

MMD&T

Molecular Motion Dedector & Tracer

Abteilung:	Elektrotechnik
Name der Verfasser:	Reto Zingg, Thomas Derrer
Semester:	Winter 97/98
Betreuer:	H. Grossmann



1 Inhaltsverzeichnis

1	INHALTSVERZEICHNIS	2
2	AUFGABENSTELLUNG	5
2.1	EINFÜHRUNG	5
2.2	AUFGABENSTELLUNG	5
2.3	HILFSMITTEL	6
2.4	BERICHT	6
2.5	TERMINE	7
2.6	ORGANISATION	7
2.7	BEWERTUNG	7
2.8	BEMERKUNGEN	7
3	TERMINPLAN	8
3.1	GRAFISCHER ZEITPLAN	9
4	EINFÜHRUNG	10
4.1	LANGFRISTIGES ZIEL DES PROJEKTES	10
4.2	ZIEL DIESER STUDIENARBEIT	10
4.3	EIGENSCHAFTEN DES PORPHYRIN MOLEKÜLS	10
4.4	EIGENSCHAFTEN DES GOLDSUBSTRATES (Au110)	11
4.5	KOMBINATION PORPHYRINMOLEKÜL UND GOLDSUBSTRAT	11
4.6	RASTERTUNNELMIKROSKOP (RTM)	12
4.6.1	MOLEKÜLHANDHABUNG MITTELS RTM	13
4.7	NANOWISSENSCHAFT	13
5	PFLICHTENHEFT	14
5.1	AUFGABENSTELLUNG	14
5.2	AUSGANGSMATERIAL	14
5.2.1	EIGENART DES AUSGANGSMATERIALS	14
5.3	ENDPRODUKT	15
5.3.1	ANFORDERUNGEN AN DEN MMD&T	15
5.3.2	ANFORDERUNGEN AN DAS SYSTEM	15
5.3.3	HARDWARE	15
5.3.4	SOFTWARE	15
5.3.5	ANFORDERUNG AN DAS USER INTERFACE (UI)	16
5.3.6	FUNKTIONALE ANFORDERUNGEN	16
5.3.7	ANFORDERUNG AN DEN BENUTZER	16
5.4	VALIDIERUNG	16
6	PROBLEMANALYSE	17



6.1	BILDQUALITÄT	17
6.2	MOLEKÜLERKENNUNG	17
6.3	DRIFTKOMPENSATION	18
6.4	MOLEKÜLZUWEISUNG	19
7	REALISIERUNG	20
7.1	MOLEKÜLERKENNUNG	20
7.2	DRIFTKOMPENSATION	22
7.3	MOLEKÜLZUWEISUNG	23
7.4	ABLAUF DER VERARBEITUNG	27
8	OBJEKTORIENTIERTE ANALYSE	28
8.1	BEGRIFFSERKLÄRUNGEN UND DEFINITIONEN	28
8.2	OBJEKTSTRUKTUR	29
8.3	KLASSENSPEZIFIKATIONEN	30
8.3.1	DIE KLASSE TMOLECULEMAP	30
8.3.2	DIE KLASSE TRTMPIC	31
8.3.3	DIE KLASSE TMOLECULE	32
8.4	DAS KLASSENDIAGRAMM DER PROBLEM DOMAIN	34
9	IMPLEMENTIERUNG	35
9.1	VERWENDETE SOFTWAREKOMPONENTEN	35
9.1.1	EURESYS EASYLIBRARY	35
9.2	BEDIENUNG	35
9.2.1	DAS HAUPTFENSTER	35
9.2.2	LADEN UND VERARBEITEN EINER BILDSERIE	36
9.2.3	LADEN EINER GESPEICHERTEN BILDSERIE	38
9.2.4	SPEICHERN EINER VERARBEITETEN SEQUENZ	38
9.2.5	ANZEIGEN EINES TRACK MOVIES	38
9.2.6	ZUWEISEN DER MOLEKÜLE	39
10	RESULTATE	40
11	SCHLUSSFOLGERUNG	41
12	AUSBLICK UND WEITERENTWICKLUNG	42
13	PERSÖNLICHES	43
13.1	WIR DANKEN	43
13.2	SCHLUSSBEMERKUNG	43
14	GLOSSAR	44



15	LITERATURVERZEICHNIS	45
-----------	-----------------------------	-----------

16	BILDERVERZEICHNIS	46
-----------	--------------------------	-----------



2 Aufgabenstellung

**Abt. Elektrotechnik
Labor für Bildverarbeitung und Robotertechnik**

SAWS98-2

Studienarbeit

für

Th. Derrer und R. Zingg E5d

**Bewegungserfassung von Molekülen mit Rastertunnelmikroskop und
Bildverarbeitung**

2.1 Einführung

Im Zusammenhang mit einem Forschungsprojekt zur Entwicklung eines Einmolekül- resp. Einatomspeicherelementes (-schalters) werden auf einem geeigneten Material mittels eines Rastertunnelmikroskopes (RTM) Bewegungen von einzelnen Molekülen untersucht.

In der Studienarbeit SASS97-1 von M. Bosshard und B. Angst ist die Häufigkeitsverteilung der Wegstrecken von Molekülbewegungen aus einer Bildsequenz ermittelt worden.

Die folgende Aufgabenstellung ist eine Fortführung der oben erwähnten Studienarbeit und beruht auf einem Vorschlag von Dr. B. Bucher, Physikdozent am ITR und Dr. T. Jung vom PSI.

2.2 Aufgabenstellung

Die vom RTM aufgenommenen Bildsequenzen sind ihrer Aufnahmereihenfolge entsprechend im TIFF-Format auf einer CD gespeichert. Bei der Analyse der Bilder sind folgende Bewegungen zu unterscheiden:

- a) Drift des Bildhintergrundes (Substrat)
- b) Bewegungen der einzelnen Moleküle

Damit die Molekülbewegungen ermittelt werden können, ist vorerst die Driftbewegung des Bildhintergrundes zu kompensieren.

In der Studienarbeit von M. Bosshard und B. Angst wurden die Positionen der Moleküle durch eine zweidimensionale Korrelationsanalyse ermittelt. In dieser Studienarbeit sollen deshalb auch alternative Lösungsmethoden untersucht werden. Zudem sollen die Bewegungen der Moleküle nicht nur statistisch erfasst, sondern aus den Positionsveränderungen der Moleküle in aufeinanderfolgenden Bildern die Bewegungsvektoren ermittelt werden. Dabei sind auch Lösungen bei Bewegungen mehrerer benachbarter Moleküle zu überlegen, in denen die Zuordnung von Molekülen aus aufeinanderfolgenden Bildern nicht mehr eindeutig belegt werden kann.



Die Visualisierung der Bewegungsdarstellung ist im Laufe der gewonnenen Erkenntnisse in Absprache mit Dr. B. Bucher, Physikdozent am ITR und Dr. T. Jung vom PSI festzulegen.

2.3 Hilfsmittel

Als Arbeits- und Programmierstation stehen zwei Pentium-PC zur Verfügung. Als Programmiersprache soll Visual C++ und als Betriebssystem Windows 95 eingesetzt werden. Für die Bilderfassung werden eine schwarz-weiss CCD Kamera Sony XC 75CE zusammen mit einem PCI-Bus kompatiblen „Framegrabber“ DOMINO von Euresys und der zugehörigen 32-Bit Programmbibliothek verwendet.

Studienarbeit SASS97-1 von M. Bosshard und B. Angst

Literatur:

- Digitale Bildverarbeitung , P.Haberäcker: Hanser Studienbücher (ITR 310 164)
- Methoden der Signalverarbeitung, Martini: Franzis (ITR 380 140)
- Digitale Bildsignalverarbeitung, F.M.Wahl: Springer (ITR 310 186)
- Digital Image Processing, Gonzalez,Woods: Addison (ITR 380 081)
- Praktische Bildverarbeitung,Voss und Süsse: Hanser (ITR 310 260)
- Einführung in die digitale Bildverarbeitung, Ernst: Franzis (ITR 310 269)
- Methoden der digitalen Bildverarbeitung, Zamperoni: Vieweg (ITR E 310 256)
- Digitale Bildverarbeitung, Bähr, Vögtle: Wichmann (ITR E 310 270)
- Einführung in die digitale Bildverarbeitung, Abmayr: Teubner (ITR 384 007)
- Digitale Bildverarbeitung, Jähne: Springer (ITR E 360 173)

2.4 Bericht

Aufgabenstellung, Zusammenfassung auf einer A4-Seite, Inhaltsverzeichnis, Einleitung, Zeitplan und gewählte Arbeitsteilung sind in dieser Reihenfolge am Anfang des Berichtes beizufügen. Ferner soll der Bericht eine "top down" strukturierte Darstellung des realisierten Lösungskonzeptes, Hinweise auf untersuchte Lösungsalternativen und deren Vor- und Nachteile, eine Darlegung der wesentlichsten bei der Realisierung aufgetretenen Probleme, Verbesserungsvorschläge in bezug auf die realisierte Lösung sowie eine Übersicht der verwendeten Hilfsmittel (Instrumente, Interfaces, Entwicklungssysteme, Programmbibliotheken, Literatur, etc.) enthalten.

Die Programmlistings sind dem Bericht im Anhang beizufügen. Der Bericht ist in 2 Exemplaren inkl. eine separate Zusammenfassung (A4-Seite gemäss Standardvorlage) abzugeben.

Aus dem Bericht muss klar hervorgehen, wer für welche Teile der Arbeit und des Berichtes verantwortlich ist. Zusätzlich zum Bericht soll eine mit den



Namen der Autoren, Titel der Arbeit und Datum beschriftete Diskette oder CD, welche den Text des Berichtes sowie die Quellenprogramme enthält, abgegeben resp. auf der hintersten Berichtseite beigefügt werden.

Der Bericht ist im Stil eines technischen Berichtes zu verfassen (Ausserhalb der Beschreibung von Arbeitsteilung, Zeitplan und Schlussbemerkungen soll auf Personalformen wie "ich, wir " etc. verzichtet, ebenfalls soll der Bericht nicht im Sinne eines Erlebnisberichtes abgefasst werden)
Aufbau und Inhalt des Berichtes müssen auch für Leser, welche den Werdegang der Arbeit nicht selbst verfolgen konnten, verständlich sein.

2.5 Termine

- Abgabe der Aufgabenstellung: 5.1.1998
- Abgabe von Bericht und Diskette resp. CD an den Betreuer: 30.4.98, 16.00

2.6 Organisation

- Arbeitsplatz: Labor für Bildverarbeitung und Robotertechnik
- Betreuung des Labors, Materialbestellungen, Übergabe von Arbeitsplatz und - - ---
- Laborschlüssel : K.Sulzer, Th. Hugentobler
- Wöchentliche Besprechung mit dem Betreuer gemäss Absprache.

2.7 Bewertung

- Bewertungskriterien siehe Beilage

2.8 Bemerkungen

- Es wird empfohlen täglich eine Backupdiskette mit dem aktuellen Stand der Quellenprogramme und der Dokumentation zu erstellen.

Rapperswil, 2.1.1998

Dr. H. Grossmann



3 Terminplan

Kalenderwoche	Tätigkeit
KW 2	Erhalten der Aufgabenstellung Pflichtenheft erstellen
KW3	Pflichtenheft besprechen Analyse der Aufgabenstellung
KW4	Analyse der Aufgabenstellung
KW5	Analyse der Aufgabenstellung einarbeiten in C++ und Euresys libraries Bezug der Laborplätze
KW6	einarbeiten in C++ und Euresys libraries Analyse der Problemstellung
KW7	Erste Versuche mit Euresys libraries Analyse der Problemstellung
KW8	Analyse Drift Kompensation Analyse Molekülerkennung
KW9	Analyse Drift Kompensation, Molekülerkennung Realisierung Drift Kompensation, Molekülerkennung
KW10	Realisierung Drift Kompensation, Molekülerkennung Programmoberfläche erstellen
KW11	Implementierung Drift Erkennung Implementierung Molekülerkennung Programmoberfläche erstellen
KW12	Analyse Molekülzuweisung
KW13	Analyse Molekülzuweisung Realisierung Molekülzuweisung
KW14	Analyse Molekülzuweisung Realisierung Molekülzuweisung
KW15	Realisierung Molekülzuweisung Implementierung Molekülzuweisung Ferien
KW16	Realisierung Molekülzuweisung Implementierung Molekülzuweisung Poster für den Workshop „Nanostructures at surface and interface“ in Ascona erstellen
KW17	Fertigstellung der Oberfläche Präsentation des Projektes in Ascona Fertigstellung des MMD&T
KW18	Fertigstellung der Dokumentation Fertigstellung des MMD&T
KW19	Fertigstellung der Dokumentation Ausdrucken des Dokuments Abgabe der Arbeit(7.5.98, 16:00)

Der Zeitplan wurde weitgehend eingehalten.



3.1 Grafischer Zeitplan

Wochen	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
Arbeiten																		
Studium der Aufgabe	■	■	■	■														
Einarbeiten in die Tools				■	■	■												
Problemanalyse					■	■	■	■			■	■	■					
Realisierung								■	■	■		■	■	■	■			
Implementierung									■	■				■	■	■	■	■
Dokumentation		■	■					■	■	■	■			■	■	■	■	■
Ferien							■							■				



4 Einführung

4.1 Langfristiges Ziel des Projektes

Zur Erforschung von Mikro- und Nanostrukturen am Paul Scherrer Institut (PSI) werden unter anderem einzelne Moleküle auf Trägeroberflächen umher geschoben. Um diese enorm kleinen Strukturen zu visualisieren, und um die Moleküle umher zuschieben wird ein Raster Tunnel Mikroskop (RTM) verwendet. Das Vorgehen sieht folgendermassen aus:

Mit dem RTM wird ein Bild der momentanen Lage der Moleküle angefertigt. Dies benötigt eine Zeit im Rahmen von ca. 40 Sekunden.

Danach wird die Spitze des RTM an das zu bewegende Molekül gefahren und dieses wird dann ein Stückchen über die Oberfläche geschoben. Da man bei diesem Prozess nicht zuschauen kann, wird das Molekül natürlich nicht sofort an die richtige Position geschoben. Daher muss man wiederholt ein Bild anfertigen, das die momentanen Positionen der Moleküle zeigt und den Schiebevorgang wiederholen.

Um diesen zeitraubenden Vorgang zu vereinfachen soll ein Tool geschaffen werden, das ein Moleküle automatisch erkennt, und auf dem nächsten Bild das gleiche Molekül wiedererkennt, das heisst, das Tool soll die Bewegung des Moleküls verfolgen können. Auf der Grundlage dieser Erkennung und Zuweisung soll das Tool selbständig das RTM steuern können, um eine bestimmte Formation von Molekülen zu bilden.

4.2 Ziel dieser Studienarbeit

Um Erfahrungen mit dem erkennen und zuweisen von Molekülen zu sammeln, wird vorerst mit einem System gearbeitet, welches nur 1-Dimensionale Bewegungen zulässt. Solch ein System ist z.B. das für diese Arbeit verwendete Gold- Porphyrin - System. Das Ziel dieser Studienarbeit ist es, einen Erkennungs- und Zuweisungs Algorithmus zu entwerfen, um Bewegungen von Porphyrinmolekülen auf einem Goldsubstrat zu erkennen.

4.3 Eigenschaften des Porphyrin Moleküls

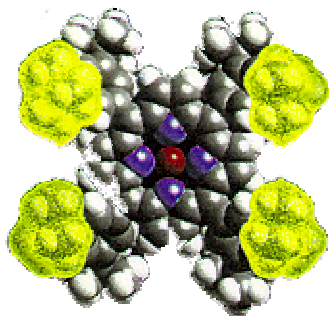


Abbildung 4.3-1 Porphyrinmolekül

Das Porphyrinmolekül, es hat einen Durchmesser von etwa eineinhalb Nanometer, ist ein organisches Molekül mit insgesamt 173 Atomen. Porphyrine kommen in der



Natur häufig vor, beispielsweise als Kern des Hämoglobins und des Chlorophylls. Vier fest damit verbundene, aber dennoch flexible Kohlenwasserstoffgruppen, die vertikal zum Porphyrinring angeordnet sind, machen das Molekül besonders attraktiv für Plazierungsexperimente, da die vier flexiblen gebundenen Kohlenwasserstoffgruppen wie Beine wirken. Da nur ein „Bein“ aufs mal bewegt werden muss, ist es möglich, dass das Molekül über die Oberfläche geschoben werden kann.

4.4 Eigenschaften des Goldsubstrates (Au110)

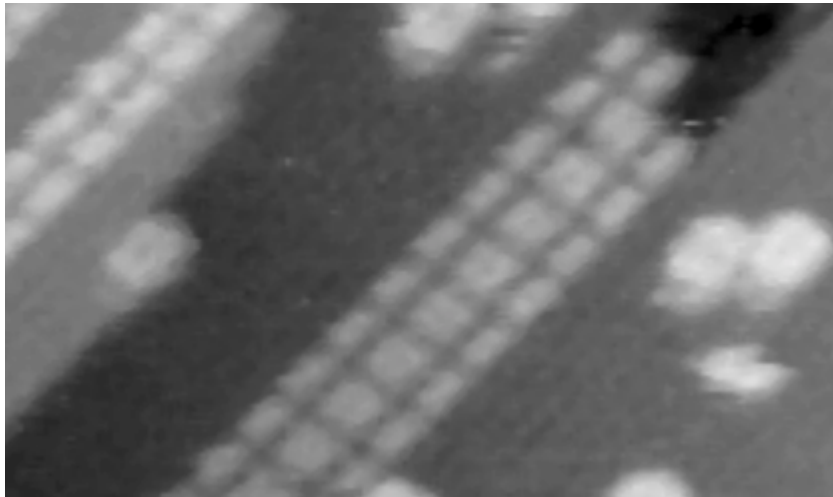


Abbildung 4.4-1 Porphyrinmoleküle auf dem Au(110) Substrat

Gold(Au110) hat durch seine Struktur an der Oberfläche eine Art Raster. Da der Träger für die Porphyrinmoleküle seine Oberfläche aber sehr selten genau parallel zu der atomaren Struktur hat, bilden sich Absätze. Man kann sich unter den Atomen die Punkte eines alten Nadeldruckers vorstellen. Wenn man nun eine Linie druckt, die nicht genau in Druckrichtung verläuft, sondern ein wenig verdreht, dann gibt es genauso Absätze wie auf dem Substrat. Auf der Oberfläche können sich auch Atome durch die Wärmebewegung verschieben.

Die Ebenen des Substrates die durch die Absätze getrennt sind, könne auf den RTM Bildern als unterschiedliche Hintergrundhelligkeiten erkannt werden.

4.5 Kombination Porphyrinmolekül und Goldsubstrat

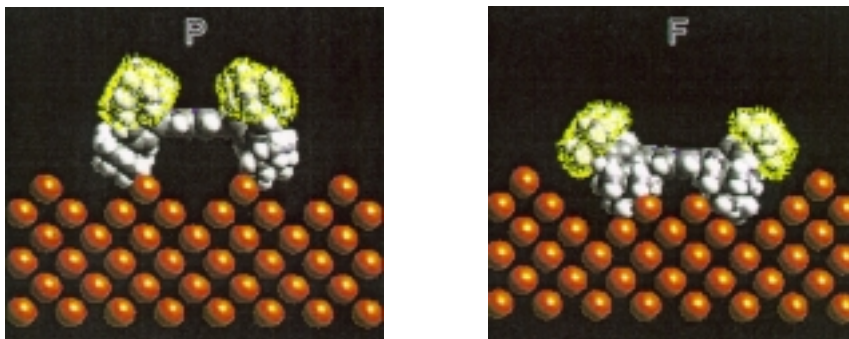


Abbildung 4.5-1 Schnelle (P) und langsame (F) Porphyrinmoleküle



Da die Porphyrinmoleküle bewegliche „Beine“ haben, können sie auch unterschiedlich auf dem Goldsubstrat aufliegen. Auf beiden Abbildungen sehen wir ein Porphyrinmolekül, jedoch mit unterschiedlich verdrehten „Beinen“. Das mit P bezeichnete Molekül liegt auf der Oberfläche der intakten Substratstruktur. Es hat sich gezeigt, dass sich solche Moleküle schneller bewegen, als die mit F bezeichneten Moleküle. Wir nennen die F- Moleküle deshalb die schnellen Moleküle. Das mit F bezeichnete Molekül hat sich eine Furche in die Substratoberfläche gegraben. Diese Art von Molekülen soll im Rahmen dieser Studienarbeit betrachtet werden. Diese beiden Arten des Moleküls kann auf den RTM Bildern primär durch ihre Helligkeit, und sekundär durch ihre etwas andere Form unterschieden werden.

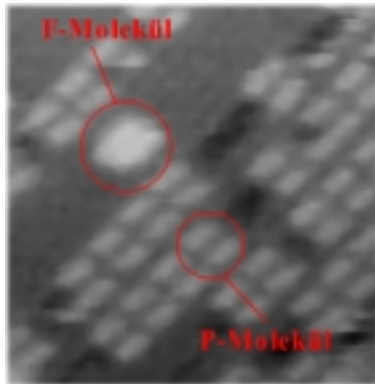


Abbildung 4.5-2 P- und F- Moleküle auf Au(110)

4.6 Rastertunnelmikroskop (RTM)

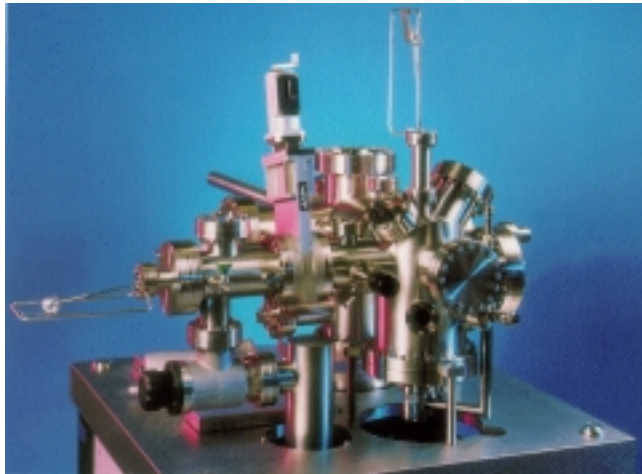


Abbildung 4.6-1 Rastertunnelmikroskop (RTM)

Beim RTM wird eine mechanische Spitze über eine Oberfläche geführt. Wenn sich die Spitze genug nah an der Oberfläche befindet (es handelt sich hier um atomare Dimensionen), tritt ein Tunnelstrom auf, der von der Spitze der Probe auf die Oberfläche fließt. Wenn man die Spannung an der Spitze variiert, ändert sich der Tunnelstrom. Auch ändert sich der Strom, wenn man den Abstand ändert. Wenn man nun mit der Spitze Zeile für Zeile über die Oberfläche fährt und die Spitze dabei vertikal so bewegt, dass der Tunnelstrom konstant bleibt, erhält man, wenn man diese Bewegung aufzeichnet, Zeile für Zeile ein Bild der Oberfläche. Und zwar ein Bild mit atomarer Auflösung. Eine Einschränkung bei der



Rastertunnelmikroskopie ist, dass die Oberfläche der Probe elektrisch leitend sein muss, denn sonst kann kein Tunnelstrom gemessen werden. Zudem muss die Abtastung im Vakuum erfolgen.

Das RTM wurde im IBM Forschungslaboratorium in Zürich Rüschlikon entwickelt. Gerd Binnig und Heinrich Rohrer erhielten für diese Entwicklung 1986 den Nobelpreis für Physik.

4.6.1 Molekülhandhabung mittels RTM

Mit dem RTM lassen sich nicht nur Oberflächen abbilden, sondern man kann auch Moleküle handhaben. Durch Erhöhen des Tunnelstroms kann man Moleküle am Substrat festheften. Mit der RTM-Spitze kann man Moleküle auch schieben. Allerdings haben Moleküle meistens die Tendenz, an einer Oberfläche festzukleben, so dass ein nicht destruktives und präzise kontrolliertes Bewegen sehr schwierig ist. Weniger klebrige Bausteine der Natur dagegen hüpfen bei Raumtemperatur kaum kontrollierbar herum. Porphyrin Moleküle eignen sich jedoch besonders gut für diese Handhabung, da auch die chemische Bindung innerhalb des Moleküls genügen stark sind und es somit nicht verändert oder aufgebrochen werden kann, wenn das Molekül mit der RTM-Spitze verschoben wird.

4.7 Nanowissenschaft

Die Mikroelektronik, die immer schneller und kleiner wird, stösst irgendwann an ihre Grenzen, da es für elektronische Bauteile zu eng wird, aber hier erst fängt die Nanowissenschaft, die kleinste Teilchen von einem Nanometer (einem Millionstel Millimeter) manipuliert, an.

In der Nanowissenschaft gelten nicht mehr die klassischen physikalischen Gesetze, sondern diejenigen der Quantenphysik. So verhalten sich Nanosysteme un stetig und sprunghaft, weil Atome Strahlungsenergie paketweise aussenden (sogenannte Quanten) oder aufnehmen. Dabei tauchen neue und Qualitäten auf, die nutzbar sind.

Noch befindet sich diese Wissenschaft in der Experimentierphase, doch wurden schon erste Anwendungen, wie mikromechanische Speicher, die eine etwa tausend mal grössere Speicherdichte als magnetische Verfahren besitzen, erstellt. Die Vorteile dieses Speichers sind die kleinen Dimensionen, aber auch die erstaunlich kleinen Energien mit der er funktioniert.

In ferner Zukunft strebt man das Erstellen eines mechanischen Prozessors an. Hier kann man eine 3-Dimensionale Architektur verwenden, die ihn herkömmlichen Chips aus thermischen Gründen undenkbar ist. Diese 3D-Vernetzung mit paralleler Verarbeitung erinnert stark an das menschliche Gehirn.

So weit ist man jedoch noch lange nicht, aber die Physiker spielen schon mit dieser Technologie und zeichnen zum Beispiel Figuren mit Atomen. Das Nanozeitalter des Menschen hat eigentlich erst vor kurzer Zeit mit der Erfindung des RTM begonnen.



5 Pflichtenheft

5.1 Aufgabenstellung

Eine Sequenz von Bildern, die von einem Raster- Tunnel- Mikroskop (RTM) stammt, sollen analysiert werden. Die Kompensation des Hintergrunddrifts und die Erkennung der Moleküle wird mit den von B. Angst und M. Bosshard entwickelten Algorithmen realisiert. Die in Matlab entwickelten Algorithmen müssen dazu in C++ umgeschrieben werden.

Neu soll ein einzelnes, wählbares Molekül über eine grössere Bilderserie verfolgt werden. Die ermittelten Bewegungen sollen übersichtlich, graphisch dargestellt werden.

5.2 Ausgangsmaterial

Die mittels eines Raster- Tunnel- Mikroskops (RTM) aufgenommenen Bildsequenzen von Molekülen auf einem Goldsubstrat stehen uns auf einer CD im BMP und im TIF Format zur Verfügung.

5.2.1 Eigenart des Ausgangsmaterials

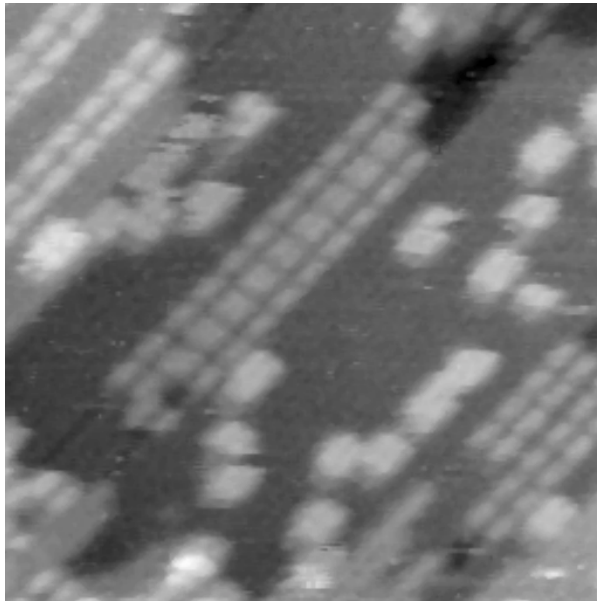


Abbildung 5.2-1 Ausgangsmaterial

Die Bilder haben eine Auflösung von 512 x 512 Bildpunkten mit einer Tiefe von 8 Bit per Bildpunkt, was 256 Graustufen entspricht.

Die unterschiedlichen Grauwerte im Hintergrund kommen durch unterschiedliche Substrathöhen zustande.

Die Grösse der Moleküle kann von Bilderserie zu Bilderserie unterschiedlich sein. In einer Bilderserie ist sie jedoch konstant.

Die Moleküle können sich nur in einer Richtung bewegen, die parallel zu den Substratlinien verlaufen (vorwärts und rückwärts).

Moleküle können sich nicht gegenseitig überspringen oder von Bahn zu Bahn



springen (Modell Eisenbahnwaggons).
Moleküle können sich jedoch aus dem Bild bewegen oder ins Bild kommen.

5.3 Endprodukt

Error! Objects cannot be created from editing field codes.

Abbildung 5.3-1 Grafik einer Molekülposition

Die Position des gewählten Moleküls über die Bilderserie soll als Zahlenreihe in einer Datei abgelegt werden können. Weiter soll die Molekülposition als Funktion der Bildnummer dargestellt werden können.

5.3.1 Anforderungen an den MMD&T

Der MMD&T soll über eine graphische Bedieneroberfläche möglichst einfach bedient werden können.
Die Algorithmen sollen möglichst schnell sein, damit keine Wartezeiten entstehen.

5.3.2 Anforderungen an das System

Es müssen keine speziellen Sicherheitsmassnahmen ergriffen werden, da keine heiklen Daten existieren.

5.3.3 Hardware

Als Arbeitsstationen stehen zwei Pentium PCs zur Verfügung

5.3.4 Software

- Windows NT oder 95, wird bei Bezug des Labors bekannt.
- Borland C++ Builder V1.0 oder höher.
- Euresys Bildverarbeitungslibraries mit Dongel.



5.3.5 Anforderung an das User Interface (UI)

Die Bedienung soll im Windows Stil gestaltet werden.

5.3.6 Funktionale Anforderungen

- Der MMD&T kompensiert den messanordnungsbedingten Drift zwischen den einzelnen Bildern nach den Verfahren von B.Angst und M.Bosshard
- Der MMD&T erkennt die langsamen Moleküle (F) nach den Verfahren von B.Angst und M.Bosshard
- Der MMD&T verfolgt ein gewähltes, einzelnes Molekül über die ganze Bilderserie und stellt die Bewegung graphisch dar.

5.3.7 Anforderung an den Benutzer

Für eine erfolgreiche Verfolgung muss der Benutzer folgende Eingaben machen:

- Richtung der Substratbahn angeben
- Referenz- Molekül kennzeichnen
- Das zu verfolgende Molekül kennzeichnen

Diese Aufzählung kann sich im Projektverlauf verändern.

5.4 Validierung

Projektmitarbeiter: Reto Zingg, Thomas Derrer

Betreuer: Dr. H. Grossmann

Auftraggeber: Dr. T. Jung, Dr. B. Bucher

6 Problemanalyse

6.1 Bildqualität

Das zu untersuchende Material eignet sich nicht sehr gut für die digitale Bildverarbeitung. Die Bildserien besitzen eine teilweise schlechte Qualität. Die folgenden Punkte zeigen detailliert die Schwierigkeiten im Umgang mit dem Ausgangsmaterial.

Verzerrtes Bild

Da das Bild nur langsam eingescannt wird (ca. 40 Sekunden für ein Bild) und das Substrat durch Wärmeausdehnung in eine Richtung driftet, wird das Bild verzerrt. Eine Molekülreihe, die eigentlich geradlinig sein sollte, ist dadurch leicht gekrümmt.

Bildstörungen in Abtastrichtung

Durch mechanische Vibrationen des Substrates beim abtasten der Struktur durch das RTM entstehen Bildstörungen in Richtung der Abtastung. Diese Vibrationen können schon durch eine Schallwelle ausgelöst werden, es handelt sich hier um Nanometer.

Zerrissene Moleküle

Das RTM liest das Bild Zeile für Zeile ein. Dieser Vorgang dauert relativ lang (ca. 40 Sekunden für ein Bild). Es kann nun vorkommen, dass sich ein Molekül, welches sich im Bereich der momentanen Abtastung befindet, bewegt. Dadurch wird nur ein Teil des Moleküls erfasst. Der Rest wird entweder gar nicht dargestellt oder das Molekül wird nochmals erfasst. Solche zerrissene Moleküle können nicht mehr eindeutig erkannt werden.

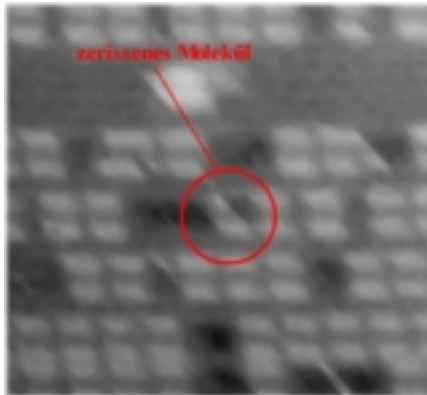


Abbildung 6.1-1 Beispiel eines zerrissenen Moleküls

6.2 Molekülerkennung

Um die Moleküle in einem Bild zu finden, wird Kreuzkorrelation verwendet. Dabei sind folgende Punkte zu beachten:

Gleiche Form

Moleküle weisen in der gleichen Bildserie immer die gleiche Form auf. Dies ermöglicht, dass die Moleküle mit der kcf, die in jedem Bild das gleiche



Vorlagemolekül verwenden kann, gesucht werden können. Die Moleküle in unterschiedlichen Bildsequenzen weisen jedoch leicht unterschiedliche Grössen und Formen auf. Deswegen muss die Form des Vorlagemolekül in jeder Bildserie neu definiert werden.

Helligkeit

Da die Helligkeit eines Punktes in Funktion seiner Y – Koordinate (Höhe) entsteht, kann sowohl die Helligkeiten der Bilder in einer Serie als auch innerhalb eines Bildes ändern. Somit kann ein Molekül in einem Teil des Bildes die gleiche Helligkeit aufweisen, wie das Substrat an einem anderen Ort. Dieser Effekt entsteht durch ein Substrat das nicht Horizontal zur Abtastrichtung liegt, respektive durch die Wärmeausdehnung des Materials während dem erstellen der Messserie.

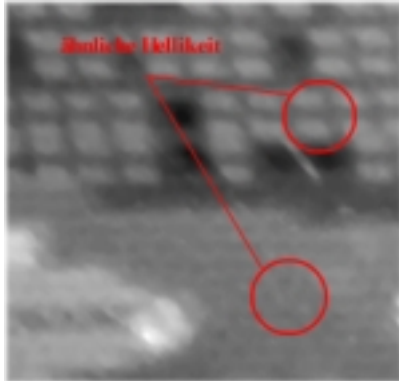


Abbildung 6.2-1 Beispiel ähnlicher Helligkeiten

Ähnliche Strukturen

Das Substrat weist zum Teil ähnliche Strukturen wie die Moleküle auf. Die Folge sind Falscherkennung bei kcf. Auch gewisse Anordnungen von ‚schnelle‘ Moleküle ergeben einen erhöhten Korrelationswert.

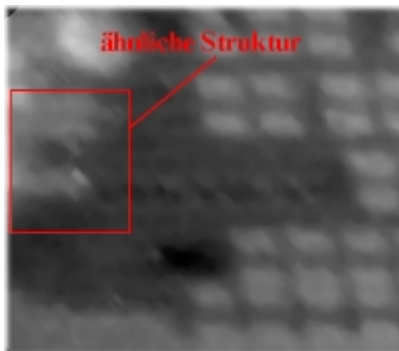


Abbildung 6.2-2 Beispiel ähnlicher Struktur

Molekülabstand

Die Moleküle liegen zum Teil so nah beieinander, dass Sie nicht mehr einzeln aufgelöst werden können.

6.3 Driftkompensation

Durch Volumenveränderung des Substrates infolge Temperaturänderung kann sich der betrachtete Bildausschnitt in x, y und z Richtung bewegen. Wie in Kapitel , 6.2 Molekülerkennung ‘ beschrieben, führt die Bewegung in y Richtung zu einer



Helligkeitsänderung. Die Bewegung in x und y Richtung resultieren in einem Drift über die gesamte Bildserie. Um die Bewegungsvektoren der Moleküle zu erfassen, muss zuerst dieser Drift kompensiert werden. Weil sich das Bild über eine Serie stark verändert, kann der Drift jeweils nur von Bild zu Bild berechnet werden. Leichte Ungenauigkeiten bei der Erkennung des Driftes könnten bei einer Aufsummierung über die ganze Serie zu einem Fehler führen. Nach Gauss sollte sich dieser Driftfehler jedoch ausmitteln.

Wenn eine Bildsequenz einen grossen Drift aufweist, wird der nutzbare Bildbereich stark eingeschränkt. Einem Drift von 4 Pixel von Bild zu Bild und eine Serie von 50 Bildern, ergeben einen maximalen Drift von 400 Pixel. Bei einer Bildgrösse von 512x512, ist der Bereich der über die ganze Serie sichtbar ist nur noch 112x112 gross.

6.4 Molekülzuweisung

Um eine Entscheidung treffen zu können, wohin sich welches Molekül im nächsten Bild bewegt hat, können verschiedene Verhaltensregeln des Porphyrin / Gold Systems aufgestellt werden:

Track

Die Moleküle bewegen sich nur in einer Dimension und können sich gegenseitig nicht überspringen, das heisst sie befinden sich in einer Spur, in der die Reihenfolge der Moleküle immer gleich bleibt. Im folgenden wird diese Spur Track genannt.

Bewegung

Es kann angenommen werden, dass sich die Mehrheit der Moleküle nicht bewegt. Sich bewegende Moleküle haben Schrittweiten mit statistischen Wahrscheinlichkeiten. Moleküle bewegen sich nur einzeln, nicht aber als Verband. Es können jedoch mehrere nebeneinander liegende Moleküle den selben Schritt nacheinander ausführen, bevor das nächste Bild entsteht. Die Wahrscheinlichkeit eines solchen Vorfalles sinkt jedoch rasch mit der Anzahl der beteiligten Moleküle.

Bildrand

Moleküle können sich aus dem Bildausschnitt hinaus bewegen oder sie können in das Bild hinein kommen.



7 Realisierung

7.1 Molekülerkennung

Für die Erkennung der Moleküle wird Kreuzkorrelation mit Helligkeitskompensation verwendet. Dazu muss ein Mustermolekül zur Verfügung stehen. Da jede Bildserie eine andere Skalierung hat, muss für jede Bildserie ein Muster generiert werden (Benutzer Eingabe).

Die Helligkeitskompensation ist nötig, da die Helligkeit der Bilder ändern kann. Allerdings kann man in einem Bild den Bereich der Helligkeit eines Moleküls eingrenzen.

I. erste Molekülerkennung mittels Kreuzkorrelation

Idee:

Für eine erste Molekülerkennung wird der ganze Track mit Kreuzkorrelation nach Molekülen untersucht. Es wird nur nach Moleküle mit einem genug hohen Korrelationswert (ca. 0.8) und einer y- Position die in der Mitte des Tracks liegen gesucht.

Kreuzkorrelation:

$$r = \frac{\sum_i (a_i + \bar{a})(b_i + \bar{b})}{\sqrt{\sum_i (a_i + \bar{a})^2} \sqrt{\sum_i (b_i + \bar{b})^2}} = \frac{\sum_i a_i b_i - \frac{1}{n} \sum_i a_i \sum_i b_i}{\sqrt{\sum_i a_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_i a_i)^2} \sqrt{\sum_i b_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_i b_i)^2}}$$

r: Kreuzkorrelationskoeffizient
 i: durchlaufende Nummer aller Bildpunkte
 n: Anzahl Bildpunkte
 a,b: Grauwert des Bildpunktes

Resultat:

Ca. 90% der Moleküle werden erkannt. Zerrissene Moleküle oder sonst irgendwie schlecht abgebildete Moleküle werden nicht erkannt. Falscherkennungen sind sehr selten.

Folgerung:

Eignet sich gut für eine erste, sichere suche nach Molekülen.

**II. spezielle Molekülerkennung****Idee:**

Um schlecht abgebildete Moleküle zu erkennen wird die zusätzliche Information die in einer Bildsequenz steckt verwendet. Das heisst, es wird nach dem besten Molekül gesucht, das man durch logische Schlussfolgerungen, die man aus der Molekülzuweisung zieht, an einem eingegrenzten Ort vermutet.

Für die Bestimmung des besten Moleküls werden folgende Punkte berücksichtigt:

- Kreuzkorrelationswert
- Quadratischer Mittelwert der Helligkeiten des linken und rechten Nachbarn
- Abweichung von der vermuteten Position

Helligkeit:

$$h = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i a_i^2}$$

- h: quadratischer Mittelwert der Helligkeit
i: durchlaufende Nummer aller Bildpunkte
n: Anzahl Bildpunkte
a: Grauwert des Bildpunktes

Resultat:

Auch zerrissene und schlecht abgebildete Moleküle werden erkannt.

Folgerung:

Eignet sich gut für die Suche nach dem besten Molekül an dem Ort an dem man eines vermutet.



7.2 Driftkompensation

Zur Kompensation des Messanordnung bedingten Driftes können verschiedene Verfahren angewandt werden. Hier werden drei dieser Verfahren erwähnt, wobei beim MMD&T das letzte, welches eine Kombination der ersten zwei ist, angewandt.

I. Driftkompensation über Molekülpositionen

Idee:

Es wird angenommen, dass sich die meisten Moleküle nicht bewegen. Auch wird angenommen, dass der Drift kleiner ist als die Grösse eines Moleküls. Es werden alle Moleküle mittels kcf in den beiden zu kompensierenden Bildern gesucht. Positionen in verschiedenen Bildern die höchstens einen Maximalen Drift voneinander abweichen, werden nun Subtrahiert. Der Mittelwert dieser Differenzen ist der Drift.

Resultat:

Der Drift wird auf etwa 0.2 Pixel genau berechnet.

Folgerung:

Eignet sich für die Berechnung des Drift gut, ist jedoch sehr langsam, da alle Molekül im Bild erkannt werden müssen.

II. Driftkompensation über Bereichskorrelation

Idee:

Im ersten Bild werden mehrere Ausschnitte mit hohem Kontrast gewählt und im zweiten Bild mittels Kreuzkorrelation gesucht. Die Differenz, der unterschiedlichen Positionen im ersten und zweiten Bild, ergeben den Drift.

Resultat:

Der Drift wird auf etwa 1 genau berechnet.

Folgerung:

Der Algorithmus ist schnell. Der Drift wird jedoch zu ungenau berechnet. Der aufsummierte Fehler über eine Bildsequenz ist zu gross.



III. Kombination von I und II

Idee:

Zuerst wird eine ungefähre Driftkompensation mit dem Algorithmus II berechnet, dann der interessierende Bildausschnitt ungefähr ausgeschnitten und darin die Moleküle mit Kreuzkorrelation gesucht. Anhand der Molekülpositionen wird dann mit dem Algorithmus I der Drift genau berechnet und der interessierende Bildbereich genau eingegrenzt.

Resultat:

Der Drift wird in y Richtung auf etwa 0.2 Pixel und in x Richtung auf etwa 0.5 Pixel (je nach Anzahl und Mobilität der Moleküle) genau berechnet. Ausserdem Summiert sich der Fehler in y Richtung nicht auf, weil die y Mitte der Moleküle immer an der gleich Position gehalten wird.

Folgerung:

Der Algorithmus ist schnell und genau genug für unsere Anwendung.

7.3 Molekülzuweisung

Um herauszufinden, wo sich ein Molekül im nächsten Bild hinbewegt hat und um eventuelle Fehler durch nicht gefundene oder falsch erkannte Moleküle zu erkennen, können verschiedene Kriterien angewandt werden.

Als Grundlage der Auswertung dienen uns die ausgeschnittenen Bilder der interessierenden Spur und die Positionen der mit hohen Korrelationswerten gefundenen Moleküle.

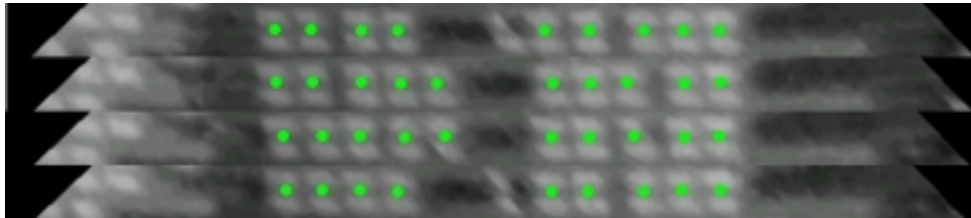


Abbildung 7.3-1 Tracks mit gefundenen Molekülen

Die Moleküle, die mit hohem Korrelationswert gefunden wurden, werden von Links her zugewiesen. Das heisst das erste Molekül von Links in einem Bild wird dem ersten Molekül von Links im nächsten Bild zugewiesen usw. Daraus entstehen Bewegungsvektoren der Moleküle.

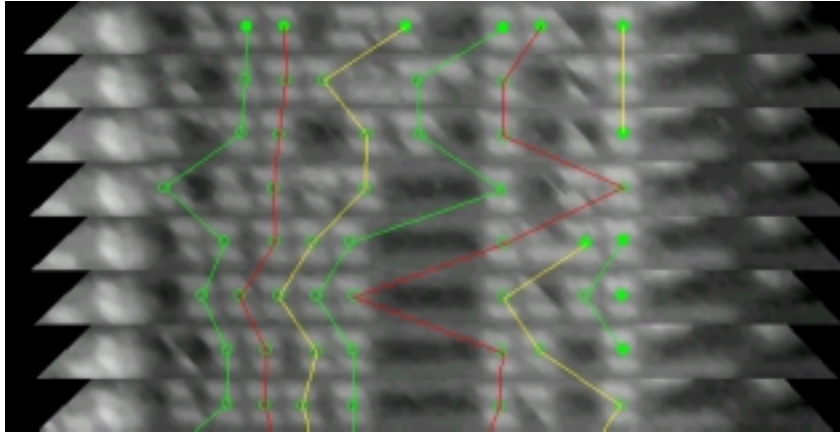


Abbildung 7.3-2 Tracks mit assoziierten Molekülen

Fehler in der Assoziation hinterlassen nun charakteristische Signaturen im Muster der Bewegungsvektoren. Folgende Signaturen können ganz bestimmten Fehlern zugewiesen werden:

Nicht erkanntes Molekül

Wenn ein Molekül nicht erkannt wurde, dann hinterlässt es ein Zickzack Muster nach rechts in den Bewegungsvektoren.

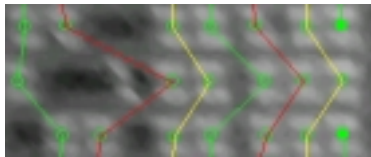


Abbildung 7.3-3 Signatur eines nicht erkannten Moleküls

Am linken Rand erscheint ein neues Molekül

Wenn am linken Rand ein neues Molekül in den Bildausschnitt eintritt, dann hinterlässt es einen Linkssprung in den Bewegungsvektoren.

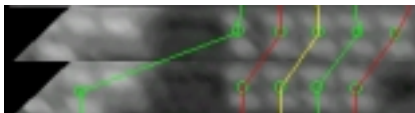


Abbildung 7.3-4 Signatur eines neu eintretenden Moleküls

Am linken Rand verschwindet ein Molekül

Wenn sich ein Molekül am linken Rand aus dem Bildbereich bewegt, dann hinterlässt es einen Rechtssprung in den restlichen Bewegungsvektoren.

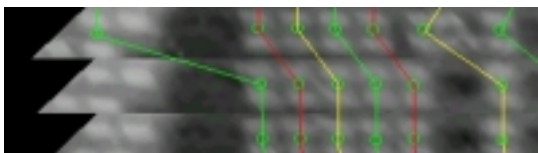


Abbildung 7.3-5 Signatur eines austretenden Moleküls

Durch Analyse der Bewegungsvektoren kann mit gewisser Wahrscheinlichkeit auf Fehler geschlossen werden. Nicht erkannte Moleküle können zusätzlich eingefügt werden oder falsch erkannte Moleküle werden entfernt.

Die Korrektur der gefundenen Moleküle und ihrer Assoziationen erledigt im MMD&T die Methode `TMoleculeMap::SuperErrorEliminator()`. Im Folgenden wird das



Vorgehen dieser Methode erläutert. Konkret sieht die Fehlerdetektion folgendermassen aus (siehe auch Abbildung 7.3-6 Flussdiagramm Fehlereliminationsalgorithmus):

- Die Fehlerdetektion wird auf jedes Molekül, von links nach rechts und von oben nach unten angewandt.
- Falls die x – Bewegung des Moleküls mehr als ein halber minimaler Molekülabstand beträgt, wird es genauer untersucht.
- Die Anzahl der Moleküle auf der rechten Seite wird gezählt, welche eine x – Bewegung von mehr als einem halben minimalen Molekülabstand aufweisen.
- Die Anzahl der Moleküle auf der rechten Seite wird gezählt, welche ein Nachfolgemolekül haben, das nicht jenes mit der ähnlichsten x - Position ist.
- Die Anzahl der Moleküle auf der rechten Seite wird gezählt, welche ein Nachfolgemolekül mit einer entgegengesetzten Bewegung in x – Richtung haben.
- Wenn die Summe der drei Zahlen ein Limit übersteigt, wird links vom Nachfolgemolekül nach einem weiteren Molekül gesucht und falls eines gefunden wird, wird es eingefügt.
- Das nächste Molekül wird untersucht.

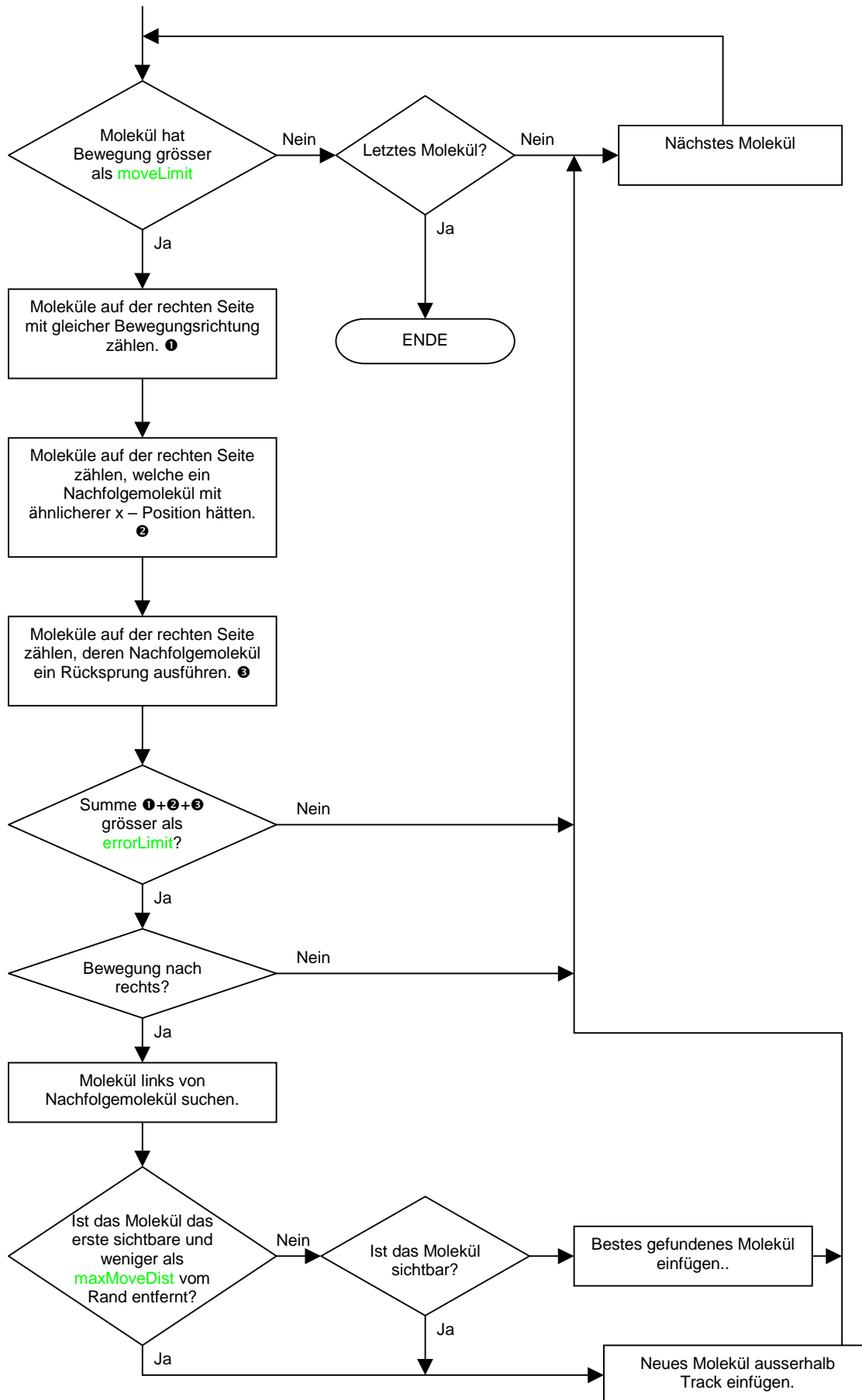


Abbildung 7.3-6 Flussdiagramm Fehlereliminationsalgorithmus



7.4 Ablauf der Verarbeitung

Im Wesentlichen wird die Verarbeitung folgendermassen ablaufen:

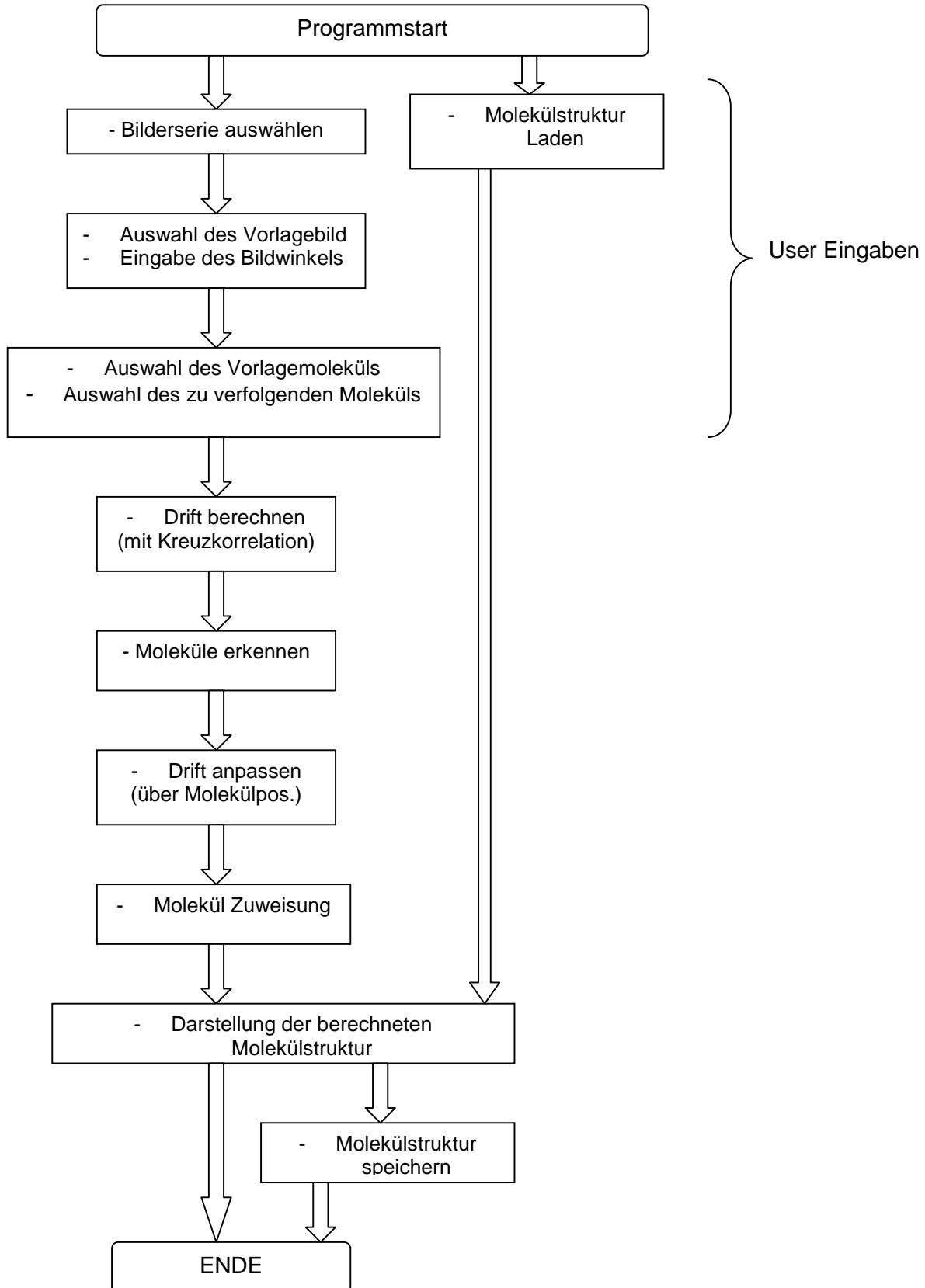


Abbildung 7.4-1 Ablaufdiagramm der Verarbeitung



8 Objektorientierte Analyse

8.1 Begriffserklärungen und Definitionen

Referenzpunkt

Punkt auf dem Substrat mit der Koordinate (0,0). Dies ist per Definition die linke obere Ecke des Vorlagebildes.

Vorlagebild

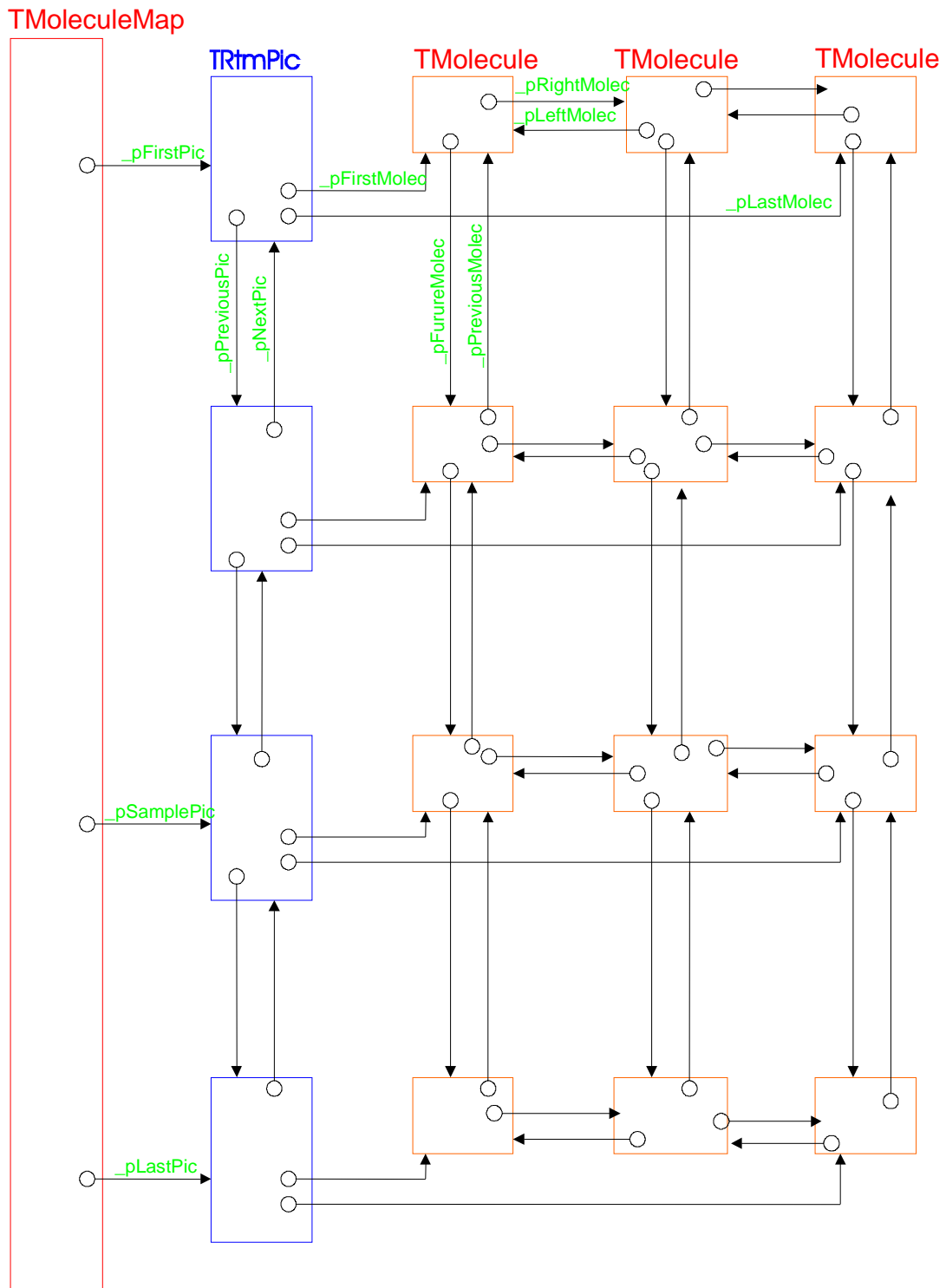
Rotiertes RTM – Bild, in dem vom Benutzer der Rotationswinkel, das Vorlagemolekül und der zu untersuchende Track definiert wurde.

Vorlagemolekül

Molekül das vom Benutzer in einem RTM – Bild markiert wurde und das als Vorlage zur Suche von weiteren Molekülen in allen Bildern dieser Sequenz verwendet wird.



8.2 Objektstruktur





8.3 Klassenspezifikationen

8.3.1 Die Klasse TMoleculeMap

TMoleculeMap kommt im MMD&T ein mal vor. Es ist der Container für eine Sequenz von Bildern(TRtmPic) und erlaubt diverse Operationen zur Verarbeitung dieser Bilder.

Attribute

<code>_pFirstPic</code>	Zeiger auf erstes Bild.
<code>_pLastPic</code>	Zeiger auf letztes Bild.
<code>_pSamplePic</code>	Zeiger auf das TRtmPic in dem der zu untersuchende Track, der Winkel des Tracks zur Horizontalen und das Vorlagemolekül bestimmt werden.
<code>_refMolec</code>	Bild des Vorlagemoleküls (Muster für die Kreuzkorrelation).
<code>_angle</code>	Der Winkel zwischen den Tracks und der Horizontalen des Bildes (vom Benutzer definiert).
<code>_trackPosY</code>	Y – Position des zu untersuchenden Tracks Gegenüber dem Referenzpunkt (linke obere Ecke des Vorlagenbildes)
<code>_molecSize</code>	Minimale Distanz der Moleküle, entspricht auch etwa der Grösse eines Moleküls.
<code>_dirty</code>	Besagt, ob seit dem Laden oder dem letzten mal Speichern etwas geändert wurde.
<code>_file</code>	Tfile Objekt zum Speichern und Laden der Daten.

Methoden

<code>CalculateDrift()</code>	Berechnet den Drift aller Bilder.
<code>CalcMolSize()</code>	Berechnet die mittlere minimale Distanz zwischen Molekülen in übergebenen Bild. Diese Methode berechnet den Wert, der <code>_molecSize</code> zugewiesen wird.
<code>MultiMolecDetector()</code>	Untersucht ein Track nach Molekülen und fügt sie in das zugehörige TRtmPic Objekt ein.
<code>MolecDetector()</code>	Sucht in einem Ausschnitt eines Tracks gezielt nach einem Molekül, wobei auch seine vermutete Position mit einbezogen wird.
<code>DoDriftComp()</code>	Startet die Verarbeitung der Bildserie.
<code>AddPic()</code>	Fügt ein TrtmPic Objekt am ende der Kette ein
<code>GetPic()</code>	Gibt einen Zeiger auf das n-te TrtmPic Objekt zurück.
<code>EraseAll()</code>	Löscht alle TRtmPic Objekte aus der Kette.
<code>IsEmpty()</code>	Anfrage, ob sich noch kein TRtmPic Objekt in der Kette befindet.
<code>DoMoleculeAssignment()</code>	Berechnung der Wahrscheinlichkeit einer Bewegung des Moleküls.
<code>AssignStreightDumb()</code>	Verbindet die Moleküle über die Zeit „geradeaus“, d.h. das



linkeste Molekül im 1. Bild wird mit dem linksten Molekül im 2. Bild verknüpft usw.

SuperErrorEliminator()	Entfernt aus einem TMoleculeMap Objekt in der die Moleküle bereits zeitlich verknüpft sind die Fehler.
InvertTime()	Dreht die zeitliche Reihenfolge der Bilder um.
MirrorVertical()	Spiegelt alles an der Vertikalen Achse (R-L Vertauschung)
Save()	Speichert das TMoleculeMap Objekt in der durch _file spezifizierten Datei.
Load()	Ladet das TMoleculeMap Objekt aus der durch _file spezifizierten Datei.

8.3.2 Die Klasse TRtmPic

Attribute

_fileName	Dateiname des Bildes.
_drift	Drift gegenüber dem Referenzbild.
_trackImg	Bild des Tracks.
_trackInImg	Besagt, ob der Track sich im Bild befindet.
_pPrevPic	Zeiger auf das vorhergehendes Bild
_pNextPic	Zeiger auf das nächstes Bild
_pFirstMolec	Zeiger auf das erste Molekül in der Reihe.
_pLastMolec	Zeiger auf das letzte Molekül in der Reihe.

Methoden

AddMolecule()	Fügt der Kette ein TMolecule Objekt zu, ohne die zeitlichen Assoziationen zu verändern.
DeleteMolecule()	Löscht ein TMolecule Objekt aus der Kette, ohne die zeitlichen Assoziationen zu verändern.
InsertMolecule()	Fügt der Kette ein TMolecule Objekt zu und verschiebt die zeitlichen Assoziationen auf das neue TMolecule Objekt.
RemoveMolecule()	Löscht ein TMolecule Objekt aus der Kette und verschiebt die zeitlichen Assoziationen auf die anderen TMolecule Objekte.
GetMeanMolecPos()	Berechnet die mittlere Position der Moleküle.
GetMeanMolecMove()	Berechnet die mittlere Bewegung der Moleküle zum nächsten Bild
InvertTime(void)	Kehrt die zeitlichen Assoziationen des Bildes und seiner Moleküle um.
MirrorVertical()	Spiegelt das Bild an der Vertikalen Achse. Dabei werden auch die Molekülpositionen gespiegelt. Die Reihenfolge der Moleküle wird gekehrt. Das erste ist nachher das letzte Molekül und umgekehrt.



Read()	Liest die gespeicherten Daten eines TRtmPic Objektes aus der geöffneten Datei.
Write()	Schreibt die Daten des TRtmPic Objektes in die geöffnete Datei.

8.3.3 Die Klasse TMolecule

Attribute

_coordinate	Koordinaten des Moleküls bezüglich der linken oberen Ecke.
_pOwner	Zeiger auf den Besitzer (Container, TRtmPic).
_pRightMolec	Zeiger auf das nächstes Molekül auf der rechten Seite.
_pLeftMolec	Zeiger auf das nächstes Molekül auf der linken Seite.
_pPastMolec	Zeiger auf das nächstes Molekül in der Vergangenheit.
_pFutureMolec	Zeiger auf das nächstes Molekül in der Zukunft.
_visible	Besagt ob das Molekül sichtbar ist.
_existProb	Wahrscheinlichkeit, dass das Molekül wirklich existiert.
_moveRightProb	Wahrscheinlichkeit einer Rechtsbewegung.
_moveLeftProb	Wahrscheinlichkeit einer Linksbewegung.
_recogProb	Wahrscheinlichkeit der korrekten Erkennung (Scores der Kreuzkorrelation).
_leftNeighbourCount	Anzahl anliegender linker Nachbarmoleküle.
_rightNeighbourCount	Anzahl anliegender rechter Nachbarmoleküle

Methoden

GetGlobalCoordinate()	Gibt die globale Koordinate des Moleküls zurück (relativ zum Bezugspunkt)
RateMoveRightProb()	Multipliziert die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Molekül nach rechts bewegen wird mit einem Faktor.
RateMoveLeftProb()	Multipliziert die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Molekül nach links bewegen wird mit einem Faktor.
RateExistProb()	Multipliziert die Wahrscheinlichkeit, dass das Molekül existiert mit einem Faktor.
FindZig()	Sucht das erste Molekül einer Reihe von Molekülen mit markanter Bewegung in die gleiche Richtung.
CalcNeighbours()	Berechnet die Anzahl linker und rechter Nachbarn aller rechten Nachbarmoleküle.
GetMovement()	Berechnet den Bewegungsvektor des Moleküls.
InvertTime()	Kehrt die zeitlichen Assoziationen des Moleküls um.
MirrorVertical()	Kehrt die örtlichen Assoziationen des Moleküls um.
Write()	Schreibt die Daten des TMolecule Objektes eine offene Datei.



GetClosestDescendant()

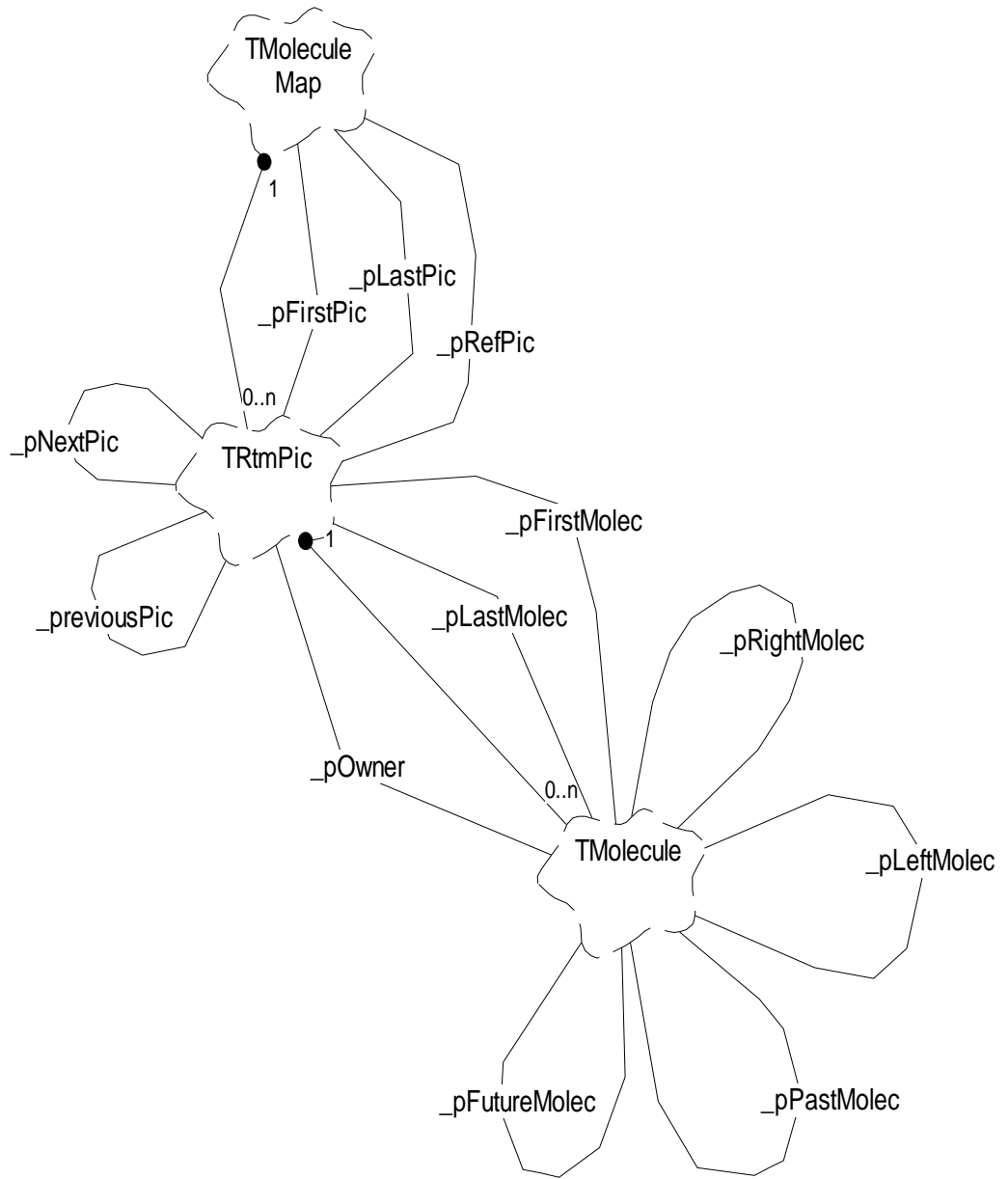
Sucht im nächsten Bild das Molekül mit der ähnlichsten x
Koordinate.

CalculateErrorPoints()

Berechnet eine Punktzahl, an der die Wahrscheinlichkeit einer
falschen zeitlichen Assoziation abgelesen werden kann.



8.4 Das Klassendiagramm der problem domain





9 Implementierung

9.1 Verwendete Softwarekomponenten

9.1.1 Euresys Easylibrary

Die Easylibrary von Euresys (www.euresys.be) ist ein Paket von Objekten und Funktionen für die Bildverarbeitung. Für die Realisierung des MMD&T wurden die Module Easy, Match und Image verwendet. Easy enthält grundlegende Objekte und Funktionen um Bilder zu laden oder zu Speicher. Image besteht aus diversen Verarbeitungsfunktionen für Bilder. Match stellt die Korrelationsroutinen zur Verfügung.

Bei der Verwendung der Easylibrary zusammen mit dem Borland C++ Builder sind einige Punkte zu beachten:

- Da die Libraries von Euresys im STRICT Modus Kompiliert sind, welcher eine strengere Typenüberprüfung verlangt, muss auch das einbindende Programm im STRICT Modus Kompiliert werden, sonst können keine Funktionen mit passender Signatur in den Libraries von Euresys gefunden werden.

Beispiel:

Ohne STRICT Definition wird ein HDC (Handle for Device Context) als void * interpretiert, somit auch nach einer Funktion in den Libraries gesucht, die einen void* erwartet.

Mit STRICT wird der HDC jedoch vom Typ HDC__ interpretiert, so auch in den Libraries.

Somit ist es wichtig, dass im Programm STRICT definiert wird (#define STRICT), bevor andere Libraries wie zum Beispiel Windows.h eingebunden werden. Bei Borland C++ Builder kann diese Definition unter „Optionen|Projekt..“ im Register „Verzeichnisse/Bedingungen“ im Feld Definition eingetragen werden. Um korrekt Compilieren zu können, muss dort auch _WINDOWS definiert werden.

- Da in Borland C++ Builder V1.0 enums vor ihrer Verwendung definiert werden müssen, muss in Easy.h die Definition des enums E_ERRORS vor der Definition der Funktion ESetError die das enum verwendet verschoben werden.

9.2 Bedienung

9.2.1 Das Hauptfenster



Abbildung 9.2-1 Das Hauptfenster von MMD&T








Nach dem Start des Programmes wird das Hauptfenster angezeigt. Hier kann man die verschiedenen Aktionen starten. Hier die Funktionen der Tasten:




Neu:

Bildserie laden und verarbeitet (siehe 9.2.2 Laden und verarbeiten einer Bildserie).



-  **Laden:** Bereits verarbeitete und gespeicherte Bildsequenzen laden (siehe 9.2.3 Laden einer gespeicherten Bildserie).
-  **Speichern:** Bereits verarbeitete Bildsequenz auf einen Datenträger speichern (siehe 9.2.4 Speichern einer verarbeiteten Sequenz).
-  **Speichern als:** Bereits verarbeitete Bildsequenz auf einen Datenträger speichern, wobei ein Name angegeben werden kann (siehe 9.2.4 Speichern einer verarbeiteten Sequenz).
-  **Movie:** Anzeigen der ausgeschnittenen Tracks als Film in wählbarer Geschwindigkeit (siehe 9.2.5 Anzeigen eines Track Movies).
-  **Trace:** Anzeigen der ausgeschnittenen Track untereinander als zeitliche Abfolge. Hier werden die erkannten Moleküle und ihre Bewegungsvektoren angezeigt. Ebenfalls stehen in diesem Fenster diverse Tool zur zeitlichen Assoziation der Moleküle zur Verfügung (siehe 9.2.6 Zuweisen der Moleküle).
-  **Export:** Export der Daten (Bewegungsvektoren) eines Moleküls (wird in dieser Version noch nicht unterstützt).
-  **Exit** Beenden des Programms.

9.2.2 Laden und verarbeiten einer Bildserie

 Diese Verarbeitung geschieht für den Benutzer in mehreren Schritten. Solche Programme nennt man in der Windows – Welt auch Experten. Nach dem drücken der ‚Neu‘ - Taste erscheint eine Dateiauswahl Liste.

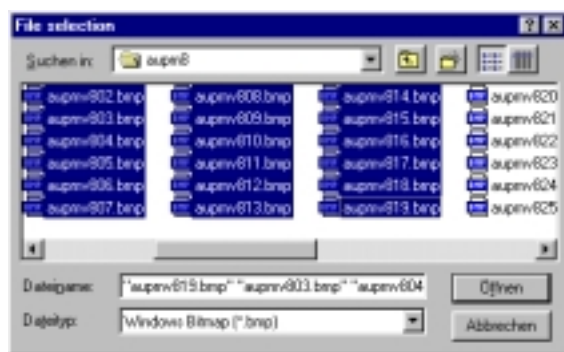


Abbildung 9.2-2 Öffnen Dialog

Hier sollen die Graphikdateien der Sequenz Markiert werden. Die Dateien werden automatisch sortiert. Diese Sortierung geschieht nach aufstiegenderem ASCII Wert der Zeichen. Am sinnvollsten ist daher eine durchgehende Numerierung der Dateinamen der Bilder.

Nach dem drücken der OK Taste erscheint das Fenster zur Bild – und Winkelwahl.



Abbildung 9.2-3 Fenster zur Bild- und Winkelwahl

Hier kann in der Liste auf der rechten Seite ein Bild der Sequenz gewählt werden. In einem Bild soll dann die Richtung der Molekülbahnen eingezeichnet werden. Durch ein Klick auf die linke Maustaste im Bild wird das Zeichnen einer Linie gestartet. Die Linie soll dann so gezogen werden, dass sie parallel zu den Molekülbahnen liegt. Durch einen zweiten Klick wird das Zeichnen der Linie abgeschlossen. Das Zeichnen der Linie kann beliebig oft wiederholt werden. Nun kann wieder ein anderes Bild gewählt werden. Das Bild das angezeigt wird, wenn die Taste mit der Beschriftung „Nächste >“ angeklickt wird, erscheint dann rotiert im nächsten Fenster, in dem man dann Mustermolekül wählen muss.

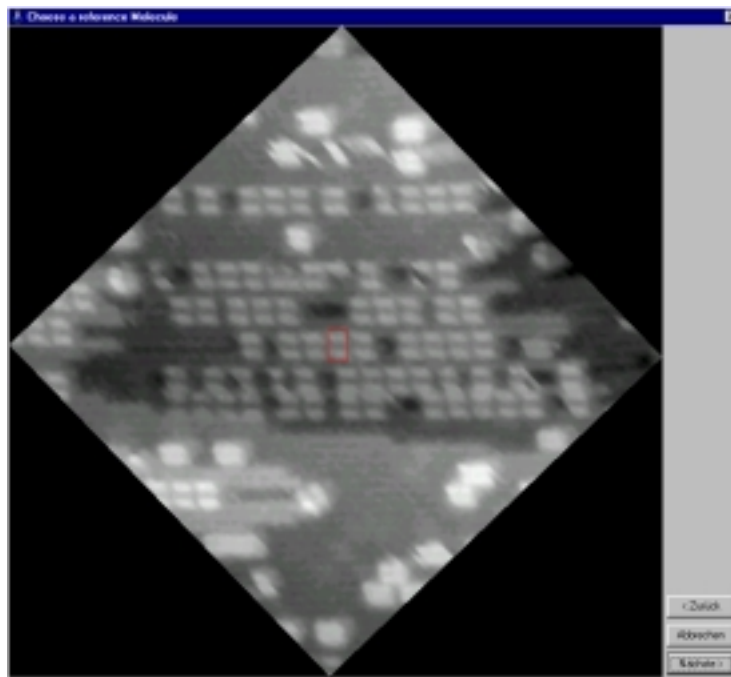


Abbildung 9.2-4 Fenster für Molekülmuster Wahl

In diesem Fenster soll ein Molekül markiert werden, das dann als Muster zur Suche von weiteren Molekülen verwendet wird. Das Molekül muss sich in dem Track befinden, der anschliessend analysiert werden soll. Mit einem Klick auf die linke Maustaste im Bereich des Bildes wird das Zeichnen eines Rahmens gestartet. Der Rahmen soll eng um ein gut abgebildetes Molekül gezogen werden. Durch einen zweiten Klick auf die linke Maustaste wird das



zeichnen des Rahmens beendet. Das zeichnen des Rahmens kann beliebig oft wiederholt werden.

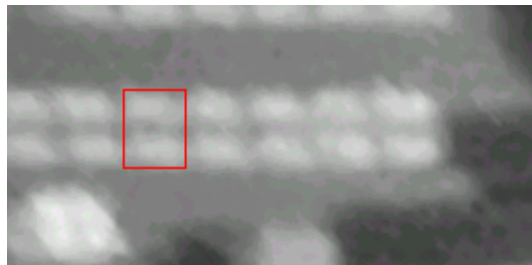


Abbildung 9.2-5 Beispiel eines gut markierten Moleküls

Durch anklicken der Taste mit der Beschriftung „Nächste >“ wird die Verarbeitung fortgesetzt. Nun wird vom Programm der Drift von Bild zu Bild über die ganze Sequenz berechnet. Dabei werden die Tracks ausgeschnitten und darin die gut abgebildeten Moleküle gesucht. Während der Verarbeitung werden die Resultate in einem Fenster angezeigt. Nach Abschluss der Verarbeitung wird mit einem akustischen Signal und einem Dialog auf den Abschluss hingewiesen. Nach bestätigen des Dialogs wird wieder das Hauptfenster angezeigt, wo weitere Verarbeitungen erfolgen können.

9.2.3 Laden einer gespeicherten Bildserie



Nach dem Drücken der ‚Laden‘ – Taste im Hauptfenster wird ein Dateiauswahl Fenster angezeigt. Hier kann eine zuvor gespeicherte *.mmp Datei gewählt werden und durch anwählen der OK – Taste geladen werden.

9.2.4 Speichern einer verarbeiteten Sequenz



Mit dem drücken einer dieser Tasten wird der momentane Zustand der Moleküle und die Bilder der Tracks abgespeichert. Der Unterschied der beiden Tasten ist, dass nach dem drücken der ersten Taste ein Verzeichnis und ein Dateiname für die Daten angegeben werden kann. Die zweite Taste speichert die Datei unter dem früher angegebenen Namen. Da die Bilder der Tracks in einzelnen Dateien abgespeichert werden, empfiehlt es sich dringen, für jede zu speichernde Sequenz ein eigenes Verzeichnis anzulegen.

9.2.5 Anzeigen eines Track Movies



Wenn die Bewegung der Moleküle im verarbeiteten Track anschaulich visualisiert werden soll, empfiehlt sich die Verwendung des Movie Tools. Nach dem drücken der ‚Movie‘ – Taste im Hauptfenster wird das Movie – Fenster angezeigt.



Abbildung 9.2-6 Das Movie Fenster

Durch drücken der Tasten am unteren Fensterrand kann die Abfolge Bild für Bild oder automatisch vorwärts oder Rückwärts abgespielt werden. Für das automatische Abspielen kann die Geschwindigkeit in Bildern pro Sekunde angegeben werden, wobei die Maximalgeschwindigkeit vom verwendeten Rechner

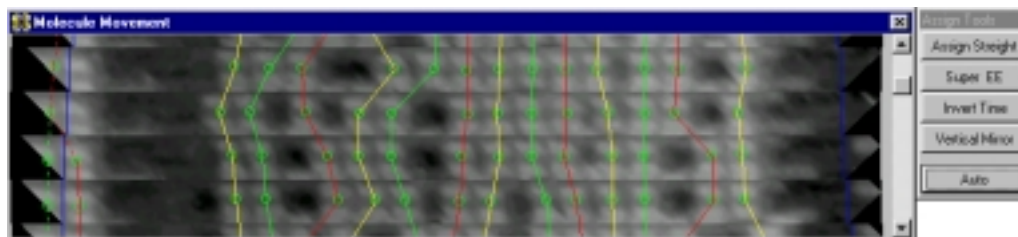


abhängt. In der rechten unteren Ecke des Fensters wird zudem der Dateiname des Bildes angezeigt, aus dem der Track ausgeschnitten wurde.

9.2.6 Zuweisen der Moleküle



Um die Molekülpositionen in der Abfolge von Bildern vergleichen zu können und um die Bewegung der Moleküle anzuzeigen steht das Trace Tool zur Verfügung. Nach dem drücken der ‚Trace‘ – Taste wird das ‚Molecule Movement‘ – Fenster angezeigt, zudem ein kleines Fenster mit dem Titel ‚Assign tools‘.



Im grossen Fenster werden die Tracks der Sequenz untereinander driftkompensiert dargestellt. Die erfassten Moleküle werden mit einem Punkt markiert. Der Rand des zu untersuchenden Teil des Tracks wird mit einer blauen Linie markiert. Auf dem ‚Assign Tools‘ Fenster stehen verschiedene Werkzeuge zur Erkennung der Moleküle zur Verfügung. Die Tasten haben folgende Funktionen:

Assign Straight

Diese Funktion knüpft die zeitlichen Assoziationen der Moleküle. Dabei wird das jeweils erste Molekül eines Tracks mit dem ersten Molekül des nachfolgenden Tracks verknüpft. Dasselbe mit dem zweiten, dritten und so weiter.

Super EE

Korrekturalgorithmus der Fehler erkennt und behebt. Dieser Algorithmus arbeitet von oben nach unten und von links nach rechts. Um Fehler effektiv zu eliminieren, muss der Algorithmus jedoch in alle Richtungen ausgeführt werden. Dazu stehen die Werkzeuge ‚Invert Time‘ und ‚Vertical Mirror‘ zur Verfügung.

Invert Time

Mit ‚Invert Time‘ werden sämtliche zeitlichen Assoziationen umgekehrt. Das heisst zum Beispiel, dass der letzte Track zum Ersten wird und umgekehrt. Diese Funktion erlaubt es, den Korrekturalgorithmus auch von unten nach oben auszuführen.

Vertical Mirror

‚Vertical Mirror‘ spiegelt die Tracks an der vertikalen Achse. Dabei wird die Reihenfolge und die Positionen der Moleküle sowie die Bilder selbst gespiegelt. Ebenfalls wird das Vorlagemolekül gespiegelt, um bei einer erneuten Suche nach Molekülen einen möglichst guten Korrelationswert zu erhalten. Diese Funktion erlaubt es, den Korrekturalgorithmus auch von rechts nach links auszuführen.



10 Resultate

Die Resultate sind stark von der Bildqualität abhängig. Bei der folgende Resultatanalyse wird von einer guten Bildqualität ausgegangen(Mehr über die Bildqualität siehe Schlussfolgerung).

Die Algorithmen des MMD&T funktionieren gut. Über 90% aller Moleküle werden allein durch Kreuzkorrelation erkannt. Von den restlichen Molekülen werden dann noch über 90% durch den Zuweisungsalgorithmus aufgespürt, so dass Schlussendlich etwa 99% aller Moleküle gefunden werden.

Für eine gute Erkennung ist es vorteilhaft, wenn das Substrat eine möglichst regelmässige Oberfläche besitzt. Zu viele Unebenheiten auf dem Substrat und auch zu viele „schnelle“ Moleküle in der Nähe des Tracks führen zu Falscherkennungen.

Die Zuweisung der Moleküle ist nicht in allen Fällen möglich. Das Wichtigste Kriterium, dass eine zuverlässige Zuweisung möglich ist, ist, es müssen genügend Moleküle in einem Track vorhanden sein. Auch ist es von Vorteil, dass die Molekülbewegungen möglichst klein sind, was meistens erfüllt ist, da sich die die Mehrheit der Moleküle nicht bewegt. Wenn dieses Kriterium erfüllt ist, funktioniert der Zuweisungs- Algorithmus jedoch sehr gut. Es werden dann über 99% der Moleküle richtig zugewiesen. Jedoch gibt es immer seltene Fälle, bei denen die Anordnungen und Positionsveränderungen der Molekülen so ist, dass eine eindeutige Zuweisung nicht möglich ist.

Die Verarbeitungsgeschwindigkeit des MMDT könnte gegenüber des MMD(Angst und Bosshard) um ca. das 50-fache gesteigert werden. Dies ist vor allem der Umstellung der Programmiersprache von Matlab zu C++ Builder zu verdanken. Ein Bildsequenz von 50 Bildern wird in unter 1 Minute verarbeitet.



11 Schlussfolgerung

Im Allgemeinen kann man sagen, dass eine zuverlässige Verfolgung von Molekülen durchaus möglich ist. Einzelne Falscherkennungen und Falschzuweisungen sind wohl bei der vorliegenden Bildqualität nicht zu vermeiden.

Mit dem MMD&T konnten Moleküle sehr zuverlässig erkannt und verfolgt werden, obwohl aus Zeitgründen nicht alle Regeln und Kriterien angewandt werden konnten. Es gibt aber viele Möglichkeiten, den MDD&T zu verbessern.

Die Ergebnisse, einer Molekülverfolgung, sind stark von der Qualität der Bilder die das RTM liefert abhängig. Kürzere Abtastzeiten des RTM würden die Bildqualität verbessern (weniger zerrissene Moleküle) und die Molekülbewegungen von Bild zu Bild verkleinern. Das würde eine Erkennung und Verfolgung der Moleküle erleichtern.



12 Ausblick und Weiterentwicklung

Beim MMD&T konnten verschiedene Regeln und Eigenschaften, die bei der Erkennung und Zuweisung der Moleküle genutzt werden können, meist aus zeitlichen Gründen, nicht beachtet werden.

Die folgenden Punkte zeigen wie man den MMD&T verbessern und Weiterentwickeln könnte:

Darstellung der Ergebnisse:

Je nach Verwendung könnten weitere Darstellungsmöglichkeiten realisiert werden. Sehr nützlich wäre auch eine Exportfunktion, die Daten eines Moleküls zum Beispiel in Excel exportiert. Dort könnten Statistiken erstellt werden.

Fuzzy:

Für die Zuweisung der Moleküle existieren viele Informationen die mehr oder weniger nützlich sind. Im jetzigen Stand des MMD&T ist es sehr schwierig, all diese Informationen zu nutzen und richtig zu Gewichten. Es werden meistens harte Entscheide gefällt. Ein Fuzzy System würde die Gewichtung dieser Informationen sehr erleichtern. Die Informationen könnten damit einfacher Gewichtet und die Limits weich Begrenzt werden.

Neurofuzzy:

Ein lernfähiges System würde weitere Vorteile bringen. Anhand der ausgeführten Erkennungen würden die Gewichtungen der Kriterien automatisch optimiert. Dadurch könnten Ergebnisse laufend das Programm verbessern. Der Vorteil gegenüber einem neuronalen Netz ist, dass man die so erhaltenen Resultate nachvollziehen kann (Fuzzy- Sets, Regeln).

Für die Erkennung von zweidimensionalen Bewegungen ist die Struktur des MMD&T nicht geeignet. Daher ist eine Weiterentwicklung dieses Programmes in diese Richtung nicht sinnvoll. Jedoch können mit diesem Werkzeug Informationen und Erfahrungen gesammelt werden, die zur Fertigung eines zweidimensionalen Erkennungssystems nützlich sind.



13 Persönliches

13.1 Wir danken

Allen Personen, die zum Gelingen dieser Arbeit etwas beigetragen haben.

Speziell danken wir den Herren H. Grossmann und B. Bucher, die uns an unseren wöchentlichen Sitzungen immer kompetent beraten haben.

Im besonderen Danken wir auch Herrn T. Jung vom PSI der uns einen Einblick in die Materie der Nanotechnologie ermöglichte. Ihm ist es auch zu verdanken, dass wir unsere Arbeit in Ascona bei dem Discussion Meeting „Nanostructures at surface and interface“ präsentieren konnten. Auch die Besichtigung des PSI die uns Herr Jung ermöglichte war ein grosses Erlebnis.

Herr Yves Daoust der Firma Euresys hat uns einige Male aus schwierigen Situationen geholfen. Insbesondere Kompatibilitätsprobleme der Easylibrary mit Borland C++ Builder standen hier in Diskussion.

13.2 Schlussbemerkung

Die Studienarbeit machte uns grossen Spass und war sehr lehrreich. Bisher Gelerntes konnte man Anwenden und neues wurde dazu gelernt.

Nicht nur technisch lernten wir dazu, wir lernten auch wie man mit anscheinend unlösbaren Problemen umgeht. Programme, Tools und Libraries die wir verwendeten, waren oft nicht kompatibel zueinander. Abklärungen beim Hersteller waren nötig. Die Kommunikation über e-mail war dabei sehr nützlich.

Das Selbständige Erarbeiten von Lösungsansätze und das lösen von Problemen war für uns eine willkommene Herausforderung und wir konnten für das spätere Berufsleben als Ingenieur sehr viel Lernen.

Mit Genugtuung konnten wir auch feststellen, dass unsere Algorithmen gute Ergebnisse liefern. Mit unserer Semesterarbeit wurden neu Erkenntnisse über die Verfolgung und Erkennung von Molekülen gewonnen, die in folgenden Projekten weiter verwendet werden können. Dies gerechtfertigt auch den hohen Zeitaufwand den das Projekt forderte.



14 Glossar

B:		
BMP		Bitmap (Bildformat, auch als .bmp bezeichnet)
D:		
Drift		wandern des Bildausschnittes
G:		
GUI / UI		Graphical User Interface / User Interface
H:		
HSR		Hochschule Rapperswil
I:		
IBM		International Business Machines (Computerfirma)
ITR		Interkantonales Technikum Rapperswil
K:		
kkf		Kreuzkorrelationsfunktion
Korrelation		Grad der Übereinstimmung zweier Objekte (berechnet mit kkf)
M:		
MMD		Molecular Movement Detector
MMD&T		Molecular Motion Detector and Tracer
Molekülcluster		Ansammlung von Molekülen zu einer Gruppe
P:		
PC		Personal Computer
PIC		Unix Bildformat (ähnlich wie bmp)
Pietzo		Kristall, der unter Druck eine elektrische Spannung bildet
PSI		Paul Scherrer Institut
R:		
RTM		Raster Tunnel Mikroskop
S:		
Sequenz		Reihe von Bildern die zeitlich nacheinander von einem RTM aufgenommen wurden.
STM		(Eng.) Scanning Tunneling Microscope (Deutsch: RTM)
Substrat		Träger für die Moleküle
T:		
Threshold		(Eng.) Schwellwert an dem eine andere Bedingung gilt.
TIF		Tag Image File (Bildformat, auch als .tif bezeichnet)
Track		Spur im Substrat, auf der sich die Moleküle bewegen.
V:		
Vorlagemolekül		siehe 8.1 Begriffserklärung



15 Literaturverzeichnis

- [1] C++ Eine Einführung; Ulrich Breymann; Carl Hanser Verlag München Wien
- [2] Statistische Methoden und ihre Anwendungen; Erwin Kreyszig; Vandenhoecker & Ruprecht Verlag Göttingen
- [3] Digitale Bildsignalverarbeitung; P.Haberäcker; Hanser Studienbücher
- [4] Digitale Bildverarbeitung; HP. Bähr/T. Vögtle; Herbert Wichmann Verlag



16 Bilderverzeichnis

Abbildung 4.3-1	Porphyrinmolekül	10
Abbildung 4.4-1	Porphyrinmoleküle auf dem Au(110) Substrat	11
Abbildung 4.5-1	Schnelle (P) und langsame (F) Porphyrinmoleküle.....	11
Abbildung 4.5-2	P- und F- Moleküle auf Au(110).....	12
Abbildung 4.6-1	Rastertunnelmikroskop (RTM).....	12
Abbildung 5.2-1	Ausgangsmaterial	14
Abbildung 5.3-1	Grafik einer Molekülposition.....	15
Abbildung 6.1-1	Beispiel eines zerrissenen Moleküls	17
Abbildung 6.2-1	Beispiel ähnlicher Helligkeiten.....	18
Abbildung 6.2-2	Beispiel ähnlicher Struktur	18
Abbildung 7.3-1	Tracks mit gefundenen Molekülen	23
Abbildung 7.3-2	Tracks mit assoziierten Molekülen	24
Abbildung 7.3-3	Signatur eines nicht erkannten Moleküls.....	24
Abbildung 7.3-4	Signatur eines neu eintretenden Moleküls	24
Abbildung 7.3-5	Signatur eines austretenden Moleküls	24
Abbildung 7.3-6	Flussdiagramm Fehlereliminationsalgorithmus.....	26
Abbildung 7.4-1	Ablaufdiagramm der Verarbeitung.....	27
Abbildung 9.2-1	Das Hauptfenster von MMD&T.....	35
Abbildung 9.2-2	Öffnen Dialog	36
Abbildung 9.2-3	Fenster zur Bild- und Winkelwahl	37
Abbildung 9.2-4	Fenster für Molekülmuster Wahl	37
Abbildung 9.2-5	Beispiel eines gut markierten Moleküls	38
Abbildung 9.2-6	Das Movie Fenster.....	38