Перевод с английского статьи "Feature-oriented scanning methodology for probe microscopy and nanotechnology" (R. V. Lapshin, Nanotechnology, volume 15, issue 9, pages 1135-1151, 2004, свободный доступ на веб-сайтах http://www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm и http://www. niifp.ru/staff/lapshin/)

# Методология особенность-ориентированного сканирования для

# зондовой микроскопии и нанотехнологии

## Р. В. Лапшин

НИИ Физических проблем, Лаборатория твердотельной нанотехнологии, 124460 г. Москва, г. Зеленоград, Россия

### Эл. почта: lapshin@niifp.ru

Предложен алгоритм сканирования реального времени, использующий особенности поверхности в качестве опорных точек при выполнении относительных перемещений. В роли особенностей выступают определённые в общем виде элементы рельефа типа "холм" или "яма". Работа алгоритма построена на локальном распознавании особенностей и связывании их друг с другом. Класс приемлемых поверхностей включает упорядоченные, частично упорядоченные и разупорядоченные поверхности, особенности которых имеют сравнимые протяженности в плоскости сканирования. Метод позволяет исключить негативное влияние термодрейфа, ползучести и гистерезиса на работу сканирующего зондового микроскопа. Благодаря возможности выполнения неограниченно больших усреднений, точность измерений может быть значительно увеличена. Отличительной чертой метода является его способность реконструировать рельеф, предельные подробности в котором мельче чем те, что способен обнаружить микроскоп при обычном сканировании. Предложенный подход снимает ограничения на размеры сканов. Нелинейность, неортогональность, паразитные связи между манипуляторами, а также погрешность смещения Аббе корректируются с использованием распределённых в пространстве сканирования калибровочных коэффициентов, определяемых автоматически в процессе измерения данным методом эталонной поверхности. Предложены способы: прецизионного позиционирования зонда по локальным особенностям поверхности в поле точного и грубого манипуляторов, автоматического возврата зонда в операционную зону после снятия образца, автоматического определения точного взаимного положения зондов в многозондовых инструментах и автоматического последовательного приложения всей совокупности зондов к одному и тому же объекту на поверхности. Продемонстрирована возможность выполнения точно локализованной спектроскопии с малым уровнем шума. Разработанная методология применима для любого сканирующего зондового прибора.

## 1. Введение

Техника сканирующей зондовой микроскопии (C3M) имеет ограничения на предельную точность, с которой выполняются измерения элементов поверхности. Ограничения связаны с величиной шума, свойственного измерительному инструменту. Одним из широко используемых способов борьбы с шумами является многократное усреднение получаемых данных. Из-за того, что сканирующий зондовый микроскоп подвержен влиянию термодрейфа [1-5] и ползучести [6, 7], эффективность применения усреднения резко падает и практически сводится на нет.

Для подавления перечисленных выше искажающих факторов предлагается способ активного сканирования и позиционирования, основная идея которого заключается в использовании особенностей исследуемой поверхности в качестве опорных точек при выполнении перемещений. Перемещения осуществляются от одной особенности к другой, расположенной по соседству. В результате образуется связанная последовательность (цепочка), в которой особенности размещены относительно друг друга. Поиск, обнаружение и вычисление координат положения особенности выполняет программа распознавания [9, 10], работающая в реальном масштабе времени. Сканируя небольшую область (сегмент) вокруг каждой особенности, а затем, раскладывая полученные фрагменты по соответствующим позициям найденной цепочки, можно реконструировать





(б)



# (в)

Рис. 1. Стилизованные изображения атомов углерода поверхности графита, иллюстрирующие простейшие способы локального связывания посредством обхода затравки с присоединением. Затравка: (а) одиночный атом; (б), (в) квазипрямолинейная цепочка из 10 атомов. Направление обхода контура: (а), (б) фиксированное (против часовой стрелки); (в) переменное (с переключением в конце каждой СО).

реальный рельеф поверхности. Эффект достигается благодаря локализации, относительному характеру и многократному повторению измерений, непрекращающимся привязкам зонда к особенностям поверхности [11, 12], а также использованию иерархии встречных перемещений.

Допустимый класс поверхностей включает все поверхности с атомным рельефом, поверхности, состоящие из молекул, различного рода цепочек, кластеров, зёрен, частиц, кристаллитов, квантовых точек, столбиков, пор. 2D-паттернов, 2D-текстур и т. п., словом, всего того, что подпадает под определение холма или ямы вообще. Причём, перечисленные типы поверхностей могут быть упорядоченными, частично упорядоченными, а также разупорядоченными. Основным ограничением, накладываемым на класс поверхностей, является следующее: протяжённости объектов в разных направлениях в плоскости сканирования должны быть сравнимы, с тем чтобы особенность могла быть полностью локализована в сегменте. К "неудобным" поверхностям, например, относятся: несодержащая дефектов поверхность одномерной дифракционной решётки, поверхность интегральной схемы, где много длинных проводников и т. п.

# 2. Описание методологии

### 2.1. Алгоритм особенностьориентированного сканирования: принципы работы и основные процедуры

В основу работы алгоритма сканирования положены понятия локальности и связности, объектами, с которыми он оперирует, являются особенности поверхности, а сам метод может быть назван объектно- или особенность-ориентированным сканированием (ООС). В предлагаемом методе фактически осуществляется переход от абсолютной системы координат, связанной с манипулятором, к относительной системе координат, связанной с особенностями поверхности.

Примечательно то, что особенности, как правило, это и есть предмет исследования или технологии, а также то, что данный метод окажется малоэффективным при сканировании поверхности, где особенностей мало либо они вообще отсутствуют. Строго говоря, не существует абсолютно гладких поверхностей, обычно вопрос состоит лишь в том, отвечают ли имеющиеся на поверхности осо-

Copyright © 2004 Р. В. Лапшин. Все права защищены

бенности тому масштабу измерений, который в данный момент интересен исследователю, а также насколько они контрастны и стабильны, чтобы служить надёжными местами привязки.

В предлагаемом методе получение скана поверхности складывается из двух этапов. На первом этапе производится построение "затравки" – квазипрямолинейной цепочки особенностей (строки особенностей, сокращённо СО) заданной длины, ориентированной в заданном направлении. Затравка играет роль



Рис. 2. Локальное связывание особенностей с использованием вспомогательных СО. Первой СО служит затравка. Квитирующая особенность предназначена для связывания смежных групп атомов-соседей, принадлежащих смежным атомам текущей СО.

исходного задающего элемента. На втором этапе на сформированную затравку "наращивается" весь остальной скан, используя для этого один из следующих двух способов локального связывания.

В первом способе (см. Рис. 1) выполняется обход затравки с присоединением новых элементов цепи. Причём, перемещение зонда во время сканирования происходит исключительно по узлам растущей цепочки. Процесс похож на прокладку рельс путеукладчиком: передвигается по пути, который сам строит. Как только "следующая" особенность цепочки найдена, она помечается как "текущая", добавляется к цепочке и становится частью контура обхода.

Во втором способе (см. Рис. 2) зонд перемещается по строкам из особенностей, играющим здесь вспомогательную роль. Первой строкой особенностей (СО) служит затравка, остальные формируются динамически в процессе сканирования. Тело цепочки образуется из элементов первой СО и особенностей, выбираемых из окружений особенностей текущей СО по мере перемещения зонда от её последней особенности к первой. Возможная аналогия здесь может быть следующей: путеукладчик движется по готовой колее, создавая параллельно ей новую. После достижения зондом первой особенности текущей СО происходит "переключение" на последнюю особенность следующей СО.

Таким образом, в предлагаемом методе сканирования траектория перемещения зонда заранее не определена, изначально задан лишь в общем виде характер поведения системы при выборе следующей особенности цепи.

Указав первую особенность цепочки, присваиваем ей ярлык "текущей" и разблокируем процедуру привязки. Начиная с этого момента, последовательно выполняются процедуры (см. Рис. 3), описание которых даётся ниже.

#### 2.1.1. Процедура привязки зонда к особенности поверхности

Процедура привязки зонда производит строчное сканирование сегмента, который представляет собой квадратную окрестность текущей особенности цепочки (см. Рис. 4(а)), затем выполняет распознавание текущей особенности (расположена ближе других к центру растра) и вычисляет её абсолютные координаты, перемещает зонд в найденную позицию текущей особенности, после чего повторяет перечисленные выше действия спустя промежуток времени *T*.

Таким образом, процедура привязки обеспечивает удержание зонда микроскопа над выбранной особенностью поверхности в течение практически неограниченного отрезка времени. Она устраняет смещение изображения особенности в поле зрения прибора вследствие действия латерального дрейфа микроскопа. Фактически процедура представляет собой цифровую следящую систему в латеральной плоскости, реализованную программно. Причём, алгоритм автоматически подстраивается к изменяющейся величине дрейфа, учитывая временные колебания последнего.

#### 2.1.2. Процедура сканирования апертуры и распознавания ближайших соседей

Вначале данная процедура осуществляет обычную строчную развертку поверхности в пределах квадратного окна, охватывающего с некоторым запасом ближайших к текущей особенности соседей (см. Рис. 4(б)). Последующий анализ поверхности производится либо внутри данного квадратного окна, либо внутри вписанного в него круга. И то и другое в дальнейшем будем назы-



Рис. 3. Упрощённая блок-схема алгоритма ООС. Процедура привязки зонда работает в фоновом режиме. Сканирование считается законченным, если длина цепочки достигла заданного значения *n*. вать апертурой.

Затем процедура распознаёт особенности и находит среди них текущую особенность (расположена ближе остальных к центру растра). Координаты особенностейсоседей определяются относительно абсолютного положения текущей особенности. Фактически, данная процедура также выполняет и привязку зонда, но только менее точно из-за того, что размеры апертуры в несколько раз больше размеров сегмента.

## 2.1.3. Локальное связывание: процедура определения следующей особенности цепочки

Процедура определения следующей особенности цепочки работает по-разному в зависимости от этапа сканирования или используемого способа локального связывания. Следует отметить, что принципиальным и наиболее существенным недостатком способа образования скана поверхности путём обхода затравки с присоединением является то, что, начиная с некоторой длины цепочки, невозможно правильно выбрать среди особенностей-соседей те особенности, что не принадлежат к уже пройденной цепочке. Причина заключается в погрешности, накапливаемой в цепочке по мере роста последней. Величина этой погрешности не должна превышать половины характерного расстояния между особенностями.

В режиме виртуального сканирования, т. е. при симуляции ООС на изображениях, полученных обычным путём, данная погрешность ничтожно мала, а вот в режиме физического (реального) сканирования может проявиться довольно быстро. Причём, чем больше шумы и изменения в скорости дрейфа, тем при некотором заданном числе усреднений быстрее наступает указанное ограничение, что, в свою очередь, накладывает ограничение на максимальный размер скана, который можно получить на данном микроскопе.

Для иллюстрации сказанного на Рис. 5 представлено стилизованное изображение поверхности графита, измерение выполнено в реальном режиме. На картинке хорошо видны искажения: изменение шага спирали и "провал", усиливающиеся по мере роста цепи.

В качестве альтернативного метода, позволяющего избежать ошибок связывания, вызываемых накоплением погрешностей в цепочке, может быть предложено связывание с использованием вспомогательных СО (см. Рис. 2). Основная идея, лежащая в его основе, заключается в том, чтобы в операции сортировки соседей потенциально принимало бы участие как можно меньшее число элементов цепочки, то есть чтобы просмотр цепочки осуществлялся бы на минимально возможную глубину.

С этой целью из соседей текущей особенности текущей СО формируется группа, куда входят особенности, лежащие по одну определённую до начала сканирования сторону от СО и непринадлежащие СО. По сути здесь мы опять имеем дело с обходом, но уже существенно малой не имеющей роста структуры – текущей особенности текущей СО. Для связывания смежных групп особенностей-соседей, относящихся к смежным особенностям текущей СО, используется квитирующая особенность – текущая особенность растущей цепочки.

Для того чтобы подавить аккумуляцию погрешности в цепочке, следует при добавлении новых звеньев цепочки периодически выполнять коррекцию. Коррекция осуществляется путём "растворения" невязки на участке цепи от текущего атома до одного из обнаруженных соседей, включённых в цепь на предыдущем витке или на предыдущей СО. В заключение отметим, что если в процессе связывания среди соседей не найдено особенностей, подходящих на роль следующей, то радиус апертуры увеличивается и заново выполняется её сканирование и анализ.

## 2.1.4. Скиппинг: процедура измерения разностей и сегментов

Данная процедура осуществляет высокоточные измерения координат следующей особенности цепочки относительно координат текущей. Вначале зонд микроскопа перемещается в позицию следующей особенности, где выполняется обычное строчное сканирование её квадратной окрестности – сегмента. Затем производится распознавание, и определяются абсолютные координаты



Рис. 4. Типичный вид (а) сегмента и (б) апертуры упорядоченной поверхности графита после распознавания. Шаги микроскопа в латеральной плоскости: Δ<sub>x</sub>=0.296 Å, Δ<sub>y</sub>=0.273 Å. Знаком "+" помечены найденные позиции атомов. Атом ближайший к центру растра является текущим. Размер стороны сегмента составляет 15 пикселей, апертуры – 27 пикселей.

следующей особенности. После этого процедура вычисляет разности координат "вперёд" (текущая-следующая) и перемещает зонд обратно в позицию текущей особенности, после чего производит там действия аналогичные тем, которые она проделала только что со следующей особенностью. Найдя абсолютные координаты текущей особенности, процедура вычисляет разности координат "назад" (следующая-текущая) между этими особенностями.

Далее описанная выше последовательность действий, называемая скиппингом, повторяется столько раз, сколько усреднений было задано (число усреднений принципиально ничем не ограничено). В конце цикла "следующей" особенности присваивается тег "текущей", а счётчик числа особенностей цепочки увеличивается на единицу. Напомним, что относительные координаты для первого перемещения зонда в позицию следующей особенности определяются процедурой сканирования и распознавания апертуры.

Если в течение одного цикла скиппинга (~300 мс для поверхностей с атомным рельефом) изменение скорости дрейфа невелико (см. раздел 3.6), то наступает практически полная его компенсация. Пусть, например, составляющая дрейфа по *x* сонаправлена с составляющей перемещения по *x* зонда при переходе его от текущей особенности к следующей. В этом случае измеренная разность будет больше истинной. При движении зонда в обратном направлении измеренная разница окажется на ту же величину меньше. Следовательно, среднее значение этих разностей будет равно истинному расстоянию между данными особенностями (устранение дрейфа во встречно-сканированных сегментах описывается в [13]).

При сканировании поверхностей со всё более крупными чем атомы особенностями, ползучесть начинает в большей степени доминировать над термодрейфом. Однако, благодаря тому, что рельеф поверхности в настоящем методе измеряется по частям – небольшими расположенными по соседству сегментами, все перемещения зонда происходят между соседними особенностями на короткие расстояния, а также широкому применению встречных перемещений в апертурах, сегментах, при скиппинге, и при движении по СО, то результирующий эффект от самогенерации ползучести оказывается незначительным. Поскольку не все перемещения в предлагаемом методе имеют встречную комплементарную составляющую, то для ослабления ползучести, вызываемой такого рода перемещениями, вводится необходимой продолжительности пауза – последовательность циклов привязки зонда.

Хотя встречные перемещения не компенсируют ползучесть полностью, но, в целом, дрейф, ими вызываемый, изменяется медленно и, следовательно, может быть устранён с использованием указанной выше линейной схемы (см. раздел 3.7). Применяя ООС, следует помнить, что погрешность измерений будет тем больше, чем больше будут по размеру используемые особенности, и чем дальше они будут отстоять друг от друга.

В этой связи одновременное использование и холмов и ям предпочтительно, если, конечно, и



Рис. 5. Типичные искажения реального скана: изменение шага спирали и несуществующий "провал" изображения, вызванные эффектом накопления погрешности в цепочке. Длина цепочки *n*=400 атомов углерода.

те и другие присутствуют на поверхности. Хотя на компьютерах с одним процессором время распознавания возрастает, на компьютерах с двумя процессорами оно не изменяется, так как задача распознавания легко распараллеливается: на одном и том же изображении одновременно один процессор распознаёт холмы, а другой – ямы. Поскольку минимальными по размеру и наиболее плотно упакованными особенностями являются атомы и междоузлия на поверхности кристаллических тел, то такие поверхности для предлагаемого метода ООС следует считать наиболее подходящими.

Помимо точного определения относительных координат следующего атома цепочки процедура скиппинга выполняет усреднение сегментов поверхности, что позволяет эффективно бороться с шумами и достигать высокого разрешения в вертикальной плоскости. Следует обратить внимание на то, что размер сегмента должен выбираться таким образом, чтобы сегменты соседних особенностей немного перекрывали бы друг друга. Это требуется для того, чтобы после

выполнения "сборки" (см. раздел 2.3) полученная поверхность не имела бы разрывов.

Поскольку, определяемое в процессе выполнения скиппинга относительное расстояние между особенностями является действительным числом, изменяющимся по случайному закону, то, выполняя большое количество измерений разностей и сегментов, и, вводя в изображение на этапе сборки реальной поверхности больше пикселов и градаций высоты, возможно реконструировать рельеф, предельные латеральные и вертикальные подробности в котором будут мельче (здесь предполагается, что игла острая) чем те, что способен обнаружить используемый микроскоп при обычном сканировании (см. раздел 3.2).

Отметим в заключении, что в описанном ООС-алгоритме

- (1) Сегмент это область предельной локализации измерений рельефа.
- (2) В каждый момент времени существует не более двух особенностей, имеющих абсолютные координаты (две особенности при скиппинге и одна особенность во всех других состояниях). Координаты остальных особенностей цепочки относительные.
- (3) Полученные цепочки принципиально не содержат погрешностей, связанных с гистерезисом пьезоманипуляторов, поскольку все перемещения в ООС происходят строго от одной особенности к другой.
- (4) Предлагаемый алгоритм не содержит тупиков, и что самое важное результаты его работы не зависят ни от типа элементарной ячейки, ни от её размеров, ни от наличия дефектов или какой-либо разупорядоченности особенностей на поверхности. Здесь, чрезмерно крупные объекты, не помещающиеся в сегменте, обходятся, а слишком мелкие, плохо воспроизводимые от скана к скану, игнорируются.
- (5) Условием окончания ООС может служить не только достижение цепочкой заданной длины, но и полное заполнение рельефом исследуемой поверхности некоторого прямоугольного окна сканирования, задаваемого оператором в начале работы (см. раздел 2.4). Так что в этом случае внешне ООС будет выглядеть как обычное сканирование.
- (6) Алгоритм ООС может быть отнесён к классу адаптивных, поскольку содержит элементы, обеспечивающие самонастройку программы к текущим окружающим условиям, особенностям поверхности и конкретному оборудованию.

## 2.2. Распределённая калибровка сканера микроскопа

Распределённая калибровка заключается в сканировании предложенным алгоритмом эталонной поверхности, в роли которой может выступать, например, высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ), и определении локальных калибровочных коэффициентов путём выполнения скиппинга между особенностью цепочки и всеми её ближайшими соседями. В результате вместо тройки фиксированных калибровочных коэффициентов [10], получаем распределение (сетку) калибровочных коэффициентов в пространстве сканирования. Поскольку, влияние термо-



Рис. 6. Реконструкция разупорядоченной наноструктурированной поверхности алюминия. Способ связывания: обход затравки с присоединением. Знаком "+" обозначены позиции особенностей (холмов) цепочки. Размер сегмента фиксированный (45×45) пикселов<sup>2</sup> (1 пиксел приблизительно равен 72 Å). Средний размер стороны апертуры составляет 69 пикселов. Число подстроек апертуры 52.



Рис. 7. "Паутина" – траектория "перемещения зонда" от одной особенности к другой в процессе построения цепи. Пунктирной линией показаны границы заполняемого окна.

дрейфа и ползучести устраняется в процессе измерения, то калибровочная сетка оказывается независимой от скорости сканирования и его направления (см. раздел 3.7). Таким образом, используя данные распределённой калибровки,

возможно на этапе сборки поверхности (см. следующий раздел) в один приём устранить все пространственные искажения, вызываемые нелинейностью пьезоманипуляторов, их неортогональностью и паразитным воздействием друг на друга [9].

При поиске распределённых коэффициентов большое значение приобретает неизменность структуры эталонной поверхности в каждой точке поля сканера, что на практике не всегда осуществимо из-за дефектов. Однако это обстоятельство не является непреодолимым. Так, если микроскоп имеет в своём составе грубый ХҮ-манипулятор, то с его помощью предварительно выбранный совершенный участок поверхности кристалла можно, используя процедуру привязки зонда к особенности, двигать в поле точного манипулятора (см. раздел 2.5.2) и таким образом калибровать всё поле сканера малой областью эталона.

#### 2.3. Визуализация результатов сканирования: сборщик поверхности и стилизёр

Для визуализации полученных данных используются следующие процедуры: "сборщик" поверхности, который из сегментов строит реальную поверхность, и "стилизёр", создающий гипотетическую поверхность, на которой атомы изображаются схематично в виде шаров [8-10].

Сборщик поверхности просматривает всю цепочку в поисках особенностей, латеральные координаты которых лежат в пределах задаваемого микроскопистом окна визуализации. Обнаружив очередную особенность, сборщик помещает её сегмент в соответствующую позицию строящегося изображения. В процессе сборки вначале исправляется дрейф во встречно-сканированном сегменте [13], затем производится коррекция позиции сегмента и позиций каждой точки в сегменте, используя интерполированные калибровочные коэффициенты, вычисляемые по значениям в сетке ближайшим к исправляемым позициям.

Наконец, в тех местах, где сегменты соседних особенностей накладываются друг на друга, рельеф усредняется. Следует отметить, что любое изображение, отсканированное обычным путём, может быть исправлено, используя данные распределённой калибровки.

#### 2.4. Специфика сканирования разупорядоченной поверхности

Для сканирования разупорядоченной поверхности характерно: использование прямого распознавания особенностей поверхности (через поиск и отбраковку обобщённых седловых точек рельефа) [9], переход от фиксированного размера сегмента к переменному, а также изменение шага сканирования (масштаба) в том случае, когда после достижения апертурой максимального



Рис. 8. Типичный вид (а) сегмента и (б) апертуры разупорядоченной поверхности алюминия после распознавания. Особенность ближайшая к центру растра является текущей.

размера среди соседей отсутствует подходящий кандидат на роль следующей особенности цепочки.

На Рис. 6 представлен результат виртуального сканирования разупорядоченной наноструктурированной поверхности алюминия, полученной в процессе электрохимической полировки текстурированной алюминиевой фольги [14]. Окончание виртуального сканирования наступило после заполнения предварительно заданного окна (1.5×1.5) мкм<sup>2</sup>, используемый способ связывания – обход затравки с присоединением. Исходное изображение было получено на атомно-силовом микроскопе (ACM) в режиме прерывистого контакта. Реконструированное изображение, показанное на Рис. 6, и исходное изображение – тождественны. Поскольку разброс размеров особенностей (алюминиевых столбиков) в латеральной плоскости оказался не слишком велик, при сканировании использовался фиксированный размер сегмента. На Рис. 7 показано, как связаны отдельные особенности в полученной цепи (сравни с Рис. 1(а)). Характерные для разупорядоченной поверхности сегмент и апертура приводятся на Рис. 8.

Рис. 9 иллюстрирует связывание особенностей на том же участке разупорядоченной поверхности алюминия посредством вспомогательных СО. "Рваные" края на приведённом изображении указывают на то, что оно состоит из отдельных сегментов. Рис. 10 отражает связи в полученной цепочке и её структуру: ориентацию, длину, общее количество и места переключения СО. Однако фактическая траектория, по которой "перемещался зонд" от одной особенности к другой так, чтобы обеспечить правильное связывание, выглядит значительно сложнее (см. Рис. 11, сравни с Рис. 2).

При сканировании упорядоченной поверхности основным признаком, по которому выполнялась селекция особенностей годных для привязки зонда, являлась площадь основания особенности. Причём в реальном режиме пороговый уровень берётся с некоторым запасом, что гарантирует надёжность селекции. При сканировании разупорядоченной поверхности для любого заданного порога всегда найдутся особенности, площадь основания которых окажется лежащей вблизи этого порога.

В виртуальном режиме данное обстоятельство не приведёт ни к каким "катастрофическим" последствиям. В реальном же режиме, напротив, существует вероятность того, что особенность с таким "плавающим" значением площади, обнаруженная в апертуре, может из-за наличия шумов и нестабильностей оказаться пропущенной в сегменте (пропуск такой особенности в апертуре опасности для связывания не представляет). Чтобы не допустить этого, порог при распознавании соседей текущей особенности в апертуре следует поднять на величину имеющей место неопределённости.

Дальнейшее повышение надёжности обнаружения обеспечивается введением дополнительных признаков, самым простым из которых является высота особенности. При использовании в качестве особенностей одновременно и холмов и ям дополнительным признаком может быть совпадение типа особенности – холм или яма. Идентифицирующим особенность признаком мо-



Рис. 9. Реконструкция разупорядоченной поверхности алюминия. Связывание выполнено с использованием вспомогательных СО. Размер сегмента фиксированный (45×45) пикселов<sup>2</sup>. Средний размер стороны апертуры составляет 73 пиксела. Число подстроек апертуры 57.



Рис. 10. Структура цепи или "скелет" разупорядоченной поверхности алюминия. Легко различимы: последовательность связывания особенностей, длина и ориентация СО, места переключения СО.

жет служить ее объём, структура ближайших соседей, возможны и более сложные в вычислительном отношении приёмы, основанные на корреляционном анализе, выделении признаков, характеризующих форму контура особенности и т. п. Если вместе с измерением рельефа поверхности получать в условиях высокого вакуума спектроскопические данные, несущие информацию о локальном химическом составе поверхности или её локальных механических свойствах, то найденные сведения также могут служить отличительными признаками особенностей при распознавании.

#### 2.5. Техника позиционирования по локальным особенностям поверхности

#### 2.5.1. Перемещение зонда в поле точного манипулятора. Маршрутизатор

В зависимости от решаемой экспериментальной или технологической задачи позиционирование зонда микроскопа осуществляется одним из двух способов. Первый способ фактически пред-

ставляет собой процесс образования затравки – среди соседей выполняется поиск такой особенности, которая расположена под наименьшим углом к направлению перемещения (затравке). При перемещении зонда по атомам точно вдоль кристаллографического направления, позиция следующего найденного атома цепочки может использоваться для постоянной подстройки направления движения (см. раздел 3.4), что позволяет точно передвигаться вдоль выбранного кристаллографического направления независимо от возможной его кривизны или наличия точечных дефектов решётки.

Второй способ подразумевает предварительное ООС поверхности, поэтому он требует существенно больших затрат времени на позиционирование. Для выполнения перемещения по второму способу специальная процедура "маршрутизатор" из всей цепочки выделяет такую подцепочку (прокладывает маршрут), которая соединяет текущую позицию зонда с конечной желаемой любой задаваемой экспериментатором траекторией. Далее, производя на каждом



Рис. 11. "Сеть" – траектория "перемещений зонда" при связывании. Из-за наложения линий друг на друга часть перемещений не видна.



Рис. 12. Прецизионное перемещение зонда микроскопа из точки А в точку D на расстояние более одного диапазона точного манипулятора. Обозначения: ТМ – точный манипулятор, ГМ – грубый манипулятор. Пунктиром на поверхности образца показано разбиение поля грубого манипулятора на смежные диапазоны точного. Дужки в положениях зонда В и С символизируют особенности поверхности.



Рис. 13. Навигационная структура "Снежинка" в виде системы сходящихся к операционной зоне (обозначена буквой z) цепочек из особенностей.

шаге пути сканирование апертуры и распознавание ближайших соседей, маршрутизатор перемещает зонд в ту позицию, которая наилучшим образом соответствует данным выбранного маршрута. Процесс выполняется до тех пор, пока зонд не достигнет конечной особенности траектории.

Если затем потребуется выполнить более точное позиционирование в пределах окрестности конечной особенности, то оно осуществляется перемещением зонда относительно положения этой особенности. Промежуток времени, в течение которого зонд может находиться в стороне от особенности, соответствует интервалу *Т* между последовательными привязками.

#### 2.5.2. Перемещение зонда в поле грубого манипулятора

В существующих C3M грубый ХҮ-манипулятор обеспечивает в пределах собственного максимального поля (область на поверхности доступная для исследования после установки образца) исходное размещение точного манипулятора. Грубый манипулятор совершает перемещение с некоторым достаточно крупным шагом, по величине обычно непревышающим рабочего диапазона точного. Направление, величина, скорость и шаг перемещения грубого позиционера задаются оператором вручную.

Из-за ошибок, связанных в первую очередь с неравномерностью шага грубого позиционера, действием гистерезиса, термодрейфа, ползучести и паразитных связей, а также с субъективным фактором, привнесённым установками оператора, невозможно точно переместиться из одной точки доступного поля на поверхности образца в любую другую, лежащую вне текущего диапазона точного сканера. Таким образом, в большинстве имеющихся на сегодняшний день приборов нельзя точно определить взаимное положение сканов, выполненных точным манипулятором микроскопа в разных местах поля грубого и, следовательно, правильно составить из них целое изображение.

Далее ради определённости положим, что исследуемый образец закреплён на точном манипуляторе, а зонд микроскопа – на грубом. Для простоты рассмотрим одномерный случай (см. Рис. 12): пусть требуется переместить зонд из точки А в точку D.

В исходном состоянии зонд микроскопа расположен в точке А поверхности (поз. 1). Посредст-



Рис. 14. Атомная поверхность ВОПГ. (а) Реальная поверхность, реконструированная из сегментов (СТМ, режим постоянной высоты, *U*<sub>tun</sub>=-10 мВ, *I*<sub>tun</sub>=998 пА). (б) Стилизованное изображение или шаровая модель поверхности. Длина цепочки 400 атомов. Число усреднений в точке растра 2. Число циклов скиппинга 3. Количество усреднений сегмента 6. Усреднённая постоянная решётки *a=b=*2.299 Å. Усреднённая компактность 71%. Скорость сканирования в апертуре 1637 Å/с. Скорость сканирования в сегменте 860 Å/с. Скорость перемещения при скиппинге 2.4 мкм/с. Средний модуль скорости латерального дрейфа около 0.51 Å/с. Время измерения 23 мин.

вом точного манипулятора будем двигать его относительно поверхности в направлении точки D до тех пор, пока не дойдём до края диапазона (см. поз. 2, точка В). Если применяется обычное позиционирование, то выполняется поиск и захват особенности ближайшей к точке В; если же производится позиционирование по особенностям, то используется текущая особенность цепочки. Затем в направлении точки D делает шаг грубый манипулятор (поз. 3). Одновременно с этим движением происходит циклическое выполнение процедуры привязки, которая посредством точного манипулятора стремится компенсировать возникшее рассогласование.

Далее перемещение грубого манипулятора, а вместе с ним и точного, продолжается до момента исчерпания диапазона точного манипулятора. Таким образом, совместное передвижение позиционеров возвращает точному манипулятору возможность дальнейшего перемещения зонда вправо (относительно поверхности). После этого следует повторение выше перечисленных действий (см. поз. 4, 5), в результате которых зонд перемещается вправо по поверхности на один диапазон точного манипулятора и достигает точки С. Наконец, посредством точного манипулятора (поз. 6) зонд перемещается в заданную точку D.

Любому типу грубого манипулятора в той или иной мере свойственны погрешности и нелинейности перемещения, обычно их абсолютные величины на порядки превосходят аналогичные параметры точных манипуляторов. Особенность предлагаемого способа [9, 15] заключается в том, что на результаты размещения поля точного манипулятора в поле грубого погрешности и нелинейности последнего не влияют. Анализ показывает, что наиболее удобными для использования в описываемом способе являются позиционеры "шагающего" типа [16].

## 2.5.3. Автоматический возврат зонда микроскопа в операционную зону

Рассмотрим одно из полезных применений алгоритма позиционирования по локальным особенностям – автоматический возврат зонда микроскопа в операционную зону [8, 9]. Данная функция необходима в C3M-экспериментах, где после какого-либо локального воздействия зондом на поверхность (механическое вдавливание, процарапывание, окисление, нагрев, испарение электрическим полем и т. п.) образец извлекается из микроскопа, подвергается нелокальной обработке (нанесение плёнки, травление, отжиг и т. п.), а затем устанавливается обратно для того, чтобы увидеть какие изменения произошли с поверхностью в месте воздействия.

Для осуществления автоматического перемещения к месту воздействия необходимо на исходной поверхности образца изготовить разветвлённую систему сходящихся к операционной зоне



Рис. 15. Атомная поверхность ВОПГ, полученная в режиме высокого разрешения. (а) "Сырое" сегментное изображение (СТМ, режим постоянной высоты, *U*<sub>tun</sub>=15 мВ, *I*<sub>tun</sub>=401 пА). (б) Стилизованное изображение. Число усреднений в точке растра 3. Количество усреднений сегмента 1000. Усреднённая постоянная решётки *a=b=*2.299 Å. Скорость сканирования в апертуре 1285 Å/с. Скорость сканирования в сегменте 665 Å/с. Скорость перемещения при скиппинге 61 Å/с. Средний модуль скорости латерального дрейфа около 0.19 Å/с. Время сканирования 39 мин.

цепочек из особенностей. На Рис. 13 представлен возможный вид такого рода структуры. Теперь достаточно сразу после подвода захватить любую особенность структуры, задать (приблизительно) направление движения к зоне и дождаться момента, когда зонд самостоятельно "дойдёт" до последнего элемента цепи.

Обобщая сказанное, можно предложить некоторую искусственно изготовленную на поверхности подложки структуру, связывающую между собой несколько технологических зон. Причём, если структура обладает иерархией размеров особенностей, то позиционирование можно сделать более точным и более оперативным, что важно, когда в качестве объектов технологии выступают отдельные атомы или молекулы. Дополнив описанный подход способностью выполнять точные перемещения зонда на большом поле грубого манипулятора (см. предыдущий раздел), получаем вполне надёжный способ позиционирования рабочего органа нанолитографа.

# 2.5.4. Автоматическое определение взаимного положения зондов в многозондовых устройствах

В реальном нанотехнологическом процессе применение C3M-литографа целесообразно проводить с использованием двух типов зондов: аналитических и технологических. Аналитические зонды предназначены для измерений и контроля, а технологические для модификации поверхности. Подобное разделение необходимо, поскольку в нанолитографическом процессе, как правило, происходит деградация кончика зонда: изменяется его радиус, форма и физико-химические свойства. В каждой группе зондов возможна дальнейшая специализация, например, аналитический зонд для измерения рельефа и аналитический зонд для выполнения спектроскопии; технологический зонд для локального воздействия электрическим полем и технологический зонд для механического вдавливания и т. п.

Предлагаемый особенность-ориентированный подход позволяет осуществить связывание зондов, т. е. точное определение их взаимного положения. Кроме того, данный подход предоставляет возможность применения всей совокупности зондов к одним и тем же объектам, обеспечивая таким образом выполнение последовательности разных технологических операций разными инструментами. Автоматическое связывание зондов необходимо также в высокопроизводительных многозондовых микроскопах для правильной сборки целого изображения из фрагментов, получаемых при одновременном сканировании поверхности массивом зондов.

Пусть необходимо связать один аналитический зонд и один технологический зонд. Сканируя аналитическим зондом и технологическим зондом некоторую область на поверхности, которая находится в пределах досягаемости и того и другого, получаем изображения поверхности, которые затем подвергаем распознаванию. Выявив на изображении, полученном с помощью техноло-



Рис. 16. Гистограмма распределения погрешности измерения постоянной решётки ВОПГ. Количество измерений  $2.5 \cdot 10^5$ . Погрешность однократного измерения ( $3\sigma$ ):  $\pm 0.255$  Å. Коэффициент асимметрии  $k_s$ =-0.09. Эксцесс  $k_k$ =1.27. Время измерения 7.5 часов.



Рис. 17. Перемещение зонда СТМ по атомам углерода в заданном направлении на поверхности ВОПГ. Подрежим удержания направления включён. Длина пройденного пути *L*≈1 мкм. Число атомов в цепочке 4060. Число циклов скиппинга 3. Скорость перемещения 1 атом/с.

гического зонда, особенность поверхности, и,

находя её на изображении, полученном с помощью аналитического зонда, определяем (грубо) величину рассовмещения систем координат данных зондов. Наконец, для того чтобы увеличить точность измерения, исключив влияние дрейфа и шума, выполняем заданное число циклов скиппинга зондов (здесь вместо одного зонда и двух особенностей имеем одну особенность и два зонда).

Зонды можно связать в цепочку, переходя от одного к другому смежному с ним, используя каждый раз новую особенность в области перекрытия их полей сканирования, а можно, используя одну и ту же особенность, путём "передачи" её от одной пары смежных зондов к другой посредством грубого манипулятора и непрерывно повторяемой привязки зонда (см. раздел 2.5.2). Помимо связывания последний приём позволяет последовательно применять к любой особенности поверхности, а также к любой точке её окрестности любое количество аналитических и технологических зондов.

#### 3. Экспериментальные результаты

Одна из проблем, с которой пришлось столкнуться при реализации реального режима работы ООС, была связана с возникновением нестабильностей во время сканирования апертуры или сегмента. Предложенный алгоритм способен автоматически выявить факт появления нестабильности и нейтрализовать её влияние путём повторного сканирования. Если нестабильность возникает в процессе скиппинга, то текущий цикл объявляется холостым, а результаты измерений, полученные в этом цикле, отбрасываются. Пересканы повторяются циклически до тех пор, пока изменение скорости дрейфа не окажется меньше наперёд заданной величины.

При проведении длительных экспериментов и/или при перемещении зонда по поверхности образца на большие расстояния возможен выход точного Z-манипулятора из диапазона. Причина выхода заключается в дрейфе головки микроскопа и/или в наличии наклона поверхности образца. В предлагаемом способе позиционирования при приближении точного Z-манипулятора к краю диапазона автоматически инициируется состояние "пауза" и на грубый Z-манипулятор в промежутки между повторяющимися привязками зонда микроскопа к текущей особенности поверхности подаются команды, возвращающие точный Z-манипулятор к середине его диапазона.

Все измерения, представленные ниже, проделаны на воздушном сканирующем зондовом микроскопе Solver™ P4 (HT-MДT), помещённом на тяжёлое основание с пассивной виброизоляцией. Для лучшей термостабилизации микроскоп был накрыт пассивным теплоизолирующим коробом. В качестве управляющего использовался 100 МГц компьютер. При сканировании коррекция



Рис. 18.  $\Delta$  отклонения положений атомов цепи от осредняющей прямой. Нелинейность в направлении поперёк цепочки 0.03%.

накопленной в цепочке погрешности не осуществлялась. При сборке реальных поверхностей



Рис. 19. Изменение атомного периода *а* по мере продвижения по цепочке. Среднее значение  $\overline{a}$  =2.205 Å. Регрессия выполнена с использованием полинома третьего порядка. Продольная нелинейность 4.94%.

вызываемые дрейфом искажения сегмента не корректировались, исправление нелинейности, неортогональности и взаимных паразитных связей манипуляторов не производилось.

#### 3.1. Особенность-ориентированное сканирование атомного рельефа поверхности графита

На Рис. 14 показано изображение атомной поверхности ВОПГ, полученное на сканирующем туннельном микроскопе (СТМ) в результате применения предлагаемого алгоритма. Иглой служила механически срезанная NiCr проволока. Локальное связывание особенностей выполнено с использованием вспомогательных СО. Из-за больших временных нестабильностей и малого числа усреднений звеньев цепи положения некоторых атомов в скане заметно смещены (см. стилизованное изображение). Усреднённое значение постоянной решётки отличается от номинального значения 2.464 Å, указывая на то, что микроскоп раскалиброван. Артефакты, связанные с сегментной структурой изображения (а), практически отсутствуют. Следует обратить внимание на низкий уровень шума в сегментном изображении, хотя никакого сглаживания данных не выполнялось.

# 3.2. Особенность-ориентированное сканирование атомного рельефа поверхности графита с высоким разрешением

В режиме высокого разрешения выполнено сканирование небольшого участка на поверхности графита (см. Рис. 15). В ходе эксперимента для каждого из 7 атомов углерода было произведено по 1000 измерений сегмента и разностей координат. Связывание особенностей выполнено путём обхода контура с присоединением. Тип затравки – одиночный атом. После выполнения сборки латеральное и вертикальное разрешение микроскопа улучшено в 20 раз. В верхнем левом и нижнем правом углах хорошо видны исходные размеры элементов изображения, соответствующие минимальному шагу микроскопа (сравни также с Рис. 4(б)).

# 3.3. Высокоточные измерения постоянных решётки и кристаллографических направлений на поверхности графита

Фактически измерение постоянных решётки представляет собой скиппинг с большим числом усреднений (10<sup>3</sup>...10<sup>6</sup>). Поскольку при выполнении скиппинга ориентация отрезка, соединяющего две особенности, измеряется относительно оси Х-манипулятора, то в общем случае для определения угла между кристаллографическими направлениями на поверхности необходимо произвести скиппинг ещё для одной пары особенностей, а затем вычислить разность полученных ориентаций.

В данном эксперименте было осуществлено 250 000 измерений постоянной решётки ВОПГ, на



Рис. 20. Усреднённая ВАХ туннельного зазора, локализованного непосредственно на вершине атома углерода. Число усреднений 10<sup>4</sup>. Количество точек в однократно измеренной характеристике 800. Время преобразования АЦП 25 мкс. Средний модуль скорости латерального дрейфа ~0.29 Å/с. Время измерения 57 мин. Производная кривой получена дифференцированием по трёхточечной симметричной схеме.



Рис. 21. Вызванная дрейфом эволюция атома привязки в пространстве (направление перемещения обозначено стрелкой). Средняя и максимальная скорости дрейфа в латеральной плоскости 0.12 Å/с и 0.33 Å/с, соответственно. Вероятное направление дрейфа в латеральной плоскости 265°. Положения зонда обозначены значком "+". Количество привязок зонда 500. Интервал времени между привязками *T*=700 мс.

что потребовалось 7.5 часов непрерывной работы СТМ. В результате решётка графита определена с погрешность ±0.000 51 Å (погрешность

однократного измерения с вероятностью *P*=0.9973 равнялась ±0.255 Å). На Рис. 16 показана функция распределения погрешности измерения ∆ кристаллической решётки графита, там же для сравнения дана функция нормального распределения.

# 3.4. Оперативное позиционирование на атомной поверхности графита. Оценка нелинейных искажений

В качестве экспериментального подтверждения возможности прецизионного позиционирования на атомарно гладкой поверхности [8, 9, 17], а также для демонстрации способности точно отмерять расстояния в несколько микрон, подсчитывая атомные периоды, на поверхности ВОПГ было выполнено перемещение иглы СТМ вдоль кристаллографического направления (см. Рис. 17). Длина пройденного пути *L* составила ~1 мкм (длина цепочки 4060 атомов углерода, скорость перемещения 1 атом/с).

Если предположить, что собственное искривление решётки графита в мезоскопическом масштабе незначительно, то по полученным данным можно судить о нелинейности вносимой сканером микроскопа. Через измеренные положения атомов методом наименьших квадратов проведена осредняющая прямая (см. Рис. 17), которая при определении нелинейности бала принята за "эталонную структуру". Максимальное поперечное отклонение от линейности  $|\Delta_{max}|$  (см. Рис. 18) составило около 2.6 Å или  $|\Delta_{max}|/L100\%=0.03\%$ .

Если пренебречь незначительным искривлением цепочки, то продольную нелинейность можно определить по изменению атомного периода (см. Рис. 19) как ( $a_{max}$ - $a_{min}$ )/ $\overline{a}$  100%, где  $a_{max}$ ,  $a_{min}$ ,  $\overline{a}$  – максимальный, минимальный и средний периоды в цепочке, соответственно. Большой разброс соседних значений на рисунке объясняется малым числом циклов скиппинга во время перемещения. Для извлечения из полученных данных численных значений, характеризующих  $a_{max}$  и  $a_{min}$ , проведена регрессионная кривая. Продольная нелинейность составила 4.94%.

Строго говоря, оценку нелинейности сканера следует проводить по распределённым в пространстве сканирования калибровочным коэффициентам. Скорректировав координаты атомов пройденной цепочки по калибровочной базе данных, можно по остаточной кривизне цепочки выявить дефекты и/или механические напряжения в кристалле.

## 3.5. Точно локализованная спектроскопия с малым уровнем шума

Для демонстрации потенциальных возможностей метода, связанных с получением спектроскопической информации (достоверные спектроскопические данные возможно получить только в



Рис. 22. Разупорядоченная поверхность электрохимически полированного алюминия (ACM, режим прерывистого контакта). Шаги микроскопа в латеральной плоскости: Δ<sub>x</sub>=8.53 nm, Δ<sub>y</sub>=8.58 nm. Изображение (а) получено по методу ООС. Средний размер апертуры (59×59) пикселов<sup>2</sup>. Размер сегмента (35×35) пикселов<sup>2</sup>. Число усреднений в точке растра 1. Число циклов скиппинга 2. Число усреднений сегмента 4. Скорость сканирования в апертуре/сегменте 3485 нм/с. Скорость перемещения при скиппинге 697 нм/с. Средний модуль скорости латерального дрейфа ~0.396 Å/с. Средний модуль скорости вертикального дрейфа ~0.077 Å/с. Время сканирования 8.5 часов. Изображение (б) (198×190) пикселов<sup>2</sup> получено обычным сканированием. Статическая нелинейность пьезосканера исправлена программными средствами. Число усреднений в точке 4. Скорость сканирования 3485 нм/с. Время сканирования 2 мин.

условиях сверхвысокого вакуума), было выполнено 10<sup>4</sup> измерений вольтамперной характеристики (ВАХ) туннельного зазора. Измерения ВАХ чередовались с привязками зонда микроскопа к выбранному атому углерода на поверхности графита. На Рис. 20 показана найденная после усреднения ВАХ перехода и её производная. Данная ВАХ измерена непосредственно на вершине атома углерода (подобные характеристики также могут быть получены в любой точке окрестности атома).

# 3.6. Определение дрейфа микроскопа

Измерение дрейфа заключается в выполнении последовательности привязок зонда к выбранной особенности на поверхности. На Рис. 21 представлена пространственная траектория движения атома привязки в процессе измерения. Средняя скорость дрейфа микроскопа в латеральной плоскости составила около 0.12 Å/с. Из Рис. 21 можно заключить, что скорость дрейфа микроскопа на протяжении десятков секунд остаётся приблизительно постоянной.

3.7. Особенность-ориентированное сканирование разупорядоченных поверхностей

Таблица 1. Статистика (сред	цние значения)	особенностей	разупорядоченной	поверхности.	Длина	цепочки
(размер выборки) – 150 особ	енностей.			-		

Поверх- ность	Тип особ.	Расстояние между особ., нм	Площадь основания особ., нм <sup>2</sup>	Диаметр особ., нм	Высота/ глубина особ., нм	Объём особ., нм <sup>3</sup>	Компакт- ность основа- ния особ., %	Плотность особ., мкм <sup>-2</sup>
Алюми-	YOEM	132.42	6890.1	93.7	3.46	11933.7	78.5	51.4
фольга	MILOX	129.39	7328.1	96.6	4.04	14595.7	78.3	52.8
Плёнка углеро- да	холм и яма	86.82	1821.3	48.2	1.31	1309.2	71.6	118.7



Рис. 23. Структура цепочки особенностей, полученная в процессе ООС поверхности наноструктурированного алюминия.

# электрохимически полированного алюминия и осаждённой из плазмы плёнки углерода

В качестве первого примера, иллюстрирующего способность алгоритма сканировать разу-



Рис. 24. Реальная сеть из абсолютных положений особенностей, на которую наложены относительные положения особенностей. Большая разница между абсолютными и относительными позициями одних и тех же особенностей свидетельствует о сильных искажениях, возникающих в процессе измерений на C3M.

порядоченные поверхности, на Рис. 22(а) представлена наноструктурированная поверхность алюминия. Здесь и ниже по тексту применяется способ связывания, использующий вспомогательные СО; реализовано прямое распознавание особенностей; сканирование апертур и фиксированного размера сегментов выполнено с постоянным шагом на АСМ в режиме прерывистого контакта, коэффициент упругости кантилевера производства компании НТ-МДТ равен ~20 Н/м, частота резонанса кантилевера 153.403 кГц, радиус кончика зонда составляет менее 10 нм; после сборки из реконструированных изображений был вычтен средний наклон поверхности, никакого сглаживания изображений не производилось.

Сравнение с тем же участком поверхности, полученным обычным сканированием (см. Рис. 22(б)), показывает полную адекватность изображений друг другу. На Рис. 22(б) хорошо видны вызываемые ползучестью искажения рельефа, которых нет на Рис. 22(а). Структура полученной цепочки особенностей показана на Рис. 23. В Таблице 1 приводятся найденные в процессе измерений статистические данные, характеризующие особенности разупорядоченной поверхности. Диаметр особенности определён как диаметр окружности, описанной вокруг основания особенности. Компактность [10] показывает в процентах степень отклонения формы основания особенности от формы круга (форма круга имеет совершенную компактность 100%). При необходимости для представленных в таблице параметров могут быть построены их функции распределения.

В процессе работы всего было отсканировано 142 апертуры и 600 сегментов, что говорит о высокой избыточности ООС-метода; также было выполнено 420 привязок, 364 циклов прескиппинга (см. ниже), 97 пересканов апертуры и 178 пересканов сегмента, что указывает на присутствие сильного вызываемого ползучестью движения; подстройка апертуры производилась 14 раз. Рис. 24 даёт наглядное представление о степени тех искажений, к которым приводит дрейф микроскопа: здесь абсолютные и относительные координаты особенностей наложены друг на друга путём совмещения позиций первых особенностей цепочек (сравни с Рис. 11).

На Рис. 25 показан тот же участок поверхности алюминия, что и на Рис. 22(а), полученный в тех же условиях и с теми же параметрами сканирования (стартовая особенность, количество элементов в затравке, ориентация затравки, длина цепочки, способ связывания, число усреднений, исходный размер апертуры, размер сегмента, пороги, допуски и т. п.). Отличия состоят только в скоростях сканирования в апертуре и в сегменте, а также в скорости перемещения при скиппинге, которые были вдвое меньше первоначальных. Непосредственное сравнение рельефа Рис. 25 с рельефом Рис. 22(а) подтверждает слабую зависимость реконструированных изображе-



Рис. 25. Тот же участок поверхности алюминия, те же условия, режимы и параметры, что и при измерении рельефа на Рис. 22(а), за исключением скорости сканирования, которая в апертуре, в сегменте и при скиппинге составляла половину от соответствующего первоначального значения.



Рис. 26. Структура цепочки особенностей, соответствующая скану на Рис. 25. Для сравнения даны координаты особенностей рельефа Рис. 22(а). Среднее рассовмещение координат составляет 3.79 нм.

сканирования

(CM.

также

скорости

### Таблицу 1).

Для большей наглядности совпадения измеренных координат особенностей на Рис. 26 дана цепочка, соответствующая рельефу Рис. 25, и позиции особенностей рельефа на Рис. 22(а) (совмещение особенностей выполнено по методу наименьших квадратов). В среднем взаимное отклонение составило 3.79 нм, что чуть меньше половины от используемого шага сканирования. Следует отметить, что небольшое рассовмещение цепочек связано в основном не с дрейфом, а с изменением настроек микроскопа в течение столь продолжительного времени сканирования. Другой обративший на себя внимание источник погрешности – неконтролируемая незначительная модификация мягкой поверхности алюминия.

ний

от

Прямое сравнение цепочек на Рис. 23 и на Рис. 26 позволяет выявить небольшие различия в их структуре, что указывает на отсутствие точно воспроизводимой траектории перемещения от особенности к особенности в реальном режиме. Хотя "макросостояние" прибора и "макроусловия" проведения измерений остаются практически неизменными, "микросостояние" прибора и "микроусловия" в данном конкретном месте образца заметно меняются и при сканировании одной и той же особенности цепочки оказываются каждый раз разными.

В качестве ещё одного примера сканирования на Рис. 27 приведена разупорядоченная поверхность осаждённой из плазмы плёнки углерода. В роли подложки использовался электронный резист (метилметакрилат), который с целью уплощения был предварительно облучён ультрафиолетом ( $\lambda$ =180...260 нм). В отличие от предыдущих сканов здесь в качестве особенностей использовались и холмы (углеродные кластеры) и ямы (межкластерные пространства). Структура цепочки особенностей показана на Рис. 28. Представленная поверхность полностью разупорядочена, её характеристики даны в Таблице 1. Следует обратить внимание на бо́льшую в сравнении с предыдущей поверхностью дисперсию размеров особенностей и расстояний между особенностями, а также на меньшие размеры особенностей. По Рис. 29 можно судить об искажениях, возникавших в процессе сканирования плёнки углерода.

Для сдерживания ползучести в процессе сканирования автоматически инициировались дополнительные привязки, а также использовался прескиппинг. Прескиппинг или холостой скиппинг вводится перед основным циклом скиппинга. Из-за сильных искажений результаты его работы для усреднения относительного расстояния между особенностями не используются, а служат только как исходные данные для старта основного цикла.

Прескиппинг, составляющий обычно 1-3 цикла, обеспечивает более плавный переход к скиппингу от сканирования апертуры или предыдущего скиппинга. Для сравнительно больших расстояний между особенностями по крайней мере один цикл прескиппинга необходим для того, чтобы сформировать для основного цикла скиппинга частную петлю гистерезиса. Такой показатель



Рис. 27. Полностью разупорядоченная поверхность осаждённой из плазмы плёнки углерода (АСМ, режим прерывистого контакта). Шаги микроскопа в латеральной плоскости:  $\Delta_x$ =5.39 нм,  $\Delta_y$ =5.42 нм. Изображение (а) получено по методу ООС. В качестве особенностей использовались и холмы и ямы (95 и 55, соответственно). Средний размер апертуры (61×61) пиксел<sup>2</sup>. Размер сегмента (41×41) пиксел<sup>2</sup>. Число усреднений в точке растра 1. Число циклов скиппинга 2. Число усреднений сегмента 4. Скорость сканирования в апертуре 1542 нм/с. Скорость сканирования в сегменте 1927 нм/с. Скорость перемещения при скиппинге 385 нм/с. Средний модуль скорости латерального дрейфа ~0.146 Å/с. Средний модуль скорости вертикального дрейфа ~0.146 Å/с. Время сканирования 10 часов 10 мин. Изображение (б) (180×245) пикселов<sup>2</sup> получено обычным сканированием. Статическая нелинейность пьезосканера исправлена программными средствами. Число усреднений в точке 4. Скорость сканирования 1927 нм/с. Время сканирования 3 мин 40 сек.

как плотность (см. Таблицу 1), отвечающий за эффективность применения ООС, для данных поверхностей следует считать вполне приемлемым.

Несмотря на то, что размеры особенностей, расстояния между особенностями, время сканирования сегмента на приведённых разупорядоченных поверхностях на 2-3 порядка больше, чем на атомарной поверхности графита, измеренные величины дрейфа оказались сравнимы, что напрямую свидетельствует о практически полной компенсации ползучести при ООС в масштабе размеров вплоть до 100-150 нм.

# 4. Обсуждение

Поскольку в разработанном методе производится распознавание отсканированного изображения, то особенности рельефа следует понимать в широком смысле. Физически они могут представлять собой не только рельеф в чистом виде, но и физические неоднородности, такие как области намагниченности, места локализации электрического заряда и т. п. Поэтому описываемый в работе метод в общем случае применим для целого семейства сканирующих зондовых приборов. Например, он может использоваться в магнитно-силовом микроскопе, в электросиловом микроскопе, в оптическом микроскопе ближнего поля и многих других, включая сканирующий электронный микроскоп.

Изначально искажающие факторы были разделены на две группы. В первую временную вошли термодрейф и ползучесть, а во вторую пространственную – нелинейность, гистерезис, паразитные связи, неортогональность. В пределах каждой из групп дальнейшее разделение не требуется и, по-видимому, в полной мере невозможно.

Поскольку в разработанном способе высокая точность измерений достигается ценой резкого



Рис. 28. Структура цепочки особенностей, полученная в процессе ООС поверхности плёнки углерода.



Рис. 29. Реальная сеть из абсолютных положений особенностей углеродной плёнки, на которую наложены относительные положения особенностей.

снижения производительности сканирования (большое число усреднений, дополнительные перемещения зонда, высокая избыточность данных), то использование алгоритма на практике во многом определяется долговременной стабильностью микроскопа и его быстродействием [18]. Причём, чем быстрее происходит сканирование в масштабе отдельных атомов, тем более медленным на его фоне выглядит процесс изменения термодрейфа, тем, соответственно, меньшую погрешность даёт применяемая схема линеаризации.

На данный момент предложено несколько систем с активной динамической коррекцией работы пьезоманипуляторов микроскопа [19-21], позволяющих выполнять прецизионные измерения рельефа поверхности. Коррекция осуществляется посредством введения в контур управления прибора трёх замкнутых следящих систем – по одной на каждый манипулятор. Во время сканирования следящая система стремится компенсировать возникающую при движении манипулятора разность между заданной величиной перемещения и фактической, измеряемой с помощью линейного датчика положения.

Несмотря на хорошие результаты, системы регулирования с замкнутой обратной связью обладают рядом недостатков. Во-первых, они сложны и дороги, так как содержат корпус, обеспечивающий с высокой точностью ортогональность и прямолинейность базовых поверхностей, а также три дополнительных следящих контура, каждый из которых оснащён высокочувствительным малошумящим датчиком положения. При изготовлении корпуса используются уникальные материалы, имеющие малый коэффициент теплового расширения, а также применяется высокопрецизионная механическая обработка. Несовершенство корпуса приводит к погрешности косинуса [2].

Во-вторых, в данных системах невозможно определять перемещения кончика зонда *in situ*, так как измерительная система датчика регистрирует смещение манипулятора относительно корпуса прибора. В результате, из-за изгиба манипулятора во время работы и небольшой собственной толщины образца (длины зонда) возникает погрешность смещения Аббе [2]. В-третьих, указанные системы не позволяют выполнять точные измерения рельефа на пределе разрешения микроскопа. В-четвёртых, системы не способны произвольно долго удерживать зонд микроскопа в выбранном месте поверхности.

Наконец, микроскоп, описанный в статье [21], трудно применять в тех случаях, когда характерный масштаб рельефа исследуемой поверхности сильно отличается от атомного масштаба эталонной поверхности ВОПГ, поскольку время измерения из-за необходимости использования малого шага может оказаться неоправданно большим. Ещё одной проблемой является то, что на практике не существует бездефектных, ненапряжённых механически, одинаково упорядоченных по всей поверхности кристаллических решёток. Следовательно, та часть изображения, которая исправлялась по искривлённой области поверхности эталона, окажется искажённой.

Предложенный метод сканирования, напротив, свободен от указанных погрешностей и недостатков, для его реализации не требуется каких-либо дополнительных механических узлов или электроники. Погрешность смещения Аббе устраняется в процессе распределённой калибровки. При этом необходимо только обеспечить посредством специального держателя образца/иглы фиксированное смещение плоскости сканирования от края манипулятора.

Поскольку погрешность смещения Аббе возрастает при перемещении к краю поля сканирования, то другим способом уменьшения её влияния может быть перенос посредством грубого позиционера и привязки зонда к особенности измеряемого места с периферии в центр поля точного сканера. Для получения наибольшего эффекта рекомендуется использовать последний приём наряду с распределённой калибровкой.

В предлагаемой концепции позиционирования погрешность косинуса отсутствует, поскольку отсутствует в явном виде метрологический короб. Роль короба частично выполняет сам XYZ-пьезосканер, определяя только начало координат, которое совпадает с положением манипулятора при подаче на него нулевой разности потенциалов. Такие атрибуты короба как ортогональность осей и прямолинейность направляющих воспроизводятся посредством выполнения распределённой калибровки. Слабая термодеформируемость метрологического короба, обычно обеспечиваемая специальными материалами и конструктивными решениями, заменена активной компенсацией термодрейфа в процессе выполнения ООС.

Необходимо отметить в заключении, что обсуждаемые подходы к измерению поверхности не следует воспринимать как противопоставление методов друг другу, в ряде случаев совместное их применение должно привести к существенно лучшим результатам, чем при использование по отдельности.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 96-02-17870, 00-02-17259, 02-03-32615), фонда Физика твердотельных наноструктур (проект 96-2012) и Правительства Москвы (грант 1.1.82). Автор выражает благодарность О. Э. Ляпину за проверку рукописи, С. А. Гаврилову за предоставленный образец наноструктурированного алюминия, А. Г. Кириленко за изготовление образца плёнки углерода, С. А. Саунину за помощь, оказанную при встраивании алгоритма сканирования в программу управления микроскопом.

# Литература

- [1] Pohl D W 1986 IBM J. Res. Dev. 30 417
- [2] Griffith J E, Grigg D A 1993 J. Appl. Phys. 74 R83
- [3] Yurov V Y, Klimov A N 1994 Rev. Sci. Instrum. 65 1551
- [4] Jørgensen J F, Madsen L L, Garnaes J, Carneiro K, Schaumburg K 1994 J. Vac. Sci. Technol. B 12 1698
- [5] Lapshin R V 1995 Rev. Sci. Instrum. 66 4718 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm)
- [6] Vieira S 1986 IBM J. Res. Dev. 30 553
- [7] Stoll E P 1992 Ultramicroscopy 42-44 1585
- [8] Лапшин Р В 1999 *Патент РФ* № 2175761 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/patents.htm)
- [9] Лапшин Р В 2002 Диссертация Москва (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm)
- [10] Lapshin R V 1998 Rev. Sci. Instrum. 69 3268 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm)
- [11] Pohl D W, Möller R 1988 Rev. Sci. Instrum. 59 840
- [12] Swartzentruber B S 1996 Phys. Rev. Lett. 76 459
- [13] Лапшин Р В 2006 *Патент РФ* № 2326367 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/patents.htm)
- [14] Yuzhakov V V, Chang H C, Miller A E 1997 Phys. Rev. B 56 12608
- [15] Лапшин Р В 1999 *Патент РФ* № 2181212 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/patents.htm)
- [16] Binnig G, Rohrer H 1983 Surf. Sci. 126 236
- [17] Lapshin R V 2000 Rev. Sci. Instrum. 71 4607 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm)
- [18] Lapshin R V, Obyedkov O V 1993 Rev. Sci. Instrum. 64 2883 (доступ на сайте
- www.nanoworld.org/homepages/lapshin/publications.htm)
- [19] Griffith J E, Miller G L, Green C A, Grigg D A, Russell P E 1990 J. Vac. Sci. Technol. B 8 2023
- [20] Barrett R C, Quate C F 1991 Rev. Sci. Instrum. 62 1393
- [21] Kawakatsu H, Hoshi Y, Higuchi T, Kitano H 1991 J. Vac. Sci. Technol. B 9 651