

APRIMORAMENTO DE ALGORITMOS DE IDENTIFICAÇÃO AUTOMÁTICA DE POUCAS CAMADAS ATÔMICAS ATRAVÉS DO CÁLCULO DA COR ESPERADA EM CONDIÇÕES DE IMAGENS CONHECIDAS

Palavras-Chave: materiais 2D, visão computacional, monocamada

Autores/as:

MATHEUS BELISARIO DE ABREU [IFGW]

Prof. Dr. PIERRE-LOUIS DE ASSIS (orientador) [IFGW]

INTRODUÇÃO:

Este trabalho tem como objetivo apresentar um método matemático computacional clássico voltado para visão computacional capaz de prever a cor de materiais 2D, em geral grafeno ou dicalcogeneto de metal de transição, e a partir disso, ser capaz de identificar tais materiais em uma amostra posta sobre um substrato conhecido, de gel ou silício, visualizada através de uma câmera conectada a uma objetiva. A máxima deste projeto está em aprimorar os métodos clássicos de visão computacional ao ponto de obtermos a mesma eficiência de quando comparados a modelos de identificação por aprendizado de máquina, porém com menor custo de processamento de dados, agilizando os processos de fabricação de estruturas constituídas de materiais bidimensionais, a exemplo, fontes de fótons únicos.

METODOLOGIA:

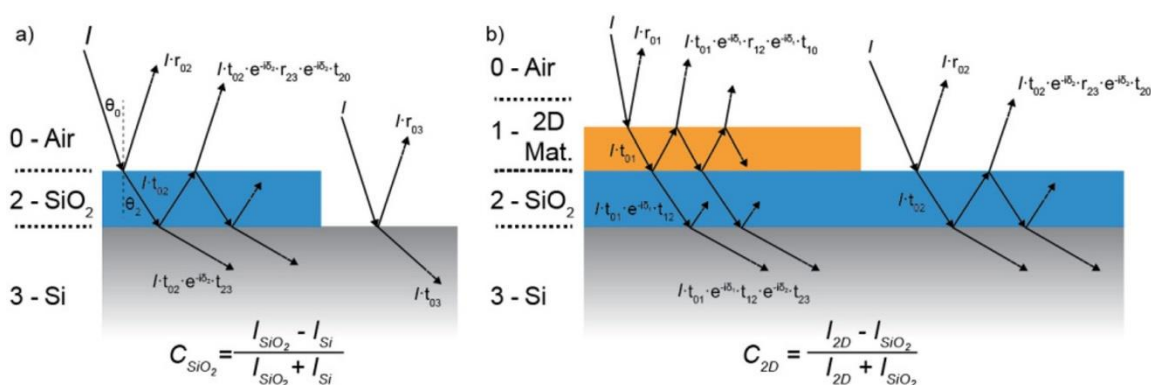


Figura 1: a) Desenho esquemático de um sistema de três camadas: Ar/SiO₂/Si. b) Desenho esquemático de um sistema de quatro camadas: Ar/Material 2D/SiO₂/Si. (Fonte: <https://doi.org/10.1002/adom.201900239>)

Como primeira etapa na proposta de criação de um algoritmo para reconhecimento de materiais bidimensionais, focamos em um estudo teórico aprofundado sobre interferência eletromagnética

envolvendo principalmente os princípios de interferência em filmes finos como também cavidades de Fabry-Perot. Em sequência, utilizamos das características físicas conhecidas de cada material (como índice de refração e espessura de monocamada) para calcular teoricamente o espectro da intensidade de luz refletida pelo mesmo após ser iluminado por um iluminante também de espectro conhecido. O esquema dos feixes de luz sobre o material pode ser observado na figura 1.



Figura 2: exemplo de amostra fotografada em nosso laboratório. Iluminante MCWHL P2 e câmera CS135CU, ambos Thorlabs.

Como segunda etapa do projeto, após o cálculo da reflectância dos materiais da amostra (um exemplo de uma amostra está apresentado na figura 2), podemos simular o que seria a cor esperada para o material através das equações:

$$X = k \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda) I(\lambda) \bar{x}(\lambda) d\lambda; Y = k \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda) I(\lambda) \bar{y}(\lambda) d\lambda; Z = k \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda) I(\lambda) \bar{z}(\lambda) d\lambda;$$

onde $R(\lambda)$ é a reflectância do material, $I(\lambda)$ é a distribuição espectral do iluminante, $\bar{x}(\lambda)$, $\bar{y}(\lambda)$ e $\bar{z}(\lambda)$ são as funções de correspondência de cores do observador ou da câmera, $k = 100 / \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I(\lambda) \bar{x}(\lambda) d\lambda$ é a constante de normalização e X, Y e Z são os valores das coordenadas da cor no espaço de cores CIE XYZ que depois é convertido para o espaço de cores RGB. Assim realizados os cálculos, somos capazes de criar um mapa de cores esperadas para cada material em função do seu número de camadas, semelhante ao obtido na figura 3.

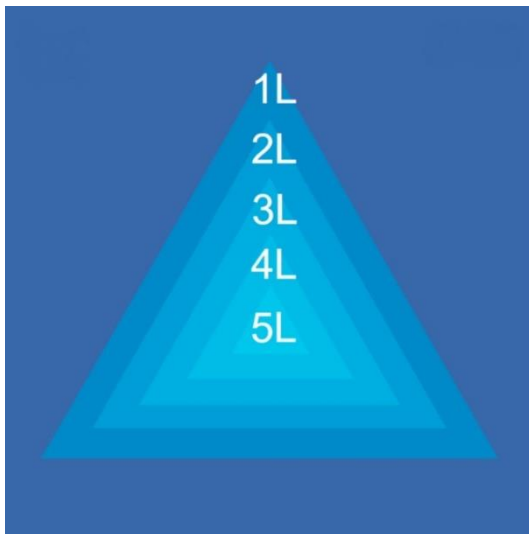


Figura 3: mapa de cores esperadas para MoS₂ de 1-5 camadas em substrato de SiO₂/Si com iluminante D65 e CIE standard observer. (Fonte: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2019.02.003>)

Como terceiro e último passo, a partir das cores teóricas calculadas e as imagens tiradas em laboratório, usamos um algoritmo clássico de visão computacional para selecionar as regiões com as cores próximas às teóricas e, a partir disso, mapear a localização dos flocos tais como suas características como bordas, centroide, área e quantidade de camadas, sendo capaz de catalogar toda a amostra.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Como durante boa parte da vigência deste projeto nosso laboratório não estava completo, não tínhamos ainda o iluminante nem a câmera e seus respectivos espectros para podermos fazer o cálculo

das cores esperadas, portanto gastamos energia tentando aprimorar técnicas de visão computacional para corrigir iluminação de background de imagem e tentar localizar monocamadas de materiais 2D. O resultado deste trabalho pode ser visto na figura 4.

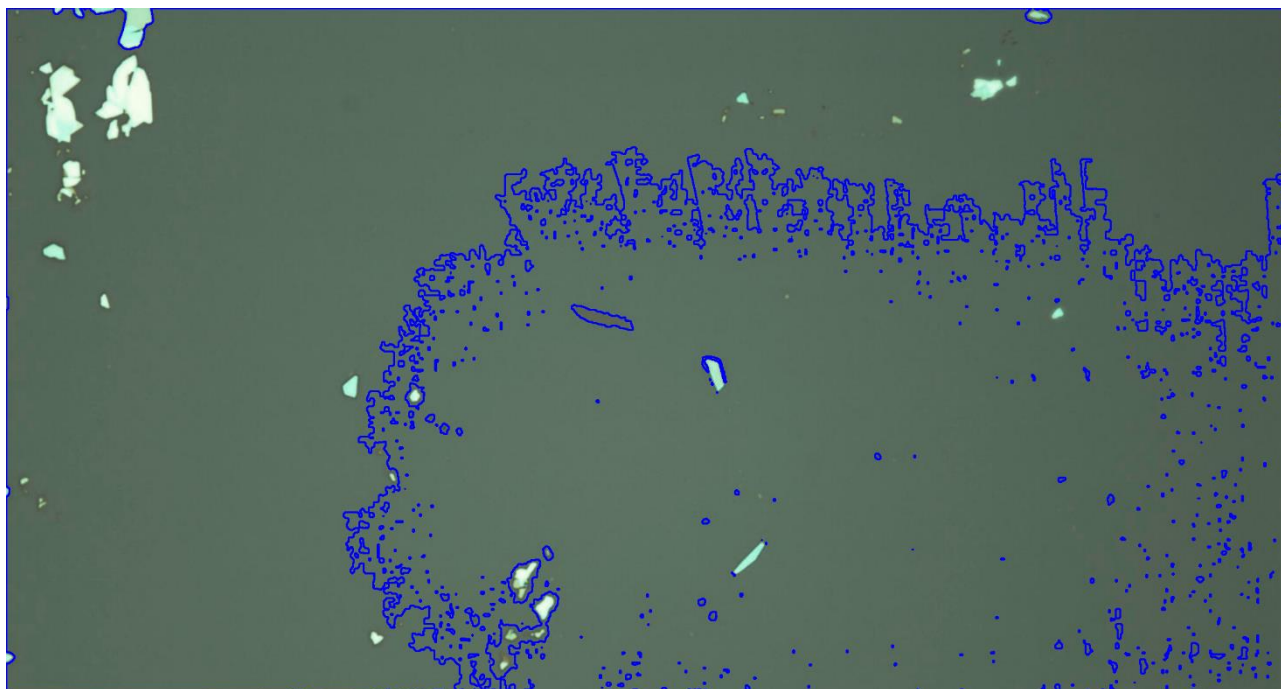


Figura 4: detecção de monocamada de grafeno sobre amostra de SiO₂/Si localizado em contorno fechado no centro da imagem. Contornos extras representam detecção de ruído na imagem. A fotografia foi extraída do banco de dados público do pesquisador Satoru Masubuchi. (Fonte: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03723-w>).

Como pode-se observar na figura 4, a região de monocamada destacada por um caminho fechado ao centro da imagem demonstra sucesso na identificação do objeto em questão, todavia com o custo de identificar com isso muitos dos ruídos presentes ao fundo, não apresentando um resultado limpo. Resultado este que é altamente dependente dos parâmetros particulares das funções utilizadas no código.

Com a recente chegada dos equipamentos ao laboratório, conseguimos produzir imagens como aquela da figura 2 e pudemos iniciar o trabalho de dedução das cores esperadas para o grafeno, MoS₂ e WS₂ variando suas

Nº camadas	Grafeno	MoS ₂	WS ₂
1	(129, 111, 182)	(128, 111, 182)	(129, 111, 182)
2	(128, 112, 181)	(127, 111, 182)	(128, 111, 181)
3	(127, 112, 180)	(130, 110, 184)	(128, 111, 183)
4	(126, 113, 179)	(130, 110, 188)	(128, 111, 186)
5	(125, 114, 178)	(131, 110, 192)	(128, 111, 193)

Tabela 1: dados das cores esperadas em coordenadas RGB para grafeno, MoS₂ e WS₂ variando sua espessura em função do número de camadas de 1-5 com iluminante D65 e observador CIE XYZ.

espessuras de 1 a 5 camadas sobre um substrato de SiO₂/Si. O resultado pode ser mais bem compreendido pelos valores da tabela 1.

Pelos dados da tabela 1 podemos concluir que as cores são muito próximas independentemente do número de camadas ou material analisado, tornando a distinção das configurações muito mais difícil do que a esperada quando olhamos para a figura 3, pois qualquer ruído da imagem seria suficiente para gerar falsas conclusões sobre qual material está sendo analisado e sobre seu número de camadas.

Para facilitar com uma análise visual, a figura 5 mostra a cor prevista para substrato de SiO₂/Si de 560 nm. A cor, como podemos identificar, é muito próxima às cores das monocamadas, o que torna difícil a identificação dos materiais na amostra. Por outro lado, podemos notar que a cor prevista para o substrato é muito próxima ao real, apresentada na figura 2 apesar dos iluminantes e observadores não serem idênticos.

Além disso, cabe ressaltar que os índices de refração complexos para os materiais TMDs (*Transition Metal Dichalcogenide*) usados para os cálculos das cores são de fontes recentes e não tão bem determinados quanto os de dielétricos convencionais.

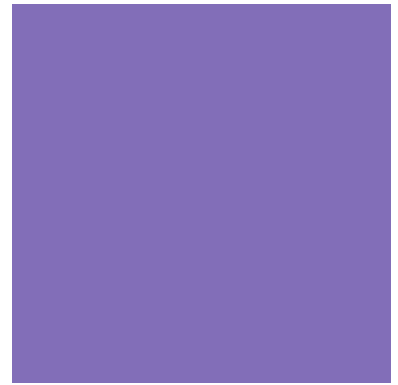


Figura 5: cor prevista para substrato de SiO₂/Si com SiO₂ medindo 560 nm de espessura. O código RGB da cor é (130, 110, 184) para iluminante D65 com observador CIE XYZ.

CONCLUSÕES:

Para concluir, se lembrarmos que o principal objetivo é, a partir do conhecimento prévio disposto sobre os materiais utilizados, sermos capazes de calcular as cores teóricas da refletividade de cada material em função de seu número de camadas, usando isso ao nosso favor para quando observarmos uma amostra desconhecida podermos identificar os materiais ali presentes e suas respectivas dimensões, o objetivo final ainda não foi atingido, todavia este período foi de grande aprendizado e experiência tanto para o bolsista como o orientador, visto que é uma área de recente atuação para ambos.

BIBLIOGRAFIA

- HECHT, Eugene. **Optics**. 5a edição, Pearson, 2017, pp. 398-452.
- HSU, Chunwei; et al. **Thickness-Dependent Refractive Index of 1L, 2L, and 3L MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂**. *Advanced Science News*, 2019.
- LEI, Jiayu; et al. **A facile method for precise layer number identification of two-dimensional materials through optical images**. Elsevier, 2019.
- RODDARO, Stefano; et al. **The Optical Visibility of Graphene: Interference Colors of Ultrathin Graphite on SiO₂**. American Chemical Society, 2007.
- ZHANG, Hui; et al. **Measuring the refractive index of highly crystalline monolayer MoS₂ with high confidence**. *Scientific Reports*, 2015.
- BLAKE, Peter; et al. **Making graphene visible**. *Applied Physics Letters*, 2007.
- MASUBUCHI, Satoru; et al. **Autonomous robotic searching and assembly of two-dimensional crystals to build van der Waals superlattices**. *Nature*, 2018.