

В.И. Клоков, А.Я. Романенко

(*Институт аналитического приборостроения АН СССР,
Ленинград*)

**ИСКАЖЕНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЙ
СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ
ДРЕЙФОМ УЗЛА МИКРОСКАНИРОВАНИЯ***

Сканирующая тунNELьная микроскопия (СТМ) позволяет исследовать структуру поверхности с атомным разрешением [1]. Система управления узла микросканирования дает возможность получать топографию поверхности образца в режимах постоянного туннельного тока и постоянной высоты; измерять локальное распределение высоты потенциального барьера для электронов; измерять локальные вольтамперные характеристики туннельного перехода; определять локальное распределение потенциала по поверхности образца [2, 3]. В связи с тем, что ряд из указанных режимов приводит к увеличению времени сканирования, влияние дрейфа узла туннелирования, в частности, теплового дрейфа пьезодвижителя, может быть значительно. Действительно, относительное изменение длины пьезодвижителя пропорционально изменению температуры: $\Delta l = k l \Delta T$, где Δl — изменение длины и температуры; l — длина элемента пьезодвижителя; k — коэффициент пропорциональности для пьезокерамики, равный $k = 10^{-5}$ 1/град. При $l = 1$ см и $\Delta T = 10^{-3}$ град изменение длины пьезодвижителя достигает $\Delta l = 0.1$ нм. Учитывая высокие требования к разрешающей способности туннельного микроскопа (нанометры), полученный тепловой дрейф может существенно исказить СТМ-изображение. Кроме теплового дрейфа в узле микросканирования могут возникать и другие явления, приводящие к дрейфу.

Таким образом, если предположить, что система управления сканирующей иглой туннельного микроскопа обеспечивает идеальное отслеживание поверхности, то тем не менее СТМ-изображение будет иметь искажения, связанные с дрейфом узла микросканирования.

Анализ искажений СТМ-изображений. Предположим, что имеется серия СТМ-изображений одного участка поверхности, полученная при сканировании через известные промежутки времени. Простейшим проявлением дрейфа является премещение положения начальной точки сканирования. Поэтому СТМ-изображения в серии будут совпадать не полностью, а в лучшем случае

* Авторы выражают благодарность А.О. Голубку, С.А. Виноградовой, Д.Н. Давыдову, В.А. Тимофееву за полезные обсуждения и предоставленные экспериментальные данные.

фрагментарно. Кроме перемещения начальной точки в серии могут быть искажения внутри каждого изображения, связанные с дрейфом и определяемые, очевидно, правилом сканирования.

Рассмотрим сначала линейное сканирование, которое происходит следующим образом: сначала игла делает n шагов длины δx по строке, направленной вдоль оси X , затем игла возвращается в исходное положение и осуществляет переход на новую строку, отстоящую от старой на δy . Этот цикл операций повторяется m раз в соответствии с числом строк. В идеальном случае при отсутствии дрейфа получается следующее изображение:

$$\begin{aligned} z &= f(x, y); \\ x &= i\delta x \quad (i = 1, \dots, n); \\ y &= j\delta y \quad (j = 1, \dots, m), \end{aligned} \quad (1)$$

где f — функция, определяющая топографию исследуемой поверхности; δx , δy — шаги сканирования по X и Y , соответственно; i — номер шага в столбце по X ; j — номер строки по Y .

Фактически положение сканирующей иглы имеет дрейфы по осям X , Y , Z со скоростями α' , β' , γ' , которые на промежутке времени, соизмеримом с длительностью съемки изображения, можно считать постоянными. В этом случае вместо сканирования по строкам, параллельным оси X , сканирование будет проходить по строкам, искаженным дрейфом. Получаемое в результате изображение описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned} \tilde{z} &= f(\tilde{x}, \tilde{y}); \\ \tilde{x} &= x_c + \alpha' t_u j + (\delta x + \alpha' t_x) i; \\ \tilde{y} &= y_c + (\delta y + \beta' t_u) j + \beta' t_y i; \\ \tilde{z} - z &= z_c + \gamma' t_c j + \gamma' t_x i, \end{aligned} \quad (2)$$

где $x_c = \alpha' t$, $y_c = \beta' t$, $z_c = \gamma' t$ — компоненты вектора сдвига начальной точки сканирования за время t от начального момента до начала сканирования; $t_u = (t_x + t_y^b)n + t_y$ — время, затрачиваемое на цикл сканирования вдоль оси X , возврат в начало строки и переход на новую строку; t_x , t_y , t_x^b — время, затрачиваемое на один шаг по X , Y и на один шаг возврата по оси X .

В действительности влияние дрейфа не учитывается и предполагается, что координаты сканирования x , y изменяются

в соответствии с (1). Тогда, исключив из (2) с помощью (1) индексы i , j , получим уравнение искажений поверхности:

$$\begin{aligned}\tilde{z} &= f(\tilde{x}, \tilde{y}); \quad \tilde{x} = x_c + x + \frac{\alpha'}{w}y + \frac{\alpha'}{v}x; \\ \tilde{y} &= y_c + y + \frac{\beta'}{w}y + \frac{\beta'}{v}x; \quad \tilde{z} = z_c + z + \frac{\gamma'}{w}y + \frac{\gamma'}{v}x,\end{aligned}\quad (3)$$

где $v = \frac{\delta x}{t_x}$ — скорость движения в строке; $w = \frac{\delta y}{t_y}$ — скорость движения по строкам.

Учитывая, что $\delta x \sim \delta y$, а $t_u \gg t_x$, имеем для скоростей $w \ll v$ и, следовательно, приближенно линейное искажение имеет вид

$$\begin{aligned}\tilde{z} &= f(\tilde{x}, \tilde{y}); \quad \tilde{x} = x_c + x + \alpha y; \\ \tilde{y} &= y_c + y + \beta y; \quad \tilde{z} = z_c + z + \gamma y,\end{aligned}\quad (4)$$

где от скоростей дрейфа α' , β' , γ' перешли к относительным скоростям дрейфа $\alpha = \alpha'/w$, $\beta = \beta'/w$, $\gamma = \gamma'/w$.

Таким образом, влияние дрейфа при линейном сканировании сводится к линейному искажению внутри изображения (4) и параллельному сдвигу изображений на вектор (x_c, y_c, z_c) .

Рассмотрим теперь искажение СМ-изображения при сканировании по концентрическим окружностям. Пусть игла перемещается с постоянной скоростью V . Тогда, в идеальном случае без учета дрейфа, сканирование производится последовательно по окружностям:

$$x = r_k \cos \omega_k t; \quad y = r_k \sin \omega_k t, \quad (5)$$

где $k = 1, \dots, n$ — номер окружности; $r_k = \Delta r k$ — радиус k -й окружности; Δr — шаг по радиусам окружностей; $\omega_k = V/r_k$ — угловая скорость сканирования по k -й окружности; t — параметр, определяющий положение на окружности точки сканирования $t \in (0, t_k)$; $t_k = 2\pi r_k/V$ — время, затраченное на полный обход k -й окружности. Переход от $k - 1$ к k -й окружности происходит по оси X на шаг Δr за время $\Delta r/V$. Общее время, затраченное на k циклов сканирования, будет равно

$$T_k = \frac{2\pi \Delta r}{V} \frac{(k+1)k}{2} + \frac{\Delta r}{V} k.$$

Тогда, аналогично (2), фактическое сканирование без учета сдвига начальной точки будет происходить по искаженным кривым:

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= r_k \cos \omega_k t + \alpha' T_{k,t}; \quad \tilde{y} = r_k \sin \omega_k t + \beta' T_{k,t}; \\ \tilde{z} - z &= \gamma' T_{k,t},\end{aligned}\tag{6}$$

где $T_{k,t} = T_{k-1} + \Delta r/V + t$ — время, затраченное на сканирование от начальной точки до точки на k -й окружности, соответствующей параметру t .

Аналогично (3) с помощью (5) избавимся в (6) от параметров сканирования k, t и получим уравнение искаженной поверхности:

$$\tilde{z} = f(\tilde{x}, \tilde{y}); \quad \tilde{x} = x + \alpha T; \quad \tilde{y} = y + \beta T; \quad \tilde{z} = z + \gamma T,$$

$$\text{где } T = T(x, y) = r \left[\frac{\pi r}{\Delta r} - \pi + 1 + \arctg(y/x) \right];$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}; \quad \alpha = \alpha'/V; \quad \beta = \beta'/V; \quad \gamma = \gamma'/V.$$

На рис. 1, а представлена периодическая структура без искажений, на рис. 1, б та же периодическая структура при наличии дрейфа $\alpha = 0.1; \beta = 0.2; \gamma = 0.05$, снятая при линейном сканировании, на рис. 1, в — периодическая структура при сканировании по концентрическим окружностям и тех же скоростях дрейфа.

Рассмотрим слияние дрейфа узла туннелирования на статистические характеристики совокупности изображений образцов. Построим функцию распределения ориентации фоновой плоскости для этой совокупности. Очевидно, наличие искажений (4), вызванных дрейфом узла микросканирования, приводит к искажению функции распределения, которое будет зависеть от статистических характеристик параметров дрейфа. Подгонка теоретической функции распределения к экспериментальной методом наименьших квадратов позволит оценить статистические параметры дрейфа.

Найдем теоретическую функцию распределения ориентации фоновой плоскости. Запишем уравнение фоновой плоскости в виде

$$ux + vy + z = 0, \tag{7}$$

где u, v — произвольные точки плоскости, определяющие ее ориентацию и взаимно однозначно связанные с точками единичной сферы; $u = \cos \varphi \operatorname{tg} \theta; v = \sin \varphi \operatorname{tg} \theta$; φ, θ — долгота и широта точки на единичной сфере, соответственно.

Вместо случайных величин, принадлежащих единичной сфере и определяющих единичный вектор, ортогональный к фоновой плоскости, можно рассмотреть случайные величины (u, v) , лежащие на плоскости (рис. 2). При этом плотность распреде-

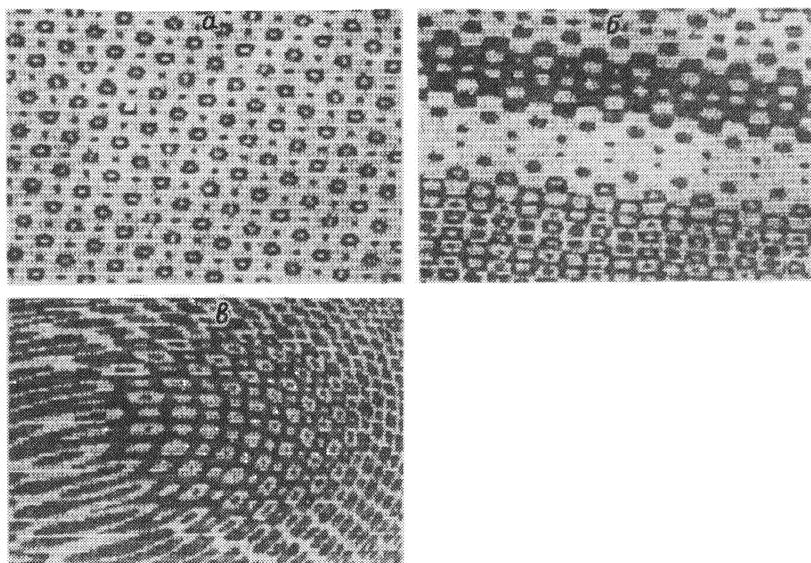


Рис. 1. Периодическая структура без искажений (а), при линейном сканировании (б), при сканировании по концентрическим окружностям и наличии дрейфа (в)

ления на плоскости $P_{\text{пл}}$ связана с плотностью распределения на сфере $P_{\text{сф}}$ по формуле

$$P_{\text{пл}} = P_{\text{сф}} \cos^3 \theta. \quad (8)$$

При отсутствии дрейфа плотность распределения ориентации фоновой плоскости должна быть осесимметричной (не зависеть от ϕ) и иметь сгущения в окрестности полюса ($\theta = 0$). Такая функция может аппроксимироваться степенями $\cos \theta$:

$$P_{\text{сф}} = \frac{k+1}{2\pi} \cos^k \theta, \quad \theta \in [0, \frac{\pi}{2}], \quad (9)$$

где $(k+1)/2\pi$ — коэффициент нормировки. Причем, чем выше степень k , тем больше концентрация точек в окрестности полюса ($\theta = 0$).

Формулы (8), (9) определяют идеальное распределение (u , v) при отсутствии дрейфа.

Рассмотрим трансформацию этого распределения при наличии дрейфа. Согласно (4) уравнение фоновой плоскости (7) преобразуется к виду

$$u'x + v'y + z = 0, \quad (10)$$

где $u' = u$; $v' = \alpha u + (1 + \beta)v + \gamma$.

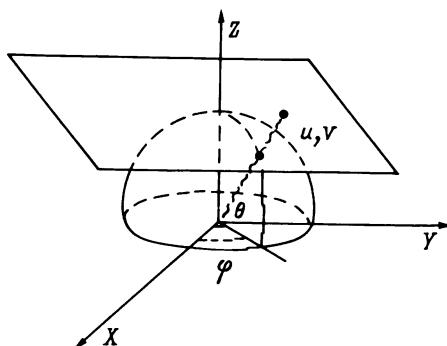


Рис. 2. Проецирование точек сферы на плоскость

Формула (10) дает переход от старых случайных величин (u , v) к новым случайным величинам (u' , v'). Обратное к (10) преобразование имеет вид

$$u - u'; \quad v = \frac{1}{1 + \beta} (-\alpha u' + v' - \gamma). \quad (11)$$

Плотность распределения новых случайных величин через старые вычисляется следующим образом:

$$P(u', v') = P_{\text{пл}} [u(u', v'), v(u', v')] \frac{\partial(u, v)}{\partial(u', v')}, \quad (12)$$

где $\frac{\partial(u, v)}{\partial(u', v')} = \frac{1}{1 + \beta}$ — якобиан преобразования координат (11).

Подставляя в (12) формулы (8), (9), (11) и переобозначив для удобства u' , v' через x , y , получим плотность распределения:

$$P(x, y) = \frac{k + 1}{2\pi(1 + \beta)} C^{k+3},$$

$$\text{где } C = 1/\sqrt{1 + r^2}; \quad r^2 = x^2 + \frac{1}{(1 + \beta^2)} (-\alpha x + y - \gamma)^2.$$

Разложив в ряд по степеням α , β , γ получившуюся условную плотность вероятности и взяв математическое ожидание, получим для плотности распределения разложение по моментам:

$$P(x, y) = P_0 + m_\alpha P_\alpha + m_\beta P_\beta + m_\gamma P_\gamma + \frac{1}{2} (\sigma_\alpha^2 P_{\alpha^2} + \sigma_\beta^2 P_{\beta^2} + \sigma_\gamma^2 P_{\gamma^2} + 2\sigma_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} + 2\sigma_{\alpha\gamma} P_{\alpha\gamma} + 2\sigma_{\beta\gamma} P_{\beta\gamma}) + \dots,$$

где m_α , m_β , m_γ — математическое ожидание параметров дрейфа

$$\left[\begin{array}{ccc} \alpha, \beta, \gamma; & & \\ \sigma_{\alpha}^2 & \sigma_{\alpha\beta} & \sigma_{\alpha\gamma} \\ \sigma_{\alpha\beta} & \sigma_{\beta}^2 & \sigma_{\beta\gamma} \\ \sigma_{\alpha\gamma} & \sigma_{\beta\gamma} & \sigma_{\gamma}^2 \end{array} \right] \quad \text{— корреляционная матрица параметров дрейфа } \alpha, \beta, \gamma;$$

P_0 — плотность распределения при отсутствии дрейфа; P_{α} , P_{β} , P_{γ} — первые производные по α , β , γ от P ; $P_{\alpha 2}$, $P_{\alpha\beta}$, ... — вторые производные по α , β , γ от P .

На рис. 3, а представлена P_0 плотность распределения при отсутствии дрейфа, а на рис. 3, б-г — искаженные плотности распределения при $\sigma_{\alpha}^2 = 0.2$; $\sigma_{\beta}^2 = 0.3$; $\sigma_{\gamma}^2 = 0.2$, соответственно, и нулевых остальных значениях корреляционной матрицы. Для всех рисунков угол θ изменяется от 0 до $\frac{\pi}{2.6}$. Изображения представлены в аксонометрической проекции и развернуты на 90° . Наибольшие искажения вносит дисперсия дрейфа по оси Z . При этом вместо одногорбого распределения P_0 (см. рис. 3, а) получается двугорбое распределение (см. рис. 3, г).

Таким образом, получена теоретическая плотность распределения ориентации фоновой плоскости.

Определение параметров дрейфа узла туннелирования. Исходя из анализа искажений СТМ-изображений, в результате дрейфа узла микросканирования имеются три типа искажений: сдвиги начальной точки сканирования; линейные искажения внутри одного изображения; искажения функций распределения характеристик ансамбля СТМ-изображений. В соответствии с этим могут быть предложены различные алгоритмы определения параметров дрейфа.

Оценка параметров дрейфа по серии СТМ-изображений. Первый, наиболее простой, способ определения скорости дрейфа по сдвигам изображений друг относительно друга в серии изображений [4]. Действительно, если имеется серия изображений, для которой известно время начала съема каждого изображения и векторы сдвига начальной точки сканирования, то, согласно (2), (4), легко определяется скорость сканирования $\alpha' = x_c/\tau$, $\beta' = y_c/\tau$, $\gamma' = z_c/\tau$. Наибольшую трудность представляет определение вектора сдвига изображений.

Пусть имеются два изображения. Требуется установить, имеется ли у этих изображений общая часть, и каким сдвигом

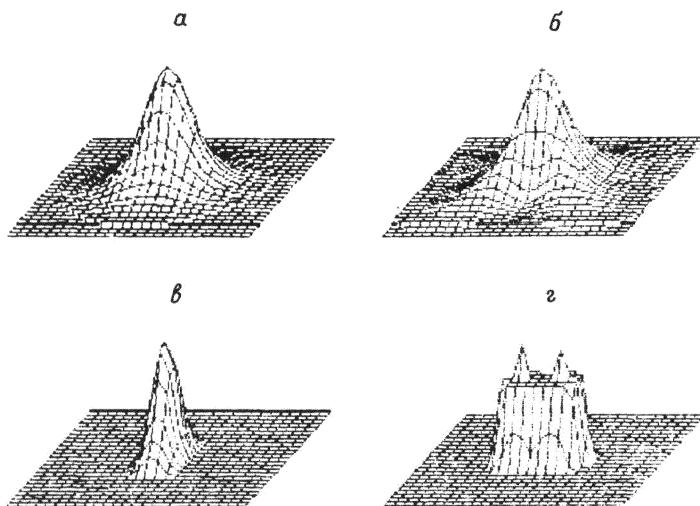


Рис. 3. Неискаженная плотность (а) распределения фоновой плоскости и искаженные плотности при наличии дрейфа по оси X (б), по оси Y (в), по вертикальной оси (г)

изображений она может быть получена. Осуществить это можно с помощью определения максимума кросс-корреляционной матрицы, которая для каждого вектора сдвига одного изображения относительно другого определяет коэффициент корреляции их общей части. Если коэффициент корреляции превосходит некоторый порог, то можно считать, что изображения имеют общую часть, а максимальный элемент матрицы кросс-корреляции соответствует сдвигу изображений друг относительно друга.

Для оценки величины дрейфа исследовалась две серии опытов. Серия из одиннадцати СТМ-изображений скола графита, разнесенная по времени съема из 24.5 мин, и такая же серия из изображений дифракционной решетки, разнесенная на 59.1 мин [4]. Для первой серии шаг $\delta x = \delta y = 3$ нм, $\delta z = 0.09$ нм. Большой коэффициент корреляции даже для крайних в серии изображений равный 0.93, свидетельствует об их хорошей повторяемости. Вектор сдвига изображений равен: $x_c = 15$ нм,

$y_c = 24$ нм, $z_c = -56.0$ нм. Отсюда, средняя скорость дрейфа составляет: $\alpha' = 0.01$ нм, $\beta' = 0.016$ нм, $\gamma' = -0.038$ нм. Вычисление кросс-корреляционной матрицы последовательно для пар изображений в серии позволяет оценить динамику изменения параметров дрейфа. Скорость дрейфа по осям X , Y убывает со временем от $\alpha' = 0.028$ нм, $\beta' = 0.042$ нм в начале серии до $\alpha' = 0.005$ нм, $\beta' = 0.005$ нм в конце серии. Скорость дрейфа по оси Z очень мало меняется и приблизительно равна среднему значению. Для второй серии средняя скорость дрейфа равна: $\alpha' = 0.0017$ нм, $\beta' = 0.0034$ нм, $\gamma' = -0.032$ нм. Скорость дрейфа мало меняется на протяжении всего времени построения серии.

Определение параметров дрейфа по искажениям одного изображения. Предположим, что заранее известны некоторые свойства изображения, тогда, используя их, можно определить параметры дрейфа. Действительно, пусть изображение имеет периодическую структуру, повернутую на угол ϕ относительно направления сканирования; фон удален. Тогда идеальная исходная структура $z = f(x, y)$ подвергается линейному преобразованию, состоящему из поворота на угол ϕ и линейного искажения (4), вследствие дрейфа:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 + \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix}. \quad (13)$$

Искаженное изображение будет иметь вид

$$Z = f(x(x', y'), y(x', y')). \quad (14)$$

Пусть для определенности исходная идеальная структура — гексагональная. Такую структуру имеет высокоориентированный пиролитический графит.

Преобразование Фурье соответствующего идеального изображения гексагональной структуры имеет шесть пиков на частотной плоскости u, v в точках

$$\begin{cases} u_k = a \cos \left(\frac{\pi}{3} k \right); \\ v_k = a \sin \left(\frac{\pi}{3} k \right), \end{cases}$$

где $k = 0, 1, \dots, 5$; a — характерный размер структуры.

Преобразование Фурье линейно-искаженного изображения (13), (14) будет иметь шесть пиков в точках

$$\begin{aligned} \tilde{u}_k &= a \cos \left(\frac{\pi}{3} k + \phi \right); \\ \tilde{v}_k &= a(1 + \beta) \sin \left(\frac{\pi}{3} k - \phi \right) + a\alpha \cos \left(\frac{\pi}{3} k - \phi \right); \\ k &= 0, 1, \dots, 5. \end{aligned} \quad (15)$$

Частоты $(\tilde{u}_k, \tilde{v}_k)$, на которых Фурье-преобразование изображения имеет пики, могут быть измерены. Тогда формулы (15) при $k = 0, 1, \dots, 5$, могут быть рассмотрены как система уравнений для определения геометрических параметров структуры a , ϕ и параметров дрейфа α , β . Из первого уравнения в (15) для \tilde{u}_k могут быть определены a и ϕ :

$$a = \sqrt{\frac{1}{3} \sum_{k=0}^5 \tilde{u}_k^2}; \quad \phi = \frac{1}{6} \sum_{k=0}^5 \left[\arccos \left(\frac{\tilde{u}_k}{a} \right) - k \frac{\pi}{3} \right]. \quad (16)$$

Параметры дрейфа при известных α и β могут быть получены методом наименьших квадратов из второго уравнения (15) для \tilde{v}_k :

$$\alpha = \frac{1}{3} \sum_{k=0}^5 \frac{v_k}{a} \cos \left(k \frac{\pi}{3} - \varphi \right); \quad (17)$$

$$\beta = \frac{1}{3} \sum_{k=0}^5 \frac{v_k}{a} \sin \left(k \frac{\pi}{3} - \varphi \right) - 1.$$

Таким образом, по измеренным частотам пиков спектра \tilde{u}_k , \tilde{v}_k одного искаженного изображения гексагональной структуры удается определить параметры дрейфа α , β по формулам (16), (17). Аналогичные формулы могут быть получены и для других периодических структур.

Для примера исследовались изображения спектра высокоориентированного пиролитического графита. В соответствии с формулами (16), (17) и (3), (4) были получены следующие параметры дрейфа: $\alpha' = 0.006$ нм, $\beta' = -0.023$ нм.

Анализ искажений изображений и рекомендации по компенсации дрейфа. Для полученных выше скоростей дрейфа оценим величину искажений, вносимых в СТМ-изображение. Для рассматриваемых данных имеем $t_{x,y} = 7 \cdot 10^{-3}$ с, $t_x^b = 3 \cdot 10^{-3}$ с. Предположим, что время, затрачиваемое на один шаг, для всех масштабов одинаково, и число шагов в строке равно 100, тогда $t_u = 1$ с для всех масштабов.

В таблице приведены коэффициенты линейных искажений α , β , γ для различных шагов δu при средних скоростях дрейфа пьезодвижителя, соответствующих сериям изображений скола графита и дифракционной решетки.

Из таблицы видно, что при шаге $\delta u = 3$ нм линейные искажения пренебрежимо малы, при уменьшении шага до $\delta u = 0.1$ нм без увеличения скорости сканирования линейные искажения становятся значительными, при шаге 0.1 нм линейные искажения становятся очень большими.

Коэффициенты линейных искажений для различных масштабов

δu нм'	Скол графита			Дифракционная решетка		
	α	β	γ	α	β	γ
3	0.003	0.005	-0.013	0.0006	0.0012	-0.011
1	0.01	0.016	-0.038	0.0017	0.0034	-0.032
0.1	0.1	0.16	-0.38	0.017	0.034	-0.32
0.05	0.2	0.32	-0.76	0.034	0.068	-0.64
0.01	1.0	1.6	-3.8	0.17	0.34	-3.2

Таким образом, задача компенсации дрейфа при получении изображений с атомарным разрешением представляется очень важной.

Возможны следующие пути компенсации дрейфа:

физико-технический путь: выбор материала для пьезодвижителя, выбор конструкции;

увеличение скорости сканирования, насколько это позволяют резонансы пьезодвижителя;

определение и компенсация дрейфа по паре изображений, для которой определяется вектор сдвига и скорость дрейфа и по этим данным осуществляется линейная коррекция изображения.

Кроме того, учитывая стабильность скорости дрейфа по оси Z , можно по одной или нескольким парам изображений определить скорость дрейфа и за счет введения поправки в закон управления движением иглы по Z скомпенсировать его влияние.

Предложенный в данной статье подход достаточно универсальный и может быть использован для анализа других приборов, где дрейф существенен.

ЛИТЕРАТУРА

1. Биннинг Г., Рорер Г. / Сканирующая тунNELьная микроскопия — от рождения к юности // Усп. физ. наук. — 1988. — Т. 154. — Вып. 2. — С. 261-277.
2. Belum R.G., Hosler W. Scanning Tunneling Microscopy / Chemical and Physical Solid Surfaces VI, Berlin e.a. — 1986. — Р. 361-411.
3. Голубок А.О., Давыдов А.И., Тимофеев В.А., Типисев С.Я. // Научное приборостроение: сб. научн. тр. — Л.: Наука, 1989. — С. 72-77.
4. Zdanovich V.V., Klokov V.I., Lakunin A.V., Romanenko A.J. Solid Surface Image Processing / LSPIC-90. — Riga. — V. 2. — Р. 363-367.

Рукопись поступила 26.06.90