

# 量子点的原子力显微镜测试结果分析: 数学形态学的实现<sup>\*</sup>

金 峰<sup>1</sup> 鲁华祥<sup>1</sup> 李 凯<sup>2</sup> 陈涌海<sup>2</sup> 王占国<sup>2</sup>

(1 中国科学院半导体研究所 神经网络实验室, 北京 100083)

(2 中国科学院半导体研究所 材料开放实验室, 北京 100083)

**摘要:** 提出了从原子力显微镜(AFM)照片中分割出量子点的算法,可以利用程序自动地统计照片中量子点的各种数据.该算法基于数学形态学的方法,包括三个步骤:首先根据照片中每个局部最高点的 dynamics 值,利用标记分水岭分割方法初步将每个量子点分开;第二步根据量子点的定义,从每个区域中提取出量子点;第三步,为了防止分割过程中将部分衬底一起提取,利用量子点的高度-面积分布,将多余衬底滤去.该算法具有快速、对噪声不敏感的特点,能准确地提取量子点的高度、横向尺寸、体积等数据.

**关键词:** 数学形态学;分水岭变换;量子点检测;自动统计

EEACC: 2520D PACC: 2852F; 4280W

中图分类号: TN304. 054

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2005)11-2120-07

## 1 引言

近年来,量子点结构材料以其优越的光学性质在理论和实验上引起了广泛关注.量子点的尺寸、形状、密度等对其器件性能有直接影响,获得这些统计数据对器件设计有重要意义<sup>[1~3]</sup>.目前表征量子点表面形貌最常用的手段是原子力显微镜(AFM).根据 AFM 的测量原理,AFM 针尖在样品表面扫描,在扫描范围中等间隔地在  $x$  和  $y$  方向上采样若干个数据点,并测量出这些点的高度值.测量后的原始数据可以以图像形式直观地提供给测试者.

通过 AFM 图像只能粗略地知道样品的形貌特征.若要得到诸如量子点的高度、横向尺寸、密度等统计信息,必须对原始数据进行加工处理.凭肉眼进行人工统计繁琐耗时且不准确,几乎无法得到诸如体积等的统计数据.由于上述原因,关于量子点形貌研究的文献<sup>[4,5]</sup>,往往只给出量子点的横向尺寸、高度等有限统计数据,而实现自动化量子点测量算法方面的工作则鲜有报道.因此研究自动统计样品表面无规则分布的纳米颗粒是必要的.龚谦,丁鼎等

人曾研究过这样的算法<sup>[6~8]</sup>.在他们工作的基础上,本文的算法具有如下创新:(1)由于衬底表面起伏情况复杂,对所有量子点选取一个统一的衬底基准高度在一些情况下是不合理的.本算法根据每个量子点周围衬底的具体情况选取其衬底基准高度.(2) AFM 针尖在平衡位置附近振动会造成背景噪声,AFM 针尖的尺寸和形状也会对量子点的识别造成影响,而本算法对这些干扰具有很强的容错性.(3)对于点密度很高的量子点样品,本算法有良好的统计结果.(4)本算法对纳米颗粒的形状具有很强的适应性,能识别包括环形量子点、甚至纳米尺寸坑洞在内的多种形状的纳米颗粒.(5)统计结果包含更多信息:例如样品中量子点数目、点间距、点密度、体积密度、平均高度、直径,以及每个量子点的高度、横向尺寸、底面积、体积、长短轴长度和取向等.

## 2 数学形态学简介:分水岭变换和 dynamics 值定义

数学形态学最早可以追溯到 1965 年<sup>[9]</sup>,它是一种面向形状的非线性信号处理的方法.对灰度图,它

<sup>\*</sup>国家自然科学基金(批准号:90207008),国家重点基础研究专项基金(批准号:G2000068303)资助项目

将亮度当作地形学中的高度来处理. 1979 年, Buecher 等人提出了数学形态学中进行图像分割的主要工具——分水岭变换 (watershed transform)<sup>[10]</sup>. 我们可以通过水淹模拟 (immersion simulation) 模型<sup>[12]</sup>来理解分水岭变换的原理.

分水岭变换首先定义局部最小区域 (regional minimum). 对一个二元函数  $f: R^2 \rightarrow R$ , 它的一个局部最小区域  $M \subset R^2$  为它的定义域上的一个连通区域, 该区域上所有位置的函数值都等于  $h$ , 而  $M$  外所有与  $M$  相邻的点的高度都严格小于  $h$ . 在一维信号的情况下, 局部最小区域就退化成为最小极值点. 如图 2(a) 所示,  $a \sim f$  为六个局部最小区域.

在确定了局部最小区域之后, 分水岭分割的水

淹模拟过程可以描述如下: 将每个局部最小区域刺穿, 然后将整个地形逐渐浸入一个大湖中, 让水位慢慢地向上升起 (如图 1(b) 所示), 来自不同局部最小区域的水体赋予不同的标签; 每当不同的水体将要合并的时候 (如图 1(c) 所示的水体 C 和 D), 在合并的位置建立一个水坝 (如图 1(c)) 以防止水体的合并; 继续这个过程 (如图 1(d)), 直到整个地形全部被水位淹没; 这个时候, 我们可以得到一系列的水坝 (如图 1(e) 所示). 这些水坝分割了整个表面, 每一个被分割开的区域中都包含了一个局部最小区域. 这样的分割区域, 被称作为它所包含的局部最小区域所对应的“聚水盆地” (catchment basins), 如图 1(e) 所示的区域 A~F.

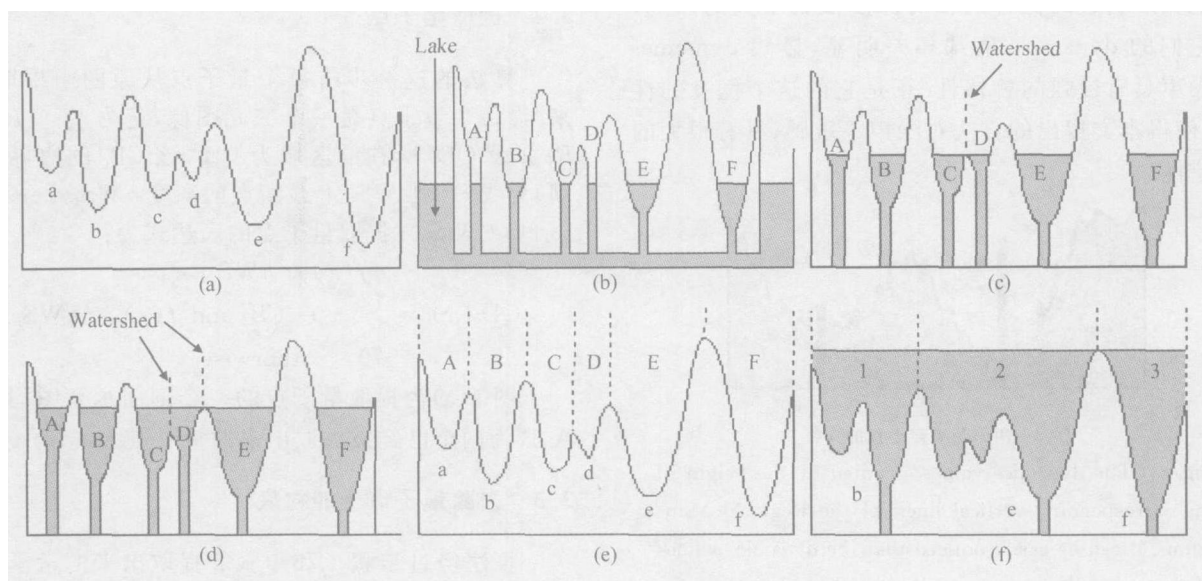


图 1 分水岭变换的水淹模拟的一维剖面示例 (a) 确定局部最小区域; (b)~(d) 水淹过程; (e) 最后得到的图像划分, 竖直虚线为水坝, 它分割开的区域为对应局部最小区域的聚水盆地; (f) 标记分水岭变换的分割结果

Fig 1 Profile of the example of the immersion simulation model; (a) Determine the regional minimums; (b)~(d) Immersion simulation procedure; (e) Final segmentation of the image with the dashed line denoting the watersheds and each divided region as the catchment basin corresponding to each regional minimum; (f) Segment result of the marker watershed transform

由此可见, 分水岭变换将整个平面划分为不同的区域, 但它存在过分割 (over segmentation) 的缺陷. 由于图像中噪声的存在, 导致了图像中局部最小区域的大量存在, 从而使得 WT 分割开来的区域数目非常巨大, 在一些情况下没有实用价值. 为了解决这个问题, Meyer 提出了“有标记的分水岭变换” (marker watershed transform)<sup>[15]</sup>. 它和简单分水岭变换的区别在于, 在水淹模拟的过程中, 它不再刺穿所有的局部最小区域, 而是根据一个叫做 marker

的二元图, 在 marker 上为 1 的地方才让水进入. 如图 1(f) 所示, 我们只让水从 b, e, f 三个局部最小区域进入, 然后重复 WT 的水淹和水坝构造过程, 最后可以得到三个被分割开的区域 1, 2, 3, 分别对应于 b, e, f 三个局部最小区域.

最小区域的 dynamics 概念是由 Grimaud 在 1992 年提出来的, 它是局部最小区域对比度的一种度量<sup>[14]</sup>. Dynamics 的定义可以使用直观的语言来描述: “最高点”为地表上一条路径上高度最高的点;

一个局部最小区域的 dynamics 值,即为它与所有低于它的局部最小区域的所有可能路径中,最低的那条路径的“最高点”的高度和该局部最小区域的高度之差.换句话说,一个处在某个局部最小区域中的人试图翻越山岭到达一个更低的谷底时,需要翻越的最小的高度差.另外,如果一个局部最小区域为整个图像中最低点,那么它的 dynamics 被定义为图像上最高点和最低点间的高度差.我们需要注意 dynamics 和盆地相对深度的区别.图 2 所示为两个受噪声干扰的深谷,局部最小区域和对应的 dynamics 值(竖线高度表示).由图可见两个受噪声影响的低谷的局部最小区域的 dynamics 值,受噪声的影响很小<sup>[14]</sup>.由于受噪声的影响,深谷盆地的相对深度与其他噪声引起的低谷的相对深度没有很大的区别,而它们的 dynamics 值却相差明显,显然 dynamics 对噪声具有极强的鲁棒性.正是它的这个优良的性质,使得本文提出的算法对噪声不敏感,具有很大的容错性.

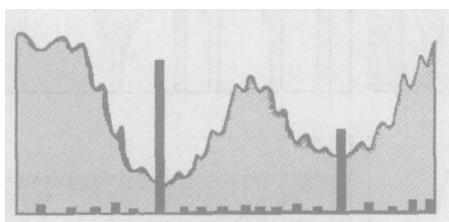


图 2 两个受噪声干扰的深谷

Fig. 2 The dynamics values (denoted by the height of the corresponding vertical lines) of the Regional Miniums. It can be easily noticed that the dynamics values of the two valleys are insensitive to the noise.

### 3 量子点分割的算法

上述分水岭变换和 dynamics 的定义都是针对局部最小区域的,针对局部最大区域,可以采用同样的定义和过程.由于在量子点的 AFM 图像中,我们研究的是突起的量子点,因此应用的将是针对局部最大的相关定义.本节将分别讲述算法的三个步骤.

#### 3.1 基于 dynamic 的量子点初步划分

标记分水岭变换中的标记(marker)可以看作是图像区域分割的初步估计,它指出了需要被分割出来的物体的核心区域,而这个物体的精确轮廓,则需要由分水岭分割方法来完成.在受噪声干扰的

AFM 照片中,取每个局部最大区域的 dynamics 作为该区域是否为足够高的量子点的判据,是合理的.本算法中,用户输入的量子点高度的下界  $\min\_Height$  作为判断某个局部最大区域是否为可能量子点的判据.如果该局部最大区域的 dynamics 值大于  $\min\_Height$ ,则该区域是一个合理量子点的定点区域,被加入下面将要进行的分水岭变换的 marker 中.

图 3 为量子点分割的一个例子.图 3(b)中,白色圆圈代表所选中的标记所在位置,可以看到这些标记正确地找到了每一个量子点.利用它们进行标记分水岭分割,得到的分割结果见图 3(c),每一个量子点都被划分到了不同的区域(或盆地)中.

#### 3.2 提取量子点

算法的这一步将每个量子点从原图中提取出来.设每个量子点是一个二元图像,记为  $QD_i: R^2 \rightarrow R$ . 并设  $QD_i$  所在的区域为  $CB_i$ , 该  $CB_i$  的边界(水坝)为  $WS_i$ . 则  $WS_i$  上最高点的高度  $h_{WS_i} = \max\{f(x) \mid x \in WS_i\}$ . 提取量子点的表达式为:

$$QD_i(x) = \begin{cases} f(x) - h_{WS_i}, & x \in CB_i \text{ and } f(x) \geq h_{WS_i} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

图 4(a) 为提取量子点的一个剖面示意图,其中 A, B 为两个已经被提取出来的量子点.

#### 3.3 去除量子点上的衬底

算法经过步骤 1 和步骤 2 提取出来的量子点,还需要进行修正.如图 4(a) 中的量子点 A,它正好生长在一个四周向外缓慢下降的衬底的顶上,因此经过分水岭分割和量子点提取后,量子点 A 脚下的衬底部分也被提取了出来.

图 4(c) 所示为带衬底的量子点的面积-高度分布曲线.可以看到在真正量子点的部分,底面积的增长很慢,而在衬底的部分,底面积增长的速度陡然增加.因此可以计算出量子点在不同高度底面积的分布曲线,根据该曲线来判断衬底存在的高度.

首先,我们定义在某一高度,量子点的底面积:

$$\text{area}(QD, h) = \text{Card}\{x \mid QD(x) > h\} \quad (2)$$

其中  $\text{Card}$  为集合的势(对有限大集合来说为元素的个数).

由此可以得到如下的面积-高度分布

$$\text{area}(i) = \text{area}(QD, h_i) \quad h_i = h_{\max}(N - i) / N \quad (3)$$

其中  $h_{\max}$  为 QD 上最高高度; $i = 1, 2, \cdots, N$ ,  $N$  是 area 的长度,为一个常数.得到面积-高度分布后,为了判断在不同高度,面积变化的快慢趋势,求出 area

的差分:

$$\begin{aligned} \text{area\_diff}(i) &= \text{area}(i+1) - \text{area}(i) \\ i &= 1, 2, \cdots, N-1 \end{aligned} \tag{4}$$

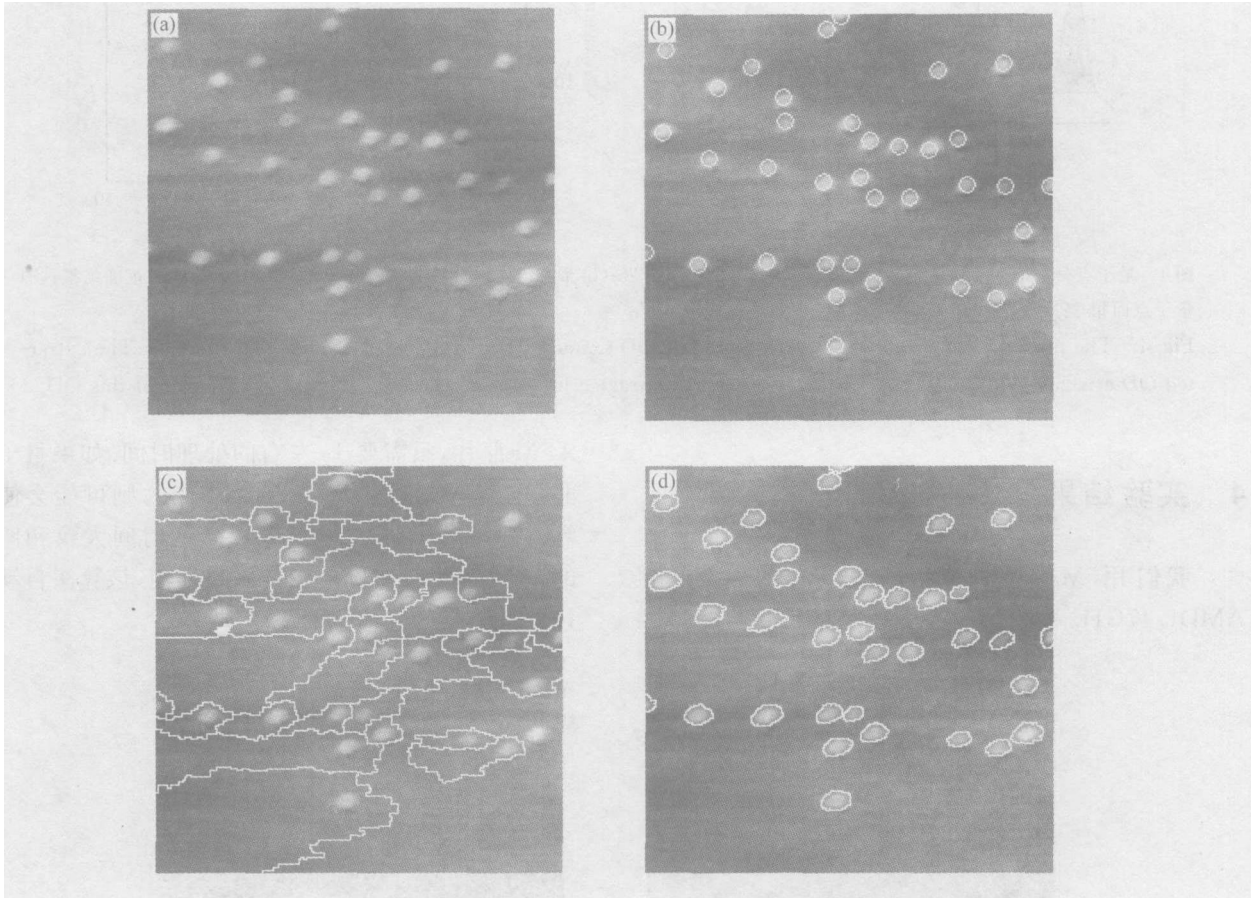


图 3 QD 分割的一个例子 (a) AFM 原图;(b)根据 dynamics 值所得的标记,画在原图上的圆代表所选标记的位置;(c)应用标记分水岭分割将每个量子点分割到不同的区域中,白色亮线代表分割边界(对应于标记分水岭分割的水坝);(d)量子点的最后分割结果,白线为量子点的边界

Fig. 3 An Example of QD segmentation (a) The original AFM photo;(b) Markers obtained according to the dynamics values,denoted as the white circles imposed on the original photo;(c) The watershed segment results of QDs using the markers from (b),with the watersheds drawn as the white borders;(d) The final segment border of the QDs

根据上面的面积差-高度分布,就可以应用一个简单的原则来判断衬底的存在与否.设  $j$  从 1 逐渐增大到  $N-1$  的过程中,首次出现如下关系:

$$\begin{aligned} \text{area\_diff}(j) &> \text{Const} \times \\ &\left[ \left[ \sum_{i=1}^{j-1} \text{area\_diff}(i) \right] / (j-1) \right] \end{aligned} \tag{5}$$

式中 Const 为一个常量(在我们的算法中,根据经验选为 10);方程右侧方括号内的式子意味着高度  $j$  之前的平均面积变化速率.若当前变化速率大大高于以前的平均变化速率,那么就可以认为在高度  $h_j$  出现了面积的突然变大,因此可以判断在该高度出

现了衬底,并标记为  $h_{\text{sub}}$ .

图 4(b)中的量子点 A 的面积-高度分布和面积差-高度分布显示在图 4(c)中.由该图可以清楚看到,在  $j=7$  的地方出现底面积增加速度的骤然变大,因此可以判断在  $h_7$  的位置出现了衬底.由图 5(b)可以看到,这个判断结果是准确的.

在得到衬底出现的高度  $h_{\text{sub}}$  后,可以用下面的式子滤除衬底,提取最后正确的量子点:

$$\text{QD}_{\text{refined}} = \begin{cases} \text{QD} - h_{\text{sub}}, & \text{QD} - h_{\text{sub}} > 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{6}$$

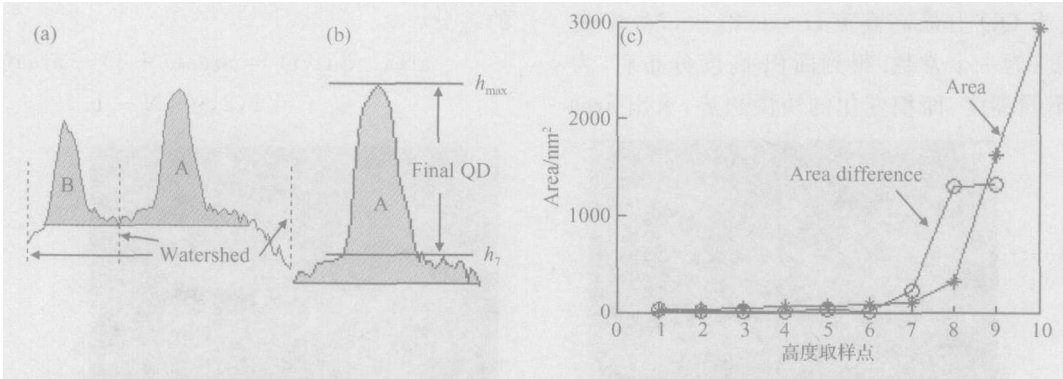


图 4 量子点分割的剖面视图 (a) 算法步骤 1 和 2 的提取结果;(b)带有衬底的分割结果及根据算法步骤 3 得到的正确结果;(c)量子点面积-高度分布曲线

Fig. 4 The profile of the segmented QDs (a) The QD extracted from the step 1 of our algorithm;(b) The extracted QD attached with substrate and the correct QD extracted in the step 3;(c) The area-height vector of this QD

4 实验结果

我们用 Matlab 实现了本算法的代码. 在 AMD1. 47GHz 的 PC 上面, 常规的 256 × 256 的

AFM 照片, 只需要 1s 左右的处理时间. 如果量子点非常密集, 数目巨大 (如 2000 多个), 则可能会使计算时间略微加长. 分割过程耗费的时间大致和图像的大小成正比. 实际应用的结果证明, 该算法自动统计量子点是十分快速的.

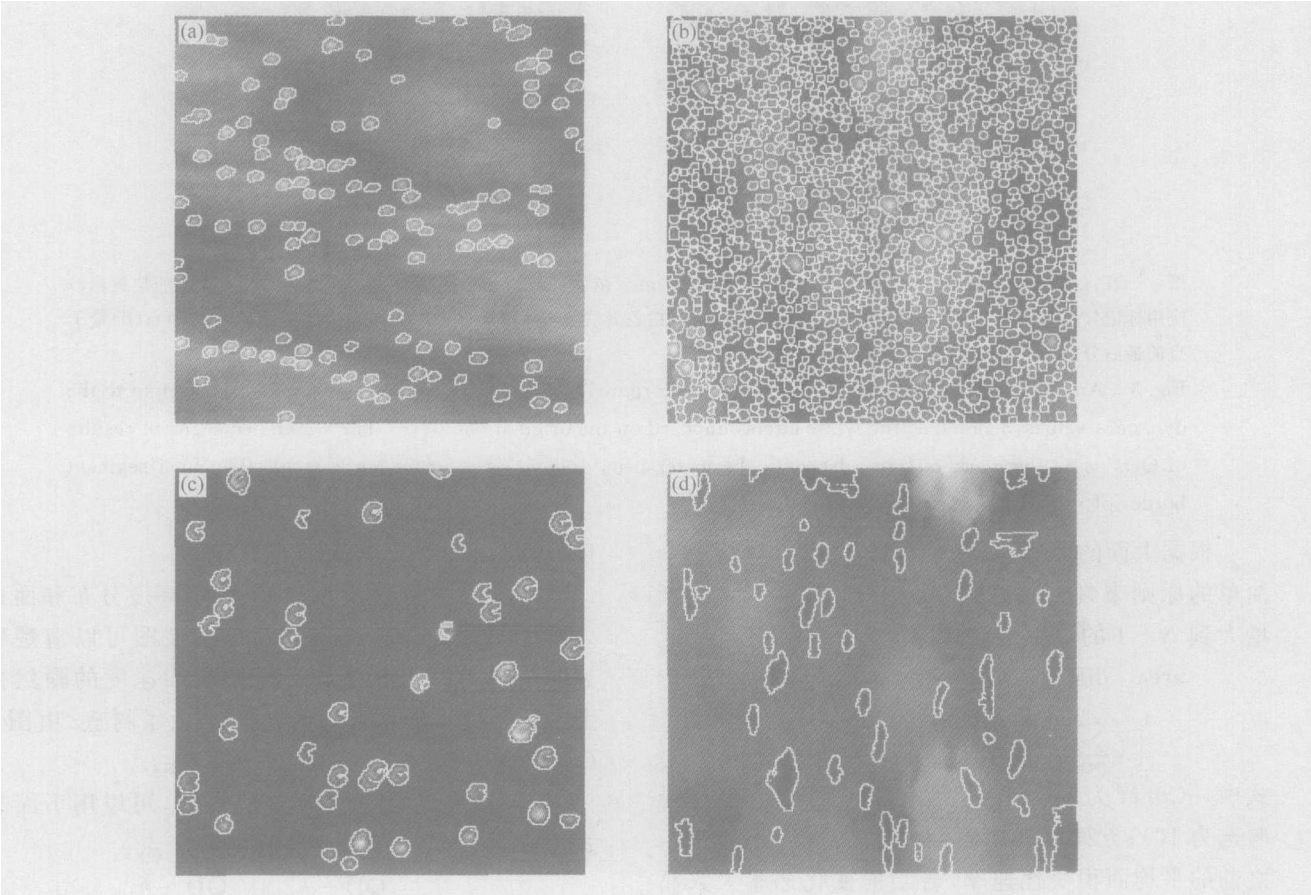


图 5 几个量子点 AFM 照片的分割结果

Fig. 5 Segment result of some typical AFM photos of QDs

图 3(d)是图 3(a)的 AFM 照片的分割结果.其他几种 AFM 照片量子点分割结果列于图 5 中.其中图 5(a)是和图 3 同种类型的量子点,只是 AFM 照片的视野大小不同.比较它们可以看到,设定不同的底面积上下界,可以分割出尺寸不同的量子点.另外在这两张图中,有很强的噪声和明显的衬底起伏,但算法分割结果仍然令人非常满意.图 5(b)为高密度量子点样品,考虑到量子点之间的互相粘连,算法分割的结果令人满意.另外对于各种不同形状的量

子点,本文算法的分割结果对量子点的形状描述得也非常合理,如图 5(c)中月牙形的量子环,以及图 5(d)中有着明显轴向的量子坑等都获得了合理的分割形状描述.

该算法在分割和统计结束后能够获取如下数据:样品中量子点数目、点间距、点密度、体积密度、平均高度、直径,以及每个量子点的高度、横向尺寸、底面积、体积、长短轴长度和取向等.图 5(a)~(d)的统计数据列于表 1.

表 1 量子点照片图 5(a)~(d)的统计结果  
Table 1 Statistics results of the QD photo of Fig. 5(a)~(d)

| 图号     | 直径/ nm    | 高度/ nm     | 底部面积/ nm <sup>2</sup> | 长轴长/ nm   | 短轴长/ nm   | 轴向/ (°)     | 体积/ nm <sup>3</sup> |
|--------|-----------|------------|-----------------------|-----------|-----------|-------------|---------------------|
| 图 5(a) | 56.321873 | 1.694095   | 2541.86               | 60.336641 | 36.237101 | 16.373991   | 1416.07905          |
| 图 5(b) | 34.706065 | 1.559255   | 946.020661            | 36.537573 | 23.686381 | - 80.268998 | 323.637359          |
| 图 5(c) | 63.108296 | 2.221378   | 3127.971541           | 69.889704 | 39.750981 | 11.329204   | 2359.394466         |
| 图 5(d) | 55.578662 | - 1.333688 | 2426.085244           | 57.440196 | 36.677118 | 14.448035   | 949.758773          |

5 结论

本文提出了从原子力显微镜 (AFM) 照片中分割出量子点的算法.算法采用数学形态学中标记分水岭方法对量子点进行提取,并以每个局部最大区域的 dynamics 作为该区域是否为量子点的判据,合理分割出纳米颗粒量子点的边界,并能适应多种形状的纳米颗粒量子点.实际应用证明,该算法具有高效快速地分割、统计 AFM 照片中量子点各种数据的能力,对噪声和衬底起伏不敏感,对实际应用中的各种量子点照片有较强的鲁棒性,能得到十分理想的结果.

参考文献

[ 1 ] Wang Zhanguo. The researching progress of nano-sized semiconductor materials and nano devices. Semiconductor Technology, 2001, 26(3) : 13; 2001, 26(5) : 17; 2001, 26(4) : 18 (in Chinese) [ 王占国. 纳米半导体材料及其纳米器件研究进展. 半导体技术, 2001, 26(3) : 13; 2001, 26(5) : 17; 2001, 26(4) : 18 ]

[ 2 ] Wang Zhanguo. The state of art and trend of information-functional materials research. Chemical Industry and Engineering Progress, 2004, 23(2) : 117 (in Chinese) [ 王占国. 信息功能材料的研究现状和发展趋势. 化工进展, 2004, 23(2) : 117 ]

[ 3 ] Petroff P M, Lorke A, Imamoglu A. Epitaxially self-assembled

quantum dots. Physics Today, 2001, 54(5) : 46

[ 4 ] Chaparro S A, Drucker J, Zhang Y, et al. Strain-driven alloying in Ge/ Si (100) Coherent islands. Phys Rev Lett, 1999, 83:1199

[ 5 ] Saito H, Nishi K, Sugou S. Shape transition of InAs quantum dots by growth at high temperature. Appl Phys Lett, 1999, 74:1224

[ 6 ] Gong Qian, Liang Jiben, Xu Bo, et al. The analysis of the AFM characterization of InAs quantum dots. Chinese Journal of Semiconductors, 1999, 20(8) : 662 (in Chinese) [ 龚谦, 梁基本, 徐波, 等. InAs 量子点的原子力显微镜测试结果分析. 半导体学报, 1999, 20(8) : 662 ]

[ 7 ] Gong Qian. The research on MBE growth and laser devices of In( Ga) As quantum dots materials. Doctor Thesis of Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, 1998 : 17 (in Chinese) [ 龚谦. In( Ga) As 量子点材料的分子束外延生长性质及激光器的研究. 中国科学院半导体研究所博士学位论文, 1998 : 17 ]

[ 8 ] Ding Ding. Analysis of AFM measurement on quantum dots. The Third China-Sweden Meeting on Nanometer-Scale Science and Technology, Beijing, 2001 : 22

[ 9 ] Patent S J. Automatic scanning device for analyzing textures. July 2, 1965a, (23 273), France. Patented in: Belgium, Canada, Great-Britain, Japan, Sweden, USA

[ 10 ] Buecher S, Lantuejoul C. Use of watershed in contour detection. In: Proc Int Workshop Image Processing, Real-Time. Edge and Motion Detection/ Estimation, Rennes, France, 1979:17

[ 11 ] Beucher B. The watershed transformation applied to image segmentation. Scanning Microscopy International, 1992, 6 (suppl) : 299

- [12] Vincent L ,Soille P. Watersheds in digital spaces:an efficient algorithm based on immersion simulations. IEEE Trans PA-MI,1991 ,13 :583
- [13] Meyer F. Un algorithme optimal de ligne de partage des eaux. In:Actes du 8<sup>e</sup> eme Congr 'es AFCET ,Lyon-Villeurbanne , France ,1991 :847
- [14] Grimaud M. A new measure of contrast :dynamics. In :SPIE Image Algebra and Morphological Processing **III**, San Diego , 1992 ,1769 :292
- [15] Meyer F ,Beucher S. Morphological segmentation. Journal of Visual Communication and Image Representation , 1990 , 1 (1) :21

## Mathematical Morphology Based Algorithm to Measure Quantum Dots from AFM Photos<sup>\*</sup>

Jin Feng<sup>1</sup> , Lu Huaxiang<sup>1</sup> , Li Kai<sup>2</sup> , Chen Yonghai<sup>2</sup> , and Wang Zhanguo<sup>2</sup>

(1 Artificial Neural Networks Laboratory , Institute of Semiconductors , Chinese Academy of Science , Beijing 100083 , China)

(2 Key Laboratory of Semiconductor Materials Science , Institute of Semiconductors ,  
Chinese Academy of Sciences , Beijing 100083 , China)

**Abstract :** This paper proposes an algorithm to obtain the statistic data of quantum dots from atomic force microscopy photos. Starting from identifying the dynamic values of each regional maximum ,the peak of each qualified quantum dot is located. Their positions are used as the markers for the next step ,which is to apply the marker watershed transform to obtain a rough segmentation of the quantum dots. According to the boundary of the coarse partition ,each quantum dot is cut from the original photo. A process is then carried out to filter the possible attached substrates based on the area-height distribution of the current quantum dot. After all the above stages ,all the quantum dots can be accurately and robustly extracted and thus their properties ,such as height ,lateral size ,and volume ,can easily be measured.

**Key words :** mathematical morphology ; watershed transform ; quantum dots characterization ; automatic statistics

**EEACC :** 2520D      **PACC :** 2852 F ; 4280 W

**Article ID :** 0253-4177(2005)11-2120-07

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China(No. 90207008) and the Special Funds of National Key Basic Research Plan of China(No. G2000068303)

Received 25 April 2005 ,revised manuscript received 8 June 2005

©2005 Chinese Institute of Electronics