

**ПРИБОРЫ, ИЗГОТОВЛЕННЫЕ
В ЛАБОРАТОРИЯХ**

УДК 54.084

**ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПО
ИЗОБРАЖЕНИЯМ *IN-SITU* АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ РОСТА
КРИСТАЛЛОВ ИЗ РАСТВОРА**

© 2025 г. Н. Н. Пискунова^а, Д. И. Цветов^б, Н. Н. Бабикова^б, В. А. Устюгов^б

Поступила в редакцию 12.02.2025 г.

После доработки 31.03.2025 г.

Принята к печати 12.05.2025 г.

Атомно-силовой микроскоп (АСМ), входящий в группу сканирующей зондовой микроскопии, в настоящее время является единственным инструментом, позволяющим в молекулярном масштабе *in-situ* следить за эволюцией ступеней на кристаллической грани в растворе. Задача определения скорости тангенциального роста ступеней в АСМ является первостепенной после феноменологического описания наблюдаемых процессов. “Ручной” способ снятия данных с изображений АСМ хорошо зарекомендовал себя [1–4], но при всех плюсах является крайне время- и энергозатратным и тормозит обработку готовых экспериментов на месяцы и годы.

В настоящей работе предложен метод автоматизированного получения кинетических данных по последовательным изображениям атомно-силовой микроскопии роста и растворения кристаллов. Создано компьютерное приложение, значительно облегчающее и ускоряющее рутинный процесс получения координат краев растущих ступеней в количестве, достаточном для статистического анализа.

^а Институт геологии им. академика Н.П. Юшкина ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
Россия, 167982, Республика Коми, Сыктывкар, Первомайская ул., 54.

^б Институт точных наук и информационных технологий Сыктывкарского государственного университета им.
Питирима Сорочкина, Россия, 167001, Сыктывкар, Октябрьский просп., 5.

Запись координат тысяч точек на пересечении профиля ступени с линиями специальной сетки, расстояние между которыми составляет первые десятки нанометров, заменена в этом приложении на возможность гораздо меньшим количеством точек наметить профиль ступени (рис. 1а). Если ступень почти прямая, то для создания контура можно обойтись четырьмя точками. Следующим шагом приложение генерирует точки на всех пересечениях контура и сетки (рис. 1б).

Рис 1. Приложение CrystalGrowthTool...

Машинным способом можно нарисовать очень плотную сетку, поэтому приложение позволяет получить множество координат за небольшое время и наклонить линии сетки под любым углом в зависимости от того, как двигаются ступени. Оно также создает радиальную круговую или эллиптическую сетку, что подходит для дислокационных холмиков. Приложение автоматически однообразно обрезает снимки, если это необходимо.

При открывании в приложении следующего снимка эксперимента на него автоматически переносятся старые профили ступеней, которые теперь пользователь должен передвинуть в их новые положения и снова сгенерировать на них множество точек. Далее необходимо нажать кнопку “Сохранить в Excel”.

Файл для сохранения в электронные таблицы выбирается в настройках (рис. 1в), и важно помнить, что при записи он должен быть закрыт. Запись данных на листе Excel производится в соответствие с номером ступени, номером снимка и номером линии сетки, она исключает случайные сдвиги строчек, что полностью подготавливает данные для дальнейшей статистической обработки. При этом происходит перевод данных из значений в пикселях в микрометры или нанометры согласно масштабу снимка. Далее в таблицах можно строить распределения, рассчитывать среднюю тангенциальную скорость роста, среднюю ширину террас, скорость нормального прироста грани и их флуктуации по методике, которая подробно описана в работе [4].

Работа приложения может быть сохранена как проект, когда тип сетки, уже выбранные профили ступеней и отмеченные точки объединяются в один архив со снимками для данного эксперимента и сохраняются в формате имяфайла.crystal.

Поскольку при работе с приложением контуры ступени обозначаются при помощи компьютерной мыши, точность снятия данных в автоматизированном способе также зависит от сенсора мыши. Для монитора 1920×1080 минимальное расстояние, которое различит сенсор мыши с CPI (counts per inch), равным 400, составляет 0.0625 мм. Если изображение занимает на экране 20 см, то для реального ростового эксперимента с площадкой сканирования 15×15 мкм² точность снятия

координаты в горизонтальной плоскости будет 4.7 нм, а для эксперимента с площадкой 7×7 мкм² точность составит 2.2 нм. Использование автоматизированного способа полностью избавляет от случайных ошибок, которые неизбежно допускает пользователь при “ручном” сборе данных. На начальном этапе работы с CrystalGrowthTool мы отмечали выпадение данных при сглаживании из-за небрежного обрисовывания профиля ступени, но для заинтересованного пользователя это легко исправимо.

В данный момент приложение используется в работе с новыми АСМ-экспериментами. Проведено сравнение полученных с его помощью результатов с данными обработки координат, полученными “ручным” способом для двух экспериментов из работ [1, 3]. Сравнивались средние расстояния, пройденные ступенями за 4.5 минуты для каждой пары снимков. Для эксперимента из работы [1] средние расстояния, полученные с помощью CrystalGrowthTool, в каждый момент времени были больше, чем полученные “ручным” методом, на величину от 5 до 5.7 нм. С учетом того, что точность в данном эксперименте составляла 4.7 нм, а автоматических данных было больше в среднем на 115 значений, результат сравнения можно считать приемлемым. Небольшое расхождение результатов не влияет на общий вывод работы [1].

Сравнение расстояний, полученных с помощью CrystalGrowthTool для эксперимента из работы [3], показало значения, большие для всех 38 пар снимков на величины от 0.5 до 1.1 нм, т. е. на не превышающие точность (2.7 нм), эти значения также не меняют выводов работы. Все это позволяет сделать выбор в пользу компьютерного приложения.

Характеристики приложения. Приложение CrystalGrowthTool создано на языке Python с помощью инструмента PyQt5, оно подходит для Windows XP с SP2 и более новых версий и занимает 544 391 Кбайт.

Поскольку библиотеки PyQt не имеют готовой функции для рисования сглаженной линии между выбранными точками, был использован алгоритм интерполяции кубическим сплайном. Алгоритм получает на вход небольшой массив координат (x , y), которые образуют кривую, а на выходе выдает множество координат для рисования плавной линии.

Мы также разработали функцию генерации точек, которая автоматически отмечает точку на пересечении профиля ступени и линии сетки с помощью метода Крамера [5]. Алгоритм попарно проверяет на пересечение каждую пару – каждый отрезок интерполированного профиля ступени и линии сетки. Если пересечение есть, то функция возвращает координату пересечения и программа сохраняет координаты точки в память.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Piskunova N.N.* // J. Cryst. Growth. 2021. V. 575. P. 126359.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2021.126359> .
2. *Piskunova N.N.* // J. Cryst. Growth. 2023. V. 603. 127013.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2022.127013> .
3. *Piskunova N.N.* // J. Cryst. Growth. 2024. V. 631. 127614.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2024.127614>
4. *Пискунова Н.Н.* // Записки Российского минералогического общества. 2022. Т. 151. № 5. С. 112.
<https://doi.org/10.31857/S0869605522050069>
5. *Мальцев И. А.* Основы линейной алгебры. М.: Наука, 1970.

Адрес для справок: Россия, 167982, Сыктывкар, ул. Первомайская, 54; Институт геологии им. академика Н.П.Юшкина. E-mail: piskunova@geo.komisc.ru

ПОДПИСЬ К РИСУНКУ

Рис. 1. Приложение CrystalGrowthTool: **а** – на первом изображении намечаются контуры ступеней, затем создается сетка, нумерованные линии которой перпендикулярны фронту движения ступеней; **б** – на следующем этапе после нажатия кнопки “Сгенерировать” (отмечена овалом) приложение автоматически расставляет точки в местах пересечения профиля ступеней и линий сетки; **в** – в меню “Настройки” можно выбрать файл для записи в таблицы Excel.

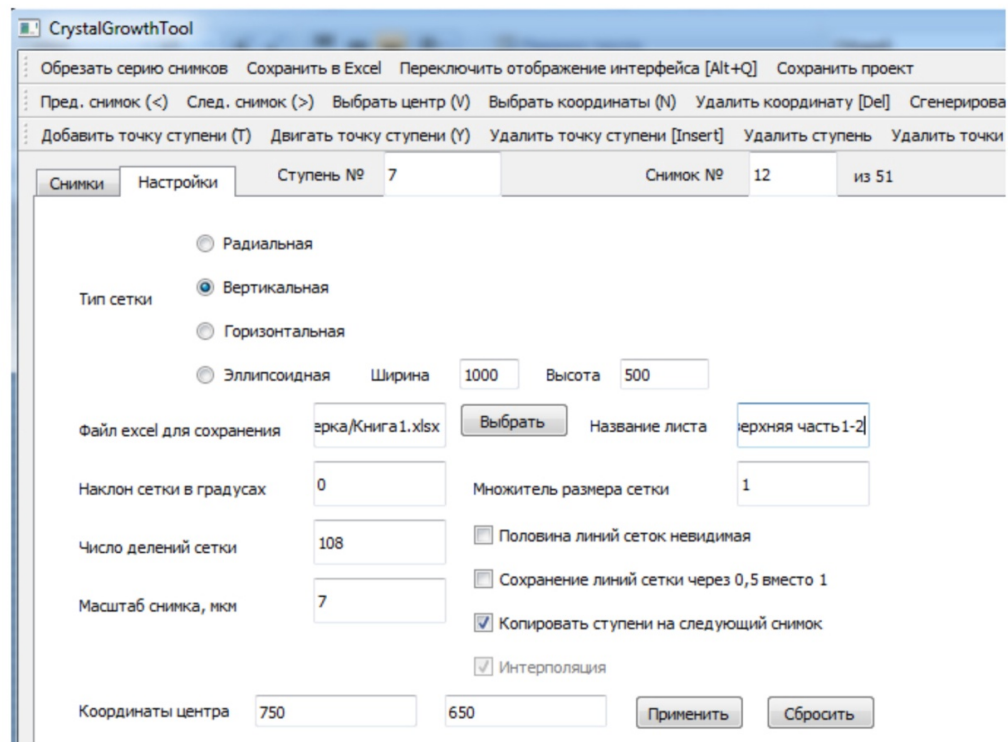
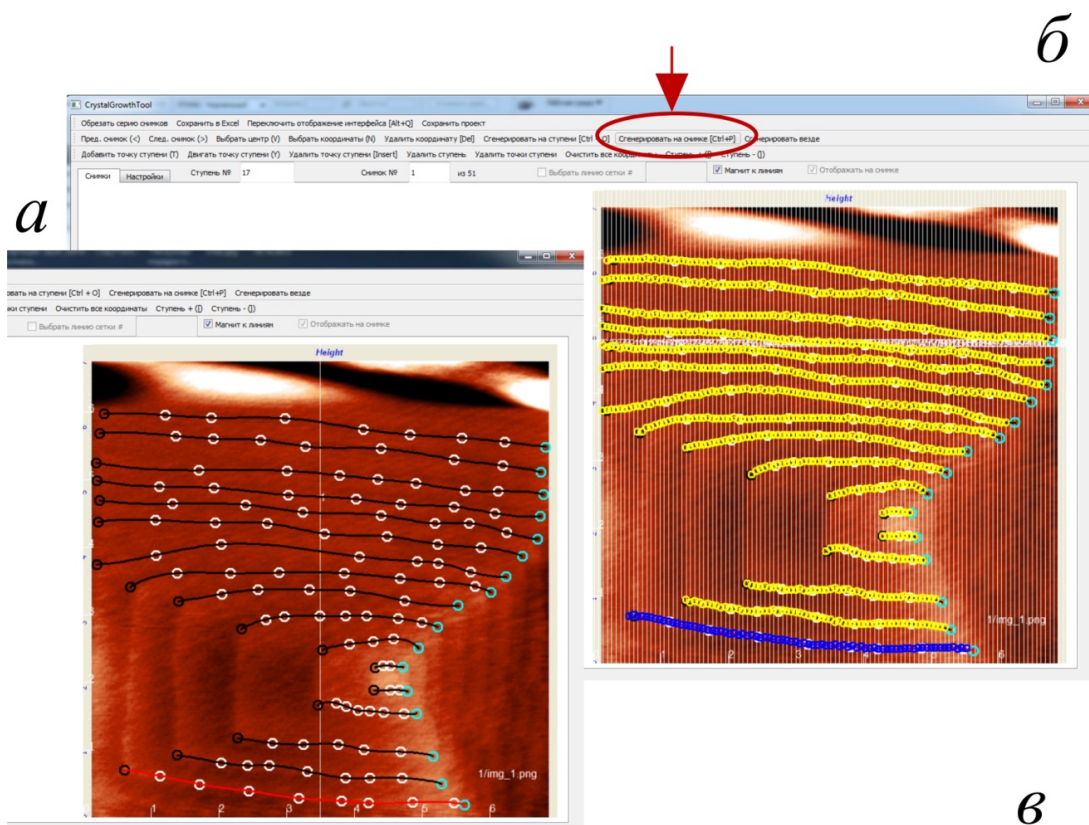


Рис. 1