镜成像方法对斜面进行去除, 并对图像进行实时显示。仿真与实验结果表明本文方法具有很好的实际效果。

**关键词** 原子力显微镜, 扫描图像, 斜面去除

### 1. 引言

作为纳米量级观测与操作的重要仪器, 原子力显微镜 (Atomic Force Microscope, AFM) 在物理、化学、生命科学、纳米科学与技术等各个领域得到了广泛的应用<sup>[1-3]</sup>。如图 1 所示, 原子力显微镜的基本硬件结构可分成四个部分: 力检测部分、位置检测部分(PSD)、压电扫描器部分、反馈控制系统。它的基本工作成像原理为: 使用末端带有探针的微悬臂在被探测样品表面逐行进行扫描, 由于探针与样品之间微弱的相互作用力(原子间力), 微悬臂会发生微形变。

在测量过程中, 微悬臂会随着样品形貌高低起伏而产生微小形变, 通过激光位移检测装置测量出这种微形变, 再由闭环控制系统通过调节压电陶瓷 Z 方向上的电压, 来控制样品台的位移, 使得样品表面的原子与探针针尖原子之间的相互作用力维持不变(即距离维持恒定)。此时, Z 方向压电陶瓷的控制电压, 便可以间接地反映样品的形貌起伏<sup>[4]</sup>。

依据此电压信号以及位置检测信号, 研究者提出了各种静态和动态的成像方法<sup>[4-9]</sup>, 以期更好地刻画物体的表面形貌。文献[6]针对高速扫描时现有成像方法的缺陷, 在成像策略方面进行了一些尝试, 以更准确地获得样品形貌的图像。基于鲁棒控制策略, Salapaka 等人设计了一种接触模式下的状态观测器来估计样品真实形貌<sup>[7]</sup>。日本学者 Shiraishi 等则通过改进形貌观测器中的动态模型, 来提高

国家自然科学基金科学仪器基础研究专款(项目批准号: 61127006)。

样品表面形貌的观测精度<sup>[8]</sup>。董晓坤等人围绕 AFM 动态成像方法进行了深入的研究，先后提出了一种基于压电扫描器动态特性的动态成像方法<sup>[4]</sup>，以及一种基于临近点集数据融合的 AFM 动态成像方法<sup>[5]</sup>。

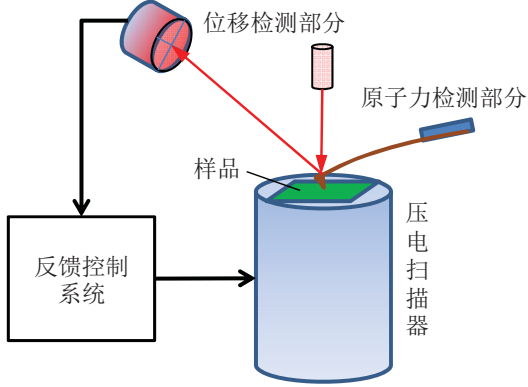


图 1. 原子力显微镜基本硬件结构图

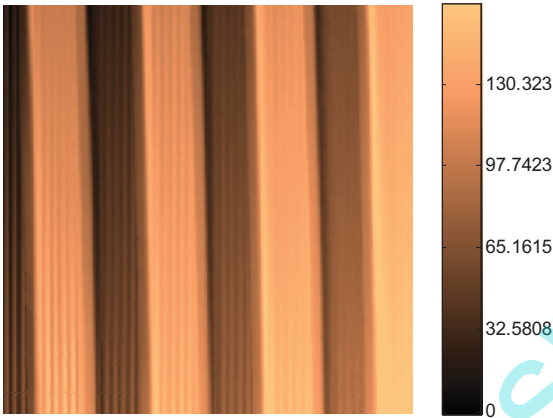


图 2. 在斜面上的样品成像情况

在制作观测样品时，一般选用表面平整的云母片、硅片或者石墨作为载玻片来盛放待扫描的样品。载玻片则依靠重力，或者使用胶粘的方式固定在压电扫描器的载物台上。而由于在样品制作过程中以及安装固定过程中，均为人工操作，难免会出现样品扫描表面倾斜的情况。即原子力显微镜压电扫描器的水平运动平面与样品的表面间并不平行，存在一个夹角。如图 2 所示，为 10Hz 扫描时，使用传统成像方法得到的样品形貌，左上角呈现低暗条纹，右下角则呈现高亮条纹，形貌的高度信息分布在一个左上角低，右下角高的倾斜面上。然而，相关研究人员关心的只是样品表面形貌的相对变化信息，而对于这个由于人为操作引入的斜面并不感兴趣。遗憾的是，现有的成像方法<sup>[4-8]</sup>均未考虑此斜面造成的亮度不均等不利影响。

在成像系统中，斜面信息主要体现在融入 Z 方向动态特性的压电扫描器伸缩量中。为了去除这个倾斜面对成像质量的影响，本文将压电扫描器伸缩量进行预处理。由

于位置反馈信号并不会产生斜面，因此也等同于对形貌高度进行斜面去除预处理。

考虑到每次扫描时斜面均不同的特性，本文提出一种可以有效去除斜面、且计算量较小的实时在线预处理方法。为了保证预处理的合理性，我们假设观测样品形貌的高度较均匀地分布在斜面两侧(即样品表面的高低起伏较为一致，对于每次测量同一种样品而言，这是一个较为合理的假设)。在此基础上，利用递推最小二乘法对该斜面进行拟合，从而实时在线地完成对斜面的估计、去除以及扫描图像的显示。仿真与实验结果表明本文的算法具有很好的实际效果，提高了 AFM 成像对科学观测人员的友好性。

本文其它部分的组织结构如下：第 2 节描述了基于递推最小二乘的在线斜面估计与去除方法；第 3 节与第 4 节分别给出了仿真与实验结果；第 5 节对本文进行了简要的小结。

## 2. 基于递推最小二乘的斜面估计与去除方法

对于一幅大小为  $m \times n$  像素的样品形貌图像， $h(x, y)$  代表第  $x$  列第  $y$  行扫描点的形貌高度(其中  $x=1, 2, \dots, m, y=1, 2, \dots, n$ )， $s(x, y)$  则表示如下倾斜平面(样品基底所在平面)：

$$s(x, y) = a \cdot x + b \cdot y + c. \quad (1)$$

式中  $(x, y)$  为扫描点坐标， $a, b, c$  为待定参数。定义形貌高度有效信息为  $\hat{h}(x, y) = h(x, y) - s(x, y)$ ，为了使得样品形貌信息数据尽可能逼近斜面，本文根据有效信息最小平方和的准则来确定参数  $[a, b, c]$ 。

将公式(1)改写为如下矩阵形式：

$$s_k = \phi_k^T \theta \quad (2)$$

其中  $k = my + x$  表示第  $y$  行第  $x$  列个扫描点的序号，可知：

$$s_k = s_{my+x} = s(x, y), \quad \phi_k = \phi_{my+x} = [x \ y \ 1]^T, \quad (3)$$

$$\theta = [a \ b \ c]^T. \quad (4)$$

令  $h_k = h(x, y)$ ，估计误差的平方和可以表示如下：

$$J = \sum_{k=1}^N [h_k - \phi_k^T \theta]^2 = [H_N - \Phi_N \theta]^T [H_N - \Phi_N \theta] \quad (5)$$

其中

$$N = m \times n \quad (6)$$

$$H_N = [h_1 \ h_2 \ h_3 \ \dots \ h_N]^T \quad (7)$$

$$\Phi_N = \begin{bmatrix} \phi_1^T \\ \phi_2^T \\ \phi_3^T \\ \vdots \\ \phi_N^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ m & n & 1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

则根据最小二乘法，当  $J$  取最小值时，可得到斜面参数  $\theta$  的

最优估计:

$$\hat{\theta}_N = (\Phi_N^T \Phi_N)^{-1} \Phi_N^T H_N \quad (9)$$

估计出斜面参数  $\theta$  后, 去除斜面后的样品形貌高度为

$$\hat{h}_k = h_k - \varphi_k \hat{\theta}_N, k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (10)$$

以上用所有数据一次完成对参数  $\theta$  的估计, 所用数据量庞大(矩阵  $\Phi_N$  为  $mm \times 3$  维), 计算时间长, 无法在线更新与显示。同时, 考虑到 AFM 逐点扫描成像的特点, 可以在扫描过程中, 每获得一个数据, 就对原参数估计值进行修正, 得到新的估计值。这样随着逐行逐点扫描的进行, 估计的斜面参数便逐渐收敛至真实值。

为了提高最开始参数估计的准确度, 我们选取前 100 个扫描点(第 1 到 100 个点), 进行初始值的计算:

$$P_{100} = (\Phi_{100}^T \Phi_{100})^{-1} \quad (11)$$

$$\hat{\theta}_{100} = P_{100} \Phi_{100}^T H_{100}$$

则从第 100 个扫描点开始(即  $k = 100$ ), 用最小二乘的递推形式逐点对斜面参数进行估计

$$\hat{\theta}_{k+1} = \hat{\theta}_k + \frac{P_k \varphi_{k+1}}{\varphi_{k+1}^T P_k \varphi_{k+1} + 1} [h_{k+1} - \varphi_{k+1}^T \hat{\theta}_k] \quad (12)$$

$$P_{k+1} = P_k - \frac{P_k \varphi_{k+1} \varphi_{k+1}^T P_k}{\varphi_{k+1}^T P_k \varphi_{k+1} + 1} \quad (13)$$

该点的去斜面高度则为:

$$\hat{h}_{k+1} = h_{k+1} - \varphi_{k+1} \hat{\theta}_{k+1} \quad (14)$$

同时, 利用该参数  $\hat{\theta}_{k+1}$  对已经扫描过的点进行高度的更新:

$$\hat{h}_i = h_i - \varphi_i \hat{\theta}_{k+1} \quad (15)$$

其中  $i = 1, 2, \dots, k$  表示扫描过的点的下标序号。在对每个扫描过的点进行高度更新之后, 便可以进行实时图形的显示与绘制。整个斜面估计、去除与图像实时显示的算法的流程图如图 3 所示。

### 3. 仿真结果

为了验证本文提出的斜面去除算法的效果, 首先使用带有倾斜面的仿真数据进行预处理。在数值仿真中, 样品真实台阶高度为 10nm, 分辨率为  $500 \times 500$  像素。

图 4 为带斜面的一维光栅扫描仿真图, 可以看出, 由于存在斜面, 斜面去除前右上角与左下角亮度差异较大, 说明对应的高度差异也较大。而该图高程变化范围达到 27nm (远远大于真实台阶高度 10nm)。因此造成亮度不均的现象, 难以体现出样品相对基底的高度形貌信息。图 5 为使用本文方法去斜面处理后得到的扫描图, 斜面去除后

该图的高程变化范围降为 10nm, 形貌图像上下亮度均匀, 说明经过去斜面处理, 我们能够得到比较准确的样品高度的细节信息。

经过本文所提出的递推最小二乘处理, 得到的最终斜面为:  $s = 0.021x + 0.016y - 0.0835$ 。其三维示意图如图 6 所示。

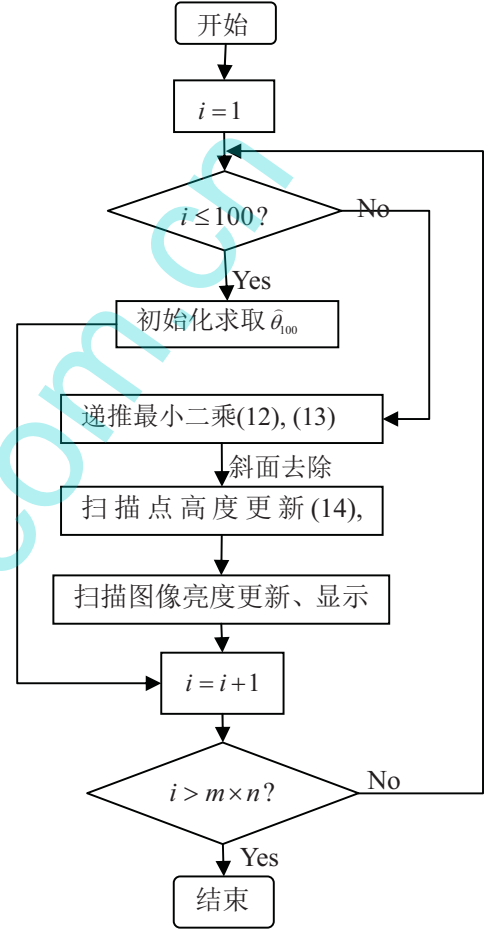


图 3. 本文算法流程图



图 4. 斜面去除前的光栅形貌仿真图





图 5. 斜面去除后的光栅形貌仿真图



图 8. 斜面去除后的带噪声光栅形貌仿真图

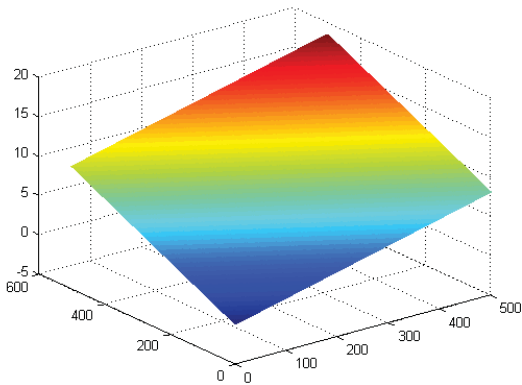


图 6. 被去除掉的倾斜面

然后再在上述仿真中，引入了高度为 $\pm 1.5\text{nm}$ 之间均匀分布的白噪声，仿真结果如图 7 与图 8 所示。可见，在存在一定程度噪声的情况下，本文提出的方法仍然能有效地去除整体斜面造成的亮度不均等影响。



图 7. 斜面去除前的带噪声光栅形貌仿真图

#### 4. 实验结果

为了验证本文算法的实际效果，在真实的 AFM 系统中进行了相关实验。所选用的原子力显微镜为本原公司生产的 CSPM 4000 系列显微镜，实物图如图 9 所示。其中，图 9(a)为本原 CSPM4000AFM 本体系统，图 9(b)为该系统的控制器系统。实验所采用的是自行搭建的基于 RTLinux 的开放式实时控制实验平台，实现了控制周期为  $50\mu\text{s}$  的精确实时控制<sup>[10]</sup>。在此实时系统中，开发了本算法所需的实时图像显示与更新模块，以完成对样品的扫描成像。



(a)

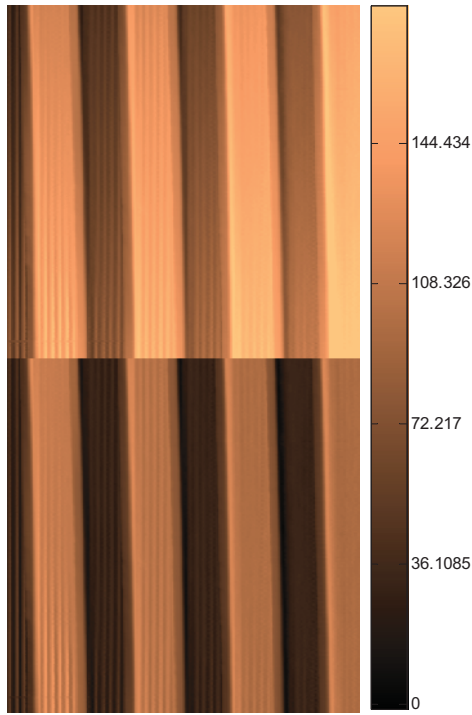
(b)

图 9. 本原 CSPM4000AFM 实物图

对于真实光栅样品，对其进行实验扫描，并应用在线递推最小二乘法进行斜面去除处理。该光栅形貌图分辨率为  $400 \times 400$  像素，最终辨识得到的斜面为

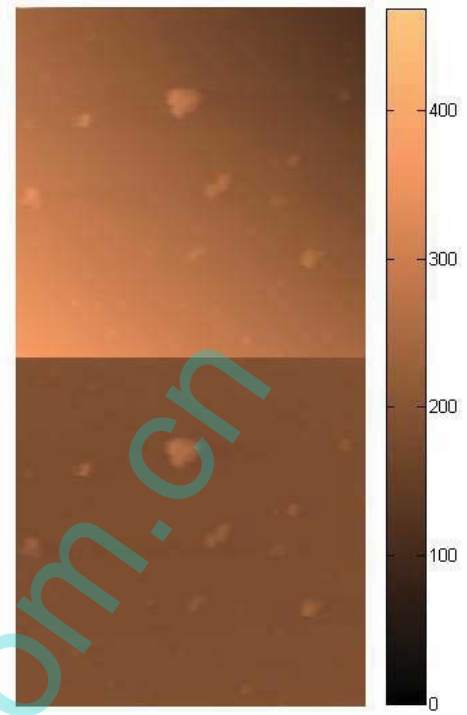
$$s(x, y) = 0.1356x + 0.0795y - 0.0390$$

为了方便对比，将斜面去除前后的形貌图画在一起，得到的形貌对比图像如图 10 所示。对比图 10(a)和图 10(b)可知：经过去除斜面预处理后，光栅形貌图像一边高亮另一边低暗的现象不存在了，其各个方向的形貌高度基本持平，这与真实光栅的情况更为相符。



(a)上图：原始扫描形貌图；(b)下图去除斜面后的光栅形貌图；单位：nm

图 10. 斜面去除前后光栅形貌对比图



(a)上图：原始扫描形貌图；(b)下图：去除斜面后的形貌图；单位：nm

图 11. 斜面去除前后生物纳米颗粒——三羟基丁酸脂聚四羟基丁酸脂样品形貌对比图

为了进一步验证本文算法的普适性，除标准光栅之外，对用于生命科学的一种纳米颗粒——三羟基丁酸脂聚四羟基丁酸脂样品进行了扫描实验。图 11 给出了相应的实验结果。可见，利用本文所提算法对斜面进行去除后，样品所在基底的高度被转换到水平面上，亮度均匀，更好地反映了纳米颗粒的相对高度信息，有利于进行纳米性质观测。

实验结果表明，对于由样品制作和固定方式等人为引入的形貌倾斜面，本节提出的在线去除方法，可以方便、快捷、有效地去除斜面，将真正有用的形貌信息呈献给相关研究者。

## 5. 结论

在原子力显微镜成像过程中，由于样品基底和压电陶瓷运动平面不平行，导致扫描得到的样品图像亮度不均。针对这一问题，提出了一种基于递推最小二乘方法的在线斜面预处理方法，并进行实时的补偿与显示。仿真与实验结果表明本文所提方法具有很好的实际效果，通过斜面去除后，所得到样品相对基底的高度更为均匀，从而使得相关研究人员更好地观测样品的形貌情况。

## 参考文献

- [1] C. Bai. Ascent of nanoscience in China[J]. *Science*, 2005, 309:61-63.
- [2] S. Hou, Y. Ma, X. Li, X. Feng, Y. Zhang, X. Dong, Y. Fang. Porous Film Fabricated by a Thermoresponsive Polymer Poly (N-isopropylacrylamide-co-butylmethacrylate) with Enhanced Hydrophobicity. *Colloids and Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects*, 2009, 346(1-3): 164-169.
- [3] 李密, 刘连庆, 席宁, 等. 基于AFM的淋巴瘤细胞成像及其机械特性测定. *科学通报*, 2010, 55(22):2188-2196.
- [4] 董晓坤, 方勇纯, 周娴玮, 张玉东. 基于压电扫描器动态特性分析的AFM成像方法研究. *高技术通讯*, 18(1): 54-58, 2008.
- [5] 董晓坤, 方勇纯, 张玉东. 一种基于临近点集数据融合的AFM动态成像方法. *自动化学报*, 37(2): 214-221, 2011.
- [6] M. Xu, D. Fujita, K. Onishi. Reconstruction of atomic force microscopy image by using nanofabricated tip characterizer

toward the actual sample surface topography. *Review of Scientific Instruments*, 2009, 80(4):043703.

- [7] S. M. Salapaka, T De, A. Sebastian. A robust control based solution to the sample-profile estimation problem in fast atomic force microscopy. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 2005, 15(16):821-837.
- [8] T. Shiraishi, H. Fujimoto. Proposal of surface topography observer considering Z-scanner for high-speed AFM, *American Control Conference (ACC)*, 2010:2754-2759.
- [9] X. Ren, Y. Fang, N. Qi, M. Wu, X. Feng, A Practical Dynamic Imaging Method for Fast Scanning AFMs, *Instrumentation Science & Technology*, Vol. 41, Iss. 4, pp. 394-405, July 2013.
- [10] 周娴玮, 方勇纯, 董晓坤, 等. 基于RTLinux的AFM实时反馈控制系统. *计算机工程*, 2008, 34(15):226-230.

www.spm.com.cn