

05;11

Применение концепции мультифракталов для характеристики структурных свойств композитных пленок фуллерена C_{60} , легированных CdTe

© А.В. Нащекин, А.Г. Колмаков, И.П. Сошников,
Н.М. Шмидт, А.В. Лоскутов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва

Поступило в Редакцию 11 февраля 2003 г.

Исследованы особенности формирования морфологии поверхности фуллереноосновных пленок C_{60} -CdTe с различным содержанием CdTe (от 0 до 100 мас.%) с использованием подходов теории информации. Характерный размер элементов поверхности пленок составляет 150–200 nm. Показана возможность применения концепции мультифракталов и методологии мультифрактального анализа для количественного сравнения топографических особенностей структуры поверхности композитных пленок. При использовании мультифрактального анализа рассчитана область концентраций CdTe 15–20%, при которой пленки имеют наиболее упорядоченную конфигурацию и получены в наиболее равновесных условиях. Показана возможность создания методом прямой электронной литографии композитных фуллереносодержащих сетчатых наноструктур с разрешением до 250 nm.

Введение. После открытия в 1985 г. и отработки технологии производства фуллерены широко исследуются, в том числе как материалы для электронно-оптической области применения [1–4]. Фуллерены и соединения на их основе также являются перспективными материалами для создания наноструктур. Так, в [4] показано, что фуллереновые пленки могут быть использованы для создания двумерных фотонных кристаллов. Причем оптические свойства фуллереновых пленок можно изменять за счет введения в них добавок полупроводниковых материалов, например CdSe и CdTe [3,4]. При этом наблюдается также изменение топографической структуры поверхности пленок, выявляющееся при ее исследовании методами атомно-силовой микроскопии и сканирующей

электронной микроскопии. Однако количественное сравнение выявленных структурных особенностей поверхности до недавнего времени вызывало большие затруднения.

Для количественного описания объектов, имеющих сложную структуру, в физике конденсированного состояния и материаловедении могут быть использованы подходы теории информации, в частности методология мультифрактальной параметризации структур [5]. Эта методология существенно дополняет традиционные методы тем, что позволяет количественно оценить степень однородности и упорядоченности общей конфигурации исследуемой структуры в целом. Перспективность использования методологии мультифрактальной параметризации для количественного описания топографической структуры пленочных электронно-оптических материалов была успешно продемонстрирована в работе [6].

В данной работе выясняется возможность и эффективность использования концепции мультифракталов для количественной характеристики структурных особенностей поверхности композитных пленок на основе фуллерена C_{60} с разным содержанием CdTe (от 0 до 100 мас.%).

Материалы и методики. В качестве основного материала для исследования использовались композитные пленки C_{60} –CdTe с толщиной от 200 до 1000 nm, осажденные на подложки GaAs (100), Si (100) методом вакуумного термического испарения на установке ВУП-5М (Сумы, НПО „Электрон“) из эффузионного источника. Отметим, что температура подложек при напылении составляла 160°C. Исходные материалы C_{60} и CdTe для приготовления смеси имели чистоту не хуже, чем 99.98% и 99.999% соответственно. Испаряемый порошок смеси C_{60} –CdTe размельчался до 1 μ m и затем спекался при температуре 300–350°C в течение 2 h. Процентное содержание CdTe по массе в смеси $(C_{60})_{1-x}(CdTe)_x$ составляло $x = 0, 15, 40$ и 100%.

Получение изображений топографической структуры поверхности (ТСП) исследуемых пленок осуществлялось на растровом электронном микроскопе CamScan Series 4 DV100. Для получения дополнительной информации изображения топографической структуры поверхности получали при двух разных увеличениях.

Для получения мультифрактальных характеристик исследуемых структур применяли оригинальную методику мультифрактальной параметризации структур, основанную на использовании метода генерации мер огрубленных разбиений [5]. Предварительная обработка изучаемых

изображений структур заключалась в их аппроксимации цифровыми компьютерными изображениями с использованием компьютерной графики. Аппроксимирование изображений структур производилось путем присвоения пикселям, приходящимся на выступы, значения „1“ (белый цвет), а на остальную область поверхности — „0“ (черный цвет) [5]. Таким образом, для мультифрактальных расчетов использовались подготовленные черно-белые изображения изучаемых структур, представляющие собой графические файлы формата „bmp“. Компьютерные расчеты проводили с использованием специальной компьютерной программы MFRDrom, разработанной Г.В. Встовским [5].

Согласно проведенным ранее теоретическим и экспериментальным исследованиям [5], в целях количественной параметризации целесообразно использовать такие мультифрактальные характеристики, как обобщенные энтропии (размерности) Реньи D_q (при положительных $q = \max$, в нашем случае $q_{\max} = 100$) и упорядоченности Δ_q при положительных q_{\max} . При этом используются „нисходящие“ ветви канонических мультифрактальных спектров и „восходящие“ ветви псевдомультифрактальных спектров. Характеристики D_q несут некоторую количественную информацию о термодинамических условиях формирования изучаемых структур [5]. В некоторых случаях можно сказать, что большие значения D_q (при $q \gg 1$) соответствуют большим значениям энтропии. В связи с этим величина D_q может применяться в качестве эффективного средства при распознавании изучаемых структур материалов, не различимых или слабо различимых при использовании традиционных количественных методов. Иначе говоря, существует возможность, с одной стороны, опознавать структуры, полученные в одних и тех же условиях, а с другой стороны, устанавливать взаимосвязь с условиями формирования структур.

Показатель Δ_q отражает степень упорядоченности и нарушения симметрии для общей конфигурации исследуемой структуры в целом. Увеличение (по модулю) Δ_q для исследуемой серии структур показывает, что в структуре становится больше периодической составляющей и что система накачивается информацией (негэнтропией) и в ней возрастает степень нарушенной симметрии [5]. Величины Δ_q , полученные из канонических и псевдоспектров, отражают несколько разную упорядоченность. Показатель Δ_q^c , полученный из канонических спектров, отражает степень упорядоченности и нарушения симметрии для макроконфигурации исследуемой структуры, а для псевдомультифрактального варианта расчета показатель Δ_q^p отражает степень нарушения локальной

симметрии меры изучаемой структуры по отношению к мультифрактальному преобразованию, усредненной по всей структуре [5].

Поскольку при мультифрактальном анализе рассматривается распределение какой-либо величины на геометрическом носителе, то в данном случае изучали распределение единичных элементов структуры (резко выступающих элементов поверхностного рельефа) на плоскости.

Результаты и их обсуждение. Исследования топографической структуры поверхности композитных фуллереноосновных пленок C_{60} -CdTe с помощью сканирующего электронного микроскопа показали заметные структурные изменения поверхности пленок C_{60} с увеличением процентного содержания CdTe в них (рис. 1, *a-c*). При этом эти изменения носят сложный характер и приводят к огрублению рельефа поверхности и к появлению эффекта кластеризации. Традиционные методы обработки результатов сканирующей микроскопии не

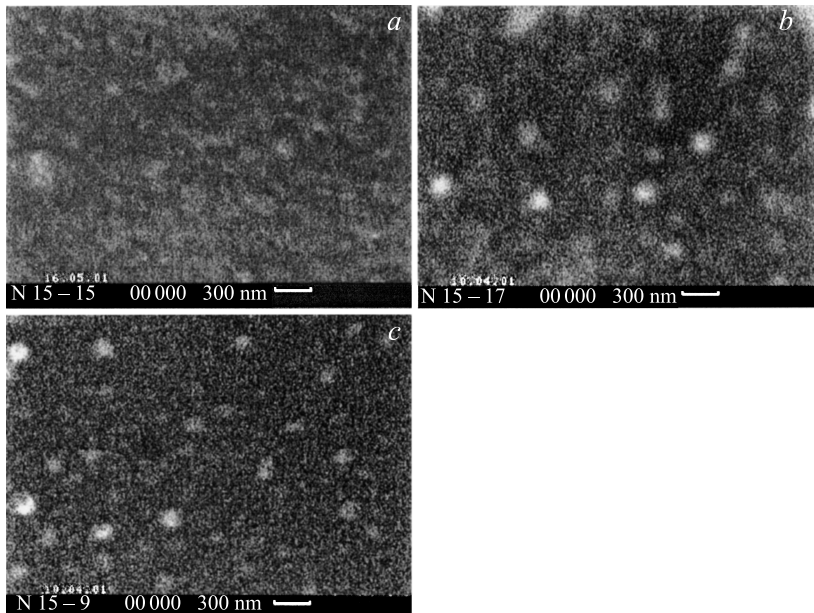


Рис. 1. Изображения топографической структуры поверхности пленок системы „фуллерен C_{60} -CdTe“, полученные с помощью растрового электронного микроскопа: C_{60} -15% CdTe (*a*), C_{60} -40% CdTe (*b*), CdTe-100% (*c*).

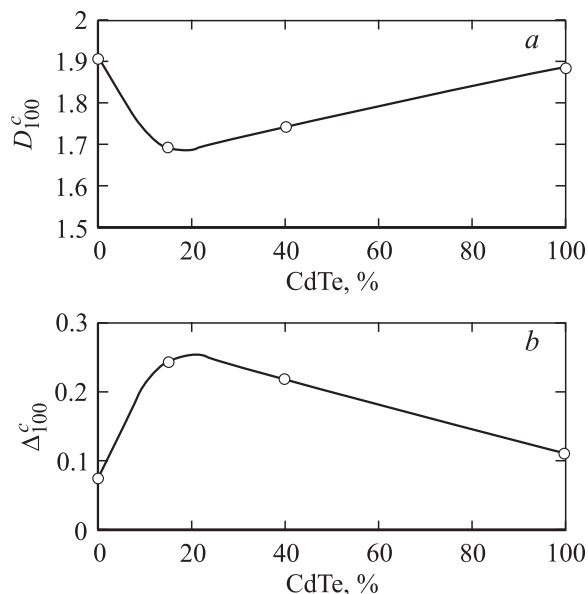


Рис. 2. Взаимосвязь основных мультифрактальных характеристик топографической структуры поверхности композитных фуллереноосновных пленок C_{60} –CdTe с содержанием добавки CdTe в мас.% (канонический вариант расчета).

позволяют провести количественные сравнения наблюдаемых изменений. Для количественной характеристики наблюдаемых изменений был использован мультифрактальный анализ. Из данных сканирующей электронной микроскопии для пленок C_{60} с разным содержанием CdTe были определены значения размерности Реньи (D_{100}) и показателя степени упорядоченности макроконфигурации в целом (Δ_{100}^c).

Зависимость D_{100} от содержания CdTe в пленках C_{60} имеет четко выраженный минимум в области составов CdTe 15–20% (рис. 2, кривая 1). Поскольку размерность Реньи несет информацию о термодинамических условиях [5] формирования исследованных пленок, то полученная зависимость свидетельствует о том, что формирование пленок с минимальными значениями D происходит в наиболее равновесных условиях и уровень самоорганизации этих пленок наиболее высокий из всех исследованных.

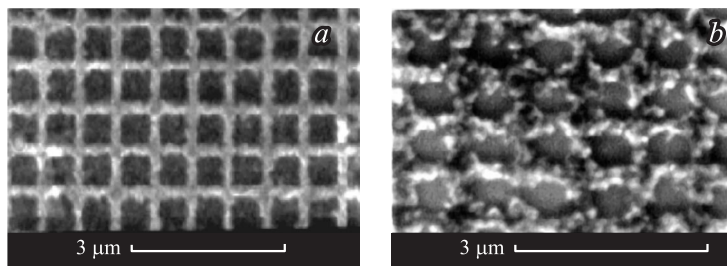


Рис. 3. Изображение наноразмерной сетчатой композитной структуры с периодом 780 nm C_{60} –15% CdTe (*a*) и с периодом 900 nm C_{60} –40% CdTe (*b*).

Зависимость показателя степени упорядоченности имеет четко выраженный максимум в той же области составов CdTe (рис. 2, кривая 2). Максимальные значения Δ_{100}^c свидетельствуют о большей степени упорядоченности макроконфигурации пленок C_{60} с содержанием CdTe 15–20%.

Выводы, полученные из мультифрактального анализа, хорошо коррелируют с результатами электронной литографии. Методами электронной литографии и химического травления [4] на этих пленках с разным содержанием CdTe создавали наноразмерные сетчатые структуры с периодом 780 nm. Наибольшее разрешение получено на пленках C_{60} с содержанием CdTe 15–20% (сравн. рис. 3, *a, b*).

Выводы.

1. Введение CdTe в фуллереноосновные пленки C_{60} вызывает структурные изменения, проявляющиеся в огрублении рельефа поверхности и появлении эффекта кластеризации. Эти изменения носят сложный характер. Традиционные методы обработки результатов сканирующей электронной микроскопии не позволяют провести количественные сравнения наблюдаемых изменений для пленок с разным процентным содержанием CdTe.
2. Применение концепции мультифракталов и методологии мультифрактального анализа позволяют провести количественное сравнение топографических особенностей структуры поверхности пленок C_{60} с разным содержанием CdTe и выделить область составов

с процентным содержанием CdTe 15–20%. Мальтифрактальный анализ показал, что пленки такого состава получены в наиболее равновесных условиях и имеют наиболее упорядоченную конфигурацию из всех исследованных.

3. Результаты мальтифрактального анализа хорошо коррелируют с результатами электронной литографии. Формирование сетчатого рисунка методом прямой электронной литографии на пленках C_{60} с разным содержанием CdTe показало, что наибольшее разрешение получено на пленках с процентным содержанием CdTe 15–20%.

Таким образом, первые эксперименты по применению концепции мальтифракталов и методологии мальтифрактального анализа для количественной характеристики структурных особенностей поверхности композитных пленок дали положительные результаты и указывают на перспективность их применения для оптимизации технологических процессов получения композитных пленок.

Работа выполнена при поддержке ФЦП „Интеграция“, проект Б-0101, а также Российско-Украинской научно-технической программы „Создание и исследование нелинейно-оптических, переключающих структур на основе фуллеренсодержащих композитных материалов“ № 2000–5F, 2000 г.

Список литературы

- [1] Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Elkund P.C. Science of fullerene and carbon nanotubes. San Diego: Academic Press, 1995. P. 965.
- [2] Optical and electronic properties of fullerenes and fullerene-based materials/ Ed. by Shinar J. New York: „J. Dekker“, 1999. P. 392.
- [3] Макарова Т.Л. // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. В. 3. С. 257–293.
- [4] Gaevski M.E., Kognovitskii S.O., Konnikov S.G., Nashchekin A.V. et al. // Nanotechnology. 2000. N 11. P. 270–273.
- [5] Vstovsky G.V., Kolmakov A.G., Terentjev V.F. // MEDŽIAGOTYRA (Materials Science). 1999. N 2 (9). P. 62–65.
- [6] Kolmakov A.G., Emtsev V.V., Lundin W.V., Ratnikov V.V., Shmidt N.M., Titkov A.N., Usikov A.S. // Physica B: Physics of Condensed Matter. 2002. V. 308–310. P. 1141–1144.