

Тестирование программного обеспечения сканирующих зондовых микроскопов

С. С. ГОЛУБЕВ*, Ю. А. КУДЕЯРОВ*, М. В. КОЗЛОВ**

* Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы, Москва, Россия, e-mail: golubev@vniims.ru

** Межрегиональный испытательный центр, Зеленоград, Россия

Представлены методы и результаты тестирования программного обеспечения сканирующих зондовых микроскопов.

Ключевые слова: сканирующий зондовый микроскоп, экспертиза документации, функциональные проверки, метод моделей исходных данных, генерирование «эталонных» данных, контрольная сумма.

The methods and results of testing of scanning probe microscopes software are presented.

Key words: scanning probe microscope, examination of documentation, functional verifications, basic data models method, reference data generation, control sum.

За последние 15 — 20 лет сканирующие зондовые микроскопы (СЗМ) стали широко применять как средства измерений (СИ) параметров рельефа поверхностей нанометрового диапазона (микроразрешенных компонентов, носителей информации, биосенсоров, нанотрубок и т. д.). Потребность в таких СИ очень велика, поскольку перечисленные нанотехнологические направления остро нуждаются в соответствующем метрологическом обеспечении. Однако в данной работе основное внимание будет уделено не задаче превращения СЗМ из средств визуализации поверхности в соответствующие СИ [1, 2], что само по себе чрезвычайно актуально, а проблемам, связанным с тем, что такие приборы представляют собой полностью компьютеризированные системы. Изображения микрообъектов в них являются компьютерными изображениями, полученными после обработки входных сигналов при помощи довольно сложного программного обеспечения (ПО). Система поддержания предельно малых расстояний между зондом СЗМ и рельефом поверхности по самому физическому принципу действия таких приборов должна быть автоматизированной и управляться программно. Все это неизбежно приводит к необходимости оценки соответствия применяемого ПО тем задачам, которое оно призвано решать в таких СИ. Между тем известно [3], что использование ПО, в частности, для автоматического управления СЗМ, а также обработки и представления измерительной информации сопровождается возможным проявлением рисков. Они обусловлены как внутренними свойствами программных продуктов, так и внешними причинами, связанными, в основном, с непреднамеренными (случайными) воздействиями на ПО. Эти риски в процессе создания и эксплуатации СЗМ необходимо оценивать и контролировать. Ситуация осложняется также тем, что большинство разработчиков и изготовителей современных СИ поставляют приборы без должной расшифровки деталей ПО, сохраняя их в качестве элементов ноу-хау.

Из приведенного выше следует, что в настоящее время проблема оценки качества предлагаемого ПО в области СЗМ и гарантии высокой степени достоверности полученных с его

помощью результатов является чрезвычайно важной. С учетом того, что существующая нормативная база находится в начальной стадии развития, практический опыт независимого тестирования ПО явно недостаточен, ситуацию, сложившуюся в этой сфере, нельзя признать удовлетворительной. Тем не менее, находятся разработчики и изготовители СЗМ, которые исходя из собственных соображений (требования потребителей, обеспечение высокого качества и конкурентоспособности выпускаемой продукции, поддержание должного уровня технической и технологической культуры и т. д.) идут на проведение независимой экспертизы ПО. Примером служит предприятие, производящее линейку СЗМ, применяемых в разных областях микро- и нанотехнологий. Его представители обратились во ФГУП «ВНИИМС» с просьбой провести независимую экспертизу (тестирование) ПО разработанных ими СЗМ в рамках созданной в институте Системы добровольной сертификации программного обеспечения средств измерений и аппаратно-программных комплексов (СДС ПО СИ и АПК), регистрационный № РОСС RU.В317.04ИЗ00 от 20 февраля 2008 г., представленной органом указанной системы — АНО «МИЦ».

Ниже рассмотрены методы и результаты тестирования ПО указанных СЗМ, которые, по мнению авторов, могут представлять интерес для разработчиков, пользователей и испытателей ПО СИ.

На тестирование было представлено следующее оборудование: ПО «Nova P9»; линейка СЗМ Solver HV, Solver HV-MFM, Solver SNOM, Smena, Solver PRO, Solver PRO-M, Solver FD, Solver P47-PRO, Solver PRO-EC, Solver MFM, Solver BIO-M, Solver OPEN; меры рельефные нанометрового диапазона TDG01 (№ ГР 41676-09), TGG1 (№ ГР 41677-09), TGZ1, TGZ2, TGZ3 (№ ГР 41678-09), TGT1 (ГР 41679-09), TGQ1 (№ ГР 41680-09).

Программное обеспечение «Nova P9» предназначено для решения комплекса задач, связанных с проведением измерений, обработки, визуализации и передачи информации с использованием СЗМ. Это ПО реализует переход на более высокий уровень управления нанотехнологическим

оборудованием по сравнению с другими программными продуктами, применяемыми в СЗМ. В нем учитывается, что, с одной стороны, многие рутинные операции должны быть автоматизированы, с другой — что разработчикам стандартного ПО, управляющего СЗМ, сложно подстроиться под огромное количество разных операций, проводимых пользователями. Решением данных проблем стала разработка и внедрение макроязыка в программу управления приборами.

Скрипты (текстовые файлы), создаваемые на макроязыке, позволяют задать определенную стандартную последовательность процедур и запуска ее нажатием одной кнопки. Это значительно облегчает управление СМЗ и повышает эффективность его работы. В программном продукте «Nova P9» использован макроязык Nova PowerScript, поддерживающий синтаксис VBScript и JScript.

При помощи «Nova P9» можно выполнять следующие функции:

настройку оптической системы регистрации изгибов кантилевера;

получение и обработку частотных характеристик;

подвод образца к зонду;

сканирование поверхности образца;

обработку и анализ полученных данных;

проведение спектроскопических исследований;

модификацию поверхности образца (нанолитографию);

работу с устройствами нагрева образца;

исследование различных сигналов;

настройку датчиков перемещения сканера.

Большинство указанных выше операций относится к автоматизированному управлению различными режимами работы микроскопов. Понятно, что при тестировании ПО проверяют не все его части и функции, а в первую очередь метрологически значимые части [4], т. е. те, которые могут влиять на метрологические характеристики прибора. Отношение частей ПО к метрологически значимым обязательно согласуется с заказчиком тестирования.

Поскольку тестирование ПО проводили в Системе добровольной сертификации, напомним, что сертификация продукции подразумевает установление соответствия конкретного изделия (устройства) требованиям нормативной документации, а ее конечным итогом при положительных результатах является выдача сертификата соответствия. В настоящее время разработан ряд международных и отечественных нормативных документов, где указаны требования к ПО

СИ и методы, с помощью которых устанавливается соответствие программного продукта этим требованиям. К их числу относятся стандарты [4 — 7] и методика [8], в соответствии с требованиями которых осуществляли сертификацию ПО СЗМ.

Кроме описанного выше оборудования, для проведения тестирования была также предоставлена следующая документация: «Справочное руководство Nova P9. Программы управления СЗМ»; «Image Analysis 3.5. Модуль обработки изображений». После ознакомления с оборудованием и документацией было признано, что этих материалов достаточно для проведения тестирования ПО.

Для тестирования была разработана и согласована с заказчиком «Методика сертификационных испытаний программного обеспечения «Nova P9» (далее — «Методика»). Помимо анализа документации в «Методику» был включен раздел «Проведение экспериментальных исследований». В рамках этих исследований выполняли функциональные проверки ПО, реализуемые с помощью как программных так и аппаратных средств (испытательного оборудования) имеющие своей задачей инициацию проверяемых функций. При этом отклик ПО на процедуру инициации должен соответствовать описанному в документации.

Согласно требованиям стандарта [4] экспериментальные исследования ПО включали следующие этапы:

проверку идентификации, т. е. установление идентификационных признаков и проверку их соответствия признакам, заявленным в технической документации;

проверку разделения на метрологически значимые и незначимые части;

опробование и проверку функциональных возможностей; установление уровня защищенности программного продукта и данных.

Для проверки функциональных возможностей ПО «Nova P9» был собран испытательный стенд, его упрощенная схема приведена на рис. 1. На оборудовании, входящем в состав испытательного стенда, должны быть выставлены тестовые данные, подающие на вход ПО. Далее выборочно проверяли функции, заявленные в документации на испытываемый программный продукт. В «Методике» прописаны процедуры проведения этих проверок. Остановимся детально на описании проверки функций обработки СЗМ-топограмм.

Одной из метрологически значимых частей ПО является модуль обработки изображений — топограмм. Важная функция данного модуля — обработка и исправление типичных для СЗМ искажений изображения поверхности образца, связанных с физическими принципами его работы. Для этого в программе предусмотрены следующие функции: «вычитание» плоскости и поверхности второго порядка (фрагмента поверхности сферы); устранение относительных сдвигов линий сканирования. Следует учесть, что указанные функции ПО применяются к изображениям, содержащим естественный шумовой фон.

«Вычитание» плоскости необходимо для устранения неплоскостности выставления образца, а поверхности второго порядка — для устранения влияния на изображение образца изгибов пьезокерамической трубки, на которой находится образец. Понятно, что термин «вычитание» носит жаргонный характер, и речь идет об учете воздействий указанных эффектов. Относительные сдвиги линий сканирования

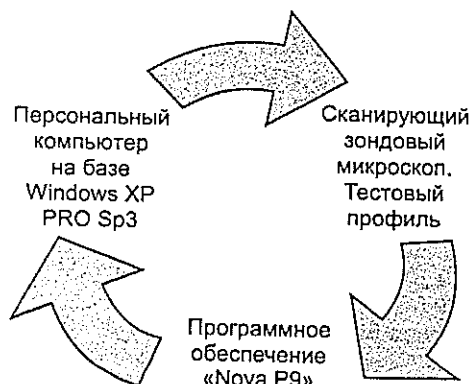


Рис. 1. Схема испытательного стенда

обусловлены изменением высоты зонда относительно образца в процессе обратного хода образца (зонда) при сканировании под влиянием различных случайных факторов.

Чтобы оценить возможности модулей ПО, учитывающих воздействие таких эффектов, в «Методике» предлагается использовать метод моделей исходных данных [9]. Одним из основных условий его применения является максимально адекватное соответствие модели исходных данных реально измеряемым образцам. В качестве таких образцов были взяты линейные меры периода TGZ и высоты TGQ1, служащие для передачи единицы длины и поверки (калибровки) сканирующих зондовых и растровых электронных микроскопов в диапазоне 10^{-8} — 10^{-4} м. Меры представляют собой совокупность периодических структур прямоугольной геометрической формы каждого элемента рельефа на поверхности квадратной кремниевой монокристаллической пластины со стороной квадрата не более 5 мм, поверхность которой ориентирована параллельно кристаллографической плоскости (100) (рис. 2). Сами элементы рельефа меры выполнены из оксида кремния методом фотохимического травления пластин. Мера TGQ1 (см. рис. 2, а) имеет трехмерный прямоугольный рельеф («шашки»), период $T = (3,00 \pm 0,01)$ мкм, высота структуры $h = (0,0200 \pm 0,0015)$ мкм; мера TGZ1 (см. рис. 2, б) обладает двухмерным прямоугольным рельефом, период T и высота h — те же, что у меры TGQ1.

Метод моделей исходных данных было предложено реализовать с помощью специально разработанной вспомогательной программы (MDTGenerator), в которой можно создавать файлы (модели исходных данных), моделирующие меры с заданными параметрами рельефа (T , h) и содержащие характерные для СЗМ искажения изображений с известными параметрами (углом наклона плоскости, радиусом области сферы, дисперсиями шума строк и фонового шума сканирования). Созданный таким образом «виртуальный» рельеф затем можно было исследовать с использованием испытываемого ПО, провести коррекцию изображений и по отношению к отклонению измеренных параметров рельефа от известных исходных (модельных) значений сделать выводы о возможностях данного программного продукта по коррекции изображений образцов.

Алгоритм работы генератора «виртуального» рельефа MDTGenerator следующий. Сначала массив данных заполняется информацией, описывающей модельную структуру с известными параметрами. При этом учитываются устанавливаемые пользователем программы генератора значения периодов структуры, высоты выступов, размера «виртуального» кадра, количества пикселей изображения и т. д. Затем для имитации искажений изображений в СЗМ этот массив данных последовательно подвергается геометрическим преобразованиям по приведенным ниже формулам.

Поворот структуры (TGZ или TGQ) относительно вертикальной оси (оси Z системы координат микроскопа):

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha;$$

$$y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha;$$

$$z' = z,$$

где α — угол поворота структуры относительно оси Z.

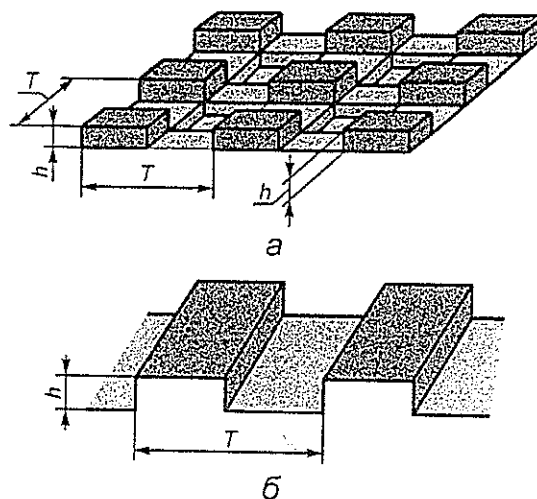


Рис. 2. Изображения мер TGQ1 (а) и TGZ1 (б)

Наложение рельефа на сферу:

$$x' = x; y' = y;$$

$$z' = z - \left(R - \sqrt{R^2 - (x^2 + y^2)} \right),$$

где R — радиус сферы, задаваемый пользователем.

Наклон относительно осей:

$$x' = x; y' = y;$$

$$z' = z + x \sin \alpha_x + y \sin \alpha_y,$$

где α_x, α_y — углы, задаваемые пользователем, которые определяют угол плоскости ($X'OY'$) с координатными осями OX и OY исходной системы координат.

Сдвиг строк, типичный для СЗМ:

$$x' = x; y' = y; z'_{ij} = z_{ij} + n_i,$$

где i, j — номера строки и столбца; n_i — случайные числа, распределенные по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и дисперсией, задаваемой пользователем.

Для имитации естественной зашумленности изображений в СЗМ в «Методике» предложено применять генерацию «эталонных» данных методом нуль-пространства [10].

Отметим, что сечение поверхности «виртуального» рельефа, о котором говорилось выше, плоскостью ZOX является кусочно-линейным, описываемым следующей зависимостью:

$$z = \begin{cases} 0 & \text{при } x \in [nT; nT + T/2); \\ h & \text{при } x \in [nT + T/2; (n+1)T); \end{cases} \quad (1)$$

$$n = 0, 1, 2 \dots$$

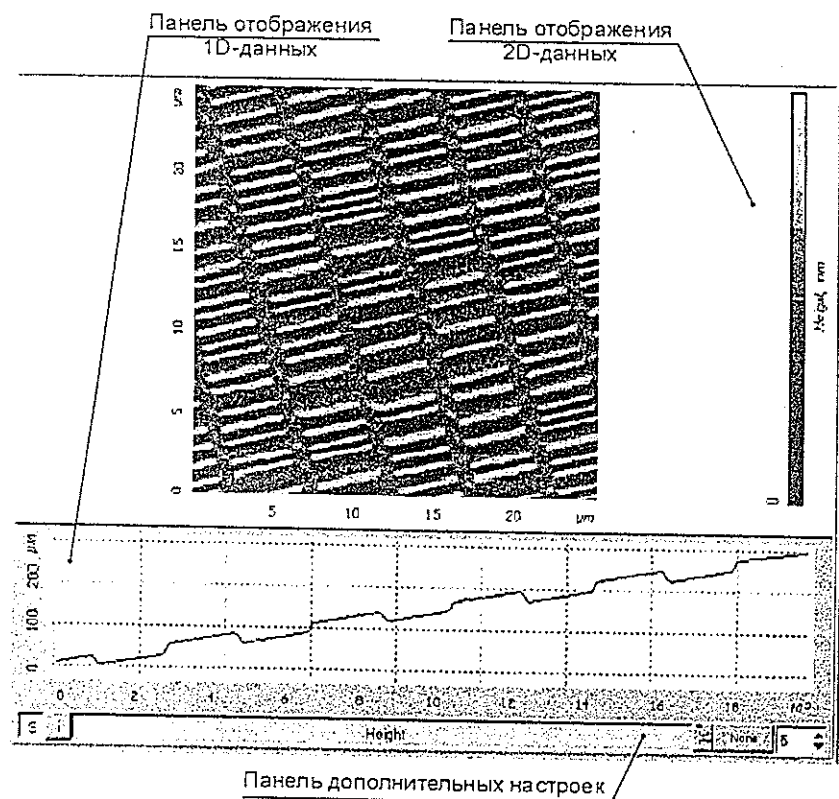


Рис. 3. Фрагмент отчета проверки функции сканирования поверхности образца

m — число экспериментально измеренных (заданных при модельных расчетах) пар чисел (z_j, x_j) , или объем выборки.

Компоненты r_j вектора остатков являются набором случайных чисел, учитывающим случайные отклонения экспериментально измеренных значений пар (z_j, x_j) от детерминированной зависимости (1), являющейся предметом определения в задаче простой линейной регрессии. Решив методом нуль-пространства [10] задачу, в данной постановке обратную простой линейной регрессии, т. е. задачу нахождения компонентов вектора остатков r по экспериментально измеренным (заданным) парам (z_j, x_j) , можно получить поверхность «виртуальной» меры с естественным шумовым фоном как сумму незашумленной структуры (1) и совокупности случайных компонентов r .

Метод генерации «эталонных» данных, как и метод моделей исходных данных, детально изложен в [3]. Отметим также, что аппроксимация реальных функций преобразования СИ кусочно-линейными зависимостями типа представленной формулой (1) позволяет проводить тестирование большого числа программных продуктов, используемых в метрологии.

Тестирование ПО СЗМ проводили на предприятии — изготовителе микроскопов, а его результаты изложены в «Протоколе сертификационных испытаний программного обеспечения «Nova P9».

Объем статьи не позволяет представить эти результаты полностью, поэтому ограничимся их выборочным и кратким изложением. Прежде всего, при проверке предоставленной на тестирование технической документации было установлено, что она удовлетворяет требованиям стандартов [4, 6]. Было рекомендовано дополнить техническую документацию разделом, содержащим описание реализованных методов защиты ПО и данных.

Как известно [8], к идентификационным признакам программного продукта относят его название, номер версии и контрольные суммы, рассчитанные для метрологически значимых частей. Номер версии определяется с использованием интерфейса пользователя. По согласованию с заказчиком сертификации к метрологически значимым частям ПО были отнесены программные модули XYCalibration.dll и ZCalibration.dll. Данные модули реализуют функции обработки топограмм (устранение наклона, искажения и сдвига строк, различные фильтрации), а также калибровки микроскопа по осям X, Y и Z. При этом последняя функция фактически представляет собой метод автоматического измерения параметров кремниевых структур TGZ1 и TGQ1 (периода и высоты) вдоль этих осей. Контрольные суммы для указанных модулей, рассчитанные изготовителем по стандартному алгоритму MD5, имеют вид

XYCalibration.dll : 9eb48340c656f5e545923ec839d60040;

ZCalibration.dll : 081da6dd16f81d05ba3c54e1de1a0f0f.

В заключение было констатировано, что структура тестируемого программного продукта характерна для автономного ПО СИ [3].

Зависимость (1) выступает и как модель исходных данных, и как априори известное решение измерительной задачи, знание которого является необходимым условием применения метода генерации «эталонных» данных [10].

Для каждой части меры зависимость (1) можно записать в векторном виде [10]:

$$z = Ab + r,$$

где A — «затравочная» матрица, или матрица наблюдений по [10]; b — вектор коэффициентов линейной зависимости; r — вектор остатков;

$$z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \dots \\ z_m \end{pmatrix}; \quad A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_m \end{pmatrix} \quad \text{при } x \in [nT; nT + T/2];$$

$$b = b_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{при } x \in [nT; nT + T/2];$$

$$b = b_1 = \begin{pmatrix} h \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{при } x \in [nT + T/2; (n+1)T]; \quad r = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \dots \\ r_m \end{pmatrix};$$

Из всех функциональных проверок остановимся только на результатах проверок сканирования поверхности образца и функции «вычитания» плоскости (устранения наклона образца). В соответствии с «Методикой» в окне «Scanning» СЗМ были выставлены начальные условия и проведено сканирование поверхности тестового образца (рис. 3). В результате испытания установлено, что реализованная в ПО «Nova P9» функция сканирования поверхности образца соответствует требованиям нормативной и технической документации. Сканер осуществляет растровое перемещение зонда относительно образца, а в узлах растра происходит цифровка измеряемых сигналов.

По «Методике» с помощью программы MDTGenerator была построена поверхность с наклоном на угол $0,1^\circ$ относительно осей X и Y. При значениях периода структуры «виртуальной» меры 3000 нм и высоты ступени 22 нм после вычитания наклона образца измеренные значения оказались равными 2998 нм и 21,85 нм, т. е. относительные отклонения рассчитанных и опорных значений не превысили 0,07 % по периоду и 0,7 % по высоте. На основании полученных данных результаты всех проведенных проверок были признаны положительными.

Наконец, при определении уровня защищенности ПО и данных было установлено, что в программном продукте реализованы журнал событий, режимы архивации и экспорта данных. Файлы «Nova P9» хранятся в бинарном виде, что делает невозможным несанкционированное изменение и воздействие на них без применения сторонних программных средств. В соответствии с методикой [8] защищенность ПО СЗМ относится к уровню «С». При этом было рекомендовано для повышения уровня защиты осуществить авторизацию и разделение прав пользователей.

По результатам тестирования ПО «Nova P9» было принято решение о выдаче Сертификата соответствия с Приложением, где кратко перечислены основные свойства и характеристики этого программного продукта, установленные в процессе испытаний.

Основной особенностью описанного тестирования ПО СЗМ является использование методов моделей исходных данных и генерации «эталонных» данных. Применение указанных методов обусловлено тем, что разработать соответствующее опорное ПО не представлялось возможным из-за его сложности и объема. На приведенном примере тестирования программного продукта показано, что при на-

личии специалистов нужной квалификации проблемы оценки свойств и характеристик даже такого сложного ПО СЗМ могут быть успешно решены.

Литература

1. Кононогов С. А., Голубев С. С., Лысенко В. Г. Исследование измерительных и калибровочных возможностей средств измерений нанометрового диапазона // Законодательная и прикладная метрология. 2008. № 3. С. 19—27.
2. Голубев С. С., Голубев С. Н. Прослеживаемость результатов измерений в нанометровом диапазоне к единицам Международной системы единиц физических величин // Измерительная техника. 2010. № 11. С. 21—28; Golubev S. S., Golubev S. N. Traceability of measurement results in the nanometric range to the units of the international system of units of physical quantities // Measurement Techniques. 2010. V. 53. N 11. P. 1209—1214.
3. Кудеяров Ю. А. Испытания (тестирование) программного обеспечения средств измерений: Учеб. пособие. М.: АСМС, 2010.
4. ГОСТ Р 8.654—2009. ГСИ. Требования к программному обеспечению средств измерений. Основные положения.
5. ГОСТ Р 8.596—2002. ГСИ. Метрологическое обеспечение измерительных систем. Основные положения.
6. ГОСТ Р ИСО/МЭК 12119—2000. Информационная технология. Пакеты программ. Требования к качеству и тестированию.
7. ГОСТ Р ИСО 9127—94. Системы обработки информации. Документация пользователя и информация на упаковке для потребительских программных пакетов.
8. МИ 2955—2010. ГСИ. Типовая методика аттестации программного обеспечения средств измерений.
9. МИ 2174—91. ГСИ. Аттестация алгоритмов и программ обработки данных при измерениях. Основные положения.
10. Cox M. G. e. a. Testing spreadsheets and other packages used in metrology [Электрон. ресурс]. [http://www.npl.co.uk/publications/testing-spreadsheets-and-other-packages-used-in-metrology-report-on-discussions-with-other-national-measurement-institutes-\(1998/1999\)](http://www.npl.co.uk/publications/testing-spreadsheets-and-other-packages-used-in-metrology-report-on-discussions-with-other-national-measurement-institutes-(1998/1999)) (дата обращения 20.06.2011).

Дата принятия 19.07.2011 г.

