

УДК 53.086

ГАРМОНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТОПОГРАФИЧЕСКИХ АСМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ НАНОРАЗМЕРНЫХ ГЛОБУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

© 2021 г. И. В. Антонец^{а, *}, Е. А. Голубев^{б, **}, В. И. Щеглов^с

^аСыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина,
Сыктывкар, 167001 Россия

^бИнститут геологии им. Н.П. Юшкина ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
Сыктывкар, 167982 Россия

^сИнститут радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук,
Москва, 125009 Россия

*e-mail: aiv@mail.ru

**e-mail: golubev@geo.komisc.ru

Поступила в редакцию 22.09.2020 г.

После доработки 18.12.2020 г.

Принята к публикации 25.12.2020 г.

Рассматривается алгоритм для статистического анализа изображений наночастиц, полученных методами сканирующей зондовой микроскопии, на основе гармонического анализа профилей поверхности со сложным рельефом. С помощью гармонического анализа были определены средние размеры частиц и оценены размеры их агрегатов. Алгоритм позволяет анализировать большие выборки частиц, и в данной работе был апробирован на модельных природных объектах с упорядоченным и разупорядоченным расположением наноразмерных частиц. Дополнительно рассмотрена зависимость результатов анализа от типа распределения частиц по размерам, выявлены особенности определения средних размеров при гауссовом и логарифмически нормальном распределениях. Среди возможных применений алгоритма можно назвать анализ средних размеров частиц и величины их агрегации в микро- и нанодисперсных структурах (тонких аморфных пленках, коллоидных системах, некристаллических веществах, полимерах) на основе трехмерных или псевдотрехмерных микроскопических изображений.

Ключевые слова: атомно-силовая микроскопия, гармонический анализ, наночастицы, агрегаты частиц, морфология поверхности, распределения частиц, микроструктура дисперсных материалов, обработка изображений.

DOI: 10.31857/S1028096021060030

ВВЕДЕНИЕ

Свойства наночастиц и нанодисперсных материалов обусловлены размерами дисперсных элементов и характеристикой их агрегации. Поэтому развитие методов измерения размеров и контроля дисперсности наночастиц является актуальной задачей. Статистический анализ размеров частиц в нанодисперсных материалах позволяет решить проблемы, связанные с факторами и механизмами их образования, оптимизацией разработки новых материалов с наночастицами на основе, как экспериментального синтеза, так и природоподобных технологий [1].

В настоящее время в наиболее широко используемых программах в основу автоматического анализа размеров и дисперсий наночастиц положен принцип пороговой обработки изображе-

ний, который после предварительных процедур фильтрования от шума позволяет оценивать средние размеры изометричных объектов [2]. Этот подход хорошо себя зарекомендовал при анализе индивидуальных частиц и их агрегатов, которые расположены на плоской поверхности. Несмотря на некоторые проблемы (учет степени изометричности и правильности формы частиц, немонотонный характер контраста частиц, идентификация нескольких слипшихся частиц как одной, игнорирование или обрезка частиц, лежащих ниже порогового уровня), этот подход является наиболее перспективным для анализа изображений наночастиц в просвечивающей электронной микроскопии, а также осадков микро- и наночастиц на плоских подложках в сканирующей зондовой микроскопии [3–5].

Для изучения строения и локальных свойств микро- и наноструктурированных твердых тел широко используются методы сканирующей микроскопии, прежде всего атомно-силовой микроскопии. Свежесколотые поверхности дают существенную информацию о строении веществ, которые имеют субмикронную дисперсность. При этом дисперсные образцы имеют сложный рельеф поверхности скола. В целом, для таких образцов его можно характеризовать шероховатостью нескольких порядков: волны микронного размера в плоскости изображения, волны субмикронного размера в плоскости изображения, островки неопределенной формы с субмикронным размером, которые покрыты холмиками с размером от единиц до первых десятков нанометров. Холмики являются постоянной составляющей изображений при любой макроволнистости поверхности. Они наблюдаются достаточно контрастно и в большинстве своем обособленно друг от друга. Как правило, эти холмики отвечают элементам микро- и нанодисперсной структуры материала соответственно, их собственный размер и размеры их скоплений (островков), а также распределение по размерам являются подходящими параметрами для оценки дисперсности вещества и сравнения образцов друг с другом [6–10].

При изучении естественной поверхности и сколов с помощью сканирующей микроскопии (электронной или зондовой) недостатки пороговой обработки изображений, прежде всего, связанные с плотным контактированием (вплоть до слипания) частиц в объеме образца и естественной макро- и микроволнистостью поверхности, становятся критическими для корректности оценки размеров [3].

Ручное определение размеров каждой частицы по профилям поверхности является очень трудоемким, хотя, по-видимому, наиболее точным на данный момент способом. Однако, значительным его ограничением являются большие временные затраты для анализа больших выборок частиц, что необходимо, например, при логнормальном распределении частиц по размерам. Поэтому для автоматического определения размеров большого числа плотноупакованных частиц, формирующих разноуровневые скопления актуально использование методов обработки, использующих иные математические основы.

Анализ профилей поверхности является одним из оптимальных способов выделения частиц и определения их размеров. Типичный профиль АСМ-изображения имеет сложный характер, в котором сочетается множество волн различного масштаба, обусловленных макроволнистостью и проявляющимися в виде холмиков микро- и наноструктурами. Для математической обработки профилей с такими характеристиками оптималь-

ным является гармонический анализ на основе представления линии профиля в виде суммы синусоидальных колебаний дискретных частот. Такое представление используется для фильтрации изображений от приборных шумов, однако оно позволяет выделить и значимые частоты, среди которых присутствуют структурно-обусловленные элементы рельефа [11, 12].

Гармонический анализ подразумевает периодичность расположения исследуемых объектов. Учитывая, что фурье-преобразование лежит в основе многих программ обработки изображений в АСМ, представляет интерес сравнение результатов применения гармонического анализа материалов с периодическим расположением структурных элементов и при отсутствии такового. Среди веществ природного происхождения распространены некристаллические вещества с микро- и наноразмерной глобулярной структурой. Для большей их части характерно отсутствие закономерного взаимного расположения глобул, при этом есть природные вещества с дальним порядком в расположении наноразмерных глобул [6].

В данной работе приводятся результаты применения гармонического анализа для оценки параметров глобулярной наноструктуры природных объектов: благородного опала, представляющего собой природный фотонный кристалл, и графеносодержащих шунгитов Карелии, интересных своими электромагнитными и сорбционными свойствами [13–16].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В работе изучались образцы шунгитов с содержанием углерода не менее 95 ат. % из месторождений Максово и Загогино, а также образец австралийского благородного опала.

Исследование топографии поверхности образцов проводилось с помощью атомно-силового микроскопа Интегра Prima (NT-MDT, Зеленоград, Россия). Для сканирования использовались кантилеверы SSS-NCH (Nanosensors) с резонансной частотой около 330 кГц, радиусом закругления зонда около 2–4 нм и жесткостью около 35 Н/м. Разрешение при сканировании составляло 256×256 точек. Съемки проводились на свежесколотых поверхностях при комнатных условиях (температура 25–27°C, относительная влажность воздуха 60–65%). Для повышения достоверности результатов все участки сканировались неоднократно, при этом анализировались только те из них, для которых наблюдалась воспроизводимость изображений.

АСМ-изображение размером 256×256 точек представляет собой совокупность из 256 двумерных массивов (x, z) по 256 точек в каждом, расположенных на расстоянии шага сканирования

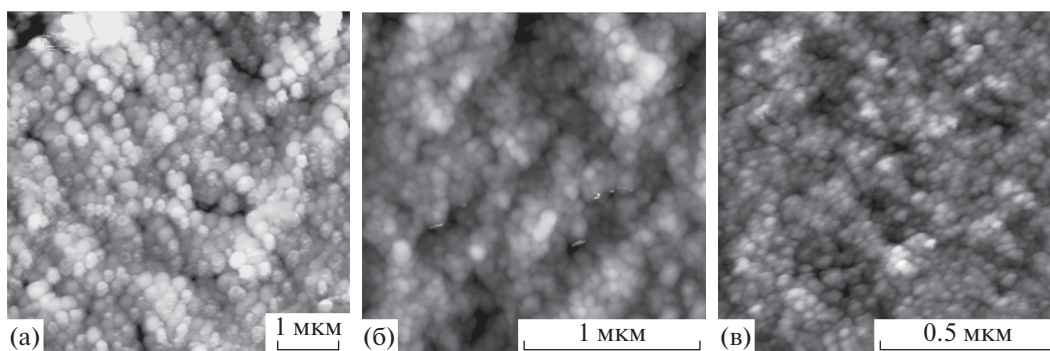


Рис. 1. Типичные АСМ-изображения глобулярного строения благородного опала (а), шунгитов Зажогино (б) и Максого (в).

вдоль оси y . Каждый такой массив (x, z) можно рассмотреть, как реализацию случайного процесса, для которого можно применить дискретное преобразование Фурье [17–19]. Объектом для анализа являлись профили поверхности. Величина шага разреза поверхности на профили определялась визуально. Профили вырезались в местах наиболее плотного скопления частиц таким образом, чтобы каждая частица была разрезана не менее чем 5 раз.

РЕЗУЛЬТАТЫ

АСМ-изображения образцов

Изображения поверхности показывают глобулярную надмолекулярную структуру образцов (рис. 1).

Структура благородного опала (рис. 1а) характеризуется регулярным чередованием глобул с редкими нарушениями регулярности, обусловленными либо отсутствием одной или нескольких глобул в ряду, либо сдвигом друг относительно друга рядов, расположенных на разных уровнях и формирующих блоки. Для шунгитов (рис. 1б, 1в) характерно плотное, но разупорядоченное расположение глобул, которые формируют агрегаты, представляющие собой неправильной формы скопления надмолекулярных частиц.

Распределения частиц по размерам, определенные вручную по выборкам из 50 частиц, приведены на рис. 2. Для опала выявлено характерное нормальное (гауссово) распределение частиц, для шунгитов – логарифмически нормальные распределения. Средние размеры частиц и дисперсии, оцененные из распределений, составляют 245 ± 7 нм (опал, рис. 2а), 56 ± 15 нм (шунгит Зажогино, рис. 2б) и 25 ± 5 нм (шунгит Максого, рис. 2в).

Алгоритм гармонического анализа

Общий алгоритм проведения гармонического анализа покажем на примере профиля поверхности опала, представленного на рис. 3. Дискретизированный профиль с шагом 0.0114 мкм приведен на рис. 4.

Сравнивая рис. 4 и рис. 3 можно заключить, что равномерно расставленные точки с заданным шагом отражают конфигурацию профиля с высокой точностью.

Предположим, что исследуемый профиль есть один период функции, которую можно продолжить до бесконечности в обе стороны. При таком предположении можно выполнить разложение сигнала профиля в гармонический ряд Фурье [18, 19]:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{\pi n x}{L} + b_n \sin \frac{\pi n x}{L} \right), \quad (1)$$

где L – полупериод функции, а представленные в (1) коэффициенты имеют вид:

$$a_0 = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) dx, \quad (2)$$

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{\pi n x}{L} dx, \quad (3)$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{\pi n x}{L} dx. \quad (4)$$

При этом полная амплитуда спектральной составляющей на частоте $\pi n/L$ составляет:

$$D_n = (a_n^2 + b_n^2)^{1/2}. \quad (5)$$

Интегралы (2)–(4) брались численно, как интегральная сумма, в результате чего расчетные формулы для коэффициентов a_0, a_n, b_n принимают вид:

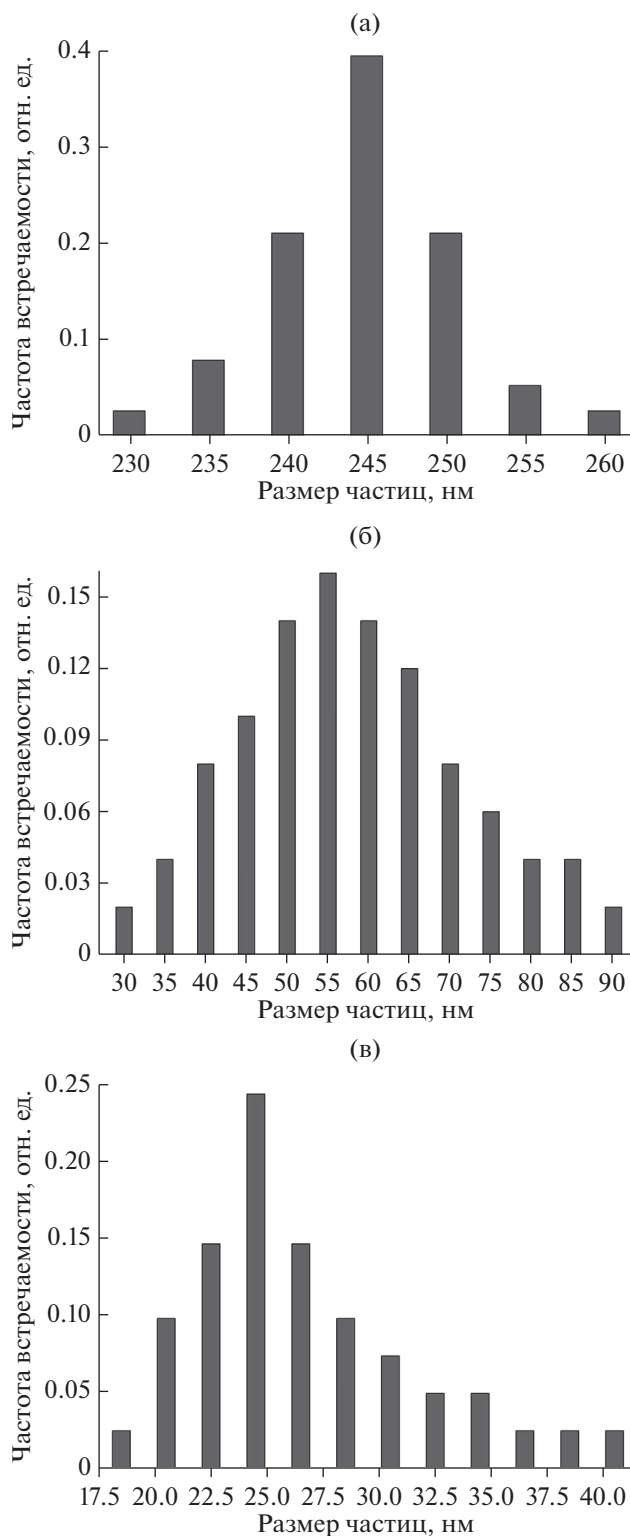


Рис. 2. Распределения частиц по размерам: а – благородный опал, б – шунгит Зажого, в – шунгит Максово.

$$a_0 = \frac{1}{L} \left[\frac{(b-a)}{m} \sum_{i=0}^{m-1} B(x_i) \right], \quad (6)$$

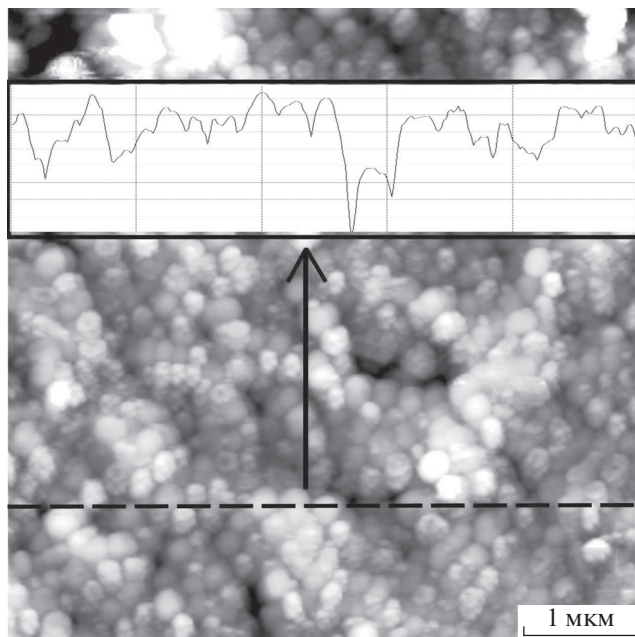


Рис. 3. АСМ-изображение надмолекулярной структуры благородного опала. Пунктирной линией показан пример траектории получения профилей. Профиль поверхности опала представлен на врезке.

$$a_n = \frac{1}{L} \left[\frac{b-a}{m} \sum_{i=0}^{m-1} \left(B(x_i) \cos \frac{\pi n x_i}{L} \right) \right], \quad (7)$$

$$b_n = \frac{1}{L} \left[\frac{b-a}{m} \sum_{i=0}^{m-1} \left(B(x_i) \sin \frac{\pi n x_i}{L} \right) \right], \quad (8)$$

где m – общее количество расчетных точек (для данного профиля составляет 458), $B(x_i)$ – амплитуда сигнала, приведенного на рис. 4 при соответствующих x_i , $b = x_{m-1}$, $a = x_0$, $L = (b-a)/2$.

Полученный спектр профиля для 20-ти гармоник приведен на рис. 5. Разложение профиля до 20-ой гармоники мотивировано тем, что при выбранном нами размере окна сканирования (5×5 мкм для опала, 2×2 мкм для шунгита Зажого, 1×1 мкм для шунгита Максово) размеры объектов, соответствующих гармоникам за пределами 20-ой, меньше размеров наблюдаемых на изображениях глобул. На рисунке по горизонтальной оси отложен номер гармоники n , а по вертикальной оси – амплитуда спектральной составляющей в относительных единицах, рассчитанная по формуле (5) и нормированная на величину максимальной амплитуды (для данного профиля – четвертой гармоники) Dn .

Для каждого образца были получены гармонические спектры для десяти последовательно вырезанных профилей, которые затем статистиче-

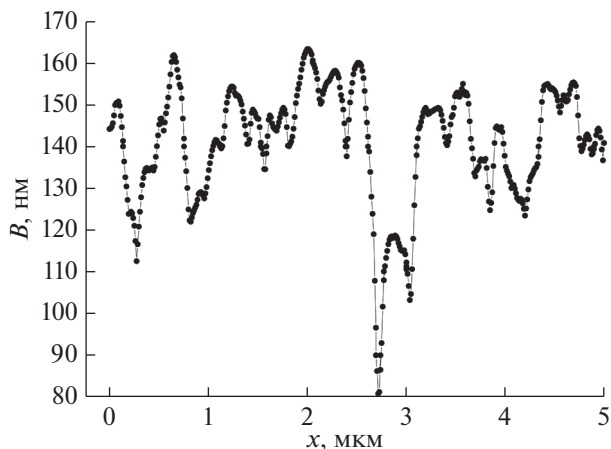


Рис. 4. Дискретизированный профиль поверхности опала.

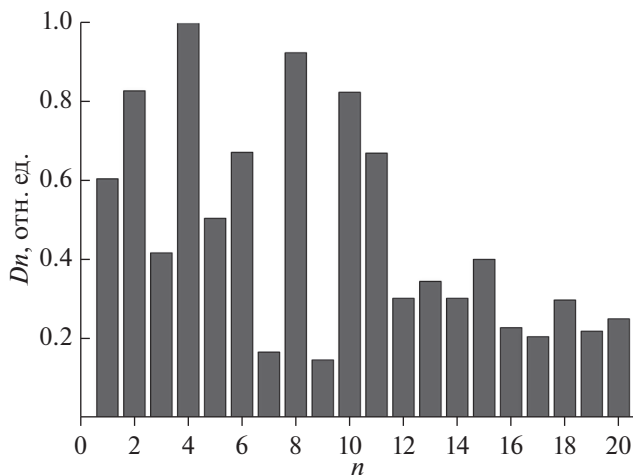


Рис. 5. Гармонический спектр профиля поверхности опала.

ски усреднялись, и на усредненных спектрах проводился анализ выделяющихся гармоник.

Гармонический анализ

В качестве примера упорядоченной наноразмерной структуры исследован образец австралийского благородного опала. Он характеризуется монодисперсной надмолекулярной структурой из упакованных по принципу плотнейшей упаковки сферических глобул (рис. 1а), диаметр которых для формирующихся в различных по температуре и скорости осаждения условиях образцов варьирует в пределах 180–300 нм. Упорядоченная надмолекулярная структура благородного опала нарушается только блочностью упаковки глобул. Для опала были проанализированы произвольно вырезанные относительно текстуры профили с шагом профилирования 39 нм.

На рис. 6 приведена результирующая спектральная гистограмма профиля АСМ-изображения надмолекулярной структуры благородного опала. Размер окна сканирования составлял 5 мкм. В целом, гистограмма представляет собой полный набор гармоник разной амплитуды, которые меняются волнообразно с увеличением номера гармоники и с наличием индивидуально или группами по две–три явно выделяющихся гармоник. Такой гармонический шум на спектре возникает из-за отсутствия строгой регулярности взаимного расположения пиков, обусловленного в данном случае (прежде всего) блочностью надмолекулярного строения.

Каждая гармоника соответствует размеру области, занимаемой топографически выделенным элементом на изображении. Будем считать, что размер такой области равен половине периода соответствующей гармоники. Например, для пер-

вой гармоники, соответствующей укладыванию на полной длине профиля одного периода синуса (или косинуса), каждая половина синусоиды (положительная и отрицательная) дает одну область, т.е. на длине полного периода размещаются две области равного размера. Таким образом, для первой гармоники при длине анализируемого профиля 5 мкм размер области оставляет 2.5 мкм. Для второй гармоники, где на длине профиля укладываются уже два периода синусоиды (косинусоиды), этот размер будет равен 1.25 мкм и так далее.

Видно, что ключевой в спектре является десятая гармоника, которая соответствует размеру частиц 250 нм. Это совпадает с предварительной оценкой размеров с помощью специальной функции в программном обеспечении микроскопа,

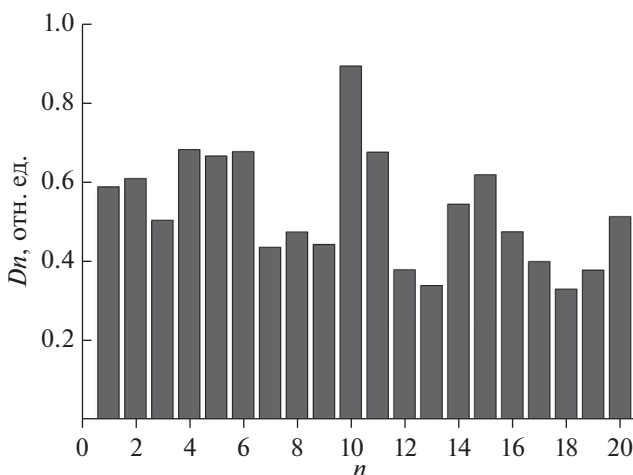


Рис. 6. Результирующая спектральная гистограмма глобулярной структуры австралийского опала.

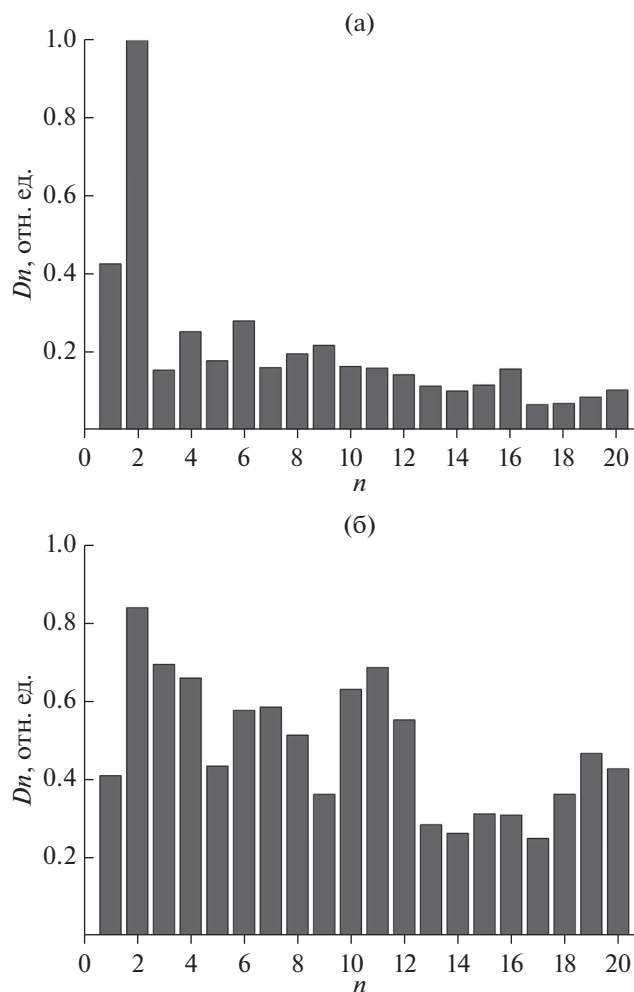


Рис. 7. Усредненные спектральные гистограммы глобулярной структуры шунгитов: образец Зажогино (а), образец Максого (б).

позволяющей вручную определять размеры объектов на изображении (рис. 2а). На фоне ближайшего окружения выделяются также гармоники 15 и 20, однако размеры объектов на изображении, которым они соответствуют, наиболее вероятно отвечают приборному шуму. Гармоники 4, 5 и 6, выделяющиеся группой, отвечают среднему размеру объектов на изображении около 500 нм, что свидетельствует о выделении в спектре двойных опаловых частиц.

Шунгиты имеют более сложную по сравнению с опалами глобулярную структуру (рис. 1б, 1в), которая характеризуется логнормальным распределением глобул по размерам (рис. 2б, 2в) и их хаотичным пространственным расположением. Единственной закономерностью в их расположении является агрегация десятка и более глобул в скопления неопределенной формы. Поэтому их спектральные разложения имеют более сложный для интерпретации характер. На рис. 7 приведены

усредненные спектральные гистограммы профилей АСМ-изображений шунгитов Зажогино (рис. 7а) с окном сканирования 2 мкм (шаг профилирования 15 нм) и Максого (рис. 7б) с окном сканирования 1 мкм (шаг профилирования 7.8 нм).

При этом для шунгитов также можно выделить гармоники, которые соответствуют их структурным особенностям. В первую очередь можно заметить, что наиболее высокоамплитудными являются гармоники из первой тройки, прежде всего, вторая. Размеры объектов, которые соответствуют этим гармоникам (500 нм для Зажогино и 167 нм для Максого), очевидно отвечают скоплениям углеродных глобул. Наблюдаемым на изображениях глобулам, средние размеры которых можно оценить из рис. 2б, 2в, отвечают 16-ая гармоника (образец Зажогино, 62.5 нм) и 19-ая гармоника (образец Максого, 25 нм). Эти гармоники явно выделяются на фоне ближайших, но не являются (в отличие от спектра упорядоченной надмолекулярной структуры благородного опала) доминирующими для всего спектра. Еще одна явно выделяющаяся гармоника образца Максого (гармоника 11) по размерам соответствует контактирующим группам (агрегатам) глобул размером около 100 нм.

Результаты показывают, что, несмотря на более сложные структурные особенности, гармонический анализ позволил в автоматизированном режиме выделить и статистически оценить размеры глобул и их скоплений на АСМ-изображениях, так как отвечающие им гармоники хорошо выделяются на фоне статистического шума.

Возможной причиной того, что гармоники глобулярных частиц не являются доминирующими в спектрах шунгитов, является обратная зависимость амплитуды гармоник от их номера. Для оценки данной зависимости нами был проанализирован модельный профиль, представленный разноразмерными регулярными выступами, в целом сопоставимый с профилями АСМ-изображений надмолекулярной наноструктуры. Анализ модельного профиля (рис. 8) показал, что величина амплитуды гармоники экспоненциально зависит от ее номера при четном количестве гармоник.

Если нормировать спектры шунгитов полученной на модельном профиле экспоненциальной зависимостью (рис. 9), то можно увидеть, что гармоники, отвечающие глобулярным частицам (16-ая гармоника у образца Зажогино (рис. 9а) и 19-ая гармоника образца Максого (рис. 9б)), становятся преобладающими на спектрах. Это правильно, так как количество глобулярных частиц существенно превышает количество сформированных ими скоплений.

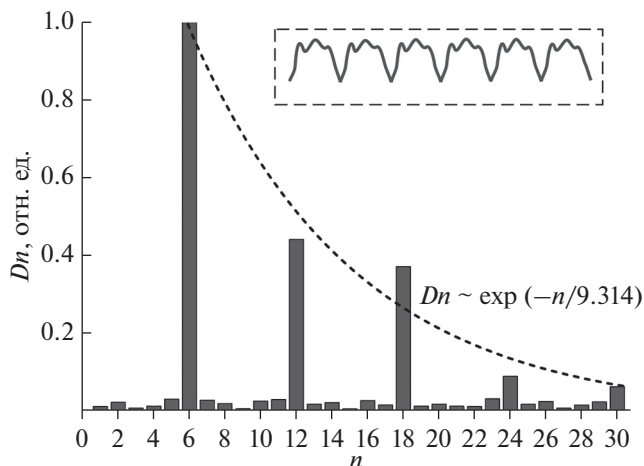


Рис. 8. Гармонический спектр модельного профиля (профиль приведен на врезке).

ОБСУЖДЕНИЕ

При монодисперсном распределении частиц по размерам гармонический анализ позволяет достоверно определить средний размер частиц и размеры их скоплений. Однако в природе чаще всего встречается логарифмически нормальное распределение по размерам, особенно для некристаллических веществ. И даже монодисперсное может иметь широкий разброс размеров. В этом случае многое зависит от дисперсии распределения (рис. 10). Если разброс по размерам является достаточно узким, то на гармонических спектрах происходит четкое выделение гармоник, отвечающих средним размерам частиц (рис. 10а). При большом разбросе размеров и логнормальном распределении также возможна корректная оценка размеров частиц, оптимальной для которой является нормировка спектра (рис. 10б, 10в).

Важным достоинством гармонического анализа профилей является возможность достоверного определения средних размеров плотных скоплений (агрегатов) частиц, что позволяет оценить иерархичность и многоуровневость строения дисперсных материалов.

Следует отметить, что на точность определения среднего размера частиц в случае гармонического анализа влияет не только собственный разброс частиц по размерам, но и то, что линия секущего профиля редко пересекает частицу по середине, показывая ее диаметр. Чаще всего линия пересекает частицу выше или ниже середины, таким образом уменьшая размер анализируемой частицы. Это выдвигает требования к шагу профилирования, который должен обеспечивать пересечение каждой частицы не менее пяти раз. В таком случае три линии будут пересекать частицу вблизи ее геометрического центра, что (с учетом дискретности гармонического анализа) поз-

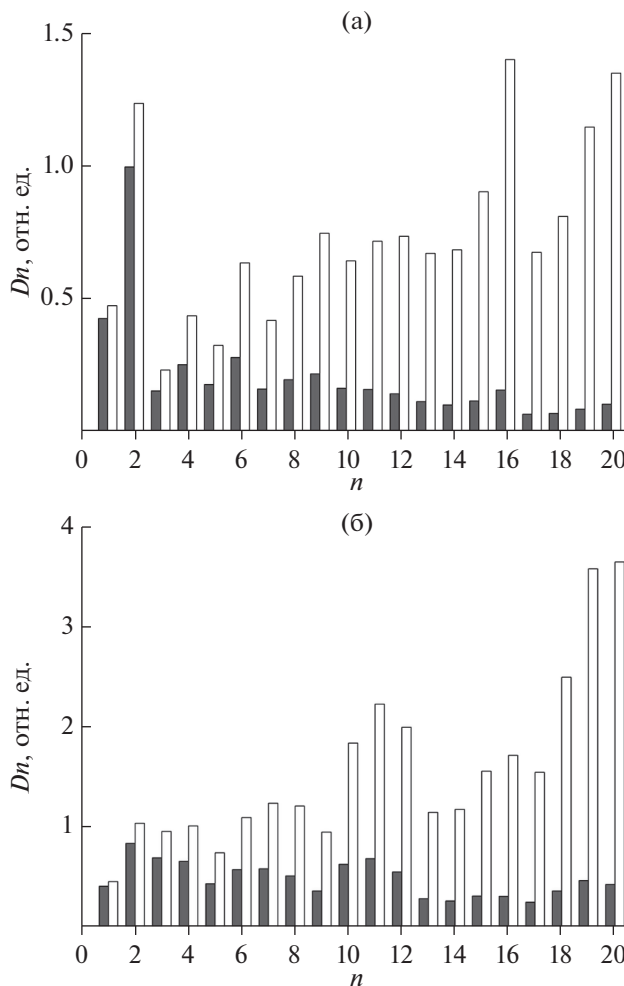


Рис. 9. Усредненные спектральные гистограммы глобулярной структуры шунгитов Жагоино (а) и Максво (б). Заполненные столбики – исходные спектры, пустые – нормированные спектры.

волит определить средний размер частиц с погрешностью около 10%. Такая погрешность является приемлемой для оценки размеров частиц по микроскопическим изображениям, особенно учитывая возможность анализа статистически большой выборки.

Важной особенностью анализа гармонического спектра является необходимость “ручной” сортировки выделенных гармоник с учетом наблюдаемых на изображении объектов и их природы (полезный сигнал, приборный шум). Тем не менее, описанные в данной работе алгоритмы позволяют получать статистические характеристики исследуемых материалов посредством обработки больших выборок, что наиболее важно при логарифмически нормальных распределениях частиц по размерам с большим разбросом.

Гармонический анализ профилей АСМ-изображений дает возможность в автоматическом ре-

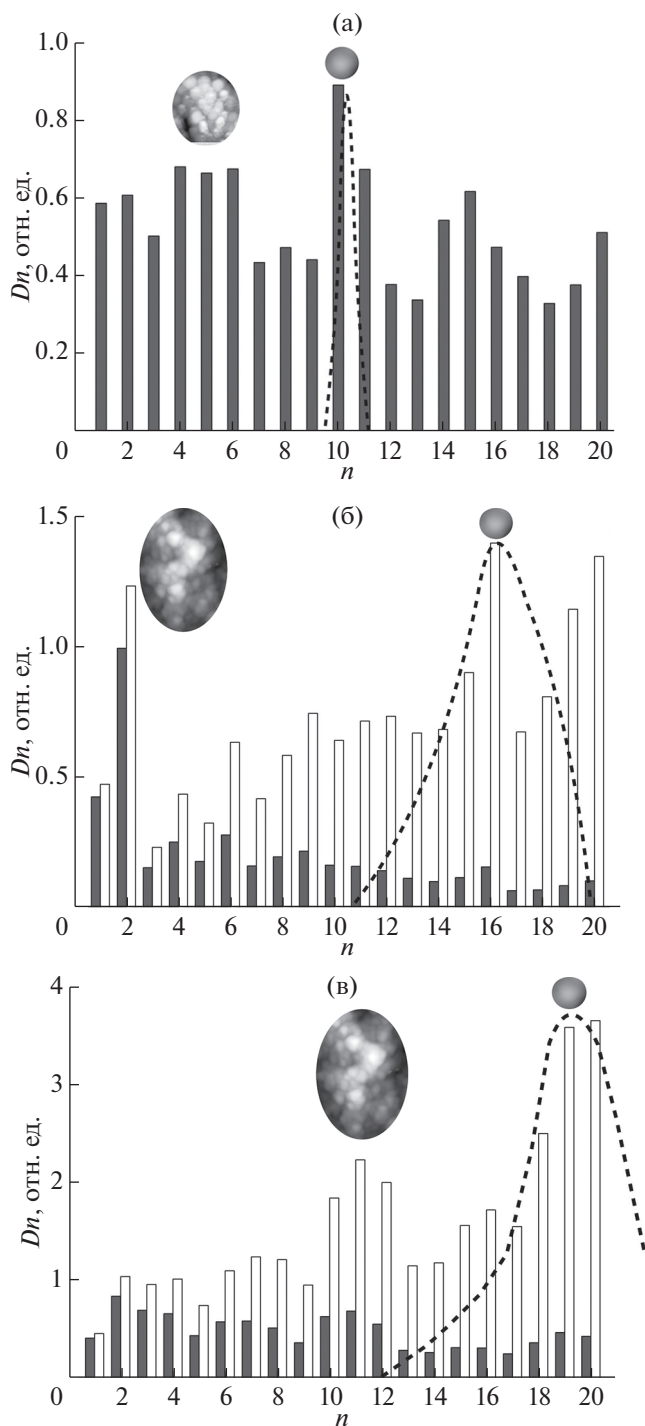


Рис. 10. Иллюстрация влияния распределения частиц по размерам на гармонические спектры опала (а), шунгита Жагоино (б) и шунгита Максого (в). Распределения частиц по размерам (пунктирные линии) приведены согласно рис. 2.

жиге определить наиболее вероятные размеры частиц при оценке статистически большой выборки данных, а также оценить средние размеры их скоплений. Дополнительно гармонический

анализ позволяет избежать трудностей с определением корректного размера частиц, связанных с разномасштабными неровностями поверхности, ее сложным рельефом, а также с наличием слипшихся частиц, которые достоверно разделяются при разложении профиля.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере образцов с упорядоченной монодисперсной и разупорядоченными наноструктурами было проведено определение средних размеров частиц и их скоплений на топографических АСМ-изображениях разложением секущего профиля в гармонический ряд Фурье. Развита методика определения средних размеров частиц с помощью гармонического анализа позволяет автоматически анализировать топографические АСМ-изображения с большим количеством наночастиц в условиях, когда исследуемая площадь образца содержит перепады высот порядка или больше высоты наночастиц, также при недостаточном контрастном разрешении близко расположенных частиц, то есть когда достоверность пороговой обработки изображений низка. Выделена зависимость точности оценки размеров частиц с помощью гармонического анализа от типа распределения частиц по размерам. Показано, что с помощью такого анализа могут быть с высокой точностью определены средние размеры частиц как при нормальном, так и при логарифмически нормальном их распределении по размерам. Особое значение предложенный способ имеет для случаев логарифмически нормального распределения частиц по размерам, так как вследствие значительной дисперсии распределений требуется измерение очень большого количества частиц для корректного определения среднего размера. При логарифмически нормальном распределении частиц по размерам для повышения корректности анализа следует провести нормировку амплитуды гармоник. Важным дополнением является возможность с помощью гармонического анализа выявлять и оценивать размеры обособленных скоплений частиц, так как процессы агрегации и размеры агрегатов влияют на многие (в том числе механические, сорбционные) свойства материалов. Представленная методика может применяться и для анализа изображений частиц в сканирующем электронном микроскопе.

БЛАГОДАРНОСТИ

Настоящее исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и NSFC (проект № 20-55-53019).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Martin-Martinez F.J., Jin K., Barreiro D.L., Buehler M.J.* // ACS Nano. 2018. V. 12. P. 7425. <https://doi.org/10.1021/acsnano.8b04379>
2. *Bishop C.M.* Neural Networks for Pattern Recognition. Oxford: Oxford Univ. Pres, 1995. 504 p.
3. *Чукланов А.П., Бородин П.А., Зиганшина С.А., Бухараев А.А.* // Ученые записки Казанского государственного университета. 2008. Т. 150. № 2. С. 220.
4. *Северюк В.А., Брунков П.Н., Шальнев И.В., Гуткин А.А., Клишко Г.В., Гронин С.В., Сорокин С.В., Конников С.Г.* // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. № 7. С. 921. <https://doi.org/10.1134/S106378261307021X>
5. *Меньшиков Е.А., Большакова А.В., Виноградова О.И., Яминский И.В.* // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2009. Т. 45. № 1. С. 108.
6. *Golubev Ye.A.* // J. Crystal Growth. 2005. V. 275. № 1–2. P. e2357. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.11.335>
7. *Golubev Ye.A., Kovaleva O.V., Yushkin N.P.* // Fuel. 2008. V. 87. № 1. P. 32. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.04.005>
8. *Golubev Ye.A., Rozhkova N.N., Kabachkov E.N., Shul'ga Yu.M., Natkaniec-Hołderna K., Natkaniec I., Antonets I.V., Makeev B.A., Popova N.A., Popova V.A., Sheka E.F.* // J. Non-Crystalline Solids. 2019. V. 524. 119608. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.119608>
9. *Антонец И.В., Котов Л.Н., Голубев Е.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2007. № 8. С. 65.
10. *Antonets I.V., Kotov L.N., Golubev E.A.* // Materials Chemistry and Physics. 2020. V. 240. 122097. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.122097>
11. *Julius O. Smith III.* Mathematics of Discrete Fourier Transformation (DFT) with audio Applications. W3K Publishing, 2007. 322 p.
12. *Daniell P.J.* // Suppl. J. R. Stat. Soc. 1946. V. 8. № 1. P. 88.
13. *Berezkin V.I., Kholodkevich S.V., Konstantinov P.P.* // Phys. Solid State. 1997. V. 39. № 10. P. 1590. <https://doi.org/10.1134/1.1129903>
14. *Голубев Е.А.* // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. № 5. С. 995. <https://doi.org/10.1134/S1063783413050107>
15. *Kovalevski V.V., Prikhodko A.V., Buseck P.R.* // Carbon. 2005. V. 43. P. 401. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.09.030>
16. *Golubev E.A., Antonets I.V., Shcheglov V.I.* // Materials Chemistry and Physics. 2019. V. 226. № 3. P. 195. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.01.033>
17. *Антонец И.В., Голубев Е.А., Шафров В.Г., Шеглов В.И.* // Журн. радиоэлектроники. 2019. № 4. С. 7. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2019.4.1>
18. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров). М.: Наука, 1973. 832 с.
19. *Романовский П.И.* Ряды Фурье. Теория поля. Аналитические и специальные функции. Преобразование Лапласа. М.: ФИЗМАТГИЗ. 1964. 304 с.

Harmonic Analysis of Topographic AFM Images of Nanosized Globular Structures

I. V. Antonets^{1,*}, E. A. Golubev^{2,**}, V. I. Shcheglov³¹*Pitirim Sorokin Syktyvkar State University, Syktyvkar, 167001 Russia*²*Institute of Geology named N.P. Yushkin FSC of Komi SC, Russian Academy of Sciences, Syktyvkar, 167982 Russia*³*Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 125009 Russia***e-mail: aiv@mail.ru****e-mail: golubev@geo.komisc.ru*

The paper considers an algorithm for statistical analysis of images of nanoparticles obtained by scanning probe microscopy, based on harmonic analysis of surface profiles. Using harmonic analysis, the average particle sizes were determined and the sizes of their aggregates were estimated. The algorithm allows analyzing large samples of particles and in this work was tested on model objects with an ordered and disordered arrangement of nanosized particles. Additionally, the dependence of the analysis results on the type of particle size distribution is considered, and the features of determining the average size for Gaussian and lognormal distributions are revealed. Possible applications of the algorithm include the analysis of the average particle size and the value of their aggregation in micro-nanodispersed structures (thin amorphous films, colloidal systems, non-crystalline substances, polymers) based on three-dimensional or pseudo-three-dimensional microscopic images.

Keywords: atomic force microscopy, harmonic analysis, nanoparticles, particle aggregates, surface morphology, particle distribution, microstructure of dispersed materials, image processing.