

05; 11; 12

© 1993

ЯВЛЕНИЕ НАРУШЕНИЯ НЕПРЕРЫВНОСТИ ЛИНИЙ ПОСТОЯННОЙ СИЛЫ НАД ПОВЕРХНОСТЬЮ С ПЕРЕПАДОМ РЕЛЬЕФА И РАЗРЕШЕНИЕ АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА

В.М. Мостепаненко, В.И. Панов,
И.Ю. Соколов

1. Введение

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из самых перспективных методов, позволяющих проводить анализ рельефа диэлектрических, металлических и полупроводниковых поверхностей с атомным разрешением (см., например, [1-4] и монографию [5]). При практическом использовании метода АСМ встают вопросы выбора режима работы с преобладанием сил притяжения или отталкивания, а также расшифровки получаемых изображений. Для их последовательного решения необходимо произвести расчеты поверхностей постоянной силы при сканировании над типовыми рельефами и определить разрешение АСМ в зависимости от расстояния между острием и исследуемой поверхностью.

Продольное разрешение можно определять как степень размытия изображения прямоугольной ступеньки, полученного при сканировании над ней острия АСМ. При этом за продольное разрешение принимается расстояние, на котором происходит перепад высот поверхности постоянной силы, равный $0.7H$, где H - высота ступеньки (см., рис. 1). Иногда под продольным разрешением АСМ понимают размер той части плоского образца под острием, взаимодействие с которой составляет 70% от общей силы. Так, определяемое разрешение найдено в работах [4, 6] для режима сил притяжения (т.е. для расстояний между острием и поверхностью образца $\geq 4 \text{ \AA}$). Следует отметить, что данное определение теряет смысл в переходном режиме (где полная сила при некотором значении расстояния обращается в нуль) и в режиме сил отталкивания. В то же время, в режиме сил притяжения оно дает такие же результаты, как и определение, основанное на степени размытия ступеньки (отметим, что вертикальное разрешение АСМ определяется параметрами датчика смещений острия и найдено в [4, 6]).

В настоящей работе впервые рассчитано силовое взаимодействие между острием АСМ и поверхностью с прямоугольной ступенькой. Показано, что при некоторых начальных высотах сканирования, соответствующих силам, близким к минимальной на зависимости силы от расстояния, поверхности постоянной силы претерпевают разрыв в окрестности ступеньки. Найдена зависимость продольного разре-

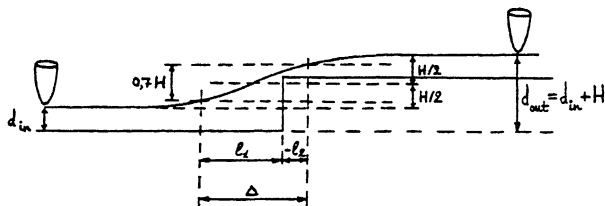


Рис. 1. Определение горизонтального разрешения АСМ Δ по степени размытия изображения ступеньки высотой H , полученного при сканировании вдоль поверхности постоянной силы с начальной высотой острия над образцом d_{in} .

шения АСМ, определяемого как степень размытия ступеньки, от расстояния между острием и поверхностью как в режиме сил притяжения, так и в режиме отталкивания.

2. Силовая зависимость между острием АСМ и поверхностью с прямоугольной ступенькой

Определим силу, действующую между острием АСМ и поверхностью с прямоугольной ступенькой, изображенной на рис. 1. Острие АСМ будем моделировать параболоидом вращения вокруг оси z с радиусом кривизны $R: z = (x^2 + y^2)/2R + d$, где d — расстояние от параболоида до поверхности образца, находящегося в плоскости (x, y) .

Суммарная сила F_{tot} складывается из обменных сил отталкивания F_{rep} и ван-дер-ваальсова притяжения F_{attr} . Вычисление F_{attr} может быть проведено по методу, использованному в работах [4, 6]. Сначала производится аддитивное суммирование потенциалов ван-дер-ваальсова взаимодействия ($\sim r^{-6}$) между отдельными атомами острия и образца. Затем константа полученного потенциала уменьшается в том же отношении, в каком различаются аддитивный и точный потенциалы для двух плоско-параллельных пластин (последнее позволяет приблизительно учесть неаддитивность ван-дер-ваальсова взаимодействия). Как показано в [4, 6], погрешность получаемых данным методом результатов не превосходит 20%, что соответствует погрешности эксперимента. Проводя расчет по указанной методике, удастся взять аналитически все интегралы по объемам параболического острия и образца со ступенькой. В результате имеем:

$$F_{attr} = -\frac{AR}{12d^2} - \frac{AR}{12(d-H)^2} - \frac{AR}{6} [I(d-H) - I(d)], \quad (1)$$

где обозначено

$$\begin{aligned}
 I(B) = & \frac{1}{4} B^{-3} (l^2 + 2RB)^{-3/2} (4B^2 + R^2 + 4l^2 + 4BR)^{-1/2} \times \\
 & \times \left[7l^2 RB + 4B^3 R + 4B^2 R^2 + 2l^4 - 2B^2 l^2 - 8B^4 \right] \operatorname{sign} l \times \\
 & \times \left[2B^2 + l^2 + RB - |B| (4B^2 + 4l^2 + 4BR + R^2)^{1/2} \right]^{1/2} + \\
 & + l (l^2 + 2RB)^{1/2} (2B^2 - 5BR - 2l^2) \left[2B^2 + l^2 + RB + |B| (4B^2 + 4l^2 + 4RB + R^2)^{1/2} \right]^{1/2} \}.
 \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь A – константа Гамакера, l – расстояние (со своим знаком) от проекции центра острия на плоскость образца до ступеньки (слева от ступеньки l положительно, справа – отрицательно). Для использованных в [4, 6] образцов (лейкосапфир) и лейкосапфирового острия АСМ константа Гамакера имеет значение $A \approx (2-4) \times 10^{-19}$ Дж [7].

Сила отталкивания острия АСМ в области справа от ступеньки (при $l < 0$, см. рис. 1) дается тем же выражением, что и для плоского образца [8]:

$$F_{rep} = \frac{\alpha N}{(d-H)^{13}}, \quad (2)$$

где α – константа обменного взаимодействия, N – число атомов на кончике острия АСМ (такая зависимость сил отталкивания от расстояния имеет место для атомов, сближенных до расстояний $\sim (1-4) \text{ \AA}$).

Если же острие АСМ находится слева от ступеньки ($l > 0$), то, помимо отталкивания от плоскости, необходимо учесть и отталкивание острия от края ступеньки:

$$F_{rep} = \frac{\alpha N}{d^{13}} - \frac{\alpha N_1}{D^{13}} \sin \gamma. \quad (3)$$

Здесь D – расстояние от боковой поверхности острия до края ступеньки, γ – угол, под которым перпендикуляр, выходящий из точки боковой поверхности острия, ближайшей к краю ступеньки, пересекает плоскость образца (x, y) ; N_1 – эффективное число соприкасающихся атомов острия и ступеньки. Для простоты далее предположим $N = N_1$, что не сказывается сколько-нибудь существенно на результатах.

Проводя элементарные тригонометрические расчеты, получим:

$$D = (l - x_0) \left[1 + (R/x_0)^2 \right]^{1/2}, \quad \sin \gamma = R / (R^2 + x_0^2)^{1/2}, \quad (4)$$

$$x_0 \approx R \left\{ \left[\frac{l}{R} + G \right]^{1/3} + \left[\frac{l}{R} - G \right]^{1/3} \right\}, \quad G = \left[\frac{8}{27} \left(1 + \frac{d-H}{R} \right)^3 + \frac{l^2}{R^2} \right]^{1/2}.$$

В работах [4, 6, 8] использовалось острие с $R \approx 100 \text{ \AA}$, а константа обменных сил оказалась равной $\alpha N = 7,2 \cdot 10^{-4} \text{ Н} \cdot \text{А}^{13}$ [8]. Легко установить зависимость αN (точнее, N) от R . Предположим, что значение N определяется числом атомов на плоском кончике острия АСМ, сплюсненном силами отталкивания. Тогда площадь плоского участка $S = 2\pi R \Delta z$, где Δz — величина деформации кончика острия. Для определения Δz найдем силу отталкивания в приближении аддитивного суммирования. Как известно [8], потенциал сил отталкивания, действующих между отдельными атомами, верный вплоть до больших расстояний (параметризация степенью вида (2) здесь некорректна), имеет вид $U \sim \exp(-r/\lambda)$, где λ — некоторая постоянная. Интегрируя по объемам острия и плоского образца, получим после дифференцирования по d (расстояние между острием и образцом) $F_{rep} \sim R \exp(-d/\lambda)$. Величина упругой деформации Δz определится тогда по закону Юнга $\Delta z \sim F_{rep}/S \sim \sim \exp(-d/\lambda)/2\pi \Delta z$. Следовательно, Δz не зависит от R . Поэтому число атомов на кончике острия, непосредственно взаимодействующих с образцом, $N \sim S \sim R$. Исходя из этого, для острия с произвольным радиусом кривизны имеем:

$$\alpha N = \alpha N \Big|_{R=100 \text{ \AA}} \cdot \left(\frac{R}{100 \text{ \AA}} \right). \quad (5)$$

Стоит отметить также, что зависимость Δz от d приводит к переопределению величины λ в экспоненциальном законе сил отталкивания. При аппроксимации его степенным потенциалом $\sim r^{-12}$ (формулы (2), (3)) это означает переопределение α . Данное обстоятельство, однако, не существенно в дальнейшем, поскольку мы пользуемся значением αN , полученным эмпирически в [8].

3. Разрыв линий постоянной силы при сканировании над ступенчатой поверхностью

Полная сила, действующая между острием АСМ и поверхностью со ступенькой, может быть представлена в виде $F_{tot} = F_{rep} + F_{attr}$, где сила притяжения дается выражением (1), а сила отталкивания выражениями (2), (3) соответственно справа и слева от ступеньки. Семейства линий постоянной силы получены в результате численного решения уравнения $F_{tot}(R, H, l) = const$ и изображены на рис. 2 и 3 при $R = 100 \text{ \AA}$ и двух различных высотах ступеньки ($H = 2 \text{ \AA}$, $H = 5 \text{ \AA}$). Как видно из рисунков, некоторые линии

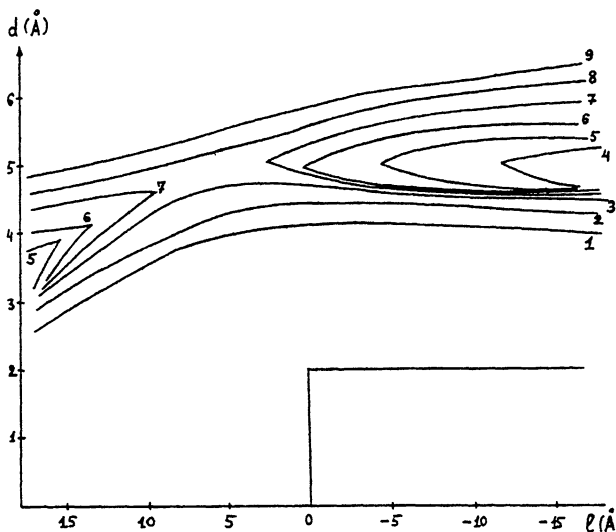


Рис. 2. Линии постоянной силы для острия с радиусом кривизны $R = 100 \text{ \AA}$ при высоте ступеньки $H = 2 \text{ \AA}$. Номерам линий 1, 2, ..., 9 соответствуют силы $(74, 8.2, -2.1, -5.1, -4.4, -4.0, -3.4, -3.0, -2.7) \cdot 10^{-9} \text{ Н}$.

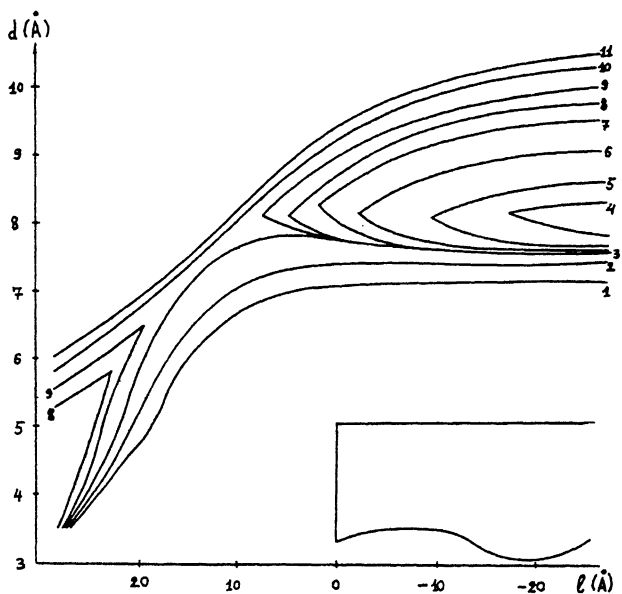


Рис. 3. Линии постоянной силы для острия с радиусом кривизны $R = 100 \text{ \AA}$ при высоте ступеньки $H = 5 \text{ \AA}$. Линиями 1, 2, ..., 11 соответствуют следующие силы: $(74, 8.2, -2.1, -5.1, -4.4, -3.4, -2.7, -2.4, -2.2, -2.0, -1.8) \cdot 10^{-9} \text{ Н}$.

постоянной силы (соответствующие определенным начальным высотам над поверхностью слева от ступеньки вдали от нее) являются непрерывными и продолжаются при любых значениях l . В то же время другие имеют точку поворота, так что существуют такие значения l вблизи ступеньки, для которых линия постоянной силы с данной силой отсутствует (явление нарушения непрерывности). Для линий постоянной силы, отсутствующих в области ступеньки, одной и той же силе соответствуют две различные высоты острия над поверхностью образца.

Это явление можно легко объяснить качественно на модельном примере высокой ступеньки. При малых d определяющий вклад в F_{tot} вносит быстро растущая сила отталкивания, а при увеличении d становятся существенными силы притяжения, так что с ростом d F_{tot} начинает уменьшаться, проходит через нуль, доходит до минимума (отрицательного) и при дальнейшем увеличении d стремится к нулю.

Пусть теперь острие находится вдали от ступеньки слева от нее и на таком расстоянии d_0 , что сила сканирования F_{tot} близка к минимально возможной F_0 . Выражение F_0 через d_0 при этом такое же, как для плоского образца [4]: $F_0 = \alpha N/d_0^{13} - AR/6d_0^2$. Если предположить теперь, что острие АСМ расположено непосредственно над краем высокой ступеньки, то вследствие симметрии задачи минимальное значение F_{tot} приближенно равняется $F_0/2$ (поскольку полуплоскость левее высокой ступеньки практически не вносит вклада в результат). Таким образом, вблизи ступеньки отсутствуют поверхности постоянной силы, отвечающие силам $F_{tot} \approx F_0$. В то же время линии постоянной силы, отвечающие силам $F_{tot} > F_0/2$, остаются непрерывными.

В заключение данного раздела отметим, что описанное явление нарушения непрерывности при сканировании над ступенькой не связано с идеально прямоугольной формой рассмотренной ступеньки. Как показывают простые оценки, такое явление для линий, отвечающих минимальным силам, имеет место всегда, когда острие АСМ сканирует над поверхностью с перепадом уровней рельефа. Данное обстоятельство, во избежание появления артефактов, необходимо учитывать при выборе режима работы АСМ.

4. Продольное разрешение АСМ

В соответствии со сказанным во введении, продольное разрешение Δ определяется как разность $\Delta = l_1 - l_2$, где l_k - корни уравнения, задающего линии постоянной силы:

$$F_{tot}(R, d_k, l_k) = F_{in} = const. \quad (6)$$

Здесь, согласно рис. 1, обозначено также $d_k = d_{in} + c_k H$, $c_1 = 0.15$, $c_2 = 0.85$ (так что $d_2 - d_1 = 0.7H$), d_{in} - начальная высота острия АСМ над образцом, F_{in} - соответствующая данной начальной высоте сила. Она, очевидно, равна $F_{tot}(R, d_{in}, l \rightarrow \infty)$ т.е. совпадает со значением полной силы вдали от ступеньки.

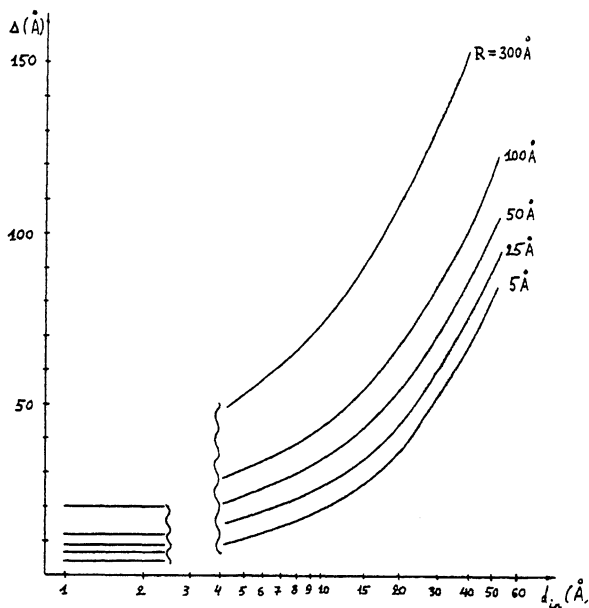


Рис. 4. Зависимость продольного разрешения Δ от начального расстояния между образцом и острием при высоте ступеньки $H = 2 \text{ \AA}$.

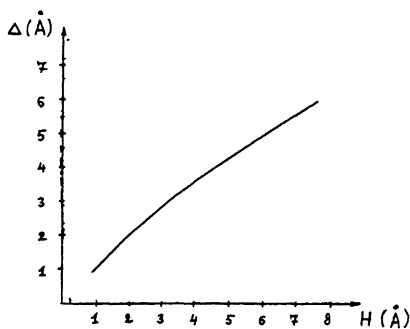


Рис. 5. Зависимость продольного разрешения Δ от высоты ступеньки в режиме сил отталкивания ($R = 5 \text{ \AA}$, $d_{in} = 1 \text{ \AA}$).

Результаты численного расчета разрешения Δ в зависимости от расстояния d_{in} и для различных значений радиуса кривизны острия R представлены на рис. 4 (значения константы αN при различных R взяты согласно формуле (5)). При этом высота ступеньки $H = 2 \text{ \AA}$. Следует отметить, что конкретное значение H практически не влияет на Δ в области преобладания сил притяжения $d_0 > 4 \text{ \AA}$, но заметно изменяет Δ в режиме сил отталкивания.

Так, на рис. 5 приведена зависимость Δ от H для острия с радиусом кривизны $R = 5 \text{ \AA}$, находящегося на начальном расстоянии от образца со ступенькой $d_{in} = 1 \text{ \AA}$.

Как видно из рис. 4, в области $d_{in} \approx (3-4) \text{ \AA}$ АСМ вообще не обладает определенным разрешением, что соответствует описанному в разд. 3 явлению нарушения непрерывности при сканировании вдоль линий постоянной силы, отвечающих указанным d_{in} . В диапазоне $d_{in} > 4 \text{ \AA}$ преобладают силы притяжения и представленные на рис. 4 результаты совпадают с полученным ранее другим методом в работах [4, 6].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] B i n n i g G., Q u a t e C.F., G e r b e r Ch. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 10. P. 930-933.
- [2] M a r t i n Y., W i l l i a m s C., W i c k r a m a s i n g h e H.K. // J. Appl. Phys. 1987. V. 61. N 6. P. 4728-4728.
- [3] В а с и л ь е в С.И., Л е о н о в В.Б., М о и с е е в Ю.Н., П а н о в В.И. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. В. 8. С. 727-731.
- [4] М о и с е е в Ю.Н., М о с т е п а н е н к о В.М., Р о р о в В.И., С о к о л о в И.Ю. // Phys. Lett. 1988. V. 132A. N 6, 7. P. 354-358.
- [5] S a r i d D. Scanning Force Microscopy with Applications to Electric, Magnetic and Atomic Forces. Oxford Series on Optical Sci., 1991.
- [6] М о и с е е в Ю.Н., М о с т е п а н е н к о В.М., П а н о в В.И., С о к о л о в И.Ю. // ЖТФ. 1990. Т. 60. В. 1. С. 141-148.
- [7] V a r n i e r F., D e s r o u s s e a u x G., C a r l a n A. // Appl. Surf. Sci. 1980. V. 5. N 3. P. 338-343.
- [8] М о и с е е в Ю.Н., М о с т е п а н е н к о В.М., П а н о в В.И., С о к о л о в И.Ю. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 20. С. 5-10.

Поступило в Редакцию
16 февраля 1993 г.