

КОМПЬЮТЕРНОЕ СКАНИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ НАНООБЪЕКТОВ В ТУННЕЛЬНОМ МИКРОСКОПЕ

Е. Ю. Шелковников, Б. А. Жуйков, П. В. Гуляев, А. В. Тюриков

Институт прикладной механики УрО РАН

г. Ижевск

Компьютерное сканирование изображений поверхности нанообъектов в туннельном микроскопе актуально в связи с перспективой его использования для оценки и снижения искажений в СТМ-изображении (в частности, обусловленных конечными размерами и формой зондирующего острия (ЗО) и т.д.) и для отображения рельефа поверхностных структур с нанометровой точностью.

Алгоритм компьютерного сканирования поверхности представлен на рис.1. Перед началом сканирования устанавливаются необходимые параметры: туннельный зазор Z_0 , угол конуса α и радиус сферы закругления ЗО R . Затем вычисляется эталонный туннельный ток $I_{ТЭТ}$ (согласно выражений, полученных в [1]), который виртуальная система обратной связи сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) поддерживает постоянным. Вычисление $I_{ТЭТ}$ проводится для заданного туннельного зазора Z_0 и плоской поверхности. Компьютерное сканирование начинается с установки ЗО в начальную точку (x_0, y_0) раstra исходной поверхности, СТМ-изображение которой необходимо получить. Далее находится плотность тока в каждой точке раstra (x_i, y_i) согласно [1], определяется «видимость» ЗО в данной точке и вычисляется туннельный ток $I_T(x_i, y_i) = J_T(x_i, y_i) \cdot S(x_i, y_i) \cdot \sin \gamma$, если точка «видима» (где $J_T(x_i, y_i)$ – плотность туннельного тока; $S(x_i, y_i) = (x_{i+1} - x_{i-1})(y_{i+1} - y_{i-1})/4$ – площадь поверхности в окрестности данной точки (x_i, y_i) ; γ – угол между нормалью в точке (x_i, y_i) и отрезком прямой, являющимся минимальным расстоянием между точкой (x_i, y_i) и ЗО).

В качестве модели для описания туннелирования электронов между ЗО и проводящей подложкой использована модель одномерного плоского туннелирования [2]:

$$J_T = \frac{e}{2\pi\hbar(\beta\Delta S)^2} \cdot \left\{ \bar{\varphi} \exp(-A'\bar{\varphi}^{1/2}) - (\bar{\varphi} + eU) \exp(-A'(\bar{\varphi} + eU)^{1/2}) \right\}, \quad (1)$$

где U – напряжение между электродами; $A' = 4\pi\beta\Delta S(2m)^{1/2}/\hbar$;

$$\beta = 1 - (8\bar{\varphi}^2\Delta S)^{-1} \int_{S_1}^{S_2} [\varphi(x) - \bar{\varphi}]^2 dx \approx 1 -$$

поправочный коэффициент, корректирующий изменение J при отклонении формы потенциального барьера от прямоугольной;

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{\Delta S} \int_{S_1}^{S_2} \varphi(x) dx; \quad \varphi(x) - \text{потенциальная}$$

энергия электрона в туннельном промежутке $S_1 < x < S_2$; $\Delta S = S_1 - S_2$; S_1, S_2 – расстояния (точки поворота) от поверхности металла, при которых кинетическая энергия электрона на уровне Ферми равна потенциальной энергии; e – заряд электрона.

С применением данной модели вычисляется суммарный ток со сканируемой поверхности на ЗО путем суммирования всех найденных $I_T(x_i, y_i)$ и сравнивается с эталонным током $I_{ТЭТ}$. Если токи $I_T(x_i, y_i)$ и $I_{ТЭТ}$ не равны, то выполняется корректировка туннельного зазора следующим образом. Если $I_T(x_i, y_i) > I_{ТЭТ}$, то туннельный зазор Z_0 увеличивается (при $I_T(x_i, y_i) < I_{ТЭТ}$, Z_0 уменьшается) на определенную величину и повторно вычисляется $I_T(x_i, y_i)$. Далее с использованием линейной интерполяции уточняется значение туннельного зазора Z_0 и снова вычисляется $I_T(x_i, y_i)$. Уточнение выполняется до тех пор, пока $I_T(x_i, y_i)$ не станет равен $I_{ТЭТ}$ с заданной погрешностью δ_T . После этого в формируемый массив высот СТМ-изображения заносится сумма текущей высоты исходной поверхности и текущего значения туннельного зазора Z_0 . Затем

КОМПЬЮТЕРНОЕ СКАНИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ НАНООБЪЕКТОВ В ТУННЕЛЬНОМ МИКРОСКОПЕ

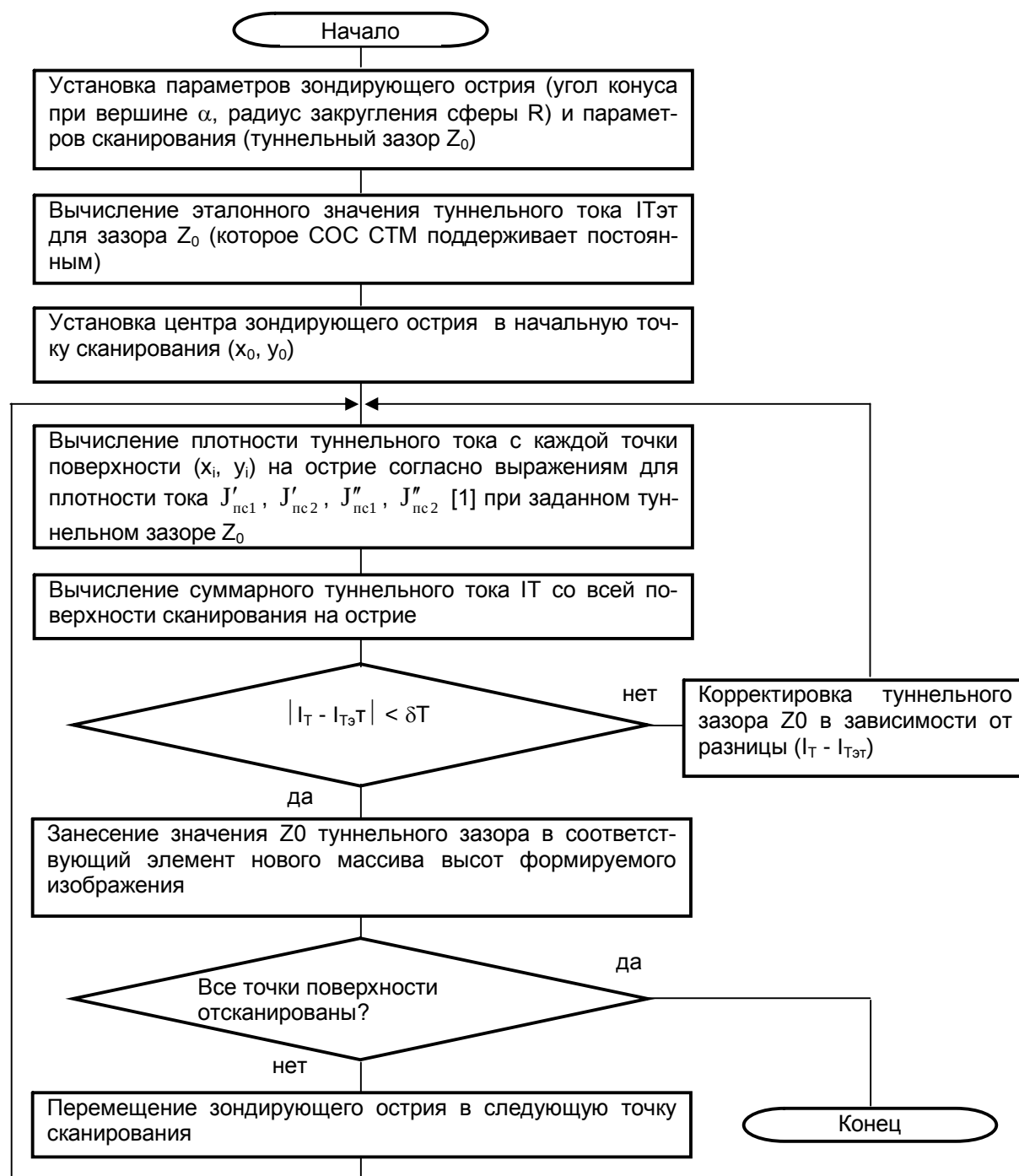


Рисунок 1 – Алгоритм компьютерного сканирования поверхности с вычислением туннельного тока

центр ЗО перемещается в следующую точку сканирования (пока не будет отсканирована вся поверхность) и процедура «виртуальной» стабилизации туннельного тока повторяется. Таким образом, в результате компьютерного сканирования исходной поверхности формируется новый массив высот исследуемой поверхности. На рис.2 приведены результаты трехмерного компьютерного сканирования с ПОЛЗУНОВСКИЙ АЛЬМАНАХ 2008 №2

применением разработанного алгоритма: исходная поверхность (а, б, в) и ее СТМ-изображение (г, д, е), при этом профилограммы (2б,д) соответствуют горизонталям 2D-вида (2а,г). В качестве исходной поверхности использовали тестовая трапецидальная решетка (высота 200А, ширина нижнего основания 200А; верхнего – 50А) и зондирующее острье конусообразной формы

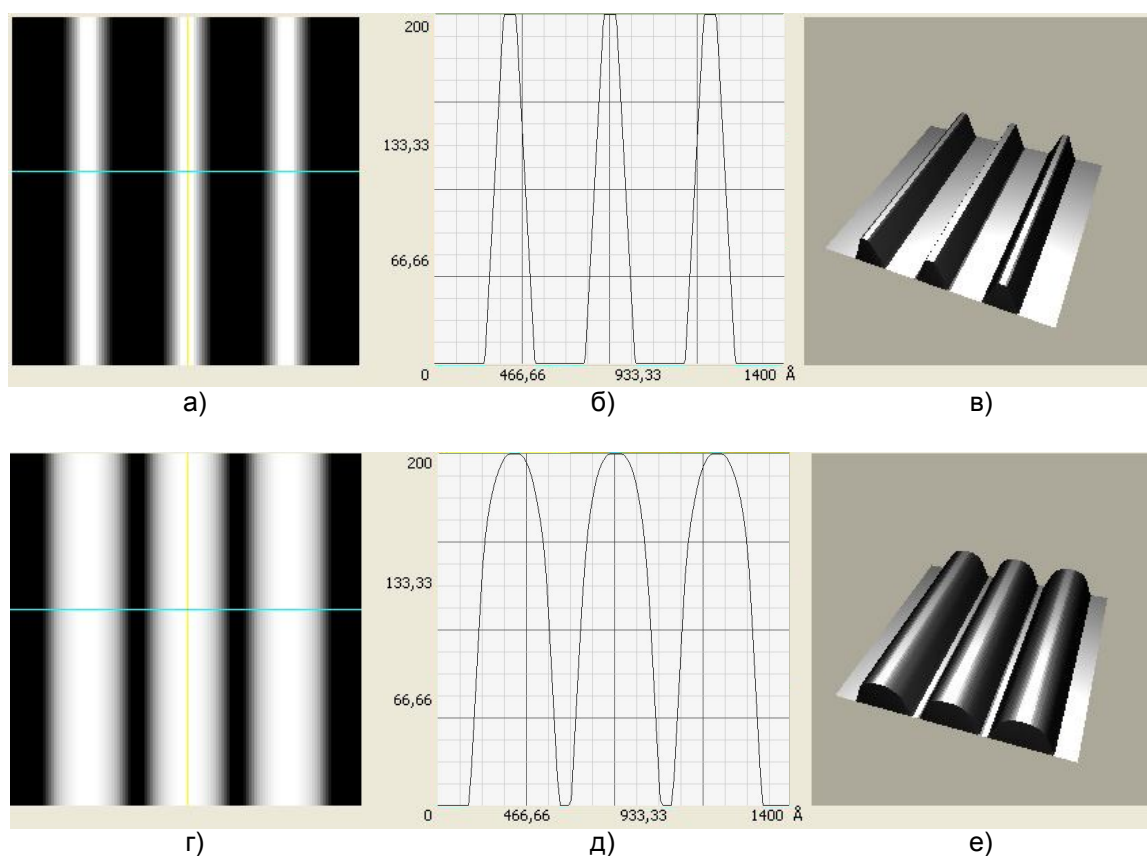


Рисунок 2 – Поверхность тестовой решетки (а, б, в) и ее СТМ-изображение (г, д, е):
а, г – 2D-вид; б, д – профилограммы; в, е – 3D-вид

со сферическим закруглением (угол конуса 15° , радиус сферы 100Å). Следует отметить, что предложенный алгоритм требует больших вычислительных, а следовательно, и временных затрат на осуществление сканирования, особенно, в случае большого размера СТМ-растра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Липанов А.М., Шелковников Е.Ю. Численные исследования параметров сканирующего туннельного микроскопа // Деп. в ВИНТИ, №2092-В00.– 36с.
2. Туннельные явления в твёрдых телах / Под ред. Э.Бурштейна и С.Лунд-квиста. – М.: Мир. 1973.– 422с.