

13;15

Влияние структуры поверхности на величину среднего перепада высот при исследованиях методами атомно-силовой микроскопии

© В.А. Новиков

Национальный исследовательский Томский государственный университет
E-mail: novikovvadim@mail.ru

Поступило в Редакцию 22 ноября 2012 г.

Приведены результаты анализа зависимости среднего перепада высот от ширины области сканирования и структуры профиля поверхности в атомно-силовой микроскопии (АСМ). На примере среднего перепада высот показано, что при анализе АСМ-данных необходимо выделять локальные и глобальные статистические параметры. При этом локальные статистические параметры могут иметь значения большие, чем глобальные. Для приведенного примера определена функция скейлинга, которая позволяет связать несколько параметров эксперимента для прогнозирования величины среднего перепада высот.

Одной из важных задач материаловедения в физике твердого тела является определение влияния условий создания или обработки [1–3] материалов на качество и структуру поверхности. В сканирующей зондовой микроскопии среди набора статистических параметров, которые характеризуют морфологию поверхности, чаще всего используют средний перепад по высоте и среднее или среднеквадратичное отклонение от него, т. е. шероховатость и среднеквадратичную шероховатость поверхности соответственно [4,5]. В рамках данной работы показано, что при анализе морфологии поверхности, полученной методами сканирующей зондовой микроскопии, необходимо различать локальные и глобальные статистические параметры поверхности.

При исследовании морфологии поверхности твердых тел в большинстве случаев наблюдается диапазон увеличений, в котором статистические параметры зависят от области сканирования (т. е. увеличения). Поэтому целью данной работы являлось определение зависимости среднего перепада по высоте при двухуровневой структуре поверхности.

Будем считать, что основными элементами поверхности являются зерна с шириной основания 200 nm и высотой 100 nm . Также на поверхности присутствуют скопления зерен, которые образуют сверхструктуру, по форме похожую на элементарное зерно с размерами: $4 \mu\text{m}$ — шириной и $2.1 \mu\text{m}$ — высотой. Для исследования влияния плотности сверхструктур на локальный средний перепад по высоте в сканирующей зондовой микроскопии были смоделированы профили такой поверхности. Для максимального приближения к эксперименту было заложено постоянное количество точек в профиле, равное 1024 , так как имеющиеся в распоряжении приборы позволяют получать изображения с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) максимум 1024×1024 точки. Моделируемые профили имитируют таковые для АСМ-изображений с разной площадью сканирования (увеличения) и плотностью сверхструктур.

Для упрощения задачи была выбрана трапециевидная форма для элементарных зерен, которые образуют основной рельеф, и сверхструктуры. Кроме того, для каждого размера области сканирования моделируется несколько профилей сканирования, так как на экспериментальных профилях сверхструктура может помещаться не полностью. Типичный профиль приведен на рис. 1.

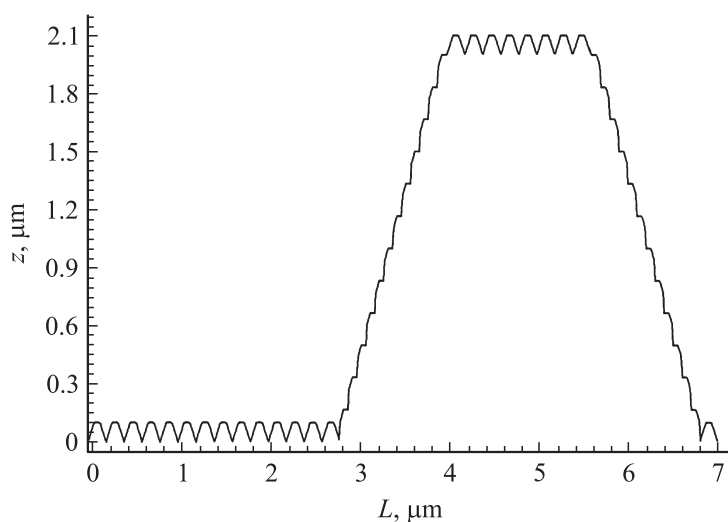


Рис. 1. Типичный профиль поверхности со сверхструктурой.

Из рис. 1 видно, что профиль поверхности со сверхструктурой можно условно разделить на две области: 1) долину — основной профиль поверхности без сверхструктуры; 2) область сверхструктуры, т. е. область, где на профиле располагается сверхструктура целиком или ее часть.

Необходимо отметить, что при областях сканирования меньше $1/3$ размера сверхструктуры все профили считаются долинами. Это ограничение связано с тем, что в процессе получения АСМ-изображений оно изначально содержит значительные искажения [6], которые необходимо исправлять при помощи математических преобразований, которые, в частности, вычитают наклонную плоскость. В результате мы не можем определить, снимаем мы поверхность боковой грани сверхструктуры, ее верхней части или часть долины.

Из смоделированных профилей поверхности были получены значения среднего перепада по высоте, на основе которых построены зависимости данного параметра от плотности сверхструктур и размера области сканирования.

В результате проведенных расчетов были получены зависимости среднего перепада по высоте (\bar{z}) от длины профиля (L) и плотности сверхструктур (N_s) (рис. 2, *a*). При малых размерах профиля (от 200 nm до $4/3 \mu\text{m}$, что составляет $1/3$ ширины сверхструктуры) средний перепад по высоте не зависит от длины профиля и плотности сверхструктур. Это обусловлено тем, что при таких областях сканирования вклад в средний перепад по высоте дают только элементарные зерна.

При увеличении длины профиля более чем на $1/3$ ширины основания сверхструктуры на зависимости среднего перепада по высоте наблюдается резкое увеличение \bar{z} . Такое увеличение вызвано вкладом точек, принадлежащих сверхструктуре, значение высоты которых изменяется от 0 до $2.1 \mu\text{m}$. Из рис. 2 видно, что, когда на профиле уместается не более 12.5 сверхструктур (что соответствует половине максимально возможной плотности сверхструктур), зависимость среднего перепада по высоте имеет вид кривой с максимумом. При увеличении плотности сверхструктур более 12.5 зависимость среднего перепада по высоте имеет вид кривой с насыщением.

Используя правила построения соотношений скейлинга [7], можно записать следующие выражения для точек выхода на насыщение ($L_{2,3}$, рис. 2, *a*) в зависимости от плотности сверхструктур:

$$\bar{z}_s \sim D^\alpha, \quad (1)$$

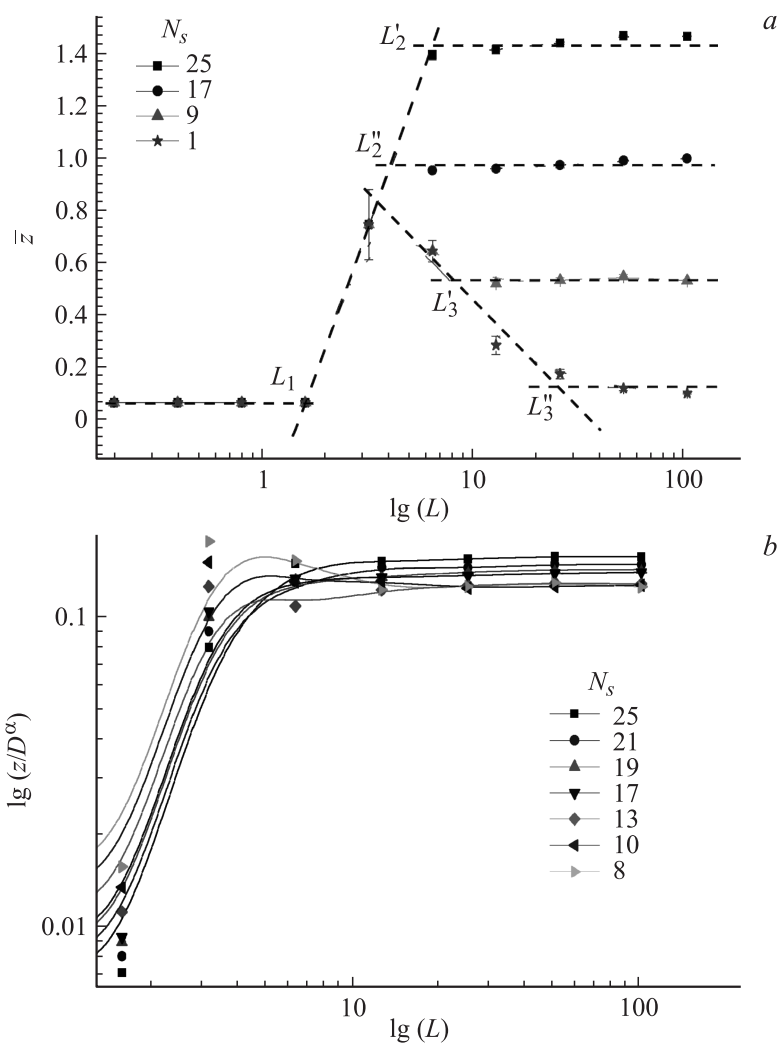


Рис. 2. Зависимость *a* — среднего перепада по высоте (\bar{z}), *b* — $\lg(z/D^\alpha)$ (преобразование скейлинга) от длины профиля и плотности сверхструктур.

где \bar{z}_s — значение насыщения среднего перепада по высоте. Показатель α определяет взаимосвязь между плотностью сверхструктур и значением насыщения для среднего перепада по высоте. Необходимо отметить, что значение \bar{z}_s соответствует глобальному значению среднего перепада по высоте, так как дальнейшее увеличение длины профиля не оказывает влияния на значение среднего перепада по высоте.

Используя выражение (1), проведем преобразование зависимости среднего перепада по высоте от длины профиля при различных значениях плотности сверхструктур. Результат данного преобразования показан на рис. 2, *b*. Как видно, преобразование такого типа приводит к слиянию семейства кривых на участке со значением длины профиля больше L_1 , равного 1/3 ширины основания сверхструктуры.

Приведенные результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными; например, на рис. 3 приведены АСМ-изображения морфологии поверхности пленки Al, которая содержит конгломераты элементарных зерен, форма которых подобна элементарному зерну, а также зависимость среднего перепада по высоте. Зависимость среднего перепада по высоте имеет вид кривой с максимумом при области сканирования порядка $10 \mu\text{m}$. Наличие максимума вызвано тем, что при относительно больших областях сканирования в среднее значение перепада по высоте вносят вклад точки, относящиеся к конгломерату.

Таким образом, при статистическом анализе АСМ-изображений необходимо выделять локальное и глобальное значение среднего перепада по высоте. Из рис. 2, *a* видно, что при наличии многоуровневой структуры поверхности (например, наличие сверхструктур) значение локального среднего перепада по высоте может значительно превышать таковое для глобального. Например, из 2, *a* видно, что при наличии 9 сверхструктур на $100 \mu\text{m}$ глобальное значение среднего перепада по высоте будет порядка 500 nm , а локальное значение среднего перепада по высоте колеблется в интервале от 100 до 800 nm . При высокой плотности сверхструктур глобальное значение среднего перепада по высоте соответствует максимальному значению локального среднего перепада по высоте.

Из зависимости, представленной на рис. 2, *a*, можно сделать обоснованное предположение о том, что если на поверхности будут присутствовать структуры еще большего размера, то на зависимости среднего перепада от длины профиля будет наблюдаться дополнительная неоднородность.

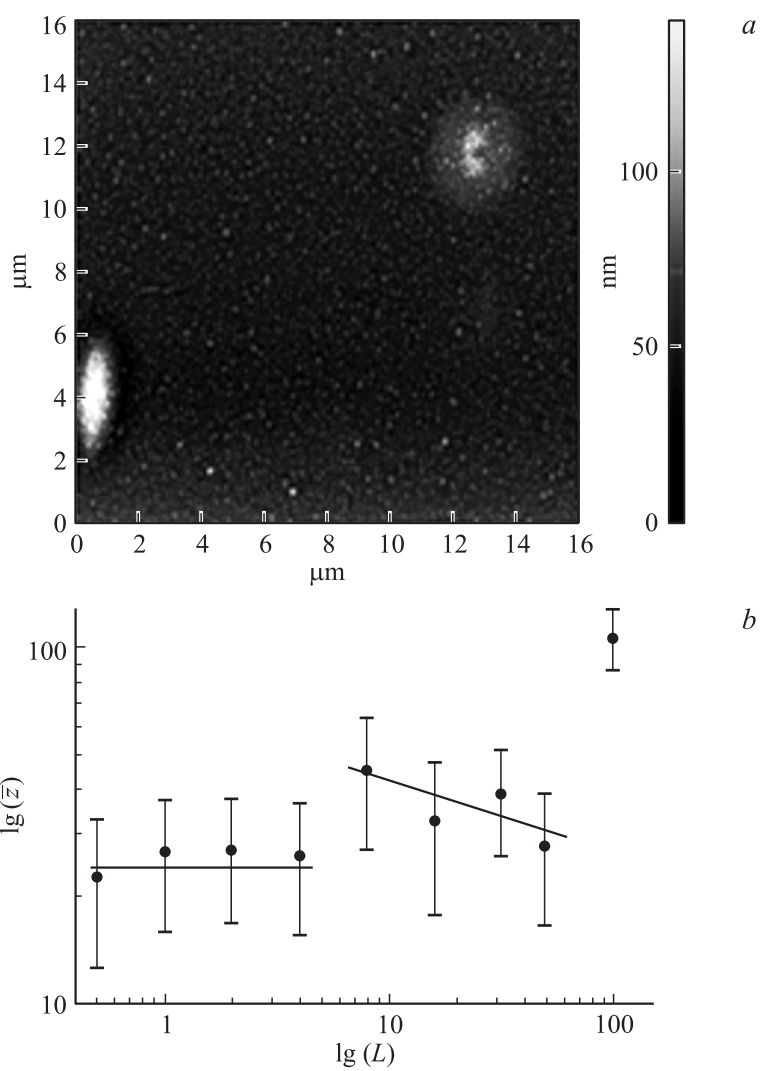


Рис. 3. АСМ-изображение поверхности алюминия (а), область сканирования $16 \times 16 \mu\text{m}$; зависимость среднего перепада по высоте от ширины области сканирования (б).

Если рассмотренные сверхструктуры заменить на поры или кратеры, то качественный вид зависимости не изменится. Изменится только значение насыщения среднего перепада, так как оно зависит от отношения высот элементарного зерна и высоты (глубины) неоднородностей, а также от их плотности.

Используя преобразование скейлинга, можно получить универсальное соотношение между средним перепадом по высоте, длиной профиля и плотностью сверхструктур, которое будет описывать все семейство кривых (рис. 2, *b*).

Аналогичные результаты могут быть получены для значений шероховатости и среднеквадратичной шероховатости. Однако зависимость данных параметров от плотности сверхструктур должна иметь более сложный вид.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 12-02-90704-моб_ст.

Список литературы

- [1] Божков В.Г., Торхов Н.А., Ивонин И.В., Новиков В.А. // ФТП. 2008. Т. 42. В. 5. С. 546–554.
- [2] Калыгина В.М., Зарубин А.Н., Новиков В.А., Петрова Ю.С., Скакунов М.С., Толбанов О.П., Тяжеев А.В., Яскевич Т.М. // ФТП. 2010. Т. 44. В. 9. С. 1266–1273.
- [3] Калыгина В.М., Зарубин А.Н., Найден Е.П., Новиков В.А., Петрова Ю.С., Толбанов О.П., Тяжеев А.В., Яскевич Т.М. // ФТП. 2012. Т. 46. В. 2. С. 278–284.
- [4] Арутюнов П.А., Толстихина А.Л., Демидов В.Н. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 1998. Т. 65. № 9. С. 27–37.
- [5] Арутюнов П.А., Толстихина А.Л. // Микроэлектроника. 1999. Т. 28. № 6. С. 405–414.
- [6] Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера, 2004. 144 с.
- [7] *Varabasi A.-L., Stanley H.E. Fractal concepts in surface growth. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1995.*