

11

## **Электросиловое взаимодействие зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью**

© Г.В. Дедков, А.А. Канаметов

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик  
E-mail: gv\_dedkov@mail.ru

*Поступило в Редакцию 15 октября 2009 г.*

На основе численного решения уравнения Лапласа для электрического потенциала рассчитываются силы электростатического взаимодействия заряженного зонда АСМ с заземленной проводящей поверхностью и с поверхностью, покрытой тонкой диэлектрической пленкой. Обосновывается необходимость повышения точности расчета электростатических сил и учета диэлектрических характеристик поверхностного слоя образца для корректной интерпретации данных электросиловой спектроскопии.

Электросиловое взаимодействие проводящего зонда атомно-силового микроскопа (АСМ) с проводящим образцом или образцом, покрытым тонкой пленкой адсорбата (окисла), когда к вакуумному (воздушному) контакту между ними приложено внешнее напряжение  $U$ , представляет значительный интерес для приложений. В частности, этот режим используется для калибровочных целей при измерениях сил Казимира [1] и Ван-дер-Ваальса [2], а в случае гармонически изменяющегося напряжения  $U$  — в многопроходных электросиловых методиках АСМ [3]. В наших работах [2,4] было показано, что измерение электростатических сил в режиме контактной электросиловой спектроскопии позволяет контролировать жесткость и геометрические характеристики зонда, если для интерпретации результатов используется теоретическая

модель [5]. Эта модель соответствует проводящему коническому зонду со сферическим окончанием (см. рис. 1 в работе [2]), апекс которого удален на расстояние  $z$  от проводящей поверхности. Сила притяжения зонда к поверхности определяется выражением

$$F = \frac{U^2}{2} \frac{dC}{dz}, \quad (1)$$

где  $C(z)$  — емкость системы зонд–образец. Аналитическая аппроксимация функции  $dC/dz$  приведена в [5]. Соответствующая формула зависит также от размеров балки кантилевера, высоты зонда  $H$ , конического угла  $\theta$  и радиуса  $R$  сферической части.

Точность определения параметров зонда из измерений электростатических сил, однако, в значительной мере ограничена влиянием двух факторов: приближенным характером модели [5] и присутствием водной или окисной пленки на поверхности образца, что особенно существенно при измерениях в воздухе [2,4]. Изучение роли этих факторов и является целью настоящей работы. Наш анализ основывается на численном решении уравнения Лапласа  $\Delta\Phi = 0$  для электрического потенциала  $\Phi$  с граничными условиями  $\Phi = U$  на поверхности зонда и непрерывности  $\Phi$  и нормальной компоненты электрической индукции на поверхности диэлектрической пленки с толщиной  $d$  и диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ , нанесенной на заземленный образец. Из решения электростатической задачи получают распределение поверхностной плотности и суммарный заряд  $Q$  зонда, а также емкость системы зонд–образец  $C = Q/U$ , после чего из (1) находится сила взаимодействия.

Вследствие осевой симметрии системы поверхностную плотность заряда на проводящем зонде можно представить в виде суммы элементарных кольцевых распределений с зарядами  $q_m$  и радиусами колец  $r_m = r(z_m)$ , центры которых располагаются на оси симметрии в точках  $z_m > 0$ . Потенциал одного кольца в точке  $(r, z)$  в вакуумной (воздушной) области  $z > 0$  равен (здесь и далее используются гауссовы единицы)

$$V(z, z_m, r, r_m) = \frac{2q_m}{\pi} \frac{1}{((z - z_m)^2 + (r + r_m)^2)^{1/2}} \times K \left[ \left( \frac{4rr_m}{(z - z_m)^2 + (r + r_m)^2} \right)^{1/2} \right], \quad (2)$$

где  $K(x)$  — эллиптический интеграл первого рода. Для функции  $K(x)$  применялось полиномиальное разложение [6], ошибка которого не превышает  $2 \cdot 10^{-8}$ . Индуцированный в образце потенциал кольца находится таким образом, чтобы на поверхностях  $z = 0$  и  $z = -d$  удовлетворялись необходимые граничные условия. При  $d > 0$ ,  $\varepsilon > 1$  индуцированный потенциал кольца представляется в виде

$$V^{ind}(z, z_m, r, r_m) = - \sum_{k=0}^{\infty} (-a)^k \left[ aV(z, -(z_m + 2dk), r, r_m) + V(z, -(z_m + 2dk + 2d), r, r_m) \right], \quad (3)$$

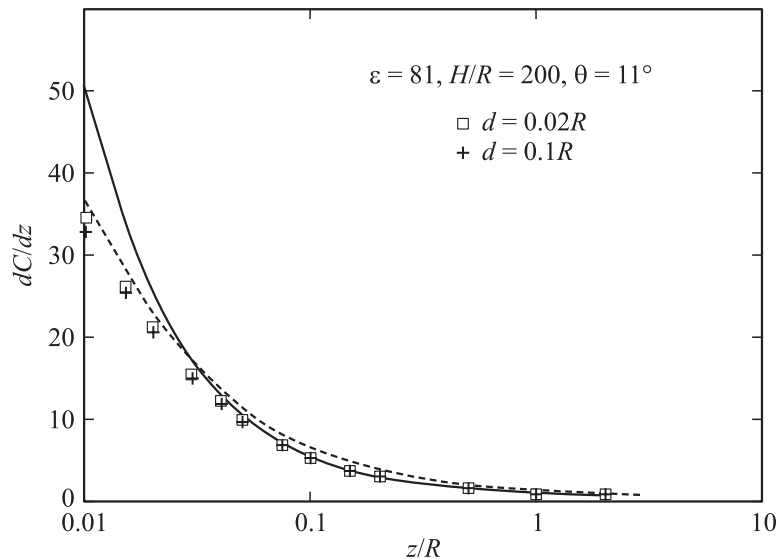
где  $a = (\varepsilon - 1)/(\varepsilon + 1)$ . В случае металлической поверхности в формуле (3) нужно перейти к пределу  $\varepsilon \rightarrow \infty$ , тогда (3) описывает потенциал „изображения“ кольца с центром в точке  $(r(z_m), -z_m)$ , расположенной симметрично точке  $(r(z_m), z_m)$  относительно плоскости  $z = 0$ , как и следует ожидать.

Результирующий потенциал  $\Phi$  системы зонд–поверхность определяется суммой (2), (3) по всем кольцевым зарядам  $q_m$ , а процедура их нахождения сводится к решению системы линейных уравнений для  $\Phi$  в дискретных точках зонда, заданных координатами  $(r(z_n), z_n)$ . Вводя сетку значений  $z_m$  по координате  $z$  для кольцевых распределений, точки с потенциалом  $\Phi = U$  на поверхности зонда целесообразно выбирать между узлами этой сетки. В наших расчетах общее количество разбиений варьировало от 400 до 1000 в зависимости от аспектного отношения  $H/R$ , причем шаг сетки возрастал с увеличением  $z_m$ . Результаты расчета силы  $F(z)$  представлены в виде универсальных зависимостей  $dC/dz = 2F(z)/U^2$ , соответствующих величинам  $H/R$  и  $\theta$  (при заданных  $\varepsilon$  и  $d$ ). Программа расчета тестировалась путем сравнения с точной аналитической формулой для силы взаимодействия заряженной металлической сферы с проводящей плоскостью [7]. Максимальное отклонение результатов численного расчета силы  $F(z)$  от формулы [7] не превышало 0.3%.

В таблице сравниваются результаты численного расчета  $dC/dz$  с результатами расчета в приближении [5] для проводящего контакта зонд–образец при различной величине  $H/R$  и конических углах  $\theta = 0, 11^\circ, 22^\circ$ . Случай  $\theta = 0$  соответствует зонду цилиндрической формы с полусферическим концом, а  $\theta = 11^\circ$  — типичным зондам

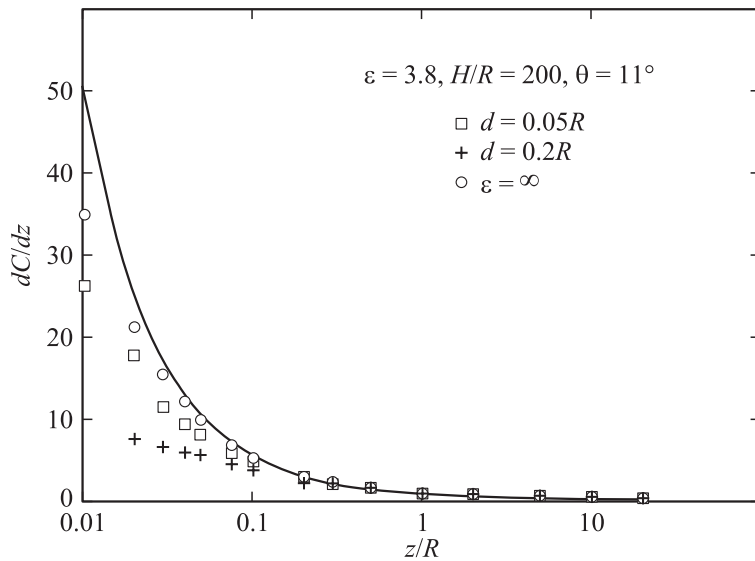
Результаты расчета  $dC/dz$  в контактах проводящего зонда с проводящей поверхностью

| $z/R$ | $H/R = 200,$<br>$\theta = 0$ | $H/R = 400,$<br>$\theta = 11^\circ$ | $H/R = 200,$<br>$\theta = 11^\circ$ | $H/R = 100,$<br>$\theta = 11^\circ$ | $H/R = 50,$<br>$\theta = 11^\circ$ | $H/R = 200,$<br>$\theta = 22^\circ$ | $H/R = 100,$<br>$\theta = 22^\circ$ |
|-------|------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| 0.01  | 33.65                        | 35.03                               | 35.03                               | 34.98                               | 34.93                              | 36.62                               | 36.56                               |
|       | 50.79                        | 50.43                               | 50.36                               | 50.30                               | 50.24                              | 50.77                               | 50.64                               |
| 0.02  | 20.26                        | 21.32                               | 21.31                               | 21.27                               | 21.21                              | 22.31                               | 22.25                               |
|       | 25.78                        | 25.42                               | 25.36                               | 25.30                               | 25.24                              | 25.77                               | 25.64                               |
| 0.05  | 9.093                        | 9.864                               | 9.847                               | 9.80                                | 9.74                               | 10.49                               | 10.42                               |
|       | 10.76                        | 10.42                               | 10.36                               | 10.30                               | 10.23                              | 10.77                               | 10.64                               |
| 0.1   | 4.587                        | 5.292                               | 5.269                               | 5.218                               | 5.16                               | 5.85                                | 5.76                                |
|       | 5.728                        | 5.421                               | 5.358                               | 5.295                               | 5.23                               | 5.76                                | 5.63                                |
| 0.2   | 2.243                        | 2.892                               | 2.860                               | 2.805                               | 2.74                               | 3.40                                | 3.30                                |
|       | 3.172                        | 2.916                               | 2.853                               | 2.79                                | 2.73                               | 3.25                                | 3.12                                |
| 0.5   | 0.870                        | 1.41                                | 1.362                               | 1.30                                | 1.23                               | 1.83                                | 1.72                                |
|       | 1.55                         | 1.40                                | 1.338                               | 1.275                               | 1.21                               | 1.71                                | 1.59                                |
| 1.0   | 0.442                        | 0.882                               | 0.822                               | 0.758                               | 0.691                              | 1.23                                | 1.10                                |
|       | 0.928                        | 0.880                               | 0.817                               | 0.753                               | 0.690                              | 1.17                                | 1.04                                |
| 2.0   | 0.238                        | 0.588                               | 0.524                               | 0.459                               | 0.394                              | 0.865                               | 0.738                               |
|       | 0.553                        | 0.597                               | 0.534                               | 0.471                               | 0.408                              | 0.843                               | 0.714                               |
| 5.0   | 0.114                        | 0.375                               | 0.311                               | 0.249                               | 0.191                              | 0.568                               | 0.446                               |
|       | 0.273                        | 0.388                               | 0.325                               | 0.262                               | 0.198                              | 0.566                               | 0.437                               |
| 10.0  | 0.0662                       | 0.274                               | 0.213                               | 0.156                               | 0.106                              | 0.409                               | 0.296                               |
|       | 0.157                        | 0.285                               | 0.221                               | 0.158                               | 0.095                              | 0.404                               | 0.275                               |
| 20.0  | 0.0376                       | 0.196                               | 0.140                               | 0.0916                              | 0.0536                             | 0.279                               | 0.181                               |
|       | 0.0869                       | 0.202                               | 0.138                               | 0.0751                              | 0.0119                             | 0.259                               | 0.129                               |



**Рис. 1.** Зависимость  $dC/dz$  от  $z/R$  при электрическом взаимодействии зонда АСМ с металлической подложкой, покрытой субмонослойной пленкой воды различной толщины  $d$ . Сплошная и пунктирная линии — расчет в приближении [5] для конического зонда со сферическим концом и в модели параболического зонда без учета пленки.

компании НТ-МДТ [8]. Абсолютные значения электростатических сил, выраженных в  $nN$ , получаются умножением данных таблицы (а также рис. 1, 2) на  $U^2/18$ , где напряжение  $U$  выражено в вольтах. В верхних строках приведенных в таблице значений  $dC/dz$  при фиксированных значениях  $z/R$  указаны результаты нашего расчета, а в нижних — результаты расчета в приближении [5]. Как следует из сравнения этих данных, формула, полученная в [5], в целом хорошо описывает силу электростатического взаимодействия в диапазоне расстояний  $0.05 < z/R < 20$  с относительной погрешностью не более 3% (в большую сторону). Однако при  $z/R \leq 0.05$  погрешность возрастает, достигая 42% при  $z/R = 0.01$ . При  $z/R \geq 20$  погрешность также растет (средние данные последних четырех столбцов). В этом случае приближение [5] занижает величину силы взаимодействия. Более заметное расхождение результатов во втором столбце таблицы объясняется логарифмической



**Рис. 2.** То же, что на рис. 1 для подложки с пленкой диоксида кремния различной толщины. Кружками и сплошной линией показаны наши результаты и расчет по модели [5] без учета пленки. Во всех случаях имеется в виду конический зонд со сферическим окончанием.

особенностью приближения [5] при  $\theta = 0$ . Соответствующие результаты были получены при  $\theta = 1^\circ$ .

На рис. 1, 2 приведены результаты расчета  $dC/dz$  при наличии на заземленной подложке тонкой диэлектрической пленки воды ( $\varepsilon = 81$ , рис. 1) или диоксида кремния ( $\varepsilon = 3.8$ , рис. 2) с толщиной  $d$ . Сплошными линиями показаны результаты расчета в приближении [5], не учитывающем наличие пленок. Из рис. 1, 2 следует, что даже тонкие диэлектрические слои существенно уменьшают величину сил взаимодействия при  $z \leq d$ . При  $z > d$  эффект нивелируется, и величина сил взаимодействия становится близка к ожидаемым величинам в отсутствие пленок. Меньший эффект водной пленки (рис. 2) обусловлен большой величиной диэлектрической проницаемости. Влияние формы зонда на рис. 1 демонстрирует пунктирная линия, показывающая результаты расчета  $dC/dz$  для зонда параболической формы с аспектным

отношением  $H/R = 200$  и уравнением поверхности  $z = z_0 + r^2/2R$ , где  $z_0$  и  $R$  — расстояние аспекта зонда от поверхности и радиус кривизны в нижней оконечности. В этом случае пленка воды не учитывалась, поэтому необходимо сравнивать между собой сплошную (приближение [5] для конического зонда со сферическим окончанием) и пунктирную линии.

Кратко обсудим возможное влияние рассмотренных эффектов на интерпретацию результатов измерения электрических сил в работе [2], в которой применялось приближение [5]. В частности, в [2] было получено примерно вдвое меньшее значение радиуса  $R$  по сравнению со средним паспортным значением (35 nm). Как следует из данных таблицы и рис. 1, реально ожидаемая величина силы взаимодействия в наиболее близких к контакту точках силовой спектроскопии оказывается меньше, чем предсказывает теория [5] при заданной величине  $R$ , поэтому согласование расчетных и измеренных значений сил может достигаться за счет уменьшения величины  $R$  в теоретических расчетах, что, по-видимому, и приводило в [2] к компенсирующему эффекту. Очевидно, что электросиловая спектроскопия дает возможность количественного контроля не только размеров зонда, но и характеристик тонких диэлектрических слоев ( $\epsilon$  и  $d$ ).

## Список литературы

- [1] Roy A., Mohideen U. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 4380.
- [2] Дедков Г.В., Канаметов А.А., Дедкова Е.Г. // ЖТФ. 2009. Т. 79. В. 12. С. 79.
- [3] Миронова В.Л. // Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера, 2004.
- [4] Дедков Г.В., Дедкова Е.Г., Тегеев Р.И., Хоконов Х.Б. // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. В. 1. С. 85.
- [5] Hudlet S., Saint Jean M., Guthmann C., Berger J. // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. N 9. P. 5245.
- [6] Abramovitz M., Stegun I.A. // Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover, 1972.
- [7] Смайт В.Р. // Электростатика и электродинамика. М.: ИЛ, 1954.
- [8] Быков В.А. // Микросистемная техника. 2000. В. 1. С. 21.