

УДК 621.315.592

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДИКИ SCALE-SPACE К ИССЛЕДОВАНИЮ САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ СТРУКТУР

© 2019 г. А. В. Алпатов¹, Н. В. Рыбина¹, *

¹Рязанский государственный радиотехнический университет,
390005 Рязань, Россия

*E-mail: pgnv@mail.ru

Поступила в редакцию 15.05.2018 г.

После доработки 15.06.2018 г.

Принята к публикации 15.06.2018 г.

Целью работы является объединение методики scale-space и метода двумерного флуктуационного анализа с исключенным трендом для исследования корреляционных свойств поверхности самоорганизующихся структур. Приведено описание предлагаемой методики исследования корреляционных свойств поверхности. Продемонстрирована работа методики scale-space на модельных поверхностях. Представлены результаты исследования пленок пористого кремния с помощью разработанной методики.

Ключевые слова: Scale-space, метод двумерного флуктуационного анализа с исключенным трендом, самоорганизация, корреляционные свойства, поверхность.

DOI: 10.1134/S0207352819050032

ВВЕДЕНИЕ

Самоорганизующиеся структуры в настоящее время представляют значительный интерес в микро- и нанoeлектронике. Для получения знаний о процессах самоорганизации при структурообразовании твердых тел необходимы инструментальные методы исследования структуры материалов и аналитические методы оценки корреляционных свойств структуры.

Рельеф поверхности (если он сформирован в процессе роста) является одним из параметров, отражающих структуру материала в объеме. Данные о рельефе можно получить с помощью методов атомно-силовой, сканирующей туннельной, просвечивающей электронной, растровой электронной микроскопии. При выборе инструментального метода исследования важно учитывать масштаб, в пределах которого необходимо получить информацию о структуре.

Для дальнейшей обработки данных о рельефе поверхности применяют аналитические методы. В работах [1–5] было показано, что методы двумерного флуктуационного анализа с исключенным трендом (2D-detrended fluctuation analysis, 2D-DFA) и средней взаимной информации (СВИ) позволяют исследовать процессы самоорганизации в структуре твердотельных материалов.

При исследовании сложных самоорганизующихся структур часто возникает задача их разло-

жения на составляющие, т.е. выделения частотных характеристик. При этом наличие ряда поверхностей одной и той же структуры с различными уровнями детализации может дать больше информации о структуре. Большое количество деталей поверхности соответствует присутствию высокочастотной компоненты в выделенной структуре, меньшее количество деталей (сглаженная поверхность) – низкочастотной компоненте.

Решить эту задачу позволит методика scale-space [6–9]. Цель данной работы заключается в объединении методики scale-space и метода 2D-DFA для исследования корреляционных свойств поверхности самоорганизующихся структур.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДИКИ SCALE-SPACE

Термин “scale-space” (“масштабное пространство”) был введен Э. Виткиным (Witkin A.P.), когда он предложил метод обработки одномерных сигналов сверткой с ядром Гаусса [6].

Свертка гауссиана сигнала $f(x)$ описывается формулой

$$F(x, \sigma) = f(x) * g(x, \sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-u)^2}{2\sigma^2}\right) du, \quad (1)$$

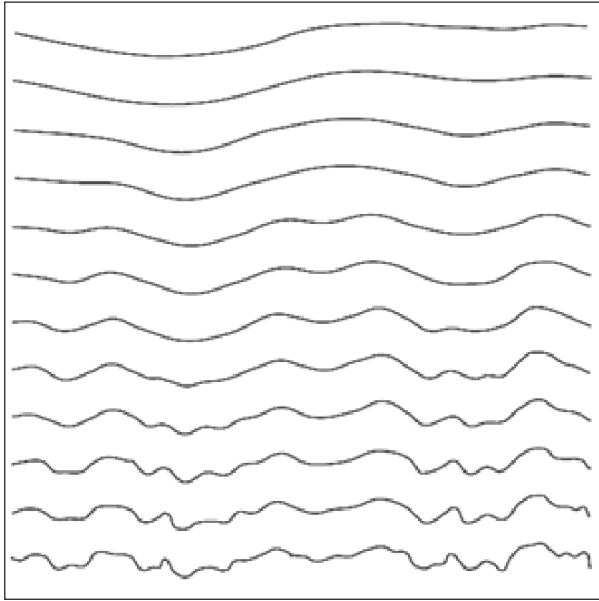


Рис. 1. Последовательность сглаживаний функцией Гаусса формы сигнала, где σ возрастает снизу вверх [10].

где символ “*” означает свертку относительно x , σ – параметр масштаба. Эта функция определяет поверхность на (x, σ) -плоскости, где каждый профиль параметра σ – это сглаженный с помощью гауссиана сигнал $f(x)$. На рис. 1 приведен пример последовательности сглаживаний функцией Гаусса формы сигнала [10].

При любых значениях σ точка экстремума n -ой производной сглаженного сигнала задается с помощью перехода через нулевое значение в $(n + 1)$ -ой производной по формуле

$$\frac{\partial^n F}{\partial x^n} = f * \frac{\partial^n g}{\partial x^n}, \quad (2)$$

где производные гауссиана явно определены. При этом при всех значениях σ должно выполняться условие для частных производных:

$$F_{xx} = 0, \quad F_{xxx} \neq 0. \quad (3)$$

Дальнейшее развитие метода scale-space привело к тому, что была продемонстрирована способность его применения для двумерного случая, в частности, для обработки растровых изображений [7].

В данной работе метод scale-space предлагается использовать для изучения свойств поверхности твердотельных материалов по изображению их рельефа. Данные о рельефе поверхности можно получить с помощью методов зондовой микроскопии.

Предположим, имеются поверхности, где каждой точке с координатами (x, y) поставлена в со-

ответствие ее высота $f(x, y)$. Для любого непрерывно дифференцируемого и интегрируемого отображения $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ существует множество $L: \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, которое будем называть масштабным представлением изображения f , определенным как [6–9]:

$$L(x, y, \sigma) = f(x, y, \sigma) * g(x, y, \sigma) = \int_{(\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2} f(x - \xi, y - \eta) g(\xi, \eta; \sigma) d\xi d\eta, \quad (4)$$

где $g: \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ – ядро свертки Гаусса на расширенной плоскости $g(x, y; \sigma) = \frac{1}{2\pi\sigma} \times \exp(-(x^2 + y^2)/2\sigma)$, $\sigma > 0$.

Результат свертки $L(x, y, \sigma)$ – это масштабное представление поверхности $f(x, y)$ с коэффициентом масштаба σ . Для множества гауссовых ядер с бинарной операцией свертки характерны свойства ассоциативности и коммутативности. Следовательно, каждый элемент масштабного представления $L(x, y, \sigma)$ можно получить как сверткой ядра $g(x, y, \sigma_2 - \sigma_1)$ по отношению к предыдущему преобразованию $L(x, y, \sigma_1)$, так и прямой сверткой $g(x, y, \sigma_2)$ по отношению к функции $f(x, y)$. Это дает свободу выбора при построении фильтров различных масштабов и позволяет контролировать величину масштаба конечного результата в ходе последовательных (комплексных) преобразований [9].

Геометрический смысл свертки поверхности $f(x, y)$ с ядром Гаусса – это сглаживание поверхности с определенным параметром масштаба σ . При этом величина σ связана с результатом операции $L(x, y, \sigma)$ таким образом, что из исходного изображения удаляются все детали, линейные размеры которых не превышают величину $\sqrt{\sigma}$. Другими словами, два локальных экстремума будут взаимно уничтожены (аннигилированы) или один перекроет другой, если расстояние между ними окажется меньше $\sqrt{\sigma}$. Это позволяет, с одной стороны, избавиться от шумов исходного материала или существенно их ослабить, а с другой – оставить элементы рельефа такой линейной размерности, которая необходима на текущем этапе обработки [9].

МЕТОДИКА SCALE-SPACE DFA

Все реальные твердотельные структуры (поверхности) можно считать сложными, поскольку всегда существует вклад шумовых составляющих и различных дефектов структуры. Ранее в ряде работ [1–5] исследование корреляционных свойств таких поверхностей с помощью метода 2D-DFA

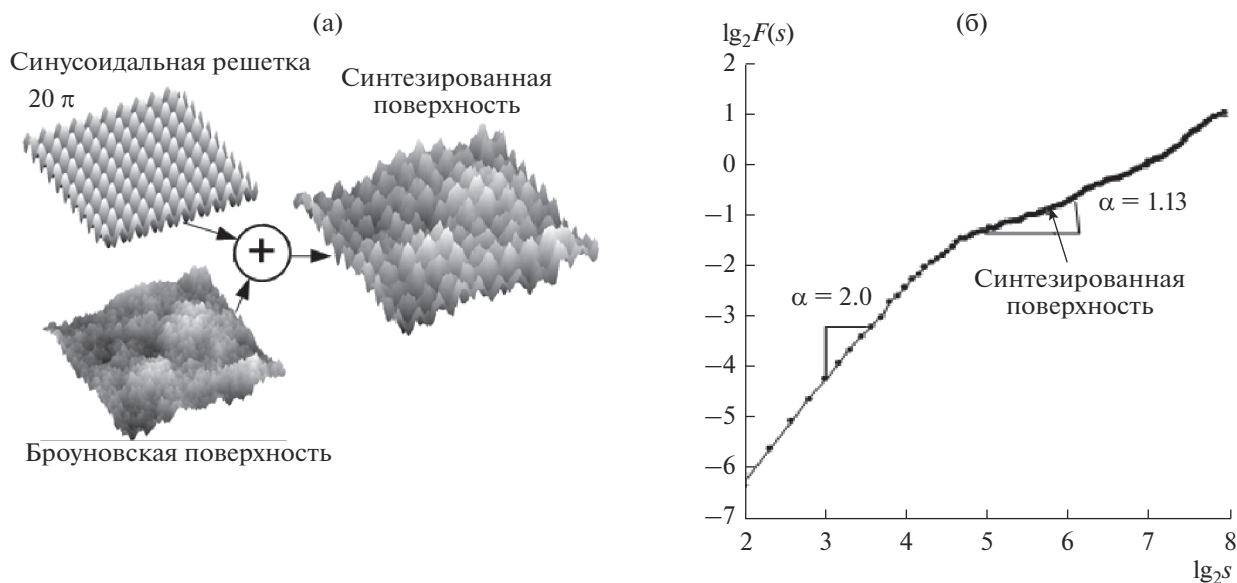


Рис. 2. Получение флуктуационных функций методом 2D-DFA для сложных поверхностей: а – синтезированная поверхность, полученная при наложении синусоидальной решетки с периодом $T = 26 \times 26$ пикселей и броуновской поверхности со скейлинговым показателем $\alpha = 1, 3$; б – флуктуационная функция синтезированной поверхности.

проводилось следующим образом. Брали трехмерные данные поверхности, отражающие рельеф. Сложные модельные поверхности создавались прямым путем синтеза, т.е. наложением различных простых составляющих (рис. 2а). Данные о рельефе реальных структур получались с помощью методов микроскопии атомно-силовой и растровой электронной микроскопии. Далее изображения поверхностей обрабатывались с помощью метода 2D-DFA, в результате чего получались зависимости флуктуационной функции от масштаба (рис. 2б), по которым определялись корреляционные параметры. Однако бывают случаи, когда нужно исследовать сложную структуру, о которой ничего неизвестно. Например, наличие большого количества составляющих (гармоник), что приведет к тому, что на зависимости флуктуационной функции от масштаба будет слишком много перегибов, и в итоге они будут сливаться. В этом случае сложную структуру нужно разложить на более простые составляющие. С этой целью можно использовать метод scale-space.

Методика исследования корреляционных свойств поверхности с помощью scale-space DFA заключается в следующем:

1. Получают данные о рельефе поверхности.
2. Изображение поверхности раскладывается по масштабам в базисе функции Лапласиана. Под масштабом здесь понимается степень сглаживания поверхности. Визуально будет наблюдаться тот же эффект, что и для одномерного случая

(рис. 1). Каждое последующее изображение от исходного представляет собой результат дифференцирования по второй производной. Самое последнее изображение – наиболее сглаженное и визуально должно сильно отличаться от исходного. Однако оно, как правило, содержит в себе определенные особенности, которые нельзя увидеть на изображениях, близких к исходному. Например, данным способом можно избавляться от различных шумов. Таким образом, в одной поверхности может содержаться множество подповерхностей, свойства которых можно сопоставлять с простыми моделями. Другими словами, появляется третье измерение.

3. Вычисляются флуктуационные функции на каждом масштабе. Для примера на рис. 3 показан результат вычисления флуктуационной функции для синтезированной модельной поверхности (“синусоидальная решетка” + “броуновский шум”).

Рассмотрим работоспособность методики scale-space DFA на модельных поверхностях. Сначала синтезировали две отдельные поверхности: первая – “синусоидальная” с 4-мя периодами и условной высотой 50, вторая – с 16-ю периодами и условной высотой 1. Как видно из рис. 4а, 4б, на зависимостях флуктуационной функции от масштаба для этих поверхностей наблюдается перегиб, по которому с высокой точностью можно определить значение периодов синусоиды.

Другая ситуация возникает, если “синусоидальные” поверхности наложить друг на друга, и в результате получить модельную поверхность

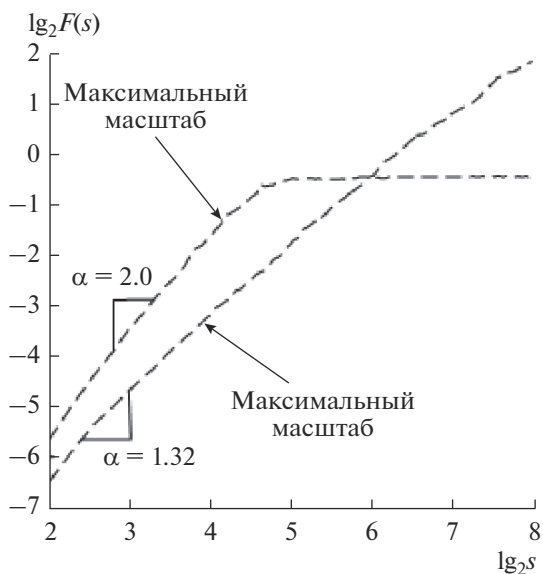


Рис. 3. Флуктуационные функции для разных масштабов синтезированной поверхности.

“синусоидальная с двумя гармониками”. На зависимости флуктуационной функции от масштаба для такой поверхности уже невозможно с высокой точностью определить оба значения периода синусоид (рис. 4в). Перегиб на большом масштабе (для гармоники четырех периодов) еще можно достаточно точно вычислить. Значение же меньшего периода определить сложно, поскольку перегиб на этом масштабе практически полностью сливается с прямолинейным участком графика. В такой ситуации как раз будет полезно использование методики scale-space DFA. На рис. 4г показана зависимость флуктуационных функций от масштаба для модельной поверхности “синусоидальная с двумя гармониками” при разном размере сглаживающего окна: кривая 1 – минимальное сглаживание (близок к исходному), кривая 2 – среднее сглаживание; кривая 3 – максимальное сглаживание. Из графика видно, что максимальное сглаживание позволяет более четко увидеть перегиб на маленьких масштабах.

Таким образом, методика scale-space DFA позволяет оценивать структурную сложность поверхностей.

Можно также отслеживать, как меняется значение скейлингового показателя α при переходе от минимального к максимальному масштабу (рис. 5). На рис. 5 наименьший масштаб соответствует наибольшей степени сглаживания. Номер масштаба можно перевести в пространственный и получить более информативный инструмент для оценки эволюции поверхности.

Таким образом, появляется псевдинамика изменения структуры. Поверхность предстает не как нечто застывшее, а развернутая в пространстве структура, изменяющая свои свойства.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В качестве экспериментальных образцов были взяты пленки пористого кремния (por-Si), представленные в работе [11]. Подложками для формирования пленок por-Si служили монокристаллические кремниевые пластины *n*-типа с удельным сопротивлением 0.5 Ом + см и ориентацией поверхности (111). Для всех образцов проводился процесс анодного электрохимического травления в течение первого часа при плотности тока 24 мА/см². Для изготовления образца № 1 использовался электролит стандартного состава (HF + C₂H₅OH, соотношение 1 : 1). Пленки por-Si образцов № 2 и № 3 формировались в электролите, состоящем из HF, C₂H₅OH и водного раствора KMnO₄ (концентрация 0.04 М) в соотношении 0.5 : 0.5 : 1.0. Образцы № 1 и № 2 были изготовлены при освещении поверхности подложки в ходе электрохимического травления, образец № 3 – без освещения (табл. 1).

Рельеф пленок por-Si был исследован с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ). Для дальнейшей обработки с помощью scale-space DFA были использованы АСМ-сканы размером 100 × 100 мкм, с разрешением 1024 × 1024 точек (рис. 6).

На рис. 6 также представлены профили масштабов, по которым можно оценить, как эволюционирует поверхность в процессе сглаживания.

Таблица 1. Технологические параметры получения пленок por-Si [11]

№ образца	Освещение подложки	Состав электролита
1	Да	HF + C ₂ H ₅ OH
2	Да	HF + C ₂ H ₅ OH + KMnO ₄
3	Нет	HF + C ₂ H ₅ OH + KMnO ₄

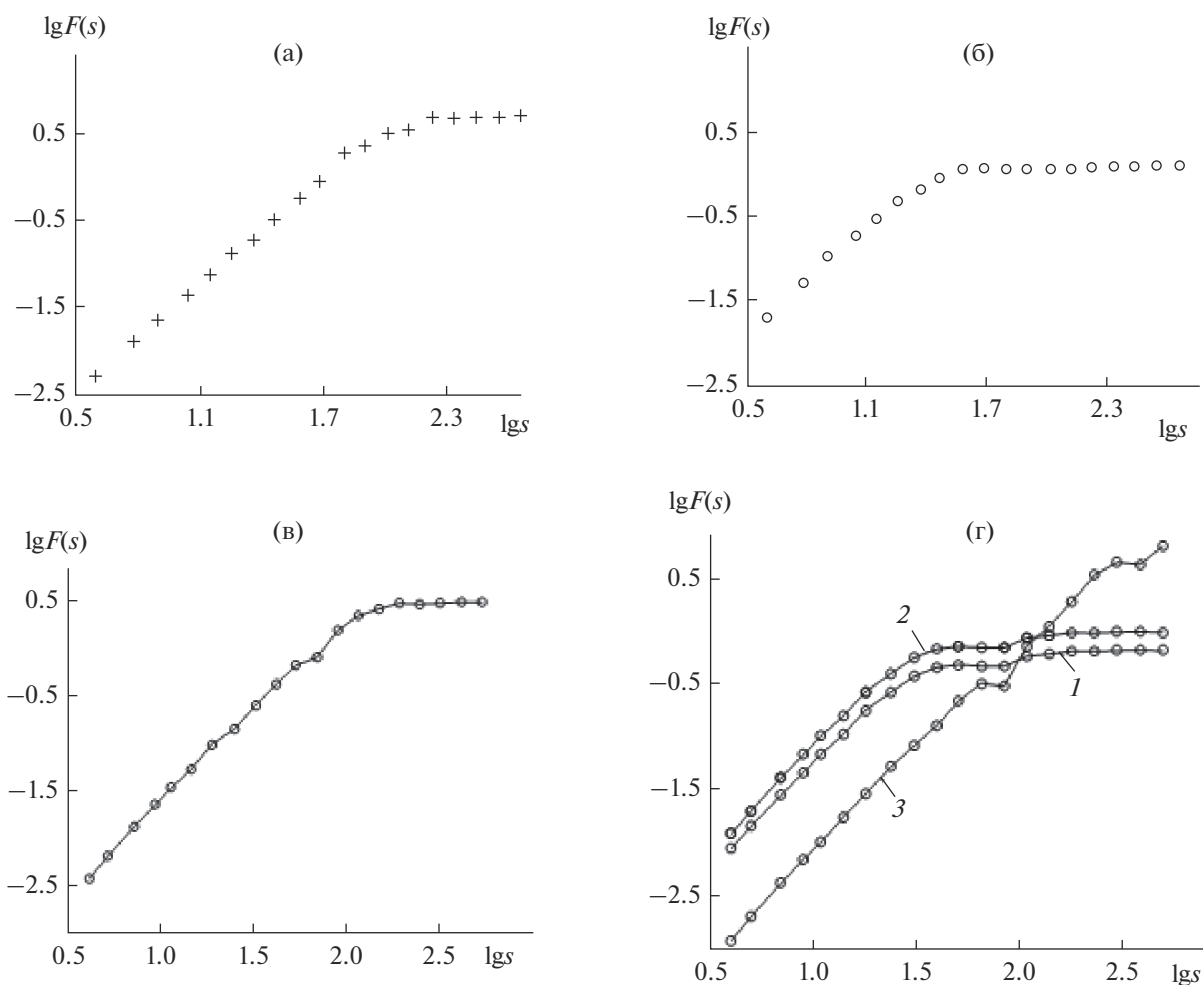


Рис. 4. Зависимость флуктуационной функции от масштаба для модельных поверхностей: а – “синусоидальная”, четыре периода, условная высота 50; б – “синусоидальная”, 16 периодов, условная высота 1; в – “синусоидальная с двумя гармониками”; г – “синусоидальная с двумя гармониками” при разном размере сглаживающего окна (1 – минимальное сглаживание (близок к исходному), 2 – среднее сглаживание, 3 – максимальное сглаживание).

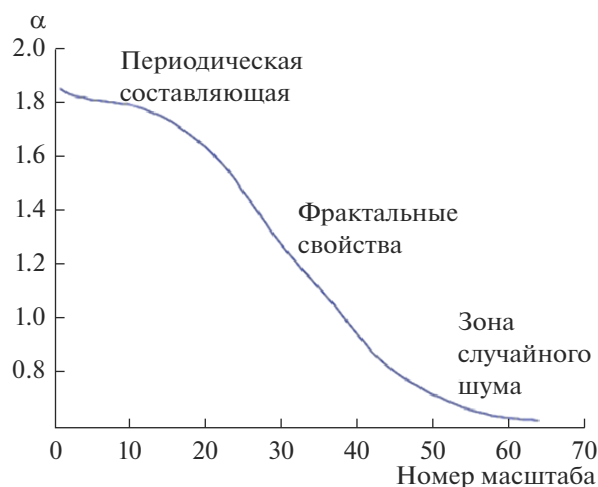


Рис. 5. Динамика изменения скейлингового показателя в зависимости от степени сглаживания поверхности.

Видно, что при увеличении степени сглаживания низкочастотная составляющая пропадает, а остаются определенные критические точки в высокочастотной области. Заметна эволюция локальных экстремумов.

В качестве примера на рис. 7 представлены флуктуационные функции для некоторых масштабов для образца № 1. Для каждого случая вычислено значение скейлингового показателя a . Как можно заметить из рис. 7, при низкой степени сглаживания (масштабы 50, 64) на зависимости флуктуационной функции перегиб (кроссовер) наблюдается только в высокочастотной области. При масштабе сглаживания, равном 32, начинает проявляться перегиб на средних частотах. И, наконец, при высокой степени сглаживания четко виден перегиб в низкочастотной области.

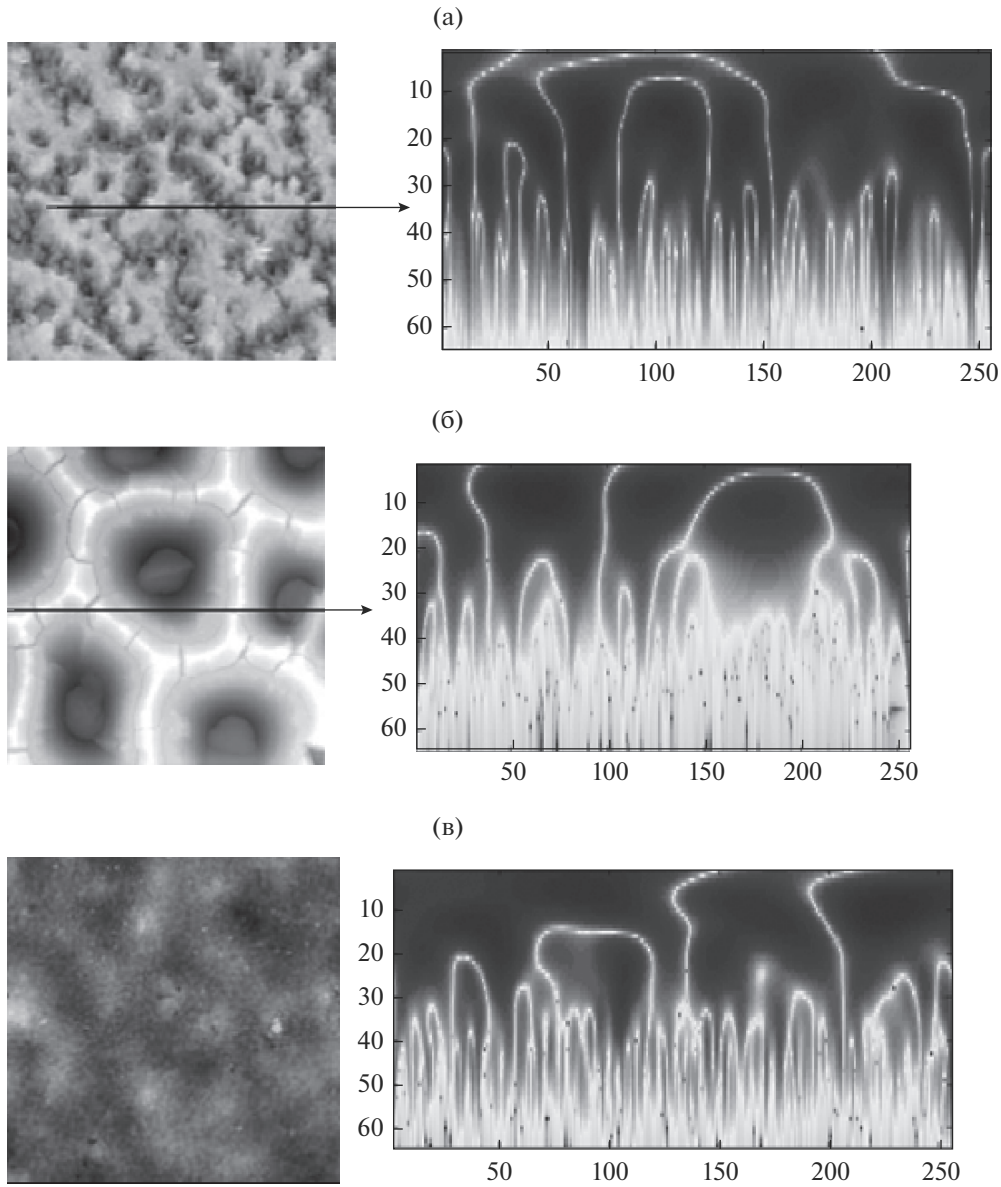


Рис. 6. Изображения поверхности и профили масштабов экспериментальных образцов: а – № 1; б – № 2; в – № 3.

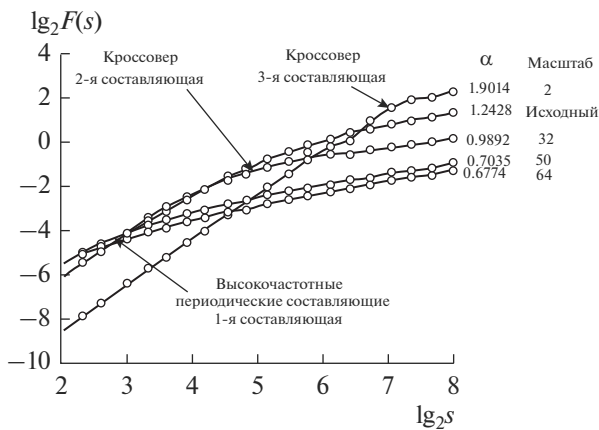


Рис. 7. Флуктуационные функции для некоторых масштабов для образца № 1.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены теоретические основы методики scale-space DFA для исследования корреляционных свойств поверхности самоорганизующихся структур. Показано, что методика scale-space DFA позволяет оценивать структурную сложность поверхностей и решать обратную задачу синтеза флуктуационных кривых. Также можно оценивать динамику скейлингового показателя в зависимости от масштаба. Апробация методики scale-space DFA проведена на пленках пористого кремния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алтатов А.В., Вихров С.П., Гришанкина Н.В., Мурсалов С.М. // Вестник Рязанского гос. радиотехнического университета. 2012. № 4. Часть 2. С. 12.

2. *Alpatov A.V., Vikhrov S.P., Grishankina N.V.* // Semiconductors. 2013. V. 47. № 3. P. 365.
3. *Alpatov A.V., Vikhrov S.P., Rybina N.V.* // Semiconductors. 2015. V. 49. № 4. P. 456.
4. *Alpatov A.V., Vikhrov S.P., Vishnyakov N.V. et al.* // Semiconductors. 2016. V. 50. № 1. P. 22.
5. *Alpatov A.V., Vikhrov S.P., Kazanskii A.G. et al.* // Semiconductors. 2016. V. 50. № 5. P. 590.
6. *Witkin A.P.* // Proc. 8th Int. Joint Conf. Art. Intell. 1983. P. 1019.
7. *Koenderink J.J.* // Biol. Cyb. 1984. V. 50. P. 363.
8. *Lindeberg T.* // J. Mathem. Imag. Vision. 1993. V. 3(4). P. 349.
9. *Рыбас О.В., Гильманова Г.З.* Применение теории масштабных пространств (Scale-Space) для выделения и анализа структур рельефа. http://itig.as.khb.ru/pp1/gis/ss_20160822_ru/book_ch2_ru.html.
10. *Lindeberg T.* // J. Appl. Statist.: Statist. Images. 1991. V. 21. № 2. P. 225.
11. *Вихров С.П., Воробьев Ю.В., Гудзев В.В. и др.* // Сборник трудов IX Межд. Конф. “Аморфные и микрокристаллические полупроводники”. 2014. С. 132.

Application of the Scale-Space Theory to Studying the Self-Organization Structures

A. V. Alpatov and N. V. Rybina

The aim of this work is combination of the scale-space theory and detrended fluctuation analysis for self-organization structures surface correlation properties investigation. The description of suggested method for surface correlation properties investigation is provided. The scale-space theory work on the model surfaces was demonstrated. The porous silicon films research results by developed method was represented.

Keywords: scale-space theory, two-dimensional detrended fluctuation analysis, self-organization, correlation properties, surface.