

УДК 531.728;53.089.6;53.088.7

АВТОМАТИЧЕСКАЯ РАСПРЕДЕЛЕННАЯ КАЛИБРОВКА СКАНЕРА ЗОНДОВОГО МИКРОСКОПА

© 2006 г. Р. В. Лапшин

*Научно-исследовательский институт физических проблем им. Ф.В. Лукина,
Москва, Зеленоград, Россия*

Поступила в редакцию 27.07.2005 г.

Описывается способ автоматической калибровки сканера зондового микроскопа, при котором вместо четверки фиксированных усредненных калибровочных параметров, характеризующих весь сканер, в процессе измерения эталонной поверхности ищется сеть локальных калибровочных коэффициентов в пространстве перемещений сканера. При проведении распределенной калибровки используются методы особенность-ориентированного сканирования, что позволяет *in situ* исключить негативное влияние термодрейфа, ползучести и гистерезиса на получаемые результаты. Располагая калибровочной базой данных, возможно в один прием исправить все пространственные искажения, вызываемые нелинейностью, неортогональностью и паразитным воздействием друг на друга пьезоманипуляторов микроскопа.

ВВЕДЕНИЕ

Как правило, сканер зондового микроскопа принято характеризовать четырьмя фиксированными параметрами, из которых три параметра являются коэффициентами чувствительности X , Y , Z пьезоманипуляторов, а четвертый параметр – это угол, учитывающий неортогональность X , Y пьезоманипуляторов [1]. Из-за нелинейности и гистерезиса пьезоманипуляторов [2], а также наличия между манипуляторами паразитных связей сканер зондового микроскопа может быть описан четырьмя указанными параметрами только вблизи начала координат, где влияние искажающих факторов незначительно. По мере удаления от начала координат погрешность измерения рельефа заметно возрастает, достигая наибольшего значения на краю поля сканера.

Решить проблему позволяет распределенная калибровка, в ходе которой для каждой точки пространства перемещения сканера определяются три локальных калибровочных коэффициента (ЛКК) K_x , K_y , K_z . Используемая при калибровке эталонная поверхность должна содержать элементы, называемые далее особенностями, расстояния между которыми и/или размеры которых известны с высокой точностью. Для того чтобы исправить искаженное изображение рельефа неизвестной поверхности, координаты каждой его точки умножаются на соответствующий ЛКК.

ОПИСАНИЕ СПОСОБА

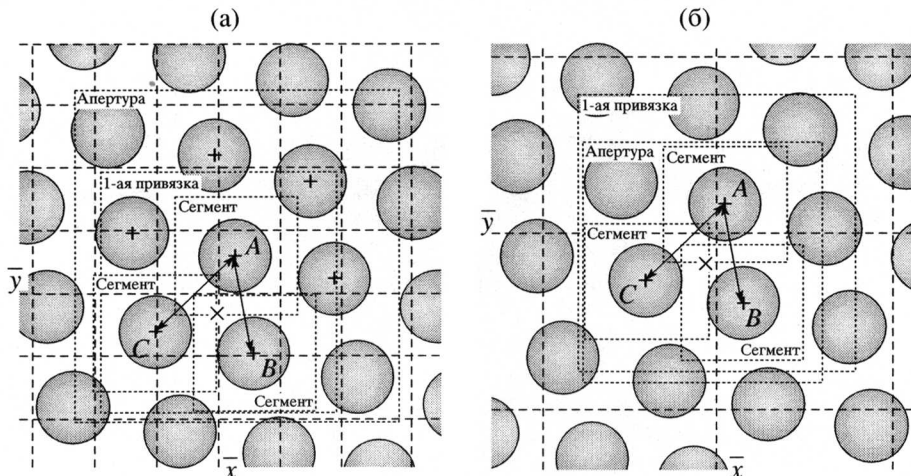
Предлагаемый способ распределенной калибровки [3, 4] сканера зондового микроскопа состоит в следующем. Вначале поле сканера “покрыва-

ется” сеткой с квадратными ячейками, узлы которой соответствуют абсолютным координатам сканера \bar{x} , \bar{y} , \bar{z} (рисунок). В ходе калибровки в окрестности каждого узла сетки производится поиск локальных калибровочных коэффициентов. Размер стороны квадрата сетки приблизительно определяет то, как плавно будут изменяться ЛКК в найденном распределении.

Зонд микроскопа перемещается по узлам сети как по растру: движется по строке в прямом направлении, переходит на следующую строку, движется по строке в обратном направлении, переходит на следующую строку и т.д. После каждого перемещения из одного узла сети (точнее, окрестности этого узла) в другой узел сети выдерживается некоторая пауза, необходимая для того, чтобы дождаться прекращения вызванного этим перемещением крипа пьезоманипуляторов сканера. Чем больше расстояние между узлами исходной сетки, тем продолжительнее задаваемая пауза.

После окончания паузы, используя процедуру привязки [3], “захватывается” ближайшая к этому узлу особенность эталонной поверхности (рис. 1а, особенность А), которая удерживается затем некоторое время в “поле зрения” прибора путем повторных привязок. В качестве особенностей эталонной поверхности могут использоваться определенные в самом общем виде элементы рельефа типа “холм” или “яма” [3].

При первом захвате особенности производится сканирование квадратной области таких размеров, при которых она способна вместить (располагаясь произвольным образом относительно структуры эталонной поверхности), по крайней мере, одну особенность эталонной поверхности.



Распределенная калибровка сканера зондового микроскопа. Сетка, разбивающая поле сканера на квадратные ячейки, показана пунктирными линиями. Точка (\bar{x}, \bar{y}) является текущим узлом сети, вблизи которого ищутся ЛКК. Позиции обнаруженных в процессе калибровки особенностей обозначены знаком "+". Определение ЛКК производится для "центра тяжести" ЛКС ABC , обозначенного как "x". Процедура привязки сканирует квадратную окрестность текущего узла сетки с целью обнаружения ближайшей особенности (обозначена буквой A) (а), ЛКС (обозначена буквами ABC) (б). Апертура представляет собой квадратный скан, в центре которого расположена захваченная особенность A (а), ЛКС предназначена для грубого определения относительных координат особенностей B и C (а), A, B и C (б). Стрелки между особенностями A и B, A и C символизируют скиппинг.

При последующих привязках для увеличения производительности распределенной калибровки размеры сканируемой области уменьшаются до размеров сегмента [3] (квадратный скан, вмещающий одну особенность).

Одна или несколько последовательно выполняемых привязок требуются тогда, когда заданной паузы оказалось недостаточно, а также для того чтобы дождаться окончания крипа, возбуждаемого, как правило, в ходе первого совмещения центра отсканированной окрестности текущего узла сетки с позицией захваченной особенности. Следующие друг за другом привязки позволяют также измерять скорость дрейфа *in situ* [3]. Привязка считается завершенной, как только измеренная средняя скорость дрейфа сравнивается по модулю с некоторым наперед заданным значением. Обычно в качестве такого значения указывается типичная для данного микроскопа средняя скорость, с которой он дрейфует после прогрева.

Выполнив привязку к особенности A, ближайшей к текущему узлу сетки, производится сканирование апертуры [3] – окрестности захваченной особенности, вмещающей ее ближайших соседей (рис. а). В ходе распознавания апертуры определяются (приблизительно) относительные координаты особенностей-соседей, образующие локальную калибровочную структуру (ЛКС) [3].

После обнаружения ЛКС один за другим выполняются скиппинги [3] между особенностью A и ее соседями B и C, целью которых является точное измерение относительных координат соседей.

Определив точные координаты особенностей, составляющих ЛКС, вычисляются искомые ЛКК K_x , K_y , K_z . Напомним, что благодаря скиппингу результаты измерения относительных координат особенностей практически не искажены дрейфом, поэтому получаемая сеть ЛКК не зависит ни от скорости сканирования, ни от направления сканирования.

Если расстояние между узлами сетки сравнимо с расстоянием, на которое перемещается сканер в процессе выполнения скиппинга, то операцию привязки к особенности можно в ряде случаев опустить. Дело в том, что сканирование апертуры с последующим ее распознаванием, по сути, ничем не отличается от процедуры привязки. Поскольку размеры апертуры больше размеров области сканирования, характерной для обычной привязки, то привязка с использованием апертуры обеспечивает просто менее точное удержание захваченной особенности.

В качестве абсолютных координат \bar{x} , \bar{y} , \bar{z} ЛКС, которым сопоставлены ЛКК $K_x(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$, $K_y(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$, $K_z(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$, удобно выбрать координаты "центра тяжести" калибровочной структуры. Если вблизи текущего узла сетки имеется несколько калибровочных структур, то среди них после распознавания апертуры выбирается та, чьи координаты расположены ближе остальных к текущему узлу сетки (рис. а). Если коэффициенты K_x , K_y , K_z для абсолютной позиции сканера

$(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ известны, то истинные координаты x, y, z точки изображения можно найти по формулам:

$$\begin{aligned} x &= K_x(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})\bar{x}, \\ y &= K_y(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})\bar{y}, \\ z &= K_z(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})\bar{z}. \end{aligned} \quad (1)$$

ЛКК K_x, K_y определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} K_x(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) &= \bar{K}_x(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) + \\ &+ \bar{K}_y(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})\bar{y} \sin[\alpha(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})]/\bar{x}, \\ K_y(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) &= \bar{K}_y(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) \cos[\alpha(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})], \end{aligned} \quad (2)$$

где \bar{K}_x, \bar{K}_y – калибровочные коэффициенты, α – неортогональность сканера, вычисленные локально для абсолютной позиции сканера $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ согласно методике, описанной в работе [1].

В простейшем случае, когда в качестве ЛКС используются три особенности A, B, C , расстояния между которыми а priori точно известны, например, три соседних атома углерода на поверхности высокоориентированного монокристалла пиролического графита [1], достаточно выполнить два скиппинга: $A \longleftrightarrow B$ и $A \longleftrightarrow C$.

Если а priori точно известны размеры особенности эталонной поверхности, то вместо сканирования апертуры и выполнения двух скиппингов достаточно произвести встречное сканирование сегмента [5] одной особенности A , после чего найти коэффициенты линейного преобразования [5] и исправить искаженное дрейфом изображение особенности в сегменте [5]. По исправленному изображению особенности можно определить ее размеры и вычислить искомые ЛКК, соответствующие абсолютной позиции особенности A . Для калибровки в латеральной плоскости необходимо знать три различных латеральных размера особенности [1], для калибровки в вертикальной плоскости – один вертикальный размер. Преимущество данного способа заключается в гораздо более высокой производительности калибровки.

Полученные в процессе распределенной калибровки ЛКК вместе с абсолютными координатами ЛКС, которым они соответствуют, помещаются в калибровочную базу данных. Сохраняя в базе даты выполнения локальных калибровок, можно за несколько лет повторных калибровок накопить информацию, позволяющую определить динамику старения пьезокерамики сканера.

Абсолютная величина скорости дрейфа во время привязки зонда к особенности, в процессе скиппинга или во время встречного сканирования сегмента может быть большой, главное, установить такую скорость сканирования, чтобы текущая особенность не успевала “уплыть” за пределы сегмента. Другим условием, накладывае-

мым на дрейф, является условие неизменности скорости дрейфа в течение времени выполнения одного цикла скиппинга или встречного сканирования сегмента [3, 5]. Чем лучше выполняется последнее условие, тем с меньшей погрешностью будет исправлен дрейф микроскопа, и тем точнее будут определены ЛКК. Как показывают измерения, скорость дрейфа может считаться практически неизменной на протяжении десятков секунд [3], тогда как продолжительность одного цикла скиппинга соседних атомов углерода на поверхности графита составляет всего лишь около 300 мс [3].

Чтобы существенно уменьшить погрешности калибровки, связанные с заметными изменениями скорости дрейфа в ходе скиппинга и/или встречного сканирования сегмента, производится постоянный *in situ* мониторинг скорости дрейфа [3-5]. Как только возникает недопустимое изменение скорости дрейфа, данные, полученные во время текущего цикла скиппинга, объявляются испорченными и автоматически отбрасываются, после чего вводятся холостые циклы скиппинга, которые повторяются несколько раз. Если в течение этого времени скорость дрейфа успела стабилизироваться, то прерванный скиппинг продолжается, иначе скиппинг производится заново. В случае долговременной нестабильности зонд микроскопа возвращается в текущую позицию сети, где процедура локальной калибровки выполняется сначала.

Если недопустимое изменение в скорости дрейфа прерывает калибровку по размерам особенности, то вводится холостое встречное сканирование сегмента. Здесь так же, как и при скиппинге, локальная калибровка для текущего узла сети будет выполнена заново, если скорость дрейфа не успеет стабилизироваться в течение заданного промежутка времени.

На рисунке б показана разновидность распределенной калибровки, когда в процессе привязки зонда микроскопа и сканирования апертуры оперируют не отдельной особенностью, а целой ЛКС. Данный способ калибровки использует апертуру меньшего размера, что позволяет увеличить производительность распределенной калибровки. Способ следует применять тогда, когда шаг исходной сетки больше характерного размера ЛКС.

В случае, когда шаг сетки сравним с характерным размером ЛКС (рис. а), после выполнения скиппинга между особенностью A и особенностями B и C , можно произвести дополнительный скиппинг между особенностью A и всеми остальными особенностями, обнаруженными в апертуре и образующими ЛКС с особенностью A . Полученные в результате ЛКК следует сопоставить координатам центров тяжести соответствующих ЛКС. Например, согласно конфигурации, изображенной на рисунке а, при калибровке можно

обойтись в шесть раз меньшим числом привязок, апертур и перемещений между узлами сетки.

Отметим, во-первых, что результаты распределенной калибровки не искажены гистерезисом, поскольку все перемещения в активной фазе выполняются точно от одной особенности поверхности к другой. Во-вторых, из-за дрейфа и отличий в размерах, структуре и ориентации элементов исходной сетки и эталонной поверхности полученная сетка ЛКК не является больше квадратной с целым шагом и должна быть преобразована к такой для дальнейшего использования.

Преобразование заключается в построении регрессионной поверхности, т.е. проведении через зашумленный ЛКК такой гладкой поверхности f_K , чтобы сумма квадратов отклонений между измеренными значениями коэффициента и соответствующими точками поверхности была бы минимальной. Указанные построения выполняются для каждого фиксированного положения Z-манипулятора, в результате получается набор некоторых поверхностей:

$$\begin{aligned} K_x &= f_{K_x}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}_i), \\ K_y &= f_{K_y}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}_i), \\ K_z &= f_{K_z}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}_i), \end{aligned} \quad (3)$$

где \bar{z}_i – фиксированные значения точного Z-манипулятора ($i = 1, 2, \dots, n$), устанавливаемые в процессе калибровки посредством перемещения грубого Z-манипулятора.

В предлагаемом способе калибровки при высокой скорости дрейфа, сильных нелинейных искажениях сканера и малом шаге сетки число циклов скиппинга, задающее количество усреднений относительного расстояния между особенностями, рекомендуется выбирать небольшим. Дело в том, что из-за дрейфа абсолютные координаты текущей ЛКС непрерывно изменяются и, следовательно, определяемые в разных циклах скиппинга ЛКК, строго говоря, соответствуют разным абсолютным позициям.

Другой причиной является сильный крип, приводящий к продолжительной паузе, который возбуждается после перемещения в следующий узел сети, если зонд микроскопа вследствие дрейфа сместился на большое расстояние от текущего узла сети. В этом случае также нарушается принятая траектория перемещения по узлам сети, что, в целом, ведет к “разгону” пьезоманипуляторов.

Для того чтобы получить более точные значения чувствительных к шуму [1] калибровочных коэффициентов \bar{K}_x , \bar{K}_y и угла α , правильнее многократно повторить калибровку, добавляя каждый раз в базу данных новый набор ЛКК. Точно такое же замечание справедливо и для случая калибровки по размерам особенности эталонной

поверхности в отношении числа последовательно выполняемых встречных сканов.

Выполнив калибровку сканера при некотором “фиксированном” положении точного Z-манипулятора, получаем распределение ЛКК в плоском поле. Кроме нелинейности и неортогональности сканера в найденном распределении также происходит учет паразитных связей типа $X \Leftrightarrow Y$. Изменение положения Z-манипулятора при перемещении от одной ЛКС к другой показывает величину погрешности от паразитных связей типа $X \Rightarrow Z, Y \Rightarrow Z$.

Выполняя калибровку при разных положениях точного Z-манипулятора, устанавливаемых грубым Z-манипулятором, находим распределение ЛКК в пространстве. Помимо нелинейности в вертикальной плоскости в полученном распределении будут учтены паразитные связи типа $Z \Rightarrow X, Z \Rightarrow Y$.

Используя в качестве эталонной поверхности атомную поверхность кристалла, можно получить распределение ЛКК с очень высокой плотностью. Однако в настоящее время покрыть столь частой сеткой весь диапазон перемещений сканера, да еще и на нескольких уровнях невозможно из-за недостаточно высокого быстродействия современных микроскопов. Тем не менее, в ряде случаев бывает достаточно точно откалибровать лишь небольшую область пространства сканера, расположенную в окрестности точки начала координат, где остаточные погрешности наименьшие. Для выполнения необходимых измерений исследуемый участок поверхности может быть просто перенесен с помощью грубых манипуляторов X, Y, Z и процедуры привязки зонда к особенности в эту часть пространства точного сканера [3].

Отметим в заключение, что успешное решение задачи нахождения ЛКК, распределенных в пространстве перемещений сканера, в большой степени зависит от свойств используемой эталонной поверхности, которая должна обладать неизменной структурой в каждой точке поля сканера. К сожалению, на практике дефекты и остаточные напряжения искажают поверхностную структуру эталона, что несколько усложняет распределенную калибровку на больших полях. В этом случае приходится, используя грубые манипуляторы X, Y, Z и процедуру привязки зонда микроскопа к особенности, перемещать предварительно выбранный “совершенный” участок поверхности эталона в пространстве точного сканера [3], для того чтобы калибровать все пространство точного сканера только этой небольшой областью поверхности эталона.

ОБСУЖДЕНИЕ

Разработанный метод калибровки, по существу, является упрощенной специализированной

разновидностью особенность-ориентированного сканирования (ООС) [3]. Метод позволяет производить распределенную калибровку сканера зондового микроскопа с большей производительностью, чем при ООС эталонной поверхности, поскольку не совершает ненужных здесь операций связывания особенностей (операции связывания необходимы для последующей реконструкции топографии измеренной поверхности).

Несмотря на целый ряд изменений, предложенный метод калибровки использует все основные принципы и приемы, заложенные в ООС, а именно: оперирование отдельными особенностями поверхности; перемещение на короткие расстояния от одной особенности к другой, расположенной по соседству; измерение относительных расстояний; локализацию измерений; многократное повторение измерений; непрекращающиеся привязки зонда к особенностям (ЛКС) поверхности; постоянный мониторинг скорости дрейфа; иерархически организованные встречные перемещения (такой элемент иерархии, как “строка особенностей” образуется из А-особенностей или даже из целых ЛКС ABC, обнаруживаемых вблизи узлов исходной сетки в процессе перемещения от одного узла к другому).

В настоящее время микроскопы, оборудованные замкнутой системой позиционирования, не позволяют из-за шумов линейных датчиков положения измерять рельеф поверхности с высоким разрешением. Поэтому для работы на пределе разрешения микроскопа замкнутую систему позиционирования приходится отключать, в результате чего измеряемый рельеф искажается дрейфами, нелинейностями и паразитными связями манипуляторов сканера.

Чтобы исправить погрешности, вызванные нелинейностями и паразитными связями манипуляторов, подключив замкнутую систему позиционирования, выполняют распределенную калибровку сканера по эталонам, не требующим высокого разрешения микроскопа [6, 7]. Полученные в ходе распределенной калибровки данные, описывающие нелинейный характер перемещений сканера, используют для исправления рельефа, измененного с высоким разрешением.

Принципиальным отличием предложенного способа распределенной калибровки является то, что случайный характер изменения скорости термосоставляющей дрейфа не влияет на ЛКК. В результате чего погрешность определения ЛКК можно существенно уменьшить путем выполнения повторных калибровок сканера, число которых практически неограничено.

В отличие от замкнутой системы позиционирования, разработанный способ калибровки не вносит никаких дополнительных шумов и паразитных связей, что позволяет калибровать сканер по природным эталонам – стабильным реконструкциям поверхностей кристаллов, используя в качестве особенностей отдельные атомы и междоузлия. Следует отметить, что на указанных поверхностях описанный метод калибровки обеспечивает наибольшую точность измерений и достигает максимальной эффективности использования [3].

Материалы, представленные в статье, докладывались на симпозиуме “Нанозифика и нанозлектроника”, Н. Новгород, 2005 г. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 05-01-00407, № 05-03-32394, № 07-07-00062) и Правительства Москвы (грант № 1.1.213).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lapshin R.V.* // Rev. Sci. Instrum. 1998. V. 69. P. 3268 (см. www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.html).
2. *Lapshin R.V.* // Rev. Sci. Instrum. 1995. V. 66. P. 4718 (см. www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.html).
3. *Lapshin R.V.* // Nanotechnology. 2004. V. 15. P. 1135 (см. www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.html).
4. Заявка на патент 2005101495 (РФ). Способ автоматической распределенной калибровки сканера зондового микроскопа / *Лапшин Р.В.* // Б. И. 2006. № 19.
5. Заявка на патент 2006127131 (РФ). Способ коррекции искаженных дрейфом изображений поверхности, полученных на сканирующем зондовом микроскопе / *Лапшин Р.В.*
6. Patent 5196713 (USA). Optical position sensor with corner-cube and servo-feedback for scanning microscopes / Wyko Corporation. *Marshall D.R.* // 1993.
7. Patent 5557156 (USA). Scan control for scanning probe microscopes / Digital Instruments, Inc. *Elings V.* // 1996.

Automatic Distributed Calibration of Probe Microscope Scanner

R. V. Lapshin

An automatic calibration method of a probe microscope scanner is suggested. By measuring a standard surface, a net of local calibration coefficients in the movement space of the scanner is searched for instead of four fixed averaged calibration parameters characterizing the scanner as a whole. The feature-oriented scanning (FOS) methods are used to implement the distributed calibration. Application of the FOS methods permits to exclude the negative influence of thermal drift, creep, and hysteresis on the obtained results in situ. Possessing the distributed calibration database, it gets possible to correct in one procedure all spatial distortions caused by non-linearity, nonorthogonality, and parasitic mutual crosstalk couplings of the microscope's piezomanipulators.