

Визуализация атомной структуры на фасетированных, ступенчатых и неплоских поверхностях методом разности гауссианов

А. Ю. Аладышкин^{1-3,*} и А. Н. Чайка⁴

¹ Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

² Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

³ Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

⁴ Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия

*email: aladyshkin@ipmras.ru

Аннотация

Детальный анализ данных сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), полученных для фасетированных, ступенчатых и неплоских поверхностей, обычно затруднен из-за наличия большого количества участков поверхности, наклоненных на большие или переменные углы относительно плоскости сканирования. Как следствие, стандартные методы устранения глобального или локального наклона либо путем плоского вычитания, либо численного дифференцирования первого порядка оказываются неэффективными. Мы покажем, что простая процедура разности гауссианов (difference-of-gaussians) дает нам выровненные изображения, соответствующие проекции рассматриваемой поверхности на плоскость сканирования, без нежелательных изменений контраста. Этот метод позволяет минимизировать мелкомасштабные шумы, конечный наклон изображения вдоль направления быстрого и медленного сканирования и кривизну поверхности [1,2]. Этот метод может применяться как для экспресс-анализа экспериментальных данных, так и для более детального анализа, включая определение параметров решетки и углов между векторами трансляций для реконструкций поверхности на различных террасах или доменах. Для иллюстрации преимуществ этого метода рассмотрим следующие примеры: фасетированная поверхность Cu(115)-O, неплоские поверхности наноструктурированного графена и графита с муаровым рисунком, неплоские поверхности тонких пленок Au(111) и Pb(111), а также вицинальные поверхности Si(556) и Si(557) (рис. 1б). В дополнение к методу разности гауссианов мы обсуждаем новый метод выравнивания вицинальных (*hhm*) поверхностей, основанный на анализе статистического распределения $f(z)$ видимых высот для частично выровненных изображений и поиске таких параметров плоскости, когда все максимумы для функции $f(z)$ будут иметь минимальную ширину (рис. 1в).

Основные преимущества этих методов заключаются в следующем: (i) оба метода дают неискаженные изображения реконструкций поверхности без нежелательной модификации контраста (латеральные сдвиги минимумов/максимумов), и (ii) оба метода существенно сокращают время обработки для подготовки качественных топографических изображений (от минут до секунд) и не требуют активного участия пользователя.

Работа выполнена в рамках Госконтракта Института физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН (подготовка образцов и измерения СТМ). А. Ю. Аладышкин благодарен Министерству науки и образования РФ (проект 075-15-2024-632, программирование и анализ СТМ данных).

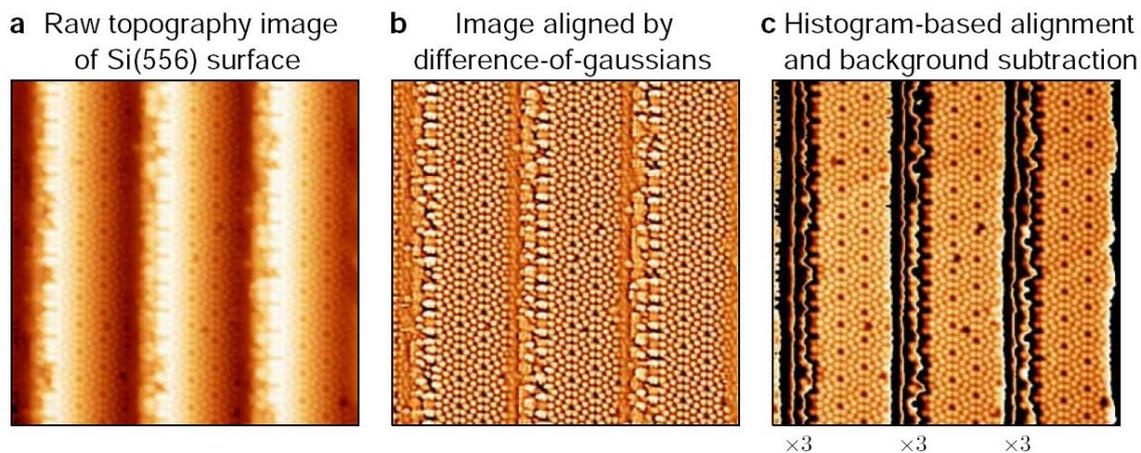


Fig.1. a – необработанное топографическое изображение поверхности Si(5 5 6), b – карта разностного сигнала, полученная методом разности гауссианов, c – карта разностного сигнала после выравнивания изображения посредством оптимизации гистограммы распределения высот и удаления фонового сигнала.

Библиография

- [1] A. Yu. Aladyshkin, A. N. Chaika *et al.* [arxiv.org/abs/ 2406.08436](https://arxiv.org/abs/2406.08436).
- [2] A. Yu. Aladyshkin, A. N. Chaika *et al.* [arxiv.org/abs/ 2406.08984](https://arxiv.org/abs/2406.08984).

Visualization of atomic structures on faceted, stepped and non-flat surfaces by difference-of-gaussians approach

A. Yu. Aladyshkin ^{1-3,*} and A. N. Chaika ⁴

¹ Moscow Institute for Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

² Institute for Physics of Microstructures RAS, Nizhny Novgorod, Russia

³ Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia

⁴ Osipyan Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka, Russia

*email: aladyshkin@ipmras.ru

Abstract

Detailed analysis of scanning tunneling microscopy (STM) data acquired for faceted, stepped and non-flat surfaces is usually complicated due to presence of large number of surface areas tilted by large/variable angles relative to the scanning plane. As a consequence, standard methods of elimination of global or local slopes either by a plane subtraction or first-order numerical differentiation seem to be ineffective. We demonstrate that simple difference-of-gaussians procedure provides us aligned topography images corresponding to a projection of considered surface onto scanning plane without undesirable modifications of contrast. This method allows us to minimize small-scale noise, finite slopes of topography image along both fast and slow scanning directions and minimize surface rippling [1,2]. This method can be applied both for fast 'on-the-fly' visualization of experimental data and more detailed analysis, including high-precision determination of lattice parameters and angles between translations vectors for surface reconstructions at different terraces or surface domains. To illustrate the advantages of this method we consider the following examples: faceted Cu(115)-O surface, non-flat surfaces of nanostructured graphene and graphite with moiré pattern, non-flat surfaces of thin Au(111) and Pb(111) films, and vicinal Si(556) and Si(557) surfaces (Fig. 1b). In addition to the difference-of-gaussians approach, we discuss a new method of the alignment of the stepped (*hkm*) surfaces based on analysis of the statistical distribution $f(z)$ of the visible heights for partly aligned images and seeking the case when all maxima in $f(z)$ would have the minimal width (Fig. 1c).

The main advantages of these methods are the following: (i) both methods return us undistorted images of surface reconstructions without unwanted modification of contrast (lateral shifts of minima/maxima), and (ii) both methods substantially reduce processing time for preparing high-quality topography images (from minutes to seconds) and does not require active participation of a user.

This work was funded by the Russian State Contract for Osipyan Institute of Solid State Physics RAS (sample preparation and STM measurements). A. Yu. Aladyshkin thanks Ministry for Science and Education of Russian Federation (project 075-15-2024-632, programming and STM data analysis).

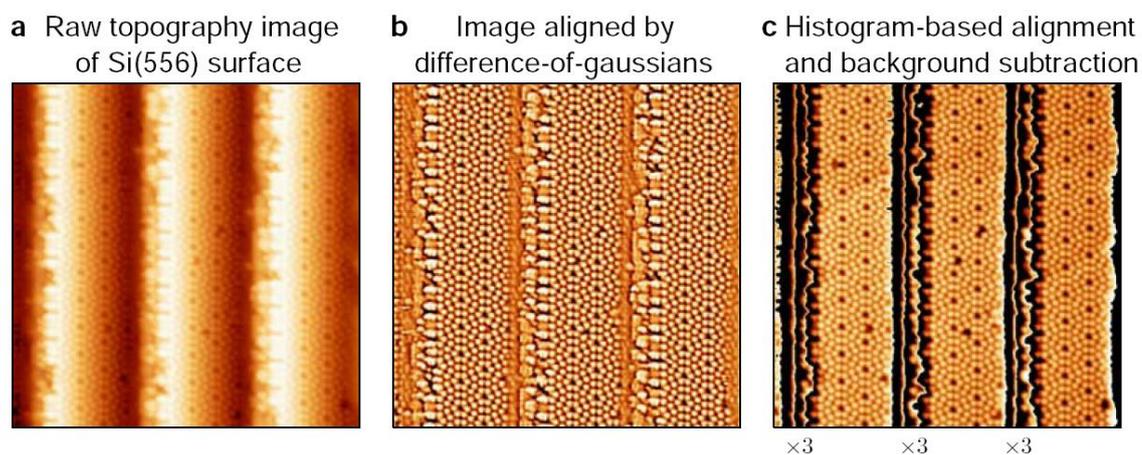


Fig.1. a – raw topography image of Si(5 5 6) surface, b – differential map obtained by difference-of-gaussians, c – optimally aligned image based on histogram analysis.

Bibliography

- [1] A. Yu. Aladyshkin, A. N. Chaika *et al.* [arxiv.org/abs/ 2406.08436](https://arxiv.org/abs/2406.08436).
- [2] A. Yu. Aladyshkin, A. N. Chaika *et al.* [arxiv.org/abs/ 2406.08984](https://arxiv.org/abs/2406.08984).