

演 題	プロブパターニングによるSTM画像の高速解析	
発 表 者 ( 所 属 )	○磯部直希 (名大院工)、沢辺恭一、正島宏祐	
連 絡 先	〒464-8603 名古屋市千種区不老町 名古屋大学大学院工学研究科物質制御工学専攻 TEL 052-789-2612	
キーワード		
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	STM(走査型トンネル顕微鏡)は導体表面の電子状態を画像化するのに用いられる。本研究では STM 像中のプロブの形状から吸着種、吸着状態を定量的に判別できる特徴量を定義して表面の被覆率を求める事を目的とした。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	Ruby が実行できる全ての OS
	ソース言語	Ruby
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

#### [1.緒言]

STM を用いて表面-探針間のトンネル電流を計測する事で表面に吸着している分子の構造を原子分解能で得る事ができる。トンネル電流強度は表面-探針間の距離が短いほど大きくなる。つまり、表面に分子が吸着している部分は表面-探針間の距離が短くなるので吸着していない表面に比べて電子状態が異なる。したがって、STM ではトンネル電流強度を輝度として画像化することで、表面の吸着状態を視覚的に観察することができる。吸着分子があると、その電子状態によって分子の吸着した部分が輝度の高いプロブとして観測されることがある。しかし、表面に吸着している分子が2種類以上ある場合や、同一分子であっても吸着状態が複数存在する場合にはプロブの形状・輝度・位置などに特徴を見出して分類しなければならない。これまでの解析では、トンネル電流の強度をプロットしピーク位置、ピーク強度などを比較する事で吸着分子や吸着状態を判断していた。しかし、この方法は目で見て特徴量を比較しなければならないので非常に主観的であり、時間がかかる方法である。

STM 像中に多数のプロブが存在する場合、全ての吸着点を解析するためには長時間を要する。また、解析を行う際には個人の主観による影響が大きく、解析する個人によって結果に大きく差が生じる場合がある。よって、全ての吸着点を正確に解析することは困難である。そこで、プロブの形状か

ら吸着状態を定量的に判別する事ができる特徴量を定義する事で画像を短時間で統計的に定量解析が可能なプログラムの開発を行った。

## [2.ソフトウェアの概要]

### ・吸着点の解析

一般的に画像処理を行う際に用いられる特徴量としては周囲長、絶対最大長、重心、円形度、慣性主軸と画像の水平方向との角度が挙げられる。しかし、これらの特徴量は図形が常に一定の方向にあるものでなければ特徴量として使う事ができない。

回転に対して変化しない特徴量としてはプロブの輝度分布をなんらかの関数としてフィッティングし、その関数を基に解析する手段も考えられる。しかしながら、STM のプロブに最適なフィッティング関数は存在しない。そこで解析を短時間で出来る特徴量として慣性モーメントを利用する事にした。慣性モーメントを計算する際に輝度の大きさを重さとして計算する。画像に対して水平方向と垂直方向の慣性モーメントを計算する事で2行2列の行列を得る。その行列を対角化する事で長軸方向、短軸方向の慣性モーメントに変換する。この比および長軸の傾きを特徴量として利用する。

## [3.解析について]

本研究室では Si(100)表面上にチオフェンを吸着させてその吸着状態を研究してきた。その結果、チオフェンの吸着状態には A と B の2種類が存在する事がわかった。(Fig.1)

解析を行う上でプロブの部分のみを抽出し、その範囲についての慣性モーメントを求める。プロブを抽出する具体的な方法としては Si 表面部分の明るさが反映されない輝度にしきい値を設定し2値化を行う。なお、しきい値は、画像の輝度を横軸とした度数分布を作成し、表面からの寄与とされる範囲の95%から99%以上の位置を採用した。さらに、2値化した画像に対してノイズ除去を行い、プロブの部分のみを表わす画像を得る事ができた。(Fig.2)

抽出したプロブの特徴量を計算するには注意が必要である。抽出部分をそのまま用いて慣性モーメントの計算をおこなうと分子の吸着した表面の情報も慣性モーメントに寄与する可能性がある。そこで、慣性モーメントの計算では輝度の値をそのまま用いるのではなく、ある基準点からの差を採用して計算する必要がある。

まず、画像全体の輝度の度数分布によって得られた最尤値をその基準値の下限值とした。プロブの輝度の最大値から下限値までの間で、基準値を変化させたときの慣性モーメントの比を Fig.3 に示す。図の横軸では、各プロブの下限値から最大値までを100%としてその割合で基準値の値を示した。図が示すように基準値を高くしすぎて80%を越えると異なるプロブであっても慣性モーメントの比は同じ値に収束してしまう。これは、基準値が高すぎてプロブの形状が点に近づくためである。したがって、慣性モーメントの計算では基準値として0から60%程度の値を用いる必要がある。

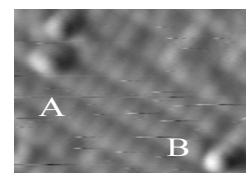


Fig.1 チオフェン導入後の Si(100)



Fig.2 Fig.1を2値化しノイズ除去したもの

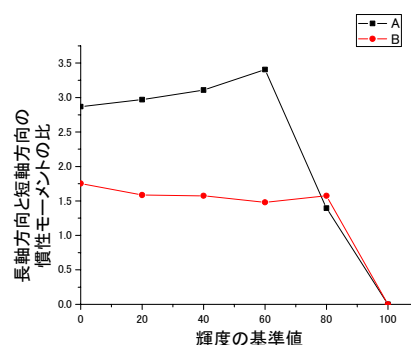


Fig.3 基準値を変えたときの慣性モーメントの比