

05;11;12

Моделирование влияния радиуса иглы на чувствительность атомно-силового микроскопа

© А.В. Покропивный¹, В.В. Покропивный², В.В. Скороход²¹Московский физико-технический институт,
141700 Москва, Россия²Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
252142 Киев, Украина

(Поступило в Редакцию 4 марта 1996 г. В окончательной редакции 8 июля 1997 г.)

Методом компьютерного моделирования впервые получено изображение изосиловой поверхности с дефектом в атомно-силовом микроскопе. Детально исследована зависимость компьютерного изображения поверхностной пентавакансии от радиуса острия. Показано, что разрешающая способность повышается с уменьшением радиуса острия.

За 10 лет со дня своего появления атомно-силовой микроскоп (АСМ) стал мощным инструментом высокого разрешения для исследования структуры поверхности [1], контактных явлений в процессах адгезии, разрушения, наноинденитирования [2] и трения [3], модификации поверхности в нанолитографии [4]. Как и в других видах микроскопии, возникла проблема адекватной идентификации АСМ изображений с реальной структурой. Форма иглы влияет на силу адгезии и АСМ изображение [1], но детали этой зависимости не изучены. Очевидно, что, когда радиус острия R превышает поперечный размер поверхностного дефекта L , часть информации теряется, а изображение дефекта искажается. Эта проблема затрагивалась недавно в работе [5], где для вычисления предельно-разрешимой глубины поверхностной канавки использовалась простая геометрическая модель $h = R - [R^2 - (L/2)^2]^{1/2}$, что отражает недостаточный уровень понимания и актуальность этой проблемы. Причина в том, что идеальное разрешение достигается при уменьшении радиуса острия до атомных размеров, где само понятие радиуса теряет строгий смысл и должно быть заменено понятием атомной структуры кончика острия. Таким образом, указанная проблема трансформируется в задачу исследования взаимодействия кончика острия с поверхностью на атомном уровне. Ландман и др. [2] продемонстрировали эффективность компьютерного моделирования для решения подобных задач. Панов и др. [6–7] развили модельные представления для АСМ диагностики поверхностных дефектов. В работе [8] нами впервые методом молекулярной динамики выполнено компьютерное моделирование АСМ изображений поверхностных вакансий.

Цель данной работы — детальное изучение влияния радиуса иглы (атомной структуры кончика иглы) АСМ на компьютерное изображение избранного дефекта (поверхностной пентавакансии).

Методика моделирования базируется на стандартном методе молекулярной динамики [8]. Для упрощения в качестве материала острия АСМ и подложки выбрано железо с объемноцентрированной кристаллической решет-

кой. Использовался надежно зарекомендовавший себя парный межатомный потенциал Джонсона, подогнанный под упругие модули, энергию образования вакансии и постоянную решетки [9]. Острие АСМ моделировалось в виде параболоида вращения: из объемноцентрированной кристаллической (ОЦК) решетки вырезались все атомы, попадающие в объем, ограниченный поверхностью $z = [(x - x_0)^2 + y^2]/2R$. Подложка моделировалась в виде прямоугольного кристаллита. Для придания жесткости верхние атомы острия, а также боковые и нижние атомы подложки из динамической релаксации исключались. Изображение плоского среза из двух поверхностей (010) с $y = 0$ и $y = 0.5A$ ($A = 0.286$ nm — постоянная решетки ОЦК Fe) выводилось программой визуализации на экран компьютера. Процесс сканирование острия моделировался следующим образом. После смещения из начального положения x_0 на шаг $dx \simeq 0.05A$ вдоль атомного ряда по оси X выполнялась релаксация и рассчитывались число, энергия и сила взаимодействия межатомных связей между острием и поверхностью, попадающих в сферу действия потенциала $r_k = 1.2A$, учитывающие две координационные сферы. Их сумма дает силу взаимодействия острия с поверхностью

$$F_{ts} = - \sum_i \sum_j d\varphi(r_{ij})/dr_{ij},$$

где $\varphi(r_{ij})$ — потенциал взаимодействия между атомами поверхности i и атомами острия j .

Далее все атомы острия смещались с шагом $dz \simeq 0.01A$ по оси Z , перпендикулярной плоскости поверхности. Методом градиентного спуска искалось конечное положение, при котором упругая сила отталкивания поверхности уравновешивала бы задаваемую исходную силу давления острия $F_{ts} = F_0$. Затем изображается отрезок изосиловой линии $F_0 = \text{const}$ между начальным и конечным положением, релаксированная атомная структура и расчет повторяется. Для каждого острия проводилось 21 сканирование с шагом $dy = 0.25A$, по результатам которых восстанавливалась изосиловая поверхность. Программы написаны на языке

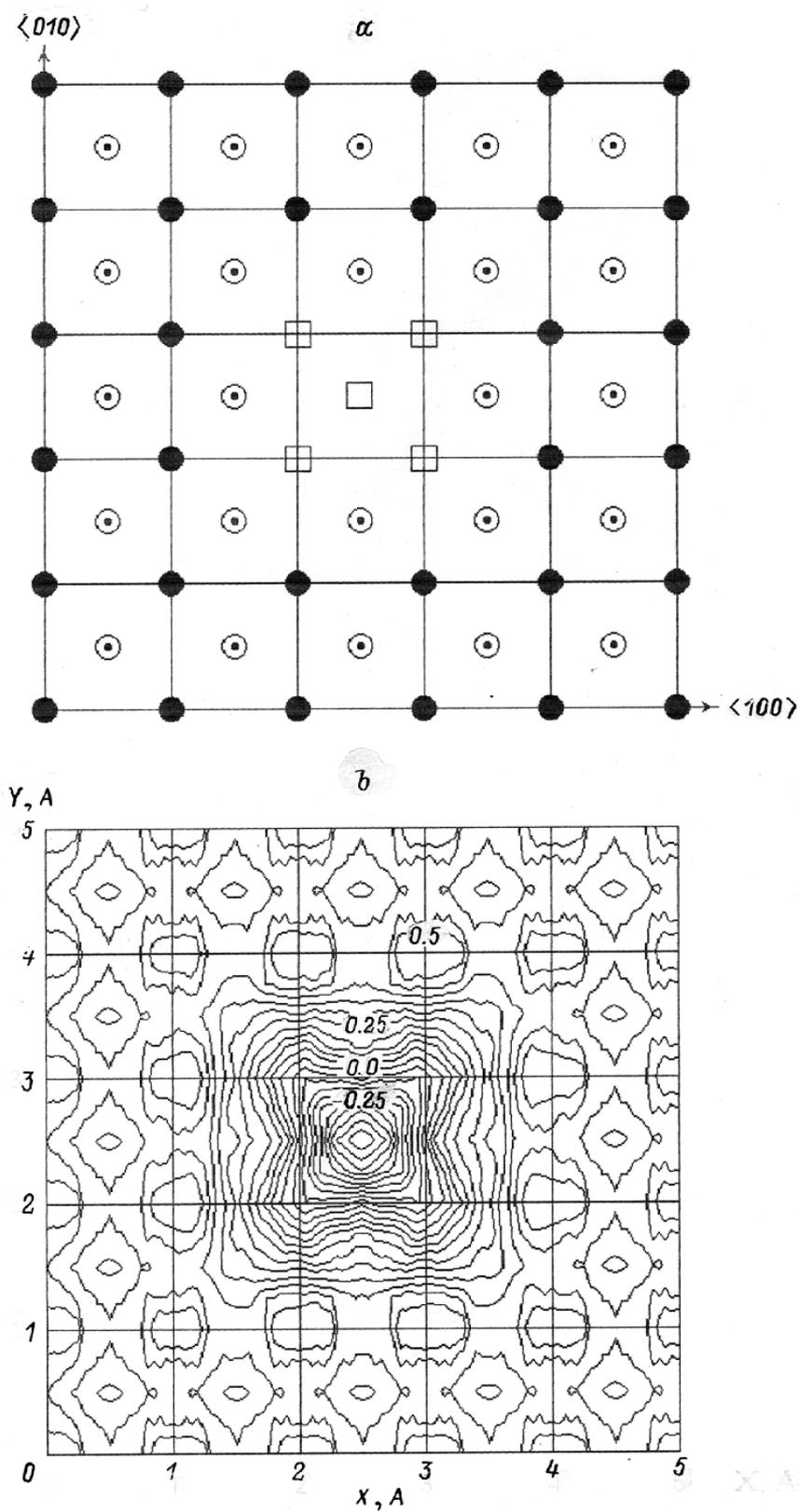


Рис. 1. Конфигурация исследуемой пентавакансии на поверхности (100) (a) и топографическое изображение ее изосиловой поверхности ($R = 0.5 \text{ \AA}$) (b).

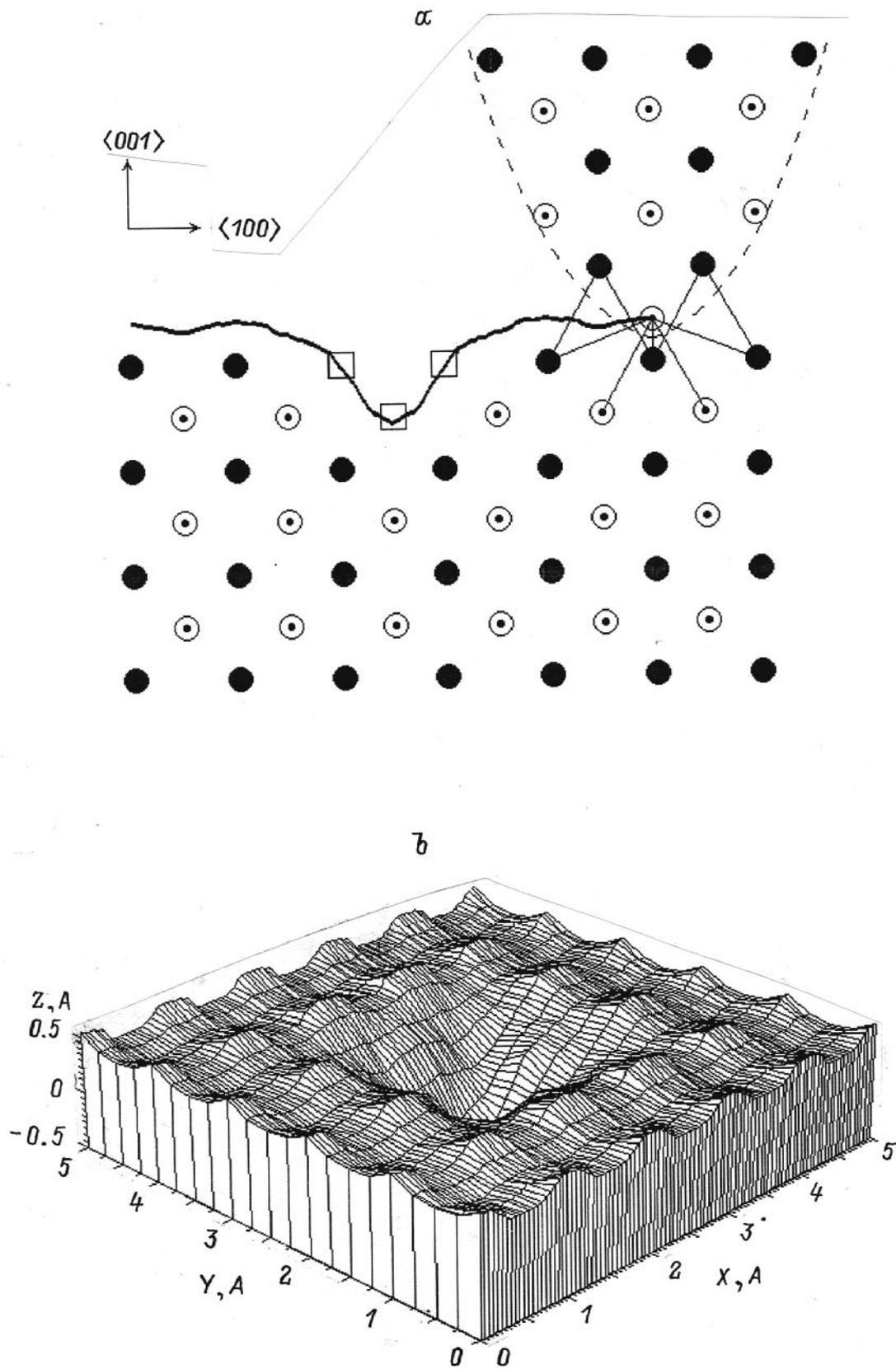


Рис. 2. Структура плоского среза кристаллита с иглой радиусом $R = 0.5 \text{ Å}$ после сканирования над центром пентавакансии (a) и изображение изосиловой поверхности пентавакансии (b).

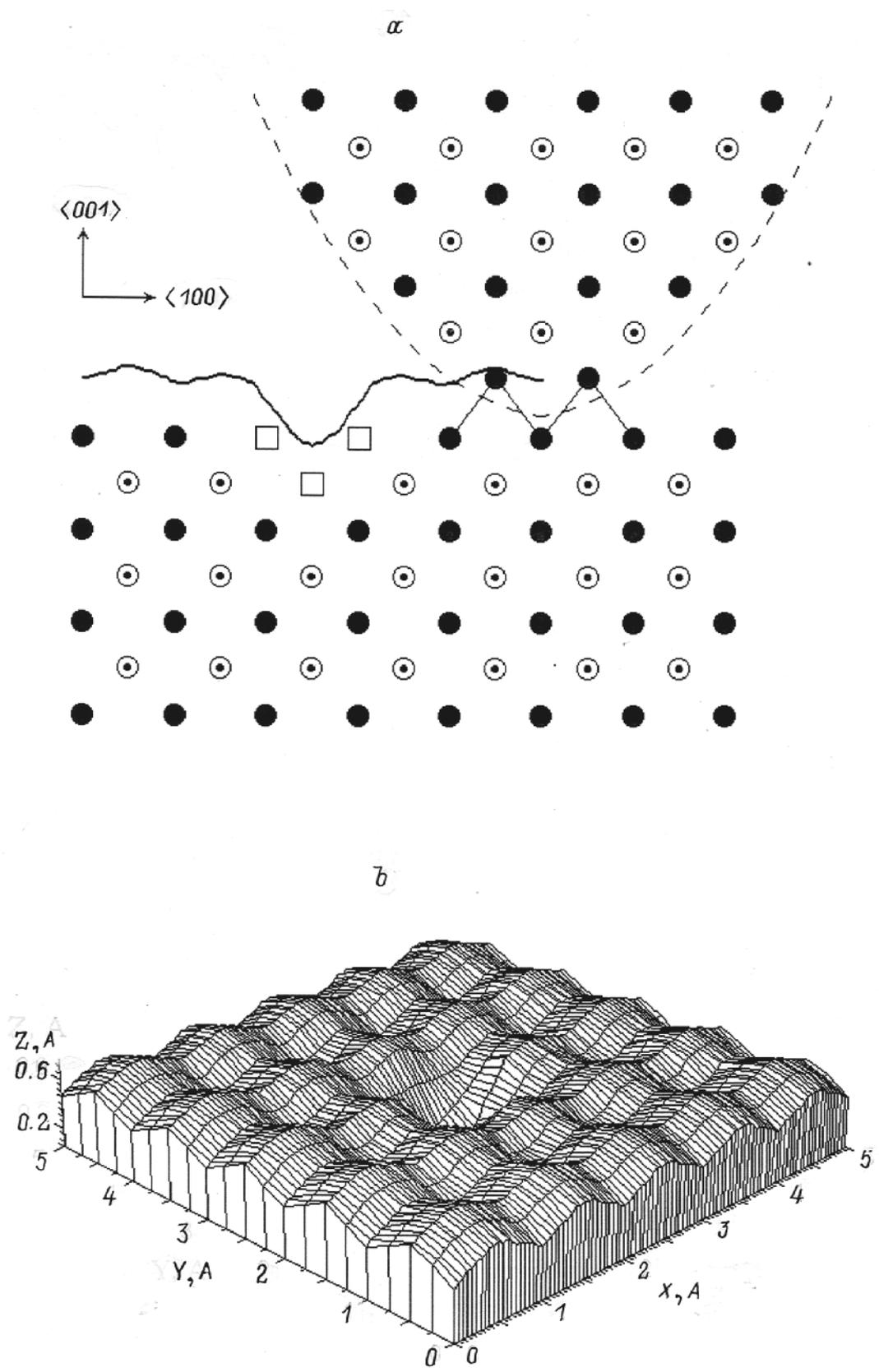


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но с иглой радиусом $R = 2 \text{ Å}$.

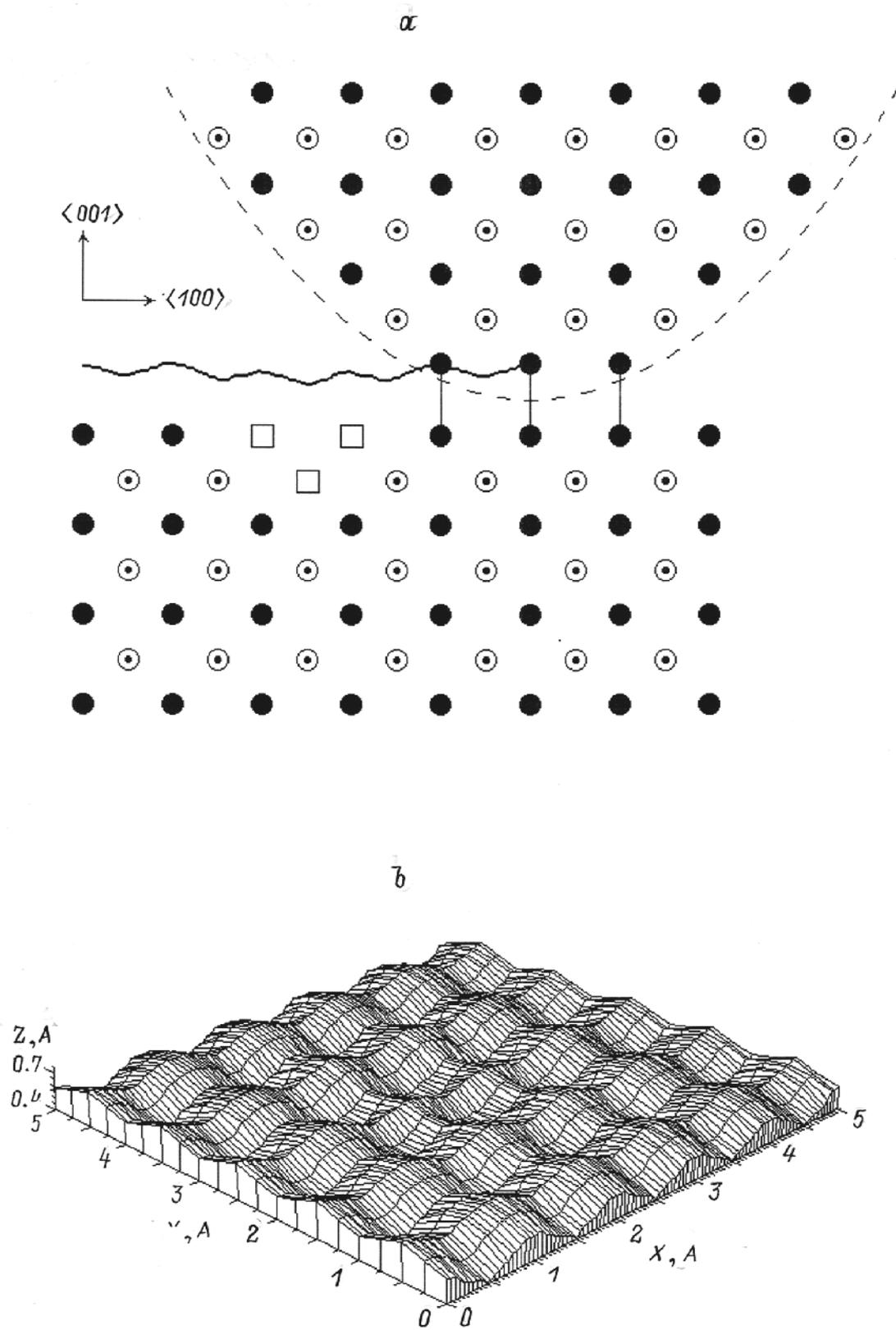


Рис. 4. То же, что и на рис. 2, но с иглой радиусом $R = 2 A$.

MS-Fortran 5.0 с использованием графического пакета на языке СИ.

Конфигурация исследуемой пентавакансии в проекциях на плоскости xu и xz , совпадающих с плоскостью (100) ОЦК решетки, представлена на рис. 1, *a* и 2, *a* соответственно. Это вакансионный кластер из четырех атомов в первом и одним атомом во втором слое (100)-поверхности. Он расположен в центре грани размером $5A \times 5A$ (рис. 1, *a*). На рис. 2, *a*, 3, *a* и 4, *a* приведена проекция атомной структуры АСМ острий радиусом 0.5, 1 и 2 \AA , на кончике которых расположены один, четыре и шесть атомов соответственно. Заметим, что в положении минимума на рис. 3, *b* острие и поверхность находятся в положении идеального совпадения. Темными и светлыми (с точкой внутри) кружками показаны динамические атомы в смежных (100)-плоскостях, а квадратиками — вакансии. Линии, соединяющие атомы, изображают парные адгезионные связи между острием и поверхностью. Кривые линии изображают линии постоянной силы. Заметим, что в отличие от атомно-острого острия (рис. 2, *a*) минимумы изосиловой линии для иглы радиусом 1.0 \AA расположены не в лунках между атомами, а над атомами (рис. 3, *a*). Это объясняется тем, что результирующее АСМ изображение является суперпозицией изображений от всех взаимодействующих атомов на кончике острия.

В тестовых расчетах была установлена сильная зависимость результатов от критерия останова релаксационной процедуры по остаточной кинетической энергии кристаллита на атом W . При $W > 10^{-2}$ eV атомы острия и поверхности не релаксируют, но взаимодействуют между собой и вносят вклад в силу адгезии F_{ts} . Этот режим, характерный для твердого острия или высокой скорости сканирования, превышающей скорость релаксации, использовался в данной работе. Значение отталкивающей постоянной силы изосиловой поверхности выбрано равным $F_0 = 100$ eV/nm = 16 nN, как часто встречающееся в натуральных экспериментах.

Результаты моделирования изображений поверхностной пентавакансии с разными радиусами иглы представлены на рис. 2, *b*, 3, *b* и 4, *b*. Сравнение этих рисунков позволяет сделать основной вывод данной работы, а именно изображения одного и того же дефекта, полученные с иглами разных радиусов, различные. Атомно-острая игла с одним атомом на кончике ($R = 0.5 < L$) дает наиболее полное изображение с разрешением всех пяти вакансий (рис. 2, *b*). Виден даже рельеф склона вакансионной ямы, обусловленный адгезионным взаимодействием острия с атомами второго слоя поверхности. Топографическое изображение изосиловой поверхности для этого случая представлено на рис. 1, *b*. Линии равной высоты проведены от -0.5 до $+0.5$ \AA с шагом 0.05 \AA . Пересечение линий сетки соответствует положению атомов в кристаллической решетке для поверхности $z = 0$ (рис. 1, *a*). Острие радиусом, равным размеру дефекта ($R = 1 \text{\AA} = L$), уже дает искаженное изображение — пентавакансия выглядит как одна вакансия (рис. 3, *b*).

И наконец, когда радиус становится больше размера дефекта ($R = 2 \text{\AA} > L$), поверхностный дефект почти не виден (рис. 4, *b*). Он проявляется только в небольшом изменении шероховатости изосиловой поверхности. Заметим, что изображение поверхности зависит не только от радиуса иглы, но и от значения постоянной силы F_0 [8].

Эта сложная зависимость требует отдельного рассмотрения. Анализ вышеизложенного показывает, что разрешающая способность АСМ увеличивается с уменьшением радиуса острия, причем предел разрешения больше радиуса иглы $\Delta L > R$. Для разрешения тонких деталей изображения требуются максимально острые иглы. В идеале это атомно-острая игла с одним атомом на кончике. Изготовление таких игл и поддержание их в таком состоянии требуют большого экспериментального мастерства. Кроме того, адгезионное взаимодействие при определенных условиях приводит к перескоку атомов с острия на подложку, вызывая затупление иглы [2,8]. Для предотвращения этого вредного эффекта иглы должны изготавливаться из максимально тугоплавкого материала, что сопряжено с большими трудностями.

В заключение можно сделать вывод, что компьютерное моделирование может служить для калибровки натуральных экспериментов, например для определения истинного радиуса иглы путем сравнения экспериментального изображения известного дефекта (к примеру вакансии) с его компьютерным изображением для разных радиусов игл. Таким образом, компьютерный эксперимент дополняет натуральный и позволяет устранить неоднозначность интерпретации изображения. Для отработки режимов работы и расшифровки изображений целесообразно создание атласа компьютерных изображений типичных дефектов. Возникает задача разработки базы изображений и программного обеспечения атомно-силового микроскопа, которое в комплексе повысит эффективность атомно-силового микроскопии. Прототипом такого сопутствующего программного обеспечения служит разработанный нами комплекс программ СИДЕМ/АСМ.

Список литературы

- [1] Giessibl F.J. // Jpn. J. Appl. Phys. Pt. 1. 1994. Vol. 33. N 6B. P. 3726–3734.
- [2] Landman U., Luedtke W.D., Burnham N.A., Colton R.J. // Science. 1990. Vol. 248. P. 454–461.
- [3] Fujisawa S., Kisni E., Sugawara Y., Morita S. // Jpn. J. Appl. Phys. Pt. 1. 1994. Vol. 33. N 6B. P. 3752–3755.
- [4] Czajka R. // Acta Phys. Polonica A. 1995. Vol. 88. N 5. P. 813–828.
- [5] Dwir D., Reinhardt F., Kapon E. // J. Appl. Phys. 1995. Vol. 78. N 8. P. 4939–4942.
- [6] Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю. // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. Вып.8. С. 65–72.
- [7] Благов У.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М. и др. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. Вып. 1. С. 71–77.
- [8] Покропивный А.В., Покропивный В.В., Скороход В.В. // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. Вып. 2. С. 1–7.
- [9] Johnson R.A. // Phys. Rev. 1964. Vol. 134A. N 5. P. 1329–1336.