



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0026997  
(43) 공개일자 2021년03월10일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
G06T 7/00 (2017.01) G06N 20/00 (2019.01)  
G06T 5/00 (2019.01)  
(52) CPC특허분류  
G06T 7/00 (2013.01)  
G06N 20/00 (2019.01)  
(21) 출원번호 10-2019-0154820  
(22) 출원일자 2019년11월27일  
심사청구일자 2019년12월03일  
(30) 우선권주장  
1020190107535 2019년08월30일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
포항공과대학교 산학협력단  
경상북도 포항시 남구 청암로 77 (지곡동)  
연세대학교 원주산학협력단  
강원도 원주시 흥업면 연세대길 1  
(72) 발명자  
고경준  
전라남도 순천시 장선배기길 89 금당대림아파트  
103동 201호  
양동환  
부산광역시 북구 의성로95번길 106 (덕천동) . 시  
영아파트 5동 110호  
(74) 대리인  
특허법인아이엠

전체 청구항 수 : 총 15 항

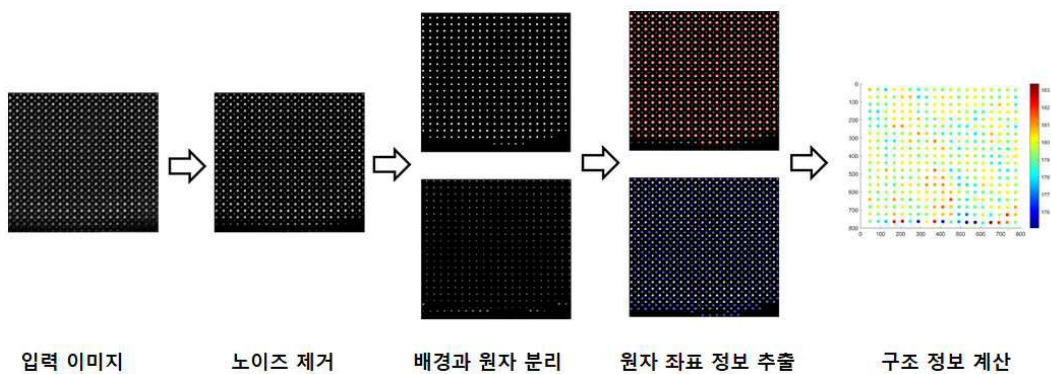
(54) 발명의 명칭 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법

(57) 요약

본 발명은 주사투과전자현미경(STEM)을 통해 얻어진 원자 이미징 결과로부터 원자 구조를 해석하는 방법에 관한 것이다.

본 발명에 따른 방법은, (a) 소정 물질에 대한 주사투과전자현미경 이미지를 얻는 단계; (b) 상기 주사투과전자현미경 이미지에 포함된 가우시안 노이즈, 푸아송 노이즈 및 배경 노이즈를 제거하는 단계; (c) 머신 러닝 기법을 통해 상기 노이즈가 제거된 주사투과전자현미경 이미지에서 원자 영역과 배경 영역을 구분하는 단계; (d) 상기 구분된 원자 영역을 이용하여 원자 좌표를 도출하는 단계; (e) 상기 원자 영역의 밝기 대비를 통해 원자 종류를 구분하는 단계; 및 (f) 상기 (d) 및 (e) 단계에서 구해진 원자의 좌표 및 종류 정보를 이용하여, 주사투과전자현미경으로 관찰된 상기 소정 물질의 구조 정보를 계산하는 단계;를 포함한다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

**G06T 5/002** (2013.01)

**G06T 2207/10061** (2013.01)

**G06T 2207/20081** (2013.01)

**G06T 2207/20084** (2013.01)

(72) 발명자

**최시영**

경상북도 포항시 남구 청암로 77 포항공과대학교  
신소재공학과

**양세정**

강원도 원주시 능라동길 78 휴먼팰리스 616호

**한중훈**

강원도 원주시 판부면 남원로 223 거장2차아파트  
105동 1018호

**이지영**

경기도 안산시 상록구 해양1로 11 안산고잔6차푸르  
지오 605-1504

**안홍기**

울산광역시 중구 함월5길 23 해찬솔 401호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711082564

부처명 과학기술정보통신부

과제관리(전문)기관명 한국연구재단

연구사업명 글로벌프론티어지원(R&D)

연구과제명 신기능성 소재 특성 해석 및 첨단 분석기술 개발

기 여 율 1/1

과제수행기관명 포항공과대학교

연구기간 2019.01.01 ~ 2019.12.31

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

- (a) 소정 물질에 대한 주사투과전자현미경 이미지를 얻는 단계;
- (b) 상기 주사투과전자현미경 이미지에 포함된 가우시안 노이즈, 푸아송 노이즈 및 배경 노이즈를 제거하는 단계;
- (c) 머신 러닝 기법을 통해 상기 노이즈가 제거된 주사투과전자현미경 이미지에서 원자 영역과 배경 영역을 구분하는 단계;
- (d) 상기 구분된 원자 영역을 이용하여 원자 좌표를 도출하는 단계;
- (e) 상기 원자 영역의 밝기 대비 및/또는 상기 소정 물질에 대한 사전 구조 정보를 통해 원자 종류를 구분하는 단계; 및
- (f) 상기 (d) 및 (e) 단계에서 구해진 원자의 좌표 및 종류 정보를 이용하여, 주사투과전자현미경으로 관찰된 상기 소정 물질의 구조 정보를 계산하는 단계;를 포함하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 (a) 단계의 주사투과전자현미경 이미지는, 상기 소정 물질에 대한 HAADF, ABF 이미지 중에서 어느 일방 또는 양방인, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (b) 단계는, 상기 푸아송 노이즈의 분산을 일정하게 고정시켜 가우시안 노이즈와 같이 변환하는 단계와, 상기 변환된 푸아송 노이즈와 상기 가우시안 노이즈를 동시에 제거하는 단계를 포함하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 4

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (b) 단계에 있어서, 상기 배경 노이즈는 모폴로지 연산을 통해 제거되는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 5

제3항에 있어서,

상기 푸아송 노이즈의 분산을 일정하게 고정시켜 가우시안 노이즈와 같이 변환하는 단계는, 앤스콤 변환(anscombe transform)을 통해 수행되는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 6

제3항에 있어서,

상기 변환된 푸아송 노이즈와 상기 가우시안 노이즈의 동시 제거는 블록매칭3D(block matching 3D, BM3D) 또는 가우시안 노이즈 필터를 사용하여 수행되는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 7

제4항에 있어서,

상기 모폴로지 연산은, 상기 주사투과전자현미경 이미지로부터 상기 변환된 푸아송 노이즈와 상기 가우시안 노이즈가 제거된 후에, 상기 주사투과전자현미경 이미지의 팽창(dilation)과 침식(erosion)을 통해 수행되는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 8

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (c) 단계의 머신 러닝 기법은 K-평균 군집화(K-means clustering)인, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 9

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (d) 단계에 있어서, 상기 원자 좌표는, 원자를 원의 형태로 가정하여, 서클러 허프 변환(Hough transform)을 이용하여, 원자의 무게 중심 위치에 원의 중심이 일치하도록 세그멘테이션(segmentation)함으로써 도출되는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 10

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (e) 단계는, 밝기 강도가 강한 순서대로 원자들의 좌표 정보를 추출하여 원자의 종류를 분류하는 1차 분류 단계를 포함하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 11

제10항에 있어서,

상기 1차 분류 단계를 통해 원자 종류의 분류가 완전히 이루어지지 않는 경우, 상기 소정 물질의 구조 정보와 상기 주사투과전자현미경 이미지로부터 도출된 원자 좌표 정보를 대응하여 원자 종류를 분류하는 2차 분류 단계를 더 포함하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 12

제2항에 있어서,

상기 주사투과전자현미경 이미지로, HAADF 이미지와 ABF 이미지를 사용하는 경우, 상기 HAADF 이미지를 사용하여 소정 원자 위치를 도출한 후, 상기 ABF 이미지를 사용하여 HAADF 이미지에서 관측되지 않는 원자 위치를 도출하는 과정을 수행하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 13

제12항에 있어서,

상기 ABF 이미지를 사용하여 HAADF 이미지에서 관측되지 않는 원자 위치를 도출하는 경우, 상기 HAADF 이미지에서 도출한 원자 위치 정보를 이용하여 ABF 이미지에서의 원자 위치 정보를 대략적으로 인식시키는 단계와, 각 원자들의 인근 영역에서 세그멘테이션(segmentation)하여 ABF 이미지에서의 정확한 원자 위치 정보를 도출하는 단계를 포함하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

#### 청구항 14

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (d) 단계에 있어서, 상기 주사투과전자현미경 이미지에 누락된 부분이 있는 경우, 해당 부분을 선택하여 히스토그램 스트레칭(histogram stretching)과 모폴로지 연산을 통해 주사투과전자현미경 이미지를 강화하는 단계를 수행한 후, 상기 원자 좌표를 재 도출하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

## 청구항 15

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 (f) 단계에서, 알려진 물질의 구조 정보를 바탕으로, 추출된 원자 좌표 및 원자 종류 정보를 단위 격자별로 분류한 후, 주사투과전자현미경으로 관찰된 상기 소정 물질의 구조 정보를 계산하는, 투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 주사투과전자현미경(STEM)을 통해 얻어진 원자 이미징 결과로부터 원자 구조를 해석하는 방법에 관한 것이다. 구체적으로, 본 발명은 주사투과전자현미경을 통하여 얻어진 이미지의 데이터 및 배경의 노이즈를 제거한 후, 머신러닝 기법을 이용하여 배경과 원자를 구분하고, 원자 배열 위치를 결정함으로써, 다양한 소재의 정보를 주사투과전자현미경이 제공하는 해상도에 비해 높은 정확도로 얻어낼 수 있을 뿐 아니라 노이즈가 많은 이미지도 정확하게 분석할 수 있도록 하는 해석 방법에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0003] 원자 구조의 고해상도 이미지를 얻어낼 수 있는 장점을 가진, 주사투과전자현미경 장비의 발전은 물질의 구조에 대한 깊은 이해를 이끌어왔다.

[0004] 이러한 주사투과전자현미경의 이미징 모드는, HAADF (High-angle Annular Dark field,  $\beta = 70 \sim 300$  mrad) 이미징, MAADF (Medium-angle Annular Dark Field,  $\beta = 40$  mrad 이상) 이미징, ABF (Annular Bright Field,  $\beta = 10 \sim 35$  mrad) 이미징, BF (Bright Field,  $\beta = 0 \sim 10$  mrad) 이미징으로 구분된다. 이중 HAADF 모드는 원자 배열 이미지의 원자 무게에 민감하기 때문에 금속이나 산화물에 있는 무거운 양이온을 이미징하는데 사용되는 모드이다. MAADF 모드는 회절 콘트라스트의 영향을 받는 중간 산란각 영역을 포함하기 때문에 도메인 경계 등에서 유발되는 변형에 의해 콘트라스트가 민감하게 반응하고, 산란각이 작은 B, C, N, O와 같은 가벼운 원소 물질로 이루어진 나노재료의 이미징에 유용한 모드이다. ABF 모드는 원자 배열에서 산소, 질소 및 수소와 같은 가벼운 원소들을 이미징하는 모드인데, HAADF 모드에 비해 자주 노이즈가 생겨 이미지가 잘 나타나지 않는다. BF 모드는 시료 두께와 탈초점 변화에 따라 콘트라스트가 민감하게 변화하나 시료의 경사에는 변화가 덜 민감하여 결정구조 파라미터를 결정하는데 있어 ABF 모드와 함께 상호 보완적으로 활용할 수 있다.

[0005] 지난 10여년 동안 원자 구조의 고해상도 이미지를 얻어낼 수 있는 장점을 가진 주사투과전자현미경 장비의 발전은 물질의 구조에 대한 깊은 이해를 이끌어왔다. 이러한 구조에 대한 이해를 바탕으로 원자 구조와 특성의 관계를 연결시키는 것, 즉 어떻게 원자 구조가 물질의 특성을 나타내고 구조의 변화가 특성에 영향을 어떻게 미치는지를 이해하는 것이 중요하다.

[0006] 그런데, 소재의 성질은 소재 내의 원자 위치의 아주 작은 변화에 기인할 수 있으며 강유전성, 강자성, 압전성 물질과 같은 기능성 산화물들이 그러한 물질적 예이다. 그리고 이러한 변화의 정도는 20 pm 미만에 불과하다. 현재 극도로 분해능이 개선된 주사투과전자현미경의 공간 분해능은 대부분 50pm ~ 100pm 정도이다. 전술한 것과 같이 물질의 특성이 20 pm 이하의 원자 위치 변화에 의존하는 점을 고려할 때, 주사투과전자현미경 분해능 한계인 50 ~ 100pm 보다 향상된 스케일 수준의 원자 위치 정보를 얻을 수 있는 기술이 필요하다.

[0007] 한편, 주사투과전자현미경은 전자빔의 시료를 주사하는 형태로 데이터를 얻게 되므로 주사 속도가 빠르거나 원자로부터의 신호가 매우 약한 경우에는 신호대 잡음비(signal-to-noise ratio)가 낮아지는 단점이 있다. 예를 들어, 기능성 산화물 같은 특별한 경우에는 산소 이온 위치의 작은 변화에도 물질의 특성이 급격하게 변할 수 있으나 산소 이온은 약한 산란 단면을 가지기 때문에 이미지 상에서 배경과 노이즈와의 구별이 특히 어렵다.

[0008] 현재까지 원자 이미징을 하는 전자현미경 기술에서 사용하고 있는 일반적인 기술은 푸리에 변환(Fourier transformation)을 이용한 이미지 필터를 이용하는 것이다. 그런데 이 방법은 인공적인 결함들을 이미지에 유발하고 인접한 원자열들의 위치 데이터를 평균화하여 과소평가하는 과정을 거치게 되므로, 원자의 위치 정보에 대한 정확성을 높이는데 한계가 있다.

[0009] 또한, 원자 위치 정보를 향상시키기 위한 방법으로, 동일한 영역에 대해 많은 이미지를 수집한 후에 가우시안 피팅을 하는 방법도 있다. 하지만 이 방법은 이미지 수집이 번거로울 뿐 아니라, 이미징 과정에서 샘플에 상당한 손상을 초래하여 데이터의 신뢰도 자체가 낮아질 수 있는 문제점이 있다.

[0010] 또한, 물질 내의 원자 위치의 작은 변화는, 소재가 가지고 있는 규칙적인 배열, 다시 말해, 단위 격자 내에서 분석이 이루어져야만 한다. 주사투과전자현미경 이미지 내에는 수백 혹은 수천 개의 단위 격자가 존재하며, 각 단위 격자로부터 분극, 양이온 변위 벡터 등의 정보를 모두 수작업으로 계산하기에는 시간적으로 어려움이 있다.

## 선행기술문헌

### 특허문헌

[0012] (특허문헌 0001) 미국 등록특허공보 제10,176,363호

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

[0013] 본 발명은 수많은 주사투과전자현미경 이미지를 통계적으로 처리할 수 있고, 주사투과전자현미경 장비가 제공하는 해상도에 비해 높은 정밀도의 이미지 정보를 제공할 수 있으며, 노이즈가 있는 경우에도 정밀하게 보정할 수 있는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법을 제공하는데 목적이 있다.

### 과제의 해결 수단

[0015] 본 발명의 과제를 해결하기 위해 본 발명은, (a) 소정 물질에 대한 주사투과전자현미경 이미지를 얻는 단계; (b) 상기 주사투과전자현미경 이미지에 포함된 가우시안 노이즈, 푸아송 노이즈 및 배경 노이즈를 제거하는 단계; (c) 머신 러닝 기법을 통해 상기 노이즈가 제거된 주사투과전자현미경 이미지에서 원자 영역과 배경 영역을 구분하는 단계; (d) 상기 구분된 원자 영역을 이용하여 원자 좌표를 도출하는 단계; (e) 상기 원자 영역의 밝기 대비 및/또는 상기 소정 물질에 대한 사전 구조 정보를 통해 원자 종류를 구분하는 단계; 및 (f) 상기 (d) 및 (e) 단계에서 구해진 원자의 좌표 및 종류 정보를 이용하여, 주사투과전자현미경으로 관찰된 상기 소정 물질의 구조 정보를 계산하는 단계;를 포함하는, 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법을 제공한다.

[0016] 또한, 상기 (a) 단계의 주사투과전자현미경 이미지는, 상기 소정 물질에 대한 HAADF 이미지이거나, 상기 소정 물질에 대한 HAADF 이미지와 ABF 이미지일 수 있다.

[0017] 또한, 상기 (b) 단계는, 상기 푸아송 노이즈의 분산을 일정하게 고정시켜 가우시안 노이즈와 같이 변환하는 단계와, 상기 변환된 푸아송 노이즈와 상기 가우시안 노이즈를 동시에 제거하는 단계를 포함할 수 있다.

[0018] 또한, 상기 (b) 단계에 있어서, 상기 배경 노이즈는 모폴로지 연산을 통해 제거될 수 있다.

[0019] 또한, 상기 푸아송 노이즈의 분산을 일정하게 고정시켜 가우시안 노이즈와 같이 변환하는 단계는, 앤스컴 변환(anscombe transform)을 통해 수행될 수 있다.

[0020] 또한, 상기 변환된 푸아송 노이즈와 상기 가우시안 노이즈의 동시 제거는 블록매칭3D(block matching 3D, BM3D) 또는 가우시안 노이즈 제거 필터를 사용하여 수행될 수 있다.

[0021] 또한, 상기 모폴로지 연산은, 상기 주사투과전자현미경 이미지로부터 상기 변환된 푸아송 노이즈와 상기 가우시안 노이즈가 제거된 후에, 상기 주사투과전자현미경 이미지의 팽창(dilation)과 침식(erosion)을 통해 수행될 수 있다.

[0022] 또한, 상기 (c) 단계의 머신 러닝 기법은 K-평균 군집화(K-means clustering) 기법일 수 있다.

[0023] 또한, 상기 (d) 단계에 있어서, 상기 원자 좌표는, 원자를 원의 형태로 가정하여, 서클러 허프 변환(Hough

transform)을 이용하여, 원자의 무게 중심 위치에 원의 중심이 일치하도록 세그멘테이션(segmentation)함으로써 도출될 수 있다.

- [0024] 또한, 상기 (e) 단계는, 밝기 강도가 강한 순서대로 원자들의 좌표 정보를 추출하여 원자의 종류를 분류하는 1차 분류 단계를 포함할 수 있다.
- [0025] 또한, 상기 1차 분류 단계를 통해 원자 종류의 분류가 완전히 이루어지지 않는 경우, 상기 소정 물질의 구조 정보와 상기 주사투과전자현미경 이미지로부터 도출된 원자 좌표 정보를 대응하여 원자 종류를 분류하는 2차 분류 단계를 더 포함할 수 있다.
- [0026] 또한, 상기 주사투과전자현미경 이미지로, HAADF 이미지와 ABF 이미지를 사용하는 경우, 상기 HAADF 이미지를 사용하여 소정 원자 위치를 도출한 후, 상기 ABF 이미지를 사용하여 HAADF 이미지에서 관측되지 않는 원자 위치를 도출하는 과정을 수행할 수 있다.
- [0027] 또한, 상기 ABF 이미지를 사용하여 HAADF 이미지에서 관측되지 않는 원자 위치를 도출하는 경우, 상기 HAADF 이미지에서 도출한 원자 위치 정보를 이용하여 ABF 이미지에서의 원자 위치 정보를 대략적으로 인식시키는 단계와, 각 원자들의 인근 영역에서 세그멘테이션하여 ABF 이미지에서의 정확한 원자 위치 정보를 도출하는 단계를 포함할 수 있다. 이 단계는 ABF 이미지와 HAADF 이미지는 동시에 촬영이 가능하지만, ABF 디텍터(detector)와 HAADF 디텍터의 위치 차이로 인해 2가지 이미지에서 원자 좌표에 약간의 오차가 생길 수 있는 점을 고려한 것이다.
- [0028] 또한, 상기 (d) 단계에 있어서, 상기 주사투과전자현미경 이미지에 누락된 부분이 있는 경우, 해당 부분을 선택하여 히스토그램 스트레칭(histogram stretching)과 모폴로지 연산을 통해 주사투과전자현미경 이미지를 강화하는 단계를 수행한 후, 상기 원자 좌표를 재 도출할 수 있다.
- [0029] 또한, 상기 (f) 단계에서, 알려진 물질의 구조 정보를 바탕으로, 추출된 원자 좌표 및 원자 종류 정보를 단위 격자별로 분류한 후, 주사투과전자현미경으로 관찰된 상기 소정 물질의 구조 정보를 계산할 수 있다.

### 발명의 효과

- [0031] 본 발명에 따른 해석 방법에 의하면, 노이즈가 상당히 있는 경우에도 이미지와 추가적인 원자 스케일의 뒤틀림을 빠르고 정밀하게 보정할 수 있다.
- [0032] 또한, 현재 시장에 출시된 차세대 수차 보정 장치의 경우, 수차는 보정이 되지만 전자 프로브의 수렴 각도(convergence angle)를 증가시키는 효과가 있으며, 이는 초점 심도 감소 및 전자 채널링 감소를 유발하기 때문에 노이즈를 증가시키는 경향이 있는데, 본 발명은 이러한 노이즈 제거를 제거할 수 있어, 차세대 수차 보정 장치와 함께 사용될 경우 더 정밀한 분석을 가능하게 만들어줄 수 있다.
- [0033] 또한, 현재 시장에 출시된 차세대 수차 보정 장치와 함께 사용하면, 증가된 전자 프로브의 수렴에 의한 각도 초점 심도 감소, 전자 채널링의 감소 때문에 커진 노이즈 등을 처리하는데 많은 도움이 될 수 있다.
- [0034] 최근 주사투과전자현미경에 내장된 픽셀형 검출기가 도입됨에 따라 많은 회절 패턴을 취하는 주사투과전자현미경 ptychography 영역이 개발되고 있는데, 이 영역의 이미지들은 노이즈가 심한 경향을 띠는데, 본 발명에 따른 해석 방법은 특히 노이즈가 많은 이미지를 높은 정밀도로 분석하는데 유리하므로, 주사투과전자현미경 ptychography 영역에 유용하게 활용될 수 있다.
- [0035] 주사투과전자현미경 이미지 분석은 원하고자 하는 정보에 따라, 구조의 종류에 따라 계산 방법이 모두 다르므로, 여러 주사투과전자현미경 이미지로부터 정보를 도출하여 통계적으로 처리함에 있어 많은 시간이 소요되는데, 본 발명에 따른 해석 방법은 다양한 정보를 신속하고 정확하게 도출할 수 있는 이점이 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [0037] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법의 흐름도이다.
- 도 2는 발명의 실시예에 따른 원자 구조 해석을 위해, 노이즈 성분을 추정하고 노이즈를 제거하는 단계를 나타낸 것이다.



도 3은 발명의 실시예에 따른 원자 구조 해석을 하는데 사용된 세그멘테이션(Segmentation)을 예시한 것으로, 원형으로 가정된 원자 영역의 무게 중심이 원자의 위치로 정의되는 것을 나타낸 것이다.

도 4는 주사투과전자현미경 이미지에서 원자 좌표 정보가 누락된 영역의 이미지를 강화하여 원자 좌표 정보를 재추출하는 과정을 나타낸 것이다.

도 5는 관측 방향에 따른 단위격자 구조 정보 계산의 변화를 예시적으로 나타낸 것이다.

도 6a는 본 발명의 실시예에 따른 원자 구조 해석이 이루어지는 분석 프로그램 GUI를 예시적으로 나타낸 것이다.

도 6b는 본 발명의 실시예에 따른 원자 구조 해석이 이루어지는 분석 프로그램을 사용한 분석 결과의 출력물을 예시적으로 나타낸 것이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0038] 이하 본 발명의 실시예에 대하여 첨부된 도면을 참고로 그 구성 및 작용을 설명하기로 한다.

[0039] 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 기능 또는 구성에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명을 생략할 것이다. 또한, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.

[0040] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 주사투과전자현미경 이미지에서의 원자 구조 해석 방법의 흐름도이다.

[0041] 본 발명에 따른 원자 구조 해석 방법은, 도 1에 나타낸 것과 같이, 주사투과전자현미경 이미지를 입력 이미지로 준비하는 단계와, 전처리를 통해 노이즈를 제거하는 단계와, K-평균 군집을 통해 배경과 원자영역을 분리하고 세그멘테이션을 통해 원자 좌표정보를 추출하는 단계와, 추출된 정보로부터 측정된 물질의 구조 정보를 계산하는 단계를 통해 이루어진다.

#### [0043] 입력 이미지 준비

[0044] 주사투과전자현미경 이미지는 그 모드에 따라 관측이 가능한 원소가 달라진다. 예를 들어, HAADF 모드는 원자 무게에 민감하기 때문에 금속이나 산화물에 존재하는 무거운 양이온을 이미징하는데 적합하나 산소와 같이 원자 번호가 작은 원소는 HAADF 이미지에서 관측되지 않는다. 한편, 원자 번호가 작은 원소는 ABF 모드로 관측이 되지만 배경과의 밝기 대비가 작고 노이즈가 크기 때문에 원자를 배경 영역으로부터 구분하는 데에 어려움이 발생하는 특성이 있다.

[0045] 본 발명의 실시예에서는 HAADF 모드의 이미지로 물질의 분석이 충분한 경우에는 HAADF 이미지만을 사용하여 분석하고, 원자 번호가 작은 원소를 포함하는 물질의 경우에는 HAADF 이미지와 ABF 이미지를 함께 사용함으로써 원자 번호가 작은 원소의 위치 정보를 정밀하게 도출한다.

#### [0047] 전처리 단계

[0048] 주사투과전자현미경 이미지는 크게 2가지의 노이즈가 검출된다. 그 하나는 전기적 신호에 의해 발생하는 가우시안 노이즈(Gaussian noise)로 영상에 더해지는 형태로 검출된다. 다른 하나는 푸아송 노이즈(Poisson noise)로 광자에 의해 발생하는데, 영상에 곱해지는 형태로 검출되기 때문에 신호가 강해지면 노이즈도 강해지는 특성이 있어 노이즈를 제거하는데 어려움이 발생한다.

[0049] 본 발명의 실시예에서는, 이러한 가우시안 노이즈와 푸아송 노이즈를 제거하는 전처리를 수행한다.

[0050] 전처리 단계에서는, 도 2에 도시된 것과 같이, 먼저 주사투과전자현미경 이미지의 노이즈 성분을 분석한 후, 최적의 조건으로 노이즈 제거를 시행한다. 예를 들어, 노이즈 성분 분석은 이미지를 여러 패치로 분할하여 각 패치에서의 노이즈 성분 기대값 및 표준 편차를 지역적으로 추정하며, 이를 전체 이미지의 노이즈 성분 추정 값에 피팅함으로써, 이미지 각 영역의 노이즈 분포를 균일화한다. 이를 통해 1회의 필터링 만으로 전체 이미지에 대해 노이즈를 1분 이내의 빠른 시간으로 효과적으로 제거할 수 있다.

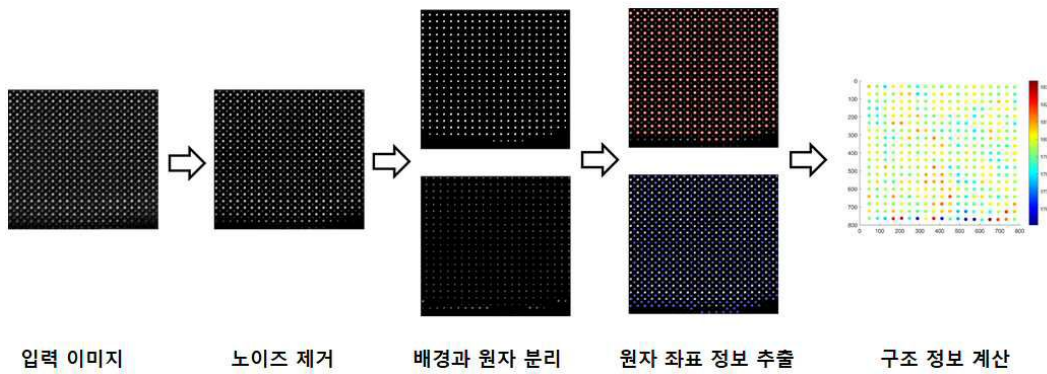


- [0051] 전술한 노이즈 성분 추정 값을 바탕으로, 앤스콤 변환(Anscombe transform)을 통해 주사투과전자현미경 이미지에서 검출된 푸아송 노이즈의 분산을 일정하게 고정시켜 가우시안 노이즈처럼 변환한다. 이와 같이 변환시키게 되면 가우시안 노이즈를 제거하는 필터를 사용하여 푸아송 노이즈까지 함께 제거할 수 있다.
- [0052] 이렇게 노이즈를 제거한 뒤, 이미지를 팽창(dilation) 및 침식(erosion)시키는 모폴로지 연산을 통해 배경에 있는 노이즈를 제거한다(도 2, 배경 노이즈 제거 참조)
- [0053] 이상과 같은 전처리 단계는, 후속되는 머신 러닝을 이용한 원자 위치 정보의 추출에 필요한 연산을 크게 줄이고 정확도를 높이는 기능을 한다.
- [0055] 원자 좌표 추출 단계
- [0056] 주사투과전자현미경 이미지에서 원자와 배경 간의 밝기 대비는 관측하는 원자의 원자 번호에 비례한다. 또한 산소와 같이 원자 번호가 작은 원소는 HAADF 이미지에서 관측되지 않고 ABF 이미지에서 관측이 되지만, 배경 간의 밝기 대비가 작고 노이즈가 크기 때문에 이러한 원자를 배경 영역으로부터 구분하는 데에 어려움이 발생한다.
- [0057] 이러한 문제를 해결하기 위해, 본 발명의 실시예에서는, 먼저 HAADF 이미지에서 밝기 대비가 큰 원소의 위치 정보를 추출한 후, ABF 이미지에서 밝기 대비가 작은 원소의 위치 정보를 추출하는 방법을 통해 각 원소의 위치 정보를 추출한다.
- [0058] 본 발명의 실시예에서는 동일한 관측지점에서 얻은 HAADF 이미지와 ABF 이미지의 쌍을 사용하여 분석하고 있으나, 분석할 물질에 따라 HAADF 이미지 또는 ABF 이미지 분석만으로 충분한 경우에는, 상기 하나의 이미지만을 선택하여 원자 좌표의 추출을 할 수도 있다.
- [0059] 구체적으로, 주사투과전자현미경 이미지에서 원자 위치 정보를 추출하는 단계는 다음과 같이 진행된다.
- [0060] 먼저, 머신러닝 기법 중 하나인 K-평균 군집화(K-means clustering) 기법을 이용하여, 주사투과전자현미경 이미지 상의 밝기 대비를 통해 이미지 내에서 원자 영역과 배경 영역을 구분해낸다.
- [0061] 이어서, 도 3에 나타낸 것과 같이, 원자를 원의 형태로 가정하여, 서클러 허프 변환(Circular Hough transform)을 이용하여, 원자의 무게 중심 위치에 원의 중심이 일치하도록 세그멘테이션하여 원자의 좌표를 정의한다. 이때, 원자들의 밝기 강도에 따라 원자들을 구분하는데, 상대적으로 강도가 강한 무거운 원자들을 좌표 정보를 먼저 추출하고, 추출된 원자들을 제외한 나머지 부분에서 다음으로 밝기 강도가 강한 원자들의 좌표 정보를 추출함으로써, 원자들의 종류를 1차적으로 분류한다.
- [0062] 그런데, 실제 주사투과전자현미경 이미지에서는 지역적으로 밝기 대비가 크고 작은 영역이 있어, 밝기 대비만으로 원자의 종류를 구분하는 데에 어려움이 있을 수 있다. 이 경우, 재료의 구조 정보를 이용하여 추가적인 분류 단계가 필요하다.
- [0063] 결정성을 가지는 재료는 구조에 따라 원자들의 배열이 규칙적으로 존재하기 때문에, 이러한 구조 정보와, 관측된 주사투과전자현미경 이미지 상의 원자 배열을 상호 대응하여 원자의 종류를 구분할 수 있는데, 본 발명의 실시예에서는 이 방법을 통해 원자들의 종류를 2차적으로 분류한다. 이러한 과정을 통해 원자의 종류를 보다 정확하게 분류할 수 있다.
- [0064] 이상과 같은 과정을 통해 HAADF 이미지에서의 원자 위치 정보의 추출이 완료되면, 다음으로 ABF 이미지의 원자 위치 추출을 진행한다.
- [0065] 동일한 영역에서 촬영된 주사투과전자현미경 이미지라도, ABF 이미지와 HAADF 이미지의 원자 위치가 미세하게 다를 수 있는데, 이는 ABF 이미지와 HAADF 이미지는 동시에 촬영이 가능하지만, ABF 디텍터(detector)와 HAADF 디텍터의 위치 차이로 인해 2가지 이미지에서 원자 좌표에 약간의 오차가 생길 수 있기 때문이다. 이에 따라서, 본 발명의 실시예에서는, ABF 이미지에서 원자 위치 정보를 추출할 때에는 HAADF 이미지에서 추출한 원자들의 위치 정보를 이용하여 ABF 이미지에서의 원자 위치 정보를 대략적으로 인식시킨 뒤에, 각 원자들의 인근 영역에서 다시 세그멘테이션하여, ABF 이미지에서의 정확한 원자 위치 정보를 추출한다.
- [0066] 한편, 촬영된 이미지의 가장자리 부분과 같은 부분에는 많은 노이즈 혹은 낮은 밝기 대비로 인해 원자 정보가 누락되는 영역이 생길 수 있으며, 이러한 영역은 사용자가 선택하여 별도의 이미지 처리 과정을 거쳐 원자 위치 정보를 추출할 수 있다.

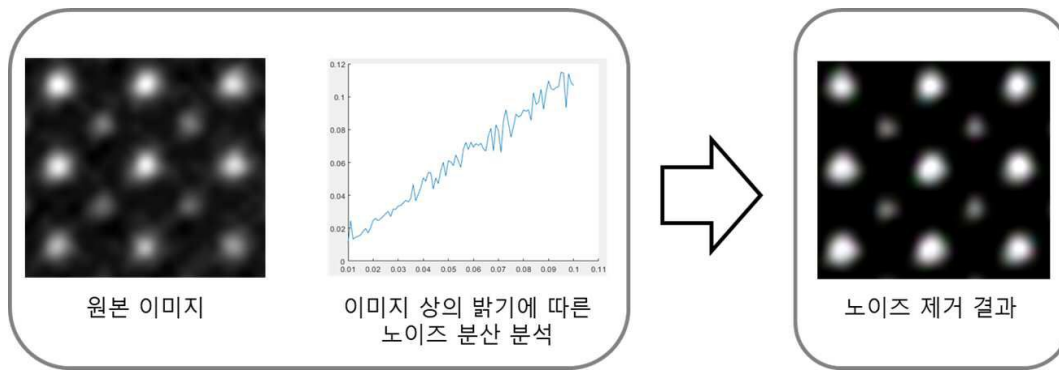
- [0067] 도 4에 도시된 것과 같이, 원자 정보가 누락된 영역으로 선택된 영역에 대해, 이미지 내의 픽셀 밝기의 최소, 최대값의 비율을 이용해 고정된 비율로 이미지를 낮은 밝기와 높은 밝기로 당겨줌으로써 특정 밝기 영역에 영상 픽셀의 밝기 값이 집중되어 있는 것을 퍼트리려 누락된 영역의 가시도를 좋게 하는 히스토그램 스트레칭(histogram stretching)과 모폴로지 연산을 통해 이미지를 강화한 후, 전술한 원자 좌표 정보를 추출하는 단계를 다시 수행하는 방법을 통해 원자 정보가 누락되는 것을 막을 수 있다.
- [0069] 구조 정보 계산 단계
- [0070] 구조 정보 계산 단계에서는 추출된 원자 좌표 정보를 이용하여, 유용한 구조 정보를 계산하는 단계이다.
- [0071] 전술한 바와 같이, 결정성을 가지는 재료는 원자들이 규칙적으로 배열되어 있다. 이러한 규칙성을 가지는 최소 단위를 단위 격자라고 하며, 단위 격자에 대한 분석을 통해 전체 구조에 대한 이해가 가능하다. 또한, 물질의 종류에 따라 단위 격자의 형태가 달라질 수 있으며, 주사투과전자현미경 이미지를 촬영하는 방향에 따라 이미지 상에서 나타나는 단위 격자가 달라질 수 있기 때문에, 구조 정보 계산 방법이 다르게 적용되어야 한다.
- [0072] 본 단계에서는, 사전에 입력된 구조 정보를 바탕으로, 전 단계에서 추출된 원자 좌표 정보와 원자 분류 정보를 단위 격자별로 다시 분류한다. 각 단위 격자에서는 해당 구조에 부합하는 계산식을 적용하여 다양한 구조 정보를 계산한다. 예를 들어  $ABO_3$  페로브스카이트 구조 [100] 방향 주사투과전자현미경 이미지에서는, 단위 격자의 길이를 계산하여, 재료에 가해진 변형(strain)을 분석할 수 있다. 또한, 단위 격자의 골격을 이루는 A 양이온들의 중심으로부터 B 양이온 및 O 음이온이 이탈한 정도를 변위 벡터로서 정량적으로 계산해낼 수 있으며, 이를 바탕으로 분극 벡터를 계산하여 재료의 강유전성을 평가할 수도 있다. 이외에도, 양이온의 버클링 각(buckling angle), O-B-O 틸트 각(tilt angle) 등 다양한 물질에 관한 정보를 계산해낼 수 있다.
- [0073] 도 6a는 본 발명의 실시예에 따른 원자 구조 해석이 이루어지는 분석 프로그램 GUI를 예시적으로 나타낸 것이다. 도 6a의 우측에 나타난 GUI에 설정되어 있는 파일 열기(File Open) 버튼을 통하여 주사투과전자현미경 이미지를 입력할 수 있으며, 분석할 물질의 단위 격자의 간격 정보, 이온의 유효 핵전하 등의 구조 정보를 입력할 수 있다.
- [0074] 관측된 이미지와 구조 정보를 입력하면, 분석 프로그램은 도 1의 흐름을 따라 노이즈 제거와 원자 위치 정보 및 분류 정보를 추출하고, GUI의 우측에 그 결과가 출력된다. 자동으로 세그멘테이션된 결과를 확인한 뒤, 프로그램의 사용자는 GUI의 클릭 혹은 드래그 버튼을 이용하여, 세그멘테이션이 누락된 곳을 전술한 방법을 통해 수정할 수 있다. 이를 통해 원자 위치 정보 및 분류 정보의 추출이 완료되면, 구조 정보 계산을 진행한다.
- [0075] 도 6b는 본 발명의 실시예에 따른 원자 구조 해석이 이루어지는 분석 프로그램을 사용한 분석 결과의 출력물을 예시적으로 나타낸 것이다.
- [0076] 도 6b에 나타난 것과 같이, 분석 결과는 그래프로 출력되어 사용자가 분석 결과를 직관적으로 확인할 수 있도록 되어 있으며, 상세 분석 데이터는 텍스트 혹은 엑셀과 같은 형태로 저장되어 별도로 확인할 수 있다.
- [0077] 본 발명에 따른 방법은 실험적으로 얻어진 이미지의 입력부터 사용자가 원하는 모든 정보를 출력하는 모든 작업 흐름을 포함하는 프로그램으로 구현될 수 있다. 이 프로그램에는 2-D 원자 위치의 고정밀 좌표 파일, 원자 유형 분류, 구조적인 뒤틀림의 히트맵과 이러한 뒤틀림에 대한 정량 데이터가 있는 파일까지 포함될 수 있으며, 이 프로그램 외에 별도로 소프트웨어를 구매하지 않아도 된다. 본 발명에 따른 방법을 구현하는 프로그램은 클라우드 서비스로 제공될 수도 있다.

## 도면

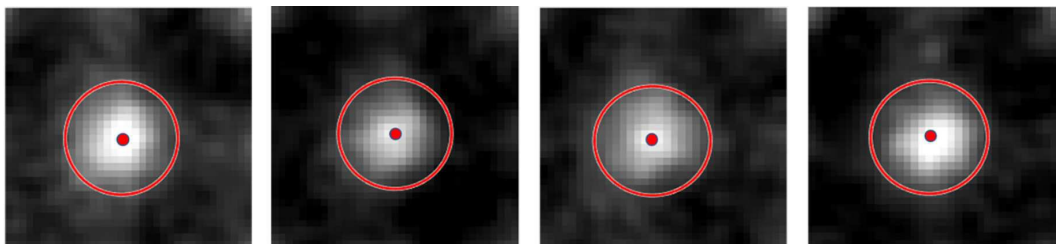
### 도면1



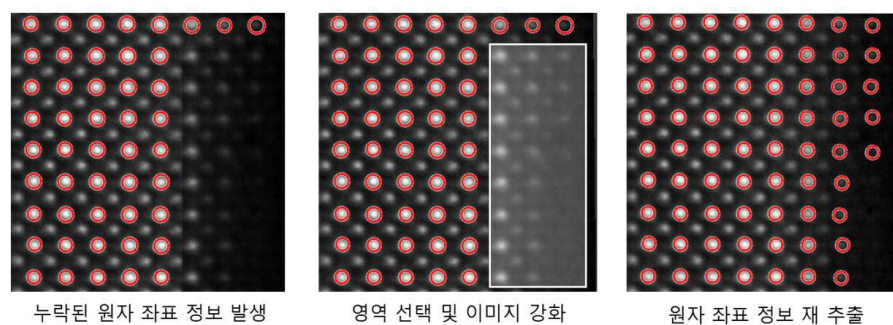
### 도면2



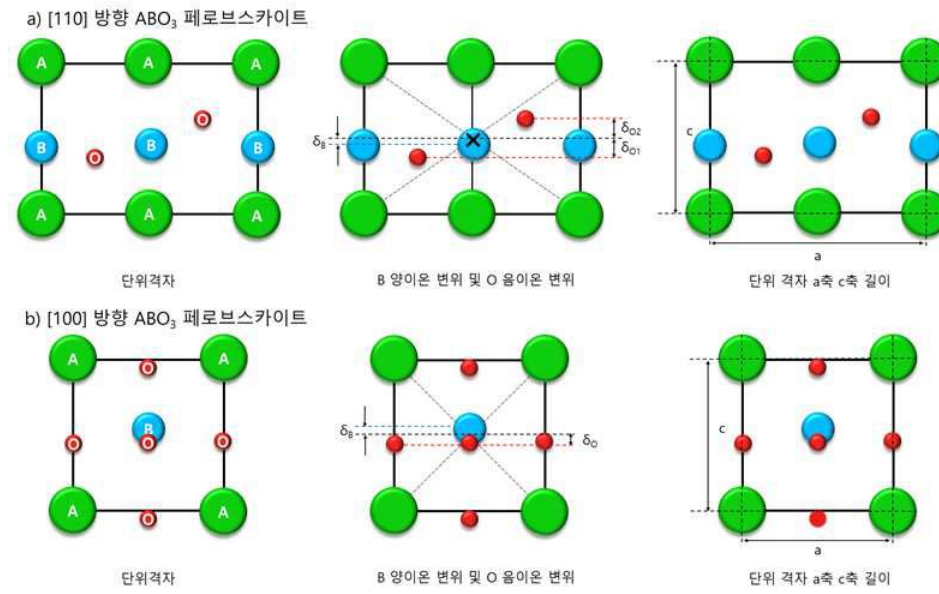
### 도면3



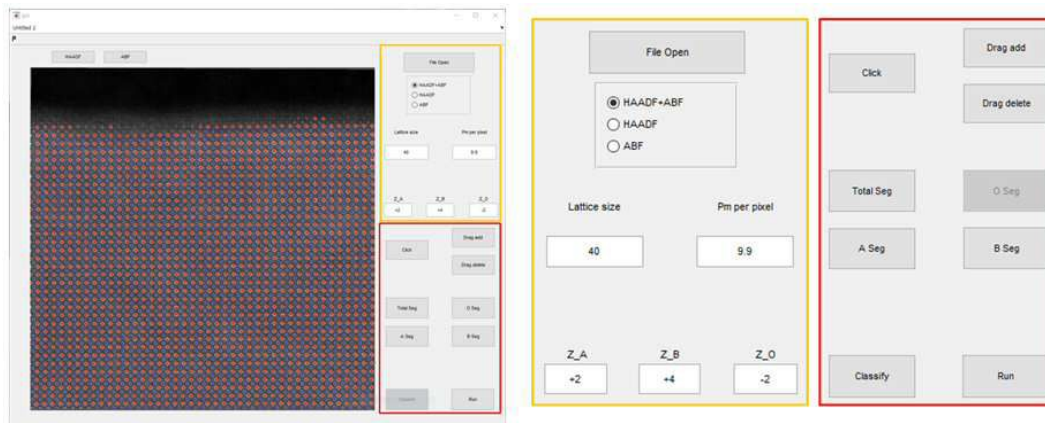
### 도면4



도면5



도면6a



도면6b

