

원자분해 투과전자현미경 영상의 Image Processing

Image Processing of Atomic Resolution Transmission Electron Microscope Images

김영민, 정종만, 김진규, 김윤중

한국기초과학지원연구원 전자현미경연구부 HVEM운영팀

1. 서론

고분해능 투과전자현미경 영상에 대해 fast Fourier transform(FFT)를 적용하여 형성된 Fourier 공간에서 이미지 성분을 제외한 영상의 배경 신호나 노이즈를 걸러 내고 이를 다시 실공간으로 inverse fast Fourier transform(IFFT)를 하게 되면 특정 영상신호가 극대화된 고분해능 영상을 얻게 되어 보다 정량적인 분석이 가능하다[1,2]. 이러한 방법을 Fourier mask filtering이라고 하며 실험적으로 획득한 고분해능 영상에 대해 특정 spatial frequency만을 걸러내어 우리가 분석하고자 하는 영역의 정량적 정보를 극대화 시키는 자료처리 기법이다.

본 연구에서는 초고전압 투과전자현미경으로 획득한 원자분해 영상에 대한 Fourier mask filtering의 적용과 해당 기법의 적용에 있어 실험자가 고려하여야 할 사항들을 고찰하고자 하며 원자분해 영상 결과의 주제를 부각하기 위한 자료의 가공 기법들을 소개하고자 한다.

2. 실험 방법

Ion-milling에 의해 제작된 [110] Si 웨이퍼 시편을 원자분해 영상의 획득과 자료 처리를 위해 사용하였다. 시료의 원자분해 영상은 초고전압 투과전자현미경(HVEM)을 이용하여 1250kV의 가속 전압에서 post-column 이미지필터인 HV-GIF(high voltage gatan imaging filter)에 장착된 HV-MS(hv high voltage multi-scan charge coupled device, 1k x 1k pixels) camera를 이용하여 획득하였다. 장비의 사양 점분해능이 1.17 Å이기 때문에 획득한 고분해능 영상은 재료의 원자 구조를 나타내는 원자분해 영상이다.

Fourier mask filtering 기법의 적용은 Gatan사에서 제조한 DigitalMicrograph™(DM, Gatan Inc.) 프로그램을 사용하였다. DigitalMicrograph™는 정품을 구비하지 않은 경우라면 Gatan사의 웹사이트에서 제공하는 데모버전을 다운받아 사용할 수 있는데, 자료 처리 및 프로그램의 모든 기능들은 사용할 수 있으나 최종결과물을 이미지 파

일로 저장하는 기능이 제한되어 있다[3]. DigitalMicrograph™는 주어진 기본 메뉴 외에 사용자가 필요한 프로그램을 편집하여 구성할 수 있는 사용자 중심의 interface를 제공하는데 Gatan사의 기술자들을 포함한 여러 일반 유저들이 필요한 스크립트 파일을 제작하여 웹상에서 Digital Micrograph Script Database(DMSD)를 구축하고 이를 서로 공유하고 있다[4,5].

3. 결과 및 고찰

1. FFT(Fast Fourier Transform) 및 Fourier Mask Filtering에 의한 자료처리

Fig. 1에 [110] Si의 원자분해 영상과 해당 영상에 대한 FFT 및 Fourier mask filtering의 결과를 나타내었다. Fig. 1(a)에 나타낸 바와 같이 image processing을 하기 전 [110] Si의 원자분해 영상에는 시료 및 장비로부터 기인한 배경신호와 전자 노이즈 등이 포함되어 선명한 [110] Si의 원자구조를 반영하지 못함을 볼 수 있다. 반면 Fig. 1(b)는 원래의 영상에 대해 FFT 변환 및 Fourier mask filtering을 적용하여 시료 정보 이외의 신호들을 제거하고 영상을 복원한 결과인데 [110] Si의 원자배열 정보가 깨끗하게 나타남을 알 수 있다. 이러한 과정은 Fig. 1의 하단에 나타낸 바와 같이 (1)~(5)까지의 과정을 거쳐 완성되었다; (1) FFT 변환에 의한 diffractogram획득. (2) [110] Si의 구조에 해당하는 pattern mask filtering. (3) 실험적으로 획득한 spatial frequency까지 신호를 제한하기 위한 band-pass mask filtering. (4) Filtered diffractogram의 획득. (5) Filtered diffractogram의 IFFT 적용.

고분해능 영상에서 실제 점분해능 이상의 위상 정보를 포함할 경우 분해능 이상의 spatial frequency에 존재하는 회절빔들은 고분해능 영상에서 contrast를 반전시키거나 intensity를 변형시키기 때문에 물질의 구조 영상을 직접적으로 반영하지 못한다. 이러한 영상에 대해 Fourier mask filtering기법을 적용하여 장비 점분해능 이내의 spatial frequency만이 포함되도록 가상 대물렌즈 조리개를 설정하고 이를 다시 복원하면 Fig. 2의 결과처럼 물질의 구조를 반영하는 영상을 얻을 수 있다. 실제 [110] Si dumbbell 구조를 나타내기 위해선 Si-Si간 최소 거리 1.36Å을 분해하여야 하며 해당 면간 거리를 갖는 면은 Si (400)면(spatial frequency 0.74\AA^{-1})이므로 해당 회절빔까지만 포함되도록 filtering을 하고 IFFT에 의해 영상을 복원하면 [110] Si dumbbell 구조가 분해된 원자분해 영상을 Fig. 2(b)처럼 얻을 수 있다.

FFT 및 Fourier mask filtering에 의한 image processing은 원래의 영상으로부터 실험자가 임의로 자료를 가공하는 것이기 때문에 실험자가 이를 적용함에 있어 실질적으로 고려하여야 할 몇 가지 사항들이 있는데 이를 고찰하면 다음과 같다.

1) 영상의 FFT 변환 결과 얻어진 diffractogram 상에서 Fourier mask filtering을 적용할 때 spatial frequency 영역을 장비의 점분해능을 넘지 않도록 설정하여 고차 회

절법들의 영상 간섭을 배제하는 것이 바람직하다.

2) Pattern mask filtering 적용의 경우 회절점 선택영역은 가급적 좁게 하고 mask center를 잘 맞추어 고차 회절점까지 중앙에 잘 일치 하도록 하는 것이 좋다. 회절점 선택을 위한 mask circle이 크게 되면 회절점 이외의 배경 신호가 유입되어 이미지 blurring을 증가 시키게 되고, 정확하지 못한 pattern vector를 설정하게 되면 고차 회절점이 포함되지 못한 mask circle로 인해 구조 영상을 제대로 반영하지 못하기 때문이다. 이에 대한 영향을 최소화 하고자 한다면 획득한 diffractogram을 가급적 크게 확대하여 정밀하게 circle 범위와 vector를 조정하여야 한다.

3) 고분해능 영상에서 관심영역이 원래의 영상 영역 보다 좁게 설정될 경우 설정된 영상의 작은 화소수로 인해 상대적으로 거친 영상으로 복원되게 된다. 이러한 영상의 모자이크화를 완화시키기 위해선 영상을 다시 scale-up을 해주어 화소를 세분화하는 것이 바람직하다.

4) Band-pass mask filtering의 경우 투과빔에 대한 filtering은 일종의 고분해능 암시야상과 같은 영상을 형성하므로 특별한 목적이 아니라면 투과빔을 filtering 하지 않는 것이 좋다. 그렇지 않으면 diffraction contrast(혹은 strain contrast)와 같은 유용한 정보가 소실되기 때문이다.

2. Image intensity 활용 자료 가공 기법

본 기법은 영상에 포함된 전자 gain의 intensity profiling에 의해 1차적으로 이루어지며 구조 해석을 위한 정량 자료의 계산 보다는 획득한 고분해능 영상의 주제를 부각하기 위한 묘사 기법이며 단순히 보이는 실험 결과를 보다 시각화 하는데 유용하게 사용될 수 있다. 그 예로서 intensity contour map, rainbow map, grey scale contour map, temperature map과 같은 여러 가지 가공 기법들이 있는데 Fig. 3에 [110] Si 원자분해 영상에 대해 적용한 결과를 나타내었다. 이들 영상의 intensity를 활용한 자료의 가공은 DMSD[4]에서 제공하는 color look-up table을 적용한 것이나 이들 가공 기법은 상용으로 배포되는 그래픽 처리 프로그램으로도 적용이 가능하다.

References

- [1] Liu Z-Q, Song M, Mitsuishi K, Furuya K, Hashimoto H, J. Electron Microsc., 53(2) : 146, 2004.
- [2] Rowicka M, Kudlicki A, Otwinowski Z, Acta Cryst. A 58 : 574, 2002.
- [3] DM : Digital Micrograph version 3.0 manufactured by Gatan. The demonstration program can be downloaded at www.gatan.com and provide full functions except for saving the data.

- [4] DMSD : Digital Micrograph Script Database, http://www.felmi-zfe.tugraz.at/dm_scripts/dmscript1.html
- [5] Mitchell DRG, Schaffer B, Ultramicroscopy 103(4) : 319, 2005.

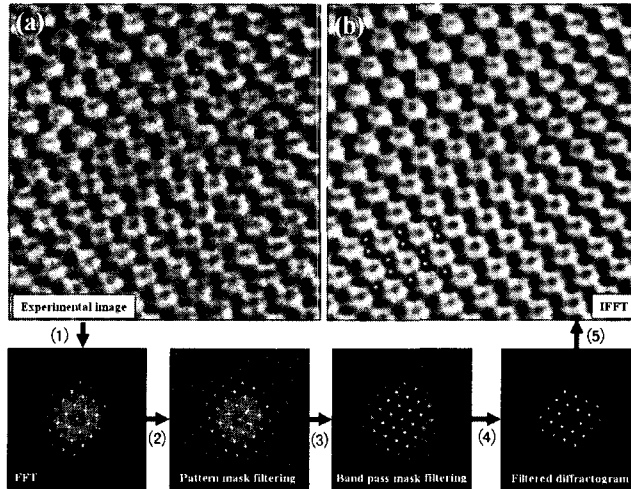


Fig. 1. An example of image quality enhancement by the fast Fourier transform (FFT) and Fourier mask filtering technique for the [110] Si atomic resolution image. (Inset superposed in (b) shows an atomic model of the [110] Si.)

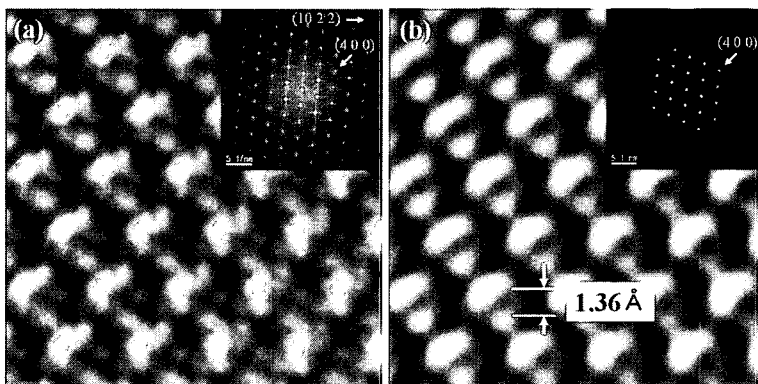


Fig. 2. An example of the reconstruction of the phase contrast image of the [110] Si atomic structure by Fourier mask filtering technique.

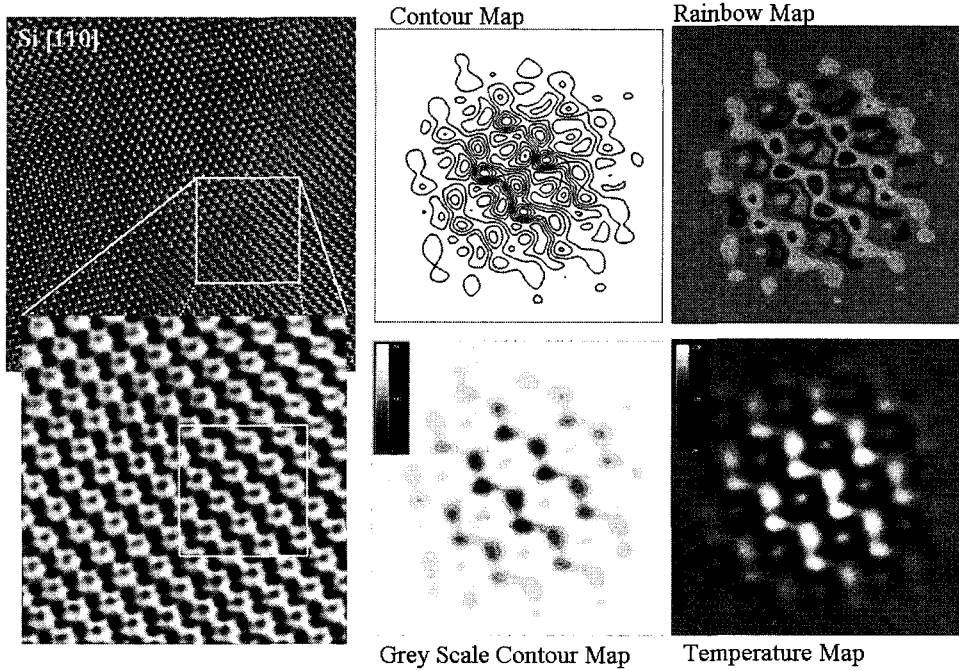


Fig. 3. Some illustrations of the digital processing techniques to exploit the image intensity in the [110] Si atomic resolution image for the versatile presentations.