УДК 539.211

КРИТЕРИИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНОЙ СЛОЖНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ

Н. В. Рыбина, к.ф.-м.н., доцент кафедры МНЭЛ РГРТУ, Рязань, Россия;
orcid.org/0000-0003-0377-5605, e-mail: pgnv@mail.ru
А. В. Алпатов, к.т.н., доцент кафедры МНЭЛ РГРТУ, Рязань, Россия;
orcid.org/0000-0001-9694-6818, e-mail: alpatov-alexey@yandex.ru
Н. Б. Рыбин, к.ф.-м.н., доцент кафедры МНЭЛ РГРТУ, Рязань, Россия;
orcid.org/0000-0003-2000-0158, e-mail: nikolay.rybin@yandex.ru

Представлен алгоритм определения структурной сложности поверхности твердотельных материалов на основе метода двумерного флуктуационного анализа с исключенным трендом и масштабного пространства. ***Целью работы*** *является выработка критериев определения структурной сложности поверхности по значениям тангенса угла наклона зависимости флуктуационной функции от пространственного масштаба и количества на ней точек перегиба. С помощью разработанного алгоритма было исследовано изображение поверхности слоя Si с имплантированными ионами Ag^+, подвергавшегося импульсному лазерному отжигу, и получены корреляционные параметры. Исследованная поверхность имела высокую структурную сложность.*

Ключевые слова: *поверхность, структурная сложность, двумерный флуктуационный анализ, масштабное пространство, корреляционные параметры, Si, шум, гармоника.*

DOI: 10.21667/1995-4565-2020-73-139-146

Введение

В настоящее время постоянно возрастают требования к свойствам твердотельных материалов, используемых в различных областях науки и техники. Это приводит к тому, что активно синтезируются новые многокомпонентные, нанокомпозиционные, нанокристаллические и другие материалы. Зачастую достигнуть нужных свойств позволяет химическая структурная модификация, заключающаяся во введении добавок в известный материал. Поэтому структура таких материалов становится более сложной как на микроуровне (атомы, молекулы, нанокластеры), так и на макроуровне. Для изучения особенностей сложных структур необходимы специальные методы обработки и анализа данных о структуре. Особенности структуры материалов можно изучить по их поверхности. Это объясняется тем, что:

– если поверхность сформирована в процессе роста материала, то она отражает структуру материала в объеме. Под ростом материала здесь подразумевается процесс самоорганизации. Получить определенный рельеф поверхности можно еще, например, с помощью шлифовки, полировки. Но это уже не самоорганизация, и для таких случаев рельеф не отражает структуру в объеме;

– исследования структуры поверхности легче реализовать, чем исследования структуры в объеме.

В профиле поверхности материалов со сложной структурой присутствует большое количество гармонических и шумовых составляющих на масштабах, как правило, от десятков нанометров до сотен микрометров. Визуально (например, просто анализируя изображение поверхности, полученное с помощью атомно-силового микроскопа) в подобных материалах трудно сделать выводы об особенностях структуры. Поэтому разработка методики анализа поверхности актуальна во многих областях науки и техники, в которых имеют дело со сложными структурами. Причем методика должна работать на различных пространственных

масштабах. Такие методики могут применяться для классификации поверхностей и определения области применения исследуемых материалов.

Цель данной работы – выработка критериев определения структурной сложности поверхности твердотельных материалов на нано- и микромасштабе.

Методы анализа поверхности твердотельных материалов со сложной структурой

Методы, позволяющие изучать структуру материалов, можно разделить на две категории:

– физические методы, которые позволяют получить первичную информацию о структуре материалов. В свою очередь, здесь можно выделить методы исследования структуры в объеме и методы исследования рельефа поверхности. К методам исследования структуры в объеме относятся, например, дифракционные и спектроскопические методы [1], в частности спектроскопия инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния, просвечивающая электронная микроскопия. К методам исследования рельефа поверхности относится зондовая микроскопия (растровая электронная микроскопия (РЭМ), атомно-силовая микроскопия и др.), оптическая микроскопия;

– аналитические методы, осуществляющие математическую обработку результатов, полученных с помощью физических методов. Поскольку рельеф поверхности материала отражает его структуру в объеме, то в качестве исходных данных часто используются изображения поверхности, полученные средствами зондовой микроскопии. Рельеф поверхности многокомпонентных, композиционных, неупорядоченных материалов содержит и гармонические, и хаотические составляющие и, как правило, только визуальная оценка изображений поверхности мало информативна. Поэтому аналитические методы исследования зачастую позволяют получить необходимую информацию о структуре сложных материалов.

К основным аналитическим методам оценки особенностей структуры твердых тел относятся: расчет автокорреляционной функции (АКФ), преобразование Фурье, вейвлет-преобразование, расчет шероховатости поверхности.

АКФ и преобразование Фурье хорошо выявляют структуру линейных сигналов, с небольшим количеством гармонических составляющих. Вейвлет-преобразование нашло широкое применение при решении задач фильтрации сигнала, искаженного шумом [2]. Шероховатость поверхности может определяться по расчету различных ее видов [3]. Однако расчет параметров шероховатости производится по среднестатистическим данным о высотах поверхности, поэтому не учитывает пространственный масштаб, на котором проявляются те или иные особенности поверхности.

Стоит также отметить активно развивающееся в последние годы направление – методы распознавания текстуры изображений [4-7] на основе машинного обучения. Как правило, в алгоритм распознавания текстуры изображений закладываются несколько признаков текстур (частотных, статистических, структурных). Это позволяет выявлять тип рельефа исследуемой поверхности.

Наличие недостатков существующих аналитических методов применительно к неупорядоченным материалам стало причиной появления методов, основанных на теории самоорганизации и информации [8-14]. Метод средней взаимной информации (СВИ) позволяет оценивать степень упорядоченности и информационную емкость структуры поверхности. Метод двумерного флуктуационного анализа с исключенным трендом (2D Detrended Fluctuation Analysis, 2D DFA) позволяет выявить тип корреляций в структуре и получить значения корреляционных векторов, соответствующих периодам гармонических составляющих в структуре поверхности материала.

Для случаев, когда в исследуемой структуре присутствует большое количество гармонических составляющих, целесообразно применять методику масштабируемого пространства совместно с методом 2D DFA (scale-space DFA) [14]. С помощью scale-space DFA изображе-

ние сложной структуры можно разложить на более простые составляющие, применяя сглаживающий фильтр. При этом получается несколько зависимостей флуктуационной функции от пространственного масштаба, из которых проще определяются перегибы, соответствующие периодам гармонических составляющих в структуре поверхности.

Критерии определения структурной сложности поверхности твердотельных материалов

Определение структурной сложности поверхности твердотельных материалов основано на методе Scale-Space DFA. Алгоритм определения структурной сложности состоит из следующих шагов.

1. Получение данных о рельефе поверхности материала в виде матрицы высот методами зондовой или оптической микроскопии.

2. Фильтрация матрицы высот сглаживающим фильтром в несколько проходов при различных коэффициентах сглаживания, определяющих масштаб детализации исходной поверхности, в базисе функции Лапласиана. В результате получается несколько подповерхностей с разной степенью детализации. Каждое последующее изображение от исходного представляет собой результат дифференцирования по второй производной.

3. Построение зависимости флуктуационной функции F от пространственного масштаба s для каждой подповерхности методом 2D DFA.

4. Нахождение на зависимости флуктуационной функции точек перегиба, которые определяют стабильные для данного масштаба корреляционные свойства путем связывания позиции точек перегиба по оси масштаба с периодами гармонических составляющих в структуре поверхности.

5. Вычисление тангенса угла наклона флуктуационной функции (скейлингового показателя α) до и после точки перегиба для оценки типа корреляции в заданном диапазоне масштабов. При отсутствии точек перегиба вычисляется только наклон флуктуационной функции во всех диапазонах масштабов.

6. Анализ структурной сложности поверхности по значениям наклонов флуктуационной функции, количеству и позициям точек перегиба.

Определение структурной сложности и типа корреляций в структуре исследуемого материала проводят по критериям, представленным в таблице. Данные критерии были разработаны на основе проведения исследований [8, 9, 12, 15, 16] корреляционных свойств модельных и реальных поверхностей различной степени упорядоченности (самоорганизации).

К типу поверхности «Низкая структурная сложность» относятся подтипы «Шум» и «Гармоника» из тех соображений, что данные структуры нельзя разложить на более простые составляющие.

С помощью представленной методики можно классифицировать исследуемые поверхности по структурной сложности. Преимущество методики в том, что она учитывает пространственный масштаб, на котором существуют корреляции в структуре.

Экспериментальные результаты

Для апробации алгоритма определения структурной сложности использовались изображения поверхности структур, предоставленные авторами работы [17]. Данные структуры представляли собой слои Si, имплантированных ионами Ag+, подвергавшиеся импульсному лазерному отжигу (рисунок 1). Импульсный лазерный отжиг привел к формированию развитого рельефа поверхности. На поверхности присутствовали наночастицы серебра различного размера: мелкие (5-15 нм) и крупные (40-60 нм) [17]. Поэтому с точки зрения структурной сложности подобные материалы представляют интерес для исследования.

Таблица 1 – Критерии определения структурной сложности поверхности твердотельных материалов

Table 1 – Criteria for Determining Surface Structural Complexity of Solid-State Materials

Тип поверхности	Подтип поверхности	Критерий	Примеры поверхностей
Низкая структурная сложность	Шум	Точки перегиба на $F(s)$ отсутствуют; α во всех диапазонах масштабов больше или равен 0,5	Белый шум (модель), поверхность аморфных стеклообразных материалов
	Гармоника	Одна точка перегиба на $F(s)$; α справа от точки перегиба стремится к 2, слева от точки перегиба стремится к 0	Синусоидальная двумерная поверхность с одной гармоникой (модель), атомарная поверхность кристалла с кубической решеткой
Средняя структурная сложность	Несколько гармоник	Несколько точек перегиба на $F(s)$; α от точки перегиба с самым маленьким значением масштаба стремится к 2, справа от точки перегиба с самым большим значением масштаба стремится к 0	Синусоидальная двумерная поверхность с несколькими гармониками (модель), текстурированный Si
	Гармоника с шумом	2-3 точки перегиба на $F(s)$; α слева от точки перегиба с самым маленьким значением масштаба находится в диапазоне 1,25 – 1,75, справа от точки перегиба с самым большим значением масштаба меньше или равен 0,5	Синусоидальная двумерная поверхность с 2-3 гармониками и шумом (модель), массив квантовых точек без покровного слоя
Высокая структурная сложность	-	Более 3 точек перегиба на $F(s)$; α слева от точки перегиба с самым маленьким значением масштаба находится в диапазоне 1,25 – 2, справа от точки перегиба с самым большим значением масштаба меньше или равен 0,5	Синусоидальная двумерная поверхность с гармониками более 3 и шумом (модель), нанокристаллические, неупорядоченные материалы (аморфный гидрогенизированный кремний)

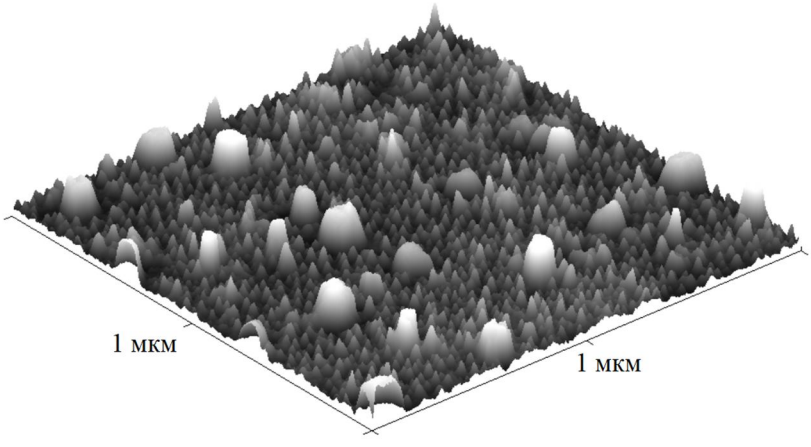

Рисунок 1 – РЭМ-изображение исследованного образца
Figure 1 – SEM-image of the investigated sample

На рисунке 2 показаны результаты обработки изображения поверхности с помощью методики scale-space DFA. Зависимости флуктуационной функции от пространственного масштаба представлены для исходного изображения и отфильтрованного изображения при некоторых коэффициентах сглаживания. Коэффициент 160 – минимальное сглаживание, коэффициент 2 – максимальное сглаживание из приведенных коэффициентов.

Для исходного изображения поверхности достаточно сложно выделить перегибы на зависимости флуктуационной функции от пространственного масштаба. Фильтрация изображения сглаживающим фильтром позволила получить более четкие перегибы на графиках. Перегибы флуктуационной функции соответствуют наличию гармонических составляющих в структуре поверхности. Пространственные масштабы, на которых наблюдались перегибы, пересчитывались в значения корреляционных векторов. Значения корреляционных векторов d отражают величины периодов гармонических составляющих в структуре. Были получены следующие значения d: 19 ± 5 нм; 200 ± 5 нм; 266 ± 5 нм; 398 ± 5 нм. В соответствии с изображением поверхности образца можно сделать вывод, что $d = 19 \pm 5$ нм соответствует среднему периоду в расположении мелких наночастиц Ag, а $d = 200 \pm 5$ нм; 266 ± 5 нм; 398 ± 5 нм соответствуют периодам в расположении крупных наночастиц Ag.

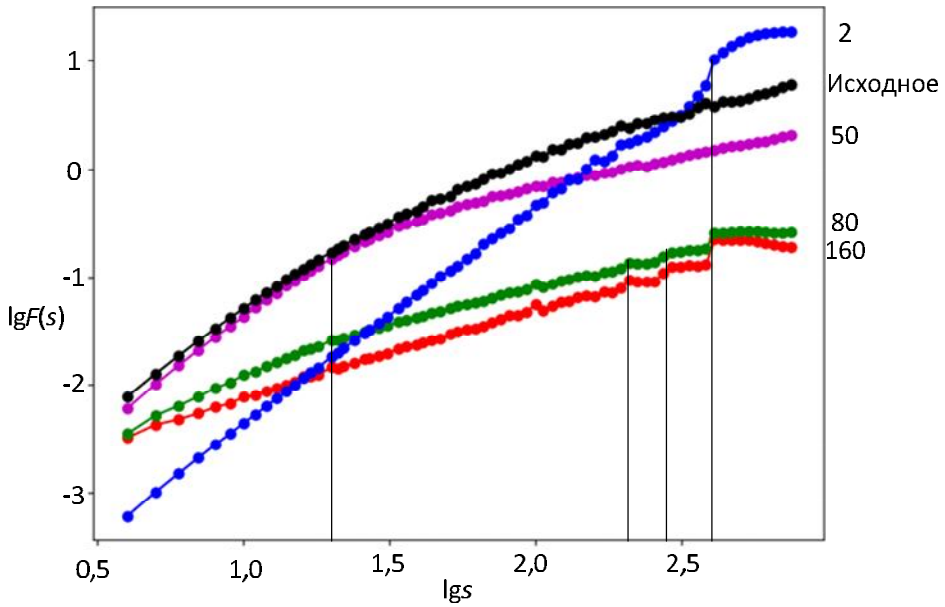

Рисунок 2 – Зависимости флуктуационных функций от пространственного масштаба для различных коэффициентов сглаживания

Figure 2 – Dependencies of fluctuation functions on spatial scale for various smoothing coefficients

Также были рассчитаны скейлинговые показатели для исходного изображения слева от точки перегиба с самым маленьким значением масштаба и справа от точки перегиба с самым большим значением масштаба. Соответственно получены следующие значения α: 0,6 и 1,8.

Таким образом, по совокупности полученных результатов, а именно количества точек перегиба и значений α можно заключить, что исследованная поверхность относится к типу поверхностей высокой структурной сложности.

Заключение

Представлен алгоритм определения структурной сложности поверхности твердотельных материалов на основе метода scale-space DFA. Преимущество разработанного алгоритма в том, что с помощью него можно определить пространственный масштаб, на котором существуют корреляции в структуре. Показано, как по значениям тангенса угла наклона на зависимости флуктуационной функции от пространственного масштаба и количества на ней точек перегиба можно определять структурную сложность поверхности. Выработаны критерии определения структурной сложности поверхности твердотельных материалов.

Разработанный алгоритм апробирован на изображении поверхности слоя Si, имплантированного ионами Ag+, подвергавшиеся импульсному лазерному отжигу. Исследованная поверхность относится к типу поверхностей высокой структурной сложности.

Знания о структурной сложности поверхности могут использоваться для определения функционального назначения и классификации твердотельных материалов по типу поверхности. Разработанный алгоритм может применяться в довольно широких областях – материаловедении, микро- и наноэлектронике, оптоэлектронике и др. В первую очередь, методика scale-space DFA полезна для анализа сложных поверхностей, с большим количеством гармонических и шумовых составляющих. Кроме того, применение методики scale-space DFA совестно с методом СВИ позволяет решать широкий круг научно-практических задач, таких как оценка степени упорядоченности структуры поверхности; расчет информационной емкости систем; обнаружение локальных дефектов в структуре поверхности; обнаружение изменения периодичности в структуре поверхности; расчет корреляционных векторов в структуре поверхности.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (FSSN-2020-0003).

Библиографический список

1. **Егоров-Тисменко Ю. К.** Кристаллография и кристаллохимия. М.:КДУ, 2005. 592 с.

2. **Рехвиашвили С. Ш.** Применение вейвлет-преобразования для обработки изображений в атомно-силовом микроскопе // Письма в ЖТФ. 2002. № 28-6. С. 46-50.

3. ГОСТ 25142-82 Шероховатость поверхности. Термины и определения URL:http://vsegost.com/Catalog/43/43751.shtml (дата обращения 25.06.2020).

4. **Потапов А. А.** Новые информационные технологии на основе вероятностных текстурных и фрактальных признаков в радиолокационном обнаружении малоконтрастных целей // Радиотехника и электроника. 2003. № 48-9. С. 1101-1119.

5. **Idrissa M., Acheroy M.** Texture classification using Gabor filters // Pattern Recognition Letters. 2002, no. 23-9, pp. 1095-1102.

6. **Конкин Ю. В., Колесенков А. Н.** Распознавание изображений на основе текстурных признаков Харалика и искусственных нейронных сетей // Известия ТулГУ. 2016. № 2. С. 117-123.

7. **Albregtsen F.** Statistical texture measures computed from gray level cooccurence matrices. Image Processing Laboratory Department of Informatics University of Oslo. 2008.

8. **Вихров С. П., Авачева Т. Г., Бодягин Н. В., Гришанкина Н. В., Авачев А. П.** Установление степени упорядочения структуры материалов на основе расчета информационно-корреляционных характеристик // Физика и техника полупроводников. 2012. № 46-4. С. 433-438.

9. **Алпатов А. В., Вихров С. П., Гришанкина Н. В., Мурсалов С. М.** Исследование структурной сложности профиля поверхности материалов с применением метода 2D флуктуационного анализа с исключенным трендом // Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета. 2012. № 4-2. С. 12-20.

10. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Grishankina N. V.** Revealing the surface interface correlations in a-Si:H films by 2D detrended fluctuation analysis // Semiconductors. 2013, no. 47-3, pp. 365-371.

11. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Rybina N. V.** Study of the correlation parameters of the surface structure of disordered semiconductors by the two-dimensional DFA and average mutual information methods // Semiconductors. 2015, no 49-4, pp. 456-460.

12. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Vishnyakov N. V. etc.** On a combined approach to studying the correlation parameters of self-organizing structures // Semiconductors. 2016, no. 50-1, pp. 22-28.

13 **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Kazanskii A. G. etc.** Study of the correlation properties of the surface structure of nc-Si/a-Si:H films with different fractions of the crystalline phase. Semiconductors. 2016, no. 50-5, pp. 590-595.

14. **Алпатов А. В., Рыбина Н. В.** Применение методики scale-space к исследованию самоорганизующихся структур // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2019. № 7. С. 92-98.

15. **Рыбина Н. В., Вихров С. П., Рыбин Н. Б.** Классификация степени самоорганизации рельефа тонкопленочных структур с помощью методов 2D DFA и СВИ // Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета. 2017. № 61. С. 143-151.

16. **Луняков А. Е., Рыбина Н. В., Рыбин Н. Б.** Исследование зависимости корреляционных свойств наноструктурированных поверхностей от параметров их рельефа // Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета. 2016. № 58. С. 153-158.

17 **Баталов Р. И., Воробьев В. В., Нуждин В. И. и др.** Воздействие импульсного лазерного излучения на слои Si с высокой дозой имплантированных ионов Ag+ // Оптика и спектроскопия. 2018. № 125-4. С. 549-555.

UDC 539.211

CRITERIA FOR DETERMINING THE SURFACE STRUCTURAL COMPLEXITY

N. V. Rybina, Ph.D. (Phys. and Math.), associate professor, RSREU, Ryazan, Russia;
orcid.org/0000-0003-0377-5605, e-mail: pgnv@mail.ru
A. V. Alpatov, Ph.D. (Tech.), associate professor, RSREU, Ryazan, Russia;
orcid.org/0000-0001-9694-6818, e-mail: alpatov-alexey@yandex.ru
N. B. Rybin, Ph.D. (Phys. and Math.), associate professor, RSREU, Ryazan, Russia;
orcid.org/0000-0003-2000-0158, e-mail: nikolay.rybin@yandex.ru

The algorithm for determining surface structural complexity of solid-state materials based on two-dimensional detrended fluctuation analysis and scale space method is presented. ***The aim is to*** *develop criteria for determining surface structural complexity by the values of slope angle tangent of fluctuation function on spatial scale dependence and the number of inflection points on it. Using the developed algorithm, the surface image of Si layer with implanted Ag+ ions subjected to pulsed laser annealing has been studied, and correlation parameters have been obtained. The studied surface has had high structural complexity.*

Key words: *surface, structural complexity, two-dimensional detrended fluctuation analysis, scale space, correlation parameters, Si, noise, harmonics.*

DOI: 10.21667/1995-4565-2020-73-139-146

References

1. **Egorov-Tismenko Y. K.** Kristallografiya i kristallohimiya. M.:KDU, 2005. 592 p. (in Russian).

2. **Rekhviashvili S. S.** Primenenie vejvlet-preobrazovaniya dlya obrabotki izobrazhenij v atomno-silovom mikroskope. *Pis'ma v ZHTF*. 2002, no. 28-6, pp. 46-50 (in Russian).

3. GOST 25142-82 SHerohovatost' poverhnosti. Terminy i opredeleniya URL:http://vsegost.com/Catalog/43/43751.shtml (date of request 25.06.2020). (in Russian).

4. **Potapov A. A.** Novye informacionnye tekhnologii na osnove veroyatnostnyh teksturnyh i fraktal'nyh priznakov v radiolokacionnom obnaruzhenii malokontrastnyh celej. *Radiotekhnika i elektronika*. 2003, no. 48-9, pp. 1101-1119 (in Russian).

5. **Idrissa M., Acheroy M.** Texture classification using Gabor filters. *Pattern Recognition Letters*. 2002, no. 23-9, pp. 1095-1102.

6. **Konkin Y. V., Kolesenkov A. N.** Raspoznavanie izobrazhenij na osnove teksturnyh priznakov Haralika i iskusstvennyh nejronnyh setej. *Izvestiya TulGU*. 2016, no. 2, pp. 117-123 (in Russian).

7. **Albregtsen F.** Statistical texture measures computed from gray level cooccurence matrices. Image Processing Laboratory Department of Informatics University of Oslo. 2008.

8. **Vihrov S. P., Avacheva T. G., Bodyagin N. V., Grishankina N. V., Avachev A. P.** Ustanovlenie stepeni uporyadocheniya struktury materialov na osnove rascheta informacionno-korrelyacionnyh harakteristik. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 2012, no. 46-4, pp. 433-438 (in Russian).

9. **Alpatov A. V., Vihrov S. P., Grishankina N. V., Mursalov S. M.** Issledovanie strukturnoj slozhnosti profilya poverhnosti materialov s primeneniem metoda 2D fluktuacionnogo analiza s isklyuchennym

trendom. *Vestnik Ryazanskogo gosudarstvennogo radiotekhnicheskogo universiteta*. 2012, no. 42-2, pp. 12-20 (in Russian).

10. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Grishankina N. V.** Revealing the surface interface correlations in a-Si:H films by 2D detrended fluctuation analysis. *Semiconductors*. 2013, no. 47-3, pp. 365-371.

11. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Rybina N. V.** Study of the correlation parameters of the surface structure of disordered semiconductors by the two-dimensional DFA and average mutual information methods. *Semiconductors*. 2015, no. 49-4, pp. 456-460.

12. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Vishnyakov N. V. etc.** On a combined approach to studying the correlation parameters of self-organizing structures. *Semiconductors*. 2016, no. 50-1, pp. 22-28.

13. **Alpatov A. V., Vikhrov S. P., Kazanskii A. G. etc.** Study of the correlation properties of the surface structure of nc-Si/a-Si:H films with different fractions of the crystalline phase. *Semiconductors*. 2016, no. 50-5, pp. 590-595.

14. **Alpatov A. V., Rybina N. V.** Primenenie metodiki scale-space k issledovaniyu samoorganizuyushchihsya struktur. *Poverhnost'. Rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya*. 2019, no. 7, pp. 92-98 (in Russian).

15. **Rybina N. V., Vihrov S. P., Rybin N. B.** Klassifikaciya stepeni samoorganizacii rel'efa tonkoplenochnyh struktur s pomoshch'yu metodov 2D DFA i SVI. *Vestnik Ryazanskogo gosudarstvennogo radiotekhnicheskogo universiteta*. 2017, no. 61, pp. 143-151 (in Russian).

16. **Lunyakov A. E., Rybina N. V., Rybin N. B.** Issledovanie zavisimosti korrelyacionnyh svojstv nanostrukturirovannyh poverhnostej ot parametrov ih rel'efa. *Vestnik Ryazanskogo gosudarstvennogo radiotekhnicheskogo universiteta*. 2016, no. 58, pp. 153-158 (in Russian).

17. **Batalov R. I., Vorob'ev V. V., Nuzhdin V. I. i dr.** Vozdejstvie impul'snogo lazernogo izlucheniya na sloi Si s vysokoj dozoj implantirovannyh ionov Ag+. *Optika i spektroskopiya*. 2018, no. 125-4, pp. 549-555 (in Russian).