

На правах рукописи

УДК: 537.533.35; 681.2.08; 681.5

ЛАПШИН Ростислав Владимирович

**ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОЕ СКАНИРОВАНИЕ ДЛЯ  
ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ И НАНОТЕХНОЛОГИИ**

(05.27.01 – твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,  
микро и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах)

**А в т о р е ф е р а т**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата технических наук

Москва – 2002

Работа выполнена в Федеральном государственном унитарном предприятии  
“Научно-исследовательский институт физических проблем им. Ф. В. Лукина”

Научные руководители:

доктор технических наук

В. А. Быков

доктор физико-математических наук

Б. К. Медведев

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор

В. К. Неволин

доктор технических наук

Н. А. Зайцев

Ведущая организация:

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН (142432, Московская область, Ногинский район, п. Черноголовка, ИПТМ РАН)

Защита состоится “18” декабря 2002 г. на заседании диссертационного совета Д 217.011 01 в ФГУП НИИ Физических проблем им. Ф. В. Лукина по адресу: 124460, г. Москва, г. Зеленоград.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИИ Физических проблем, телефон: 531-46-73; 536-93-79

Автореферат разослан “4” ноября 2002 г.

Заместитель председателя диссертационного совета  
доктор физико-математических наук, профессор



Э. А. Полторацкий

## I. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы

Сканирующий зондовый микроскоп (СЗМ) способен как измерять рельеф с атомарным разрешением, так и поатомно модифицировать его, что позволяет рассматривать данный прибор как один из базовых инструментов нанотехнологии. Однако, существующие микроскопы и применяемые в них методы управления всё ещё недостаточно совершенны. В частности, критическим узлом современных СЗМ является система позиционирования зонда, на работу которой оказывают влияние многочисленные негативные факторы: внешние вибрации, шумы, термодрейфы, нелинейность, гистерезис, ползучесть (крип) и паразитные взаимные связи (кауплинг) используемых пьезоманипуляторов. В результате ухудшается точность измерений, уменьшается их достоверность, снижается предельное разрешение прибора. Искажения ведут к неправильной интерпретации экспериментальных данных, ограничивают область применения микроскопа.

На сегодняшний день задача получения адекватного изображения рельефа поверхности решается посредством использования компенсирующих/исправляющих моделей, описывающих соответствующее искажение, и/или следящих измерительных систем, оснащённых линейным датчиком положения. Для построения модели и определения её параметров необходимо чёткое разделение искажающих факторов друг от друга. Однако, разделение искажающих факторов не всегда осуществимо по причине того, что разные источники часто ведут к схожим искажениям.

Применение следящих измерительных систем натолкнулось на ограничения, связанные с погрешностью косинуса, ошибкой смещения Аббе и с шумами датчиков положения. Из-за более сложной конструкции, юстировки и эксплуатации СЗМ, оборудованных следящими системами, необходимости использования высокоточных технологий обработки деталей этих приборов, применения материалов с исключительными механическими свойствами стоимость данных микроскопов оказалась достаточно большой. В этой связи при разработке высокопрецизионных устройств всегда следует помнить об экономической составляющей, поскольку трудно ожидать быстрого и широкого внедрения в промышленность дорогих уникальных приборов.

В настоящее время СЗМ из разряда приборов, обеспечивающих получение в большей степени качественных результатов, переходит в разряд приборов, способных производить точные количественные измерения. Соответственно возрастает значение задачи калибровки сканера микроскопа, решение которой должно настолько поддаваться формализации, чтобы обеспечить полную автоматизацию этого процесса. Причём, как показывает практика измерений, предпочтение при выборе эталона длины необходимо отдавать природным мерам – высокоупорядоченным кристаллическим решёткам веществ со стабильной поверхностью, а для полной компенсации нелинейностей сканера следует искать распределение локальных калибровочных коэффициентов в пространстве сканирования.

Фактически нереализованной функцией СЗМ-нанолитографа, лежащей в основе технологии манипулирования и избирательного воздействия на отдельные атомы, молекулы и кластеры из них, остаётся позиционирование рабочего органа микроскопа – зонда как непосредственно в месте операции, так и по большому полю грубого манипулятора. На сегодняшний день практически от-

сутствуют такие важные функции СЗМ-нанолитографа как: автоматическое удержание места измерения/воздействия в поле зрения прибора, автоматический возврат в технологическую зону после отвода зонда от поверхности или снятия образца, автоматическое перемещение между разными технологическими зонами на поверхности образца.

На современном этапе развития нанотехнология располагает целым набором специализированных аналитических и технологических инструментов – зондов. Однако, поочерёдное их применение к одному и тому же нанообъекту на поверхности невозможно, если взаимное положение зондов точно не известно, и СЗМ-нанолитограф не обладает способностью в автоматическом режиме находить среди других объектов заданный объект. Чтобы увеличить производительность СЗМ-нанолитографа, следует использовать линейки или массивы зондов, функционирующих параллельно. Однако, не имея точной информации о том, как расположены зонды относительно друг друга, невозможно правильно собрать целое изображение из фрагментов, полученных каждым из зондов. Таким образом, задача организации измерений/воздействий в многозондовых системах является на сегодняшний день весьма актуальной.

**Цель работы** состояла в создании и экспериментальной апробации способа объектно-ориентированного сканирования (ООС) поверхности. Применяя процедуру распознавания и ряд специальных приёмов, производится поочерёдное многократное сканирование небольших расположенных по соседству друг с другом окрестностей топографических объектов (особенностей) поверхности. После чего из полученных фрагментов собирается искомое изображение рельефа свободное от шумов и от искажений, связанных с дрейфом зонда микроскопа относительно исследуемой поверхности. Для достижения поставленной цели были разработаны:

- методы итеративного и прямого распознавания особенностей поверхности в реальном масштабе времени;
- способ связывания особенностей путём обхода контура с присоединением новых элементов цепи и способ связывания с использованием вспомогательных квазистрок особенностей;
- функции компенсации, учёта и мониторинга дрейфа микроскопа посредством периодической “привязки” зонда к особенности поверхности;
- процедура многократного скиппинга между текущей и следующей особенностями цепочки с усреднением полученных данных;
- методика автоматической распределённой калибровки сканера микроскопа;
- алгоритм сборки сегментного изображения рельефа поверхности;
- способы прецизионного позиционирования зонда по локальным особенностям поверхности в поле точного манипулятора;
- способ прецизионного переноса поля точного манипулятора в поле грубого;
- методика повышения чувствительности спектроскопических измерений и точности их локализации на поверхности;
- функции сбора и накопления статистической информации, характеризующей особенности исследуемой поверхности.

Совокупность предложенных методов должна обеспечить широкое внедрение СЗМ в практику осмотровых измерений, метрологию, нанолитографию, кристаллографию, молекулярную биологию и в другие области науки и техники.

#### **Научная новизна**

Предложен метод активного сканирования рельефа, основанный на ис-

пользовании особенностей исследуемой поверхности в качестве опорных точек при выполнении относительных перемещений. Применяя распознавание особенностей поверхности в реальном масштабе времени и встречные перемещения зонда, компенсируется негативное влияние термодрейфа головки микроскопа и ползучести пьезоманипуляторов, что позволяет повысить точность СЗМ-измерений, а также снять ограничения на размеры получаемых сканов. Осуществляя периодическую привязку зонда микроскопа-наноитографа к объекту поверхности, возможно произвольно долго удерживать зонд в некоторой области на поверхности, где проводятся измерения и технологические воздействия, а также прецизионно размещать поле точного позиционера в поле грубого.

Посредством выполнения больших усреднений данных продемонстрированы: возможность получения рельефа поверхности с предельным для используемого типа прибора латеральным и вертикальным разрешением; способность измерять постоянные решётки и кристаллографические направления на 2-3 порядка точнее, чем при обычном сканировании; возможность осуществления точно локализованной туннельной и атомно-силовой спектроскопии с низким уровнем шумов.

Распределённая автоматическая калибровка, при которой в каждой точке пространства сканирования, используя высокоупорядоченные поверхностные структуры природных эталонов, ищется тройка локальных калибровочных коэффициентов, открывает перспективу почти полного исправления искажений, вносимых нелинейностью, неортогональностью и паразитными связями пьезоманипуляторов микроскопа. Причём, калибровка всего поля точного манипулятора производится лишь небольшой заранее выбранной лишённой дефектов областью поверхности эталона.

### **Практическая ценность**

Создан полный комплект программ, реализующих предложенный метод. Комплект включает: модуль реального/виртуального сканирования поверхности, маршрутизатор, стилизёр, сборщик поверхности, калибровщик, экстрактор подцепочек, конвертер. Модуль сканирования интегрирован в управляющую программу микроскопа Solver™ P4, изготавливаемого серийно. Модуль обеспечивает построение “затравки”, сканирование поверхности с использованием нескольких методов распознавания и нескольких способов связывания, позиционирование зонда по локальным особенностям поверхности, измерение постоянных решётки и кристаллографических направлений, получение точно локализованных спектрограмм с малым уровнем шума, автоматическую калибровку микроскопа, непрерывный мониторинг дрейфа прибора. Для хранения и эффективного использования данных предложен специальный цепочечный формат.

Разработанный метод может использоваться в различных областях науки и техники для решения широкого круга экспериментальных и производственных задач нанотехнологии, часть из которых (автоматический поиск и “залечивание” дефектов, непосредственное слежение за движением отдельных объектов по поверхности, автоматический возврат зонда в операционную зону после снятия образца, автоматическое определение взаимного положения аналитических и технологических зондов, удержание заданного направления при перемещении по поверхности кристалла или упорядоченной структуры, манипуляция нано-объектами при комнатной температуре в автоматическом режиме, модификация поверхности в автоматическом режиме и др.) была ранее трудно осуществима, а в некоторых случаях и принципиально невыполнима в рамках общепринятого

подхода к сканированию и позиционированию. Предлагаемая методика обеспечивает высокую точность СЗМ-измерений и высокий уровень их автоматизации при сохранении обычных требований к оборудованию. Универсальность развиваемого подхода позволяет применять метод на любом сканирующем зондовом приборе.

**На защиту выносятся следующие положения и результаты:**

- методология объектно-ориентированного сканирования, заключающаяся в том, что рельеф поверхности измеряется по частям – небольшими расположенными по соседству сегментами в относительной системе координат, а основная доля перемещений в апертурах, в сегментах, между текущей и следующей особенностями, при движении по квазиотрезкам особенностей содержит встречную комплементарную составляющую так, что искажения от дрейфа, рассматриваемые как линейные, могут быть учтены и скомпенсированы в процессе сканирования;
- способы локального связывания особенностей поверхности в цепочку посредством обхода затратки с присоединением новых элементов цепи, а также с использованием вспомогательных квазиотрезков из особенностей; в обоих способах траектория перемещения зонда заранее неизвестна и определяется динамически в процессе ООС, изначально в общем виде задаётся только характер поведения системы при выборе следующей особенности цепи;
- способы позиционирования зонда микроскопа-наноитографа по локальным особенностям поверхности, обеспечивающие прецизионное перемещение в поле точного манипулятора, а также способ прецизионного размещения поля точного манипулятора в поле грубого, при котором удаётся резко снизить требования, предъявляемые к грубому манипулятору, по точности; прецизионность достигается за счёт перемещения от одной особенности к другой соседней и использования следящей системы в горизонтальной плоскости на основе процедуры привязки зонда к особенности;
- эксперименты, подтверждающие базовые принципы, преимущества и потенциальные возможности ООС, по измерению рельефа высокопорядоченной, квазиупорядоченной и полностью разупорядоченной поверхности; по измерению рельефа атомной поверхности с высоким вертикальным и латеральным разрешением; по высокоточному измерению постоянных решётки и направлений на поверхности кристалла; по перемещению на большие расстояния от атома к атому на упорядоченной поверхности кристалла и по выявлению нелинейности сканера или крупномасштабных искажений решётки кристалла; по измерению точно локализованных на поверхности вольтамперных характеристик туннельного зазора с низким уровнем шума; по определению величины дрейфа и характера его проявления в СЗМ; по определению статистических параметров особенностей исследуемой поверхности;
- пакет прикладных программ, функционирующих по принципам ООС.

**Достоверность результатов** подтверждается непосредственным сравнением данных, полученных в реальном режиме предложенным методом сканирования-позиционирования, с данными, измеренными на том же участке поверхности при тех же условиях в процессе обычного сканирования-позиционирования, на предмет выявления ожидаемых качественных и/или количественных отличий, искажений, трансформаций и т. п. Проверка надёжности работы объектно-ориентированного метода как такового (правильность распознавания, связывания, задание адекватных параметров и режимов измерений, устойчивость к исходным и к добавленным симулятором шумам, дрейфам, сбо-

ям сканирования и т. п.) выполняется путём виртуального сканирования по данным, полученным в ходе обычного сканирования, и последующего сравнения реконструированного изображения с исходным. Реконструированное изображение и исходное должны быть в этом случае тождественны друг другу либо должны слабо отличаться, если в процессе виртуального сканирования были искусственно подмешаны шумы, дрейфы и сбои.

### **Апробация работы**

Основные результаты, представленные в диссертации, докладывались на

- Второй международной конференции “Nanometer Scale Science and Technology” (NANO-II), Москва, 1993
- Второй международной научно-технической конференции “Микроэлектроника и информатика”, Москва, Зеленоград, 1995
- Третьей международной научно-технической конференции “Микроэлектроника и информатика”, Москва, Зеленоград, 1997
- Третьей международной научно-технической конференции “Электроника и информатика – XXI век”, Москва, Зеленоград, 2000
- Международной конференции “Micro-Nano Technology for Aerospace Applications”, Montreal, Canada, 2002

### **Публикации**

Основные результаты диссертации изложены в 16 публикациях. По материалу работы получено 3 патента РФ на изобретение.

### **Структура и объём диссертации**

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Количество слов: 29265, рисунков: 49, таблиц: 1, ссылок на литературу: 198. Объём диссертации эквивалентен 140 страницам машинописного текста.

## **II. СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цели диссертационной работы, показана научная новизна и практическая ценность полученных результатов, перечислены основные положения, выносимые на защиту, приведены краткие аннотации глав.

**В первой главе** описан метод объектно-ориентированного сканирования поверхности. Первый параграф посвящён сравнительному анализу существующих систем и методов точного сканирования и позиционирования. На базе проведённого анализа обоснована необходимость разработки метода, предлагаемого в настоящей диссертации.

В частности, выполненный анализ показал, что СЗМ с активной динамической коррекцией работы пьезоманипуляторов<sup>1,2,3</sup> обеспечивают получение изображений поверхности наименее искажённых термодрейфом, ползучестью, нелинейностью и паразитными взаимосвязями между манипуляторами. Указанная коррекция производится введением в контур управления прибора трёх замкнутых следящих систем – по одной на каждый манипулятор. Во время работы следящая система стремится компенсировать возникающую при движении манипулятора разность между заданной величиной перемещения и фактической, измеряемой с помощью линейного датчика положения.

Несмотря на высокие 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 высокоточная механическая обработка. Несовершенство корпуса приводит к погрешности косинуса.<sup>4</sup>

Во-вторых, в данных системах невозможно определять перемещения кончика зонда *in situ*, так как измерительная система датчика фиксирует смещение манипулятора относительно корпуса прибора. В результате, из-за изгиба манипулятора во время работы и небольшой собственной длины иглы/толщины образца возникает погрешность смещения Аббе.<sup>4</sup>

В-третьих, указанные системы не позволяют выполнять точные измерения рельефа на пределе разрешения микроскопа. В-четвёртых, системы не обладают критической для нанолитографии способностью произвольно долго удерживать зонд микроскопа в выбранном месте поверхности.

Наконец, микроскоп, описанный в статье 3, трудно применять в тех случаях, когда характерный масштаб рельефа исследуемой поверхности сильно отличается от атомного масштаба эталонной поверхности графита, поскольку время сканирования из-за необходимости использования малого шага в туннельном датчике может оказаться неоправданно большим. Замена графита на эталон с более крупными структурными элементами и, соответственно, более крупными отрезками длины не всегда годится, поскольку, в таком случае мы вынуждены использовать, как правило, уже не природный эталон, а искусственную неидеальную структуру, которая сама оказывается изготовленной с некоторыми погрешностями.

Ещё одной проблемой в системах подобных 3 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.

Во втором параграфе дана ключевая идея метода. Показано, что техника сканирующей зондовой микроскопии имеет ограничения на предельную точность, с которой выполняются измерения элементов поверхности. Ограничения вызваны величиной шума, свойственного измерительному прибору. Одним из широко используемых способов борьбы с шумами является многократное усреднение получаемых данных. Из-за того что сканирующий зондовый микроскоп подвержен влиянию термодрейфа и ползучести, эффективность применения усреднения резко падает и практически сводится к нулю.

Для подавления перечисленных выше искажающих факторов и указанных недостатков систем с динамической коррекцией 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. Сканируя небольшую область (сегмент) вокруг каждой особенности, а затем, раскладывая полученные фрагменты по соответствующим позициям найденной цепочки, можно реконструировать реальный рельеф поверхности.

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.

Поскольку в разработанном методе производится распознавание сосканированного изображения, то особенности рельефа следует понимать в широком смысле. Физически они могут представлять собой области намагниченности, места локализации электрического заряда и т. п. Поэтому описываемый в работе алгоритм в общем случае применим для целого семейства сканирующих зондовых приборов. Например, он может использоваться как в сканирующем туннельном (СТМ) и атомно-силовом микроскопах (АСМ), так и в оптическом микроскопе ближнего поля, сканирующем электронном микроскопе и др.

В третьем параграфе вводятся базовые понятия и определения. В частности указывается, что в основу работы описываемого ниже алгоритма сканирования положены понятия локальности и связности, объектами, с которыми он оперирует, являются особенности поверхности, и поэтому сам метод может быть назван объектно- или особенность-ориентированным сканированием. В предлагаемом методе фактически осуществляется переход от абсолютной системы координат, связанной с манипулятором, к относительной системе координат, связанной с особенностями поверхности.

В роли особенностей могут выступать элементы рельефа типа “холм” или “яма”. Примечательно, 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 особенности тому масштабу измерений, который в данный момент интересен исследователю, а также насколько они контрастны и стабильны, чтобы служить надёжными местами привязки.

В четвёртом параграфе главным образом на примере упорядоченной поверхности высокоориентированного пиролиитического графита (ВОПГ) описан способ итеративного распознавания, основу которого составляют: операция сегментации изображения поверхности и итеративный поиск оптимального положения горизонтальной плоскости разреза рельефа поверхности. Здесь же введена численная характеристика основания особенности – компактность. Компактность показывает в процентах степень отклонения формы основания особенности от формы круга (форма круга имеет совершенную компактность 100 %).

Пятый параграф содержит описание того, как собственно происходит получение рельефа поверхности при ООС. Вначале, для более ясного и простого изложения метода поверхность полагается атомарно-гладкой, а под особенностями понимаются те выпуклости на ней (изменения электронной плотности),

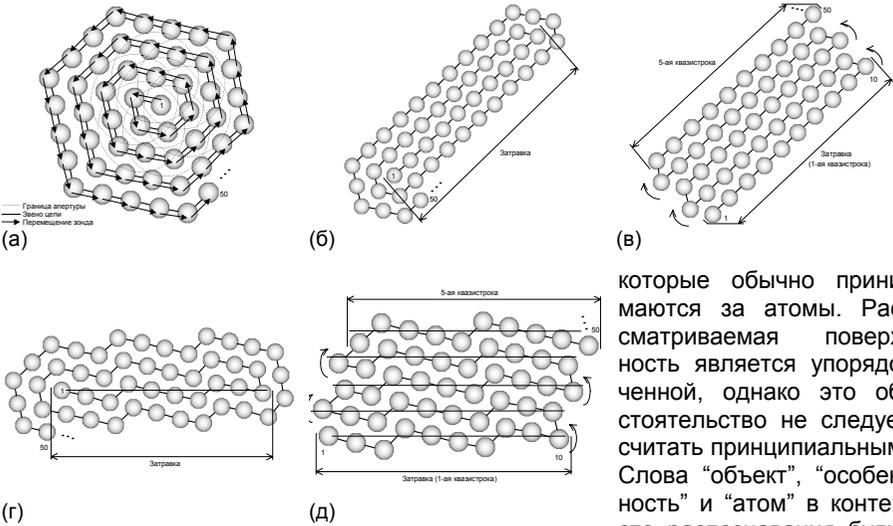


Рис. 1 Стилизованные изображения атомов углерода поверхности графита, иллюстрирующие простейшие способы локального связывания посредством обхода контура с присоединением. Картинки получены в режиме виртуального сканирования. Затравка: (а) одиночный атом; (б), (в), (г), (д) одномерная прямолинейная цепочка из 10 атомов. Затравка ориентирована вдоль: (б), (в) кристаллографического направления; (г), (д) направления, составляющего с X-манипулятором угол  $0^\circ$ . Направление обхода контура: (а), (б), (г) фиксированное (против часовой стрелки); (в), (д) переменное (с переключением в конце каждой квазистроки). Сканы, получаемые связыванием с использованием вспомогательных квазистрок, внешне ничем не отличаются от изображений (в), (д). Скорость распознавания  $\sim 5$  атомов/с.

X-манипулятора против часовой стрелки); а на втором, 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 (контур обхода остаётся всё время, например, слева). Причём, перемещение зонда во время сканирования происходит исключительно по узлам растущей цепочки. Процесс похож на прокладку рельс путеукладчиком: передвигается по пути, который сам строит.

Во втором способе зонд перемещается по квазистрокам, играющим здесь вспомогательную роль. Первой квазистрокой служит затравка, остальные формируются динамически в процессе сканирования. Тело цепочки образуется из элементов первой квазистроки и атомов-соседей, выбираемых из окружения атомов текущей квазистроки по мере перемещения зонда от её последнего атома к первому. Возможная аналогия здесь может быть следующей: путеукладчик движется по готовой колее, создавая параллельно ей новую. После достижения зондом первого атома текущей квазистроки происходит “переключение” на последний атом следующей квазистроки.

Таким образом, в предлагаемом методе сканирования траектория переме-

которые обычно принимаются за атомы. Рассматриваемая поверхность является упорядоченной, однако это обстоятельство не следует считать принципиальным. Слова “объект”, “особенность” и “атом” в контексте распознавания будут использоваться ниже как синонимы.

Итак, в предлагаемом методе получение скана поверхности складывается из двух этапов: на первом, производится построение “затравки” – квазипрямолинейной цепочки атомов заданной длины, ориентированной в заданном направлении (отсчитывается от оси

жения зонда заранее неопределена, изначально задан лишь в общем виде характер поведения системы при выборе следующего атома цепи.

Если за элементарную затравку принять произвольный атом, то его обход даст изображение поверхности, развёрнутое по спирали, форма которого будет определяться формой ячейки, образуемой соседними атомами (см. Рис. 1а). Данный способ является самым простым способом сканирования, применяемым в описываемом алгоритме.

Если в роли затравки используется одномерная прямолинейная (в некоторых случаях прямолинейная условно см., например, Рис. 1г, д) цепочка атомов, то её обход приведёт к построению изображения в виде вытянутой спирали (см. Рис. 1б, г). Причём, если направление обхода в конце каждой “строки” (подцепочки атомов, сориентированной в процессе обхода по затравке) изменять на противоположное, то получим изображение поверхности, “развёрнутое” по квазистрокам (см. Рис. 1в, д) и расположенное в общем случае произвольно по отношению к осям манипулятора. Во всех способах после отыскания “следующего” атома цепочки, “текущий” атом добавляется к цепочке и становится частью контура обхода.

Отметим, что независимо от способа связывания затравка играет роль исходного задающего элемента. Её длина фактически определяет размер скана, а ориентация – его положение относительно системы координат манипулятора (см. Рис. 1б-д). В качестве направления ориентации затравки может быть выбрано как произвольное направление на упорядоченной или разупорядоченной поверхности, так и одно из кристаллографических направлений на упорядоченной поверхности.

Помимо реального предлагаемый алгоритм имеет режим виртуального сканирования. Виртуальный режим используется для сбора статистических данных об особенностях на изображениях поверхности, полученных обычным сканированием. Виртуальный режим также даёт возможность провести моделирование процесса объектно-ориентированного сканирования, задавая шумы и составляющие скорости дрейфа по трём координатным осям, подставляя поверхности-заглушки, имеющие те или иные особенности и т. п.

Перед запуском ООС необходимо выбрать способ локального связывания, задать количество атомов затравки, количество атомов  $n$  в цепочке, а также число усреднений  $l$  сегментов и разностей координат, выбрать тип особенности, задать ориентацию затравки, радиус круглой апертуры  $R$  и ввести подходящий размер сегмента  $m$ , указать первый атом цепочки и разблокировать процедуру привязки. Начиная с этого момента, алгоритм будет последовательно выполнять процедуры (см. Рис. 2), описание которых приведено в последующих четырёх пунктах параграфа.

В первом пункте рассматривается процедура привязки зонда микроскопа. Процедура привязки производит строчное сканирование квадрата окрестности “текущего” атома цепочки, затем удаляет тренд и сглаживает полученное изображение, определяет оптимальную высоту разреза, после чего выполняет рас-



Рис. 2 Упрощённая блок-схема алгоритма. Процедура привязки зонда работает в фоновом режиме. Сканирование считается законченным, если длина цепочки достигла заданного значения  $n$ .

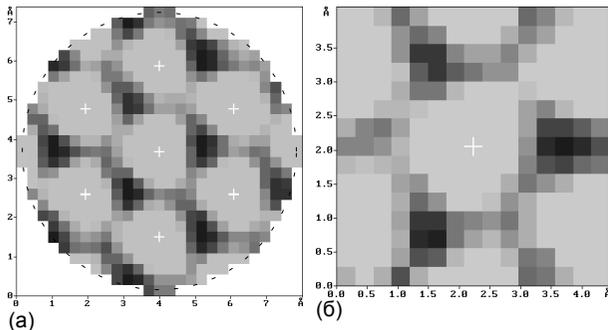


Рис. 3 Наглядное представление результатов распознавания (а) апертуры ( $27 \times 27$  пикселей<sup>2</sup> и (б) сегмента ( $15 \times 15$  пикселей<sup>2</sup>). Перед выполнением распознавания из изображения сначала вычитается локальный тренд, а затем производится сглаживание. Знаком "+" помечены найденные позиции атомов. Положение горизонтальной плоскости разреза одно и тоже для всех особенностей. Среднее число пикселей в основании особенности: 29. Данные изображения обычно используются для качественной визуальной оценки работы алгоритма сканирования. Размер квадратиков на изображениях соответствует минимальному шагу микроскопа в латеральной плоскости ( $\Delta_x = 0.296 \text{ \AA}$ ,  $\Delta_y = 0.273 \text{ \AA}$ ). Картинки получены в реальном режиме сканирования.

данного промежутка времени  $T$ . Интервал  $T$  определяется автоматически по результатам измерения полного мгновенного дрейфа, который меняется во времени и зависит как от конкретной конструкции микроскопа, так и от условий проведения эксперимента. Под полным дрейфом будем понимать далее итог совместного действия термодрейфа и ползучести.

Во втором пункте параграфа описана процедура сканирования апертуры и распознавания ближайших соседей. Вначале данная процедура осуществляет обычную строчную развёртку поверхности в пределах заданного квадратного окна  $2R \times 2R$ , охватывающего с некоторым запасом ближайших к текущему атому соседей (см. Рис. 3а). Последующая работа с изображением поверхности производится либо внутри данного квадратного окна, либо внутри вписанного в него круга радиуса  $R$ , и то и другое в дальнейшем будем называть апертурой.

Затем процедура удаляет тренд, выполняет сглаживание и производит поиск оптимальной высоты разреза. Далее осуществляется распознавание атомов, среди которых находится текущий (расположенный ближе всех к центру растра). Координаты атомов-соседей определяются относительно абсолютного положения текущего атома. Фактически, данная процедура также выполняет и привязку зонда, но только менее точно, из-за того что размеры апертуры в несколько раз больше размеров сегмента.

Описываемая в третьем пункте процедура определения следующего атома цепочки работает по-разному в зависимости от этапа сканирования или используемого способа локального связывания. Например, при создании затравки производится поиск такого атома, который расположен под наименьшим углом к

познавание текущего атома и вычисляет его абсолютные координаты.

Процедура привязки способна удерживать зонд микроскопа над выбранным атомом поверхности в течение практически неограниченного отрезка времени. Она устраняет влияние латерального термодрейфа микроскопа и ползучести ХУ-пьезоманипуляторов, и фактически представляет собой цифровую следящую систему в латеральной плоскости, реализованную программно.

Процедура функционирует в фоновом режиме и активизируется, используя показания системного таймера компьютера, по прошествии за-

прямой, задающей направление движения. Найденный атом получает ярлык “следующий”. Причём, при перемещении вдоль кристаллографического направления положение следующего атома цепочки используется для уточнения направления движения, если изменение локальной кривизны цепочки лежит в заданных пределах. Таким образом, указанный приём позволяет удерживать выбранное направление, легко минув те места на поверхности кристалла, где расположены точечные дефекты решётки.

В случае, когда выполняется обход затравки с присоединением (см. Рис. 1), вначале выполняется сортировка: среди атомов выбирают те, что не принадлежат к уже пройденной цепочке. После чего среди отобранных ищется тот, что расположен под наибольшим (наименьшим) углом (отсчёт угла в обоих случаях производится вокруг “текущего” атома в направлении против часовой стрелки) к отрезку, соединяющему “текущий” и “предыдущий” атомы при обходе контура цепочки против часовой стрелки (по часовой стрелке). Найденный таким образом атом принимается за “следующий” атом цепочки.

Принципиальным и наиболее существенным недостатком способа образования скана поверхности путём обхода затравки с присоединением является то, что, начиная с некоторой длины цепочки, невозможно правильно выполнить сортировку атомов-соседей. Причина заключается в погрешности, накапливаемой в цепочке, величина которой не должна превышать половины характерного расстояния между особенностями.

В режиме виртуального сканирования данная погрешность ничтожно мала, а вот в режиме 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, а, следовательно, и ограничение на максимальный размер скана, который можно получить на данном микроскопе.

Для иллюстрации сказанного на Рис. 4 представлено стилизованное изображение поверхности графита, измеренное в реальном режиме сканирования. На картинке хорошо видны искажения: изменение шага спирали и “провал”, усиливающиеся по мере роста цепи. Для того чтобы подавить аккумуляцию погрешности, следует при добавлении новых звеньев цепочки выполнять коррекцию путём “растворения” невязки на участке цепи от текущего атома до одного из обнаруженных атомов-соседей, включённых в цепь на предыдущем витке.

В качестве альтернативного метода, позволяющего избежать ошибок, вызываемых накоплением погрешностей в цепочке, может быть предложено упомянутое ранее связывание с использованием вспомогательных квазиатомов (см. Рис. 5). Основная идея, лежащая в его основе, заключается в том, чтобы в операции сортировки соседей потенциально принимало бы участие как можно меньшее число элементов цепочки, т. е. чтобы просмотр цепочки осуществлялся бы на минимально возможную глубину.

С этой целью из соседей текущего атома текущей квазистроки образуется группа, куда входят атомы, лежащие по одну определённую до начала сканиро-

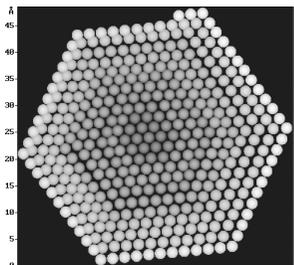


Рис. 4 Типичные искажения скана: изменение шага спирали и несуществующий “провал” изображения, вызванные эффектом накопления погрешности в цепочке. Длина цепочки 400 атомов. Интервал накопления погрешности 67 атомов. Число усреднений звеньев цепочки – 25.

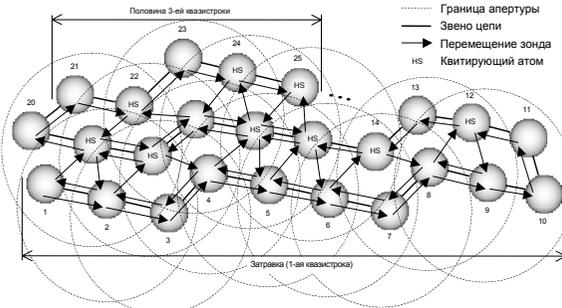


Рис. 5 Локальное связывание особенностей с использованием вспомогательных квазистрок. Первой квазистрокой служит затравка (число атомов в затравке – 10, затравка ориентирована параллельно оси X-манипулятора). Атом квитирувания предназначен для связывания смежных групп атомов-соседей, принадлежащих смежным атомам квазистроки.

подходящих на роль “следующего”, то радиус апертуры увеличивается и заново выполняется её сканирование и анализ.

В четвёртом пункте параграфа рассматривается процедура, предназначенная для точного измерения разностей и сегментов. Вначале её работы блокируется процедура привязки, поскольку теперь основная часть функций последней будет выполняться самой процедурой измерения разностей. Затем зонд микроскопа перемещается в позицию следующего атома, где выполняется обычное строчное сканирование квадрата ( $m \times m$ ) его окрестности, называемого сегментом поверхности.

После этого процедура определяет средний наклон поверхности в сегменте и удаляет его простым вычитанием, выполняет сглаживание, осуществляет поиск оптимальной высоты разреза и, найдя её – распознавание (см. Рис. 3б) следующего атома. Определив его абсолютные координаты, процедура вычисляет разности, а затем перемещает иглу СТМ обратно в позицию текущего атома, после чего производит там действия аналогичные тем, которые она проделала только что со следующим атомом. Находя абсолютные координаты текущего атома, процедура снова вычисляет разности координат между атомами.

Далее описанная выше последовательность действий, называемая скиппингом (от слова *skipping* – перепрыгивание), повторяется столько раз, сколько усреднений / (число усреднений принципиально ничем не ограничено) было задано. В конце цикла “следующему” атому присваивается тэг “текущий”, процедура привязки разблокируется, а счётчик числа атомов цепочки увеличивается на единицу. Напомним, что относительные координаты для первого перемещения зонда в позицию следующего атома определяются процедурой сканирования и распознавания апертуры.

Если в течение одного цикла скиппинга (~300 мс для поверхностей с атомным рельефом) изменение скорости дрейфа невелико, то наступает практически полная его компенсация. Пусть, например, составляющая дрейфа по  $x$  направлена с составляющей перемещения по  $x$  зонда при переходе его от текущей особенности к следующей, тогда измеренная разность будет больше истинной, при движении в обратном направлении она окажется на ту же величину меньше. Следовательно, среднее значение этих разностей будет равно истин-

вания сторону от квазистроки и не принадлежащие квазистроке. По сути здесь мы опять имеем дело с обходом, но уже существенно малой не имеющей роста структуры – текущим атомом текущей квазистроки. Для связывания смежных групп атомов-соседей, относящихся к смежным атомам в квазистроке, используется атом “квитирувания” – текущий атом растущей цепочки.

Отметим, что если в процессе связывания среди соседей не найдено атомов,

ному расстоянию между данными особенностями.

При сканировании поверхностей со всё более крупными чем атомы особенностями крип всё сильнее доминирует над термодрейфом. Однако, благодаря тому, что рельеф поверхности в настоящем методе измеряется по частям – небольшими расположенными по соседству сегментами, а также широкому применению встречных перемещений в апертурах, сегментах, при скиппинге, при движении по квазистрокам, результирующий эффект от самогенерации крипа оказывается незначительным. Поскольку не все перемещения в предлагаемом методе имеют встречную комплементарную составляющую, то для ослабления крипа, вызываемого такого рода перемещениями, вводится пауза – последовательность циклов привязки зонда.

Хотя встречные перемещения не компенсируют крип полностью, но в целом дрейф, ими вызываемый, изменяется медленно и, следовательно, может быть устранён с использованием указанной выше линейной схемы. 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 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 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. Необходимо обратить внимание на то, что размер сегмента должен выбираться таким образом, чтобы сегменты соседних атомов немного перекрывали бы друг друга. Это требуется для того, чтобы после выполнения “сборки” 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 пикселей 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.

Следует отметить, во-первых, что в описанном методе сканирования сегмент это область предельной локализации измерений рельефа. Во-вторых, в каждый момент времени существует не более двух атомов, имеющих абсолютные координаты (два атома при скиппинге и один во всех других состояниях). Координаты остальных атомов цепочки – относительные. В-третьих, 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 атомов на поверхности. Здесь, чрезмерно крупные объекты, не помещающиеся в сегменте, обходятся, а

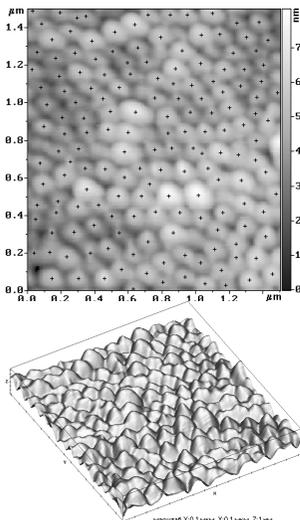


Рис. 6 Реконструкция разупорядоченной наноструктурированной поверхности алюминия. Способ связывания: обход затравки с присоединением. Знаком “+” обозначены позиции расположенных особенностей (холмов). Число подстроек апертуры: 52. Исходный, средний и максимальный размеры стороны апертуры составили 69, 69 и 79 пикселей, соответственно (1 пиксел приблизительно равен 72 Å). Размер сегмента фиксированный (45×45) пикселей<sup>2</sup>. Скорость распознавания: 1.9 особенностей/с.

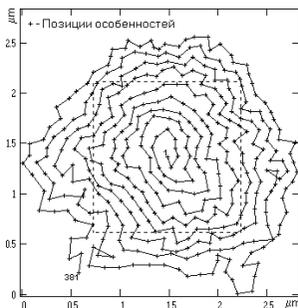


Рис. 7 “Паутина” – траектория “перемещения зонда” от одной особенности к другой в процессе построения цепи. Наличие петель в цепочке указывает на то, что одна и та же особенность на разупорядоченной поверхности не всегда “видна” в смежных апертурах. Пунктирной линией показаны границы заполняемого окна.

лонной поверхности ищется сетка локальных коэффициентов, покрывающая поле сканера. В результате, при проведении сборки изображения появляется возможность в один приём откорректировать все пространственные искажения, вносимые пьезоманипуляторами микроскопа, а именно: нелинейность, неортогональность и паразитное воздействие друг на друга.

Калибровочная процедура заключается в сканировании по алгоритму, описанному выше, эталонной поверхности, в роли которой может выступать, например, ВОПГ, и определении локальных калибровочных коэффициентов путём выполнения скетчинга между каждой особенностью цепочки и всеми её ближайшими соседями. В итоге получаем распределение (сетку) калибровочных коэффициентов в пространстве сканирования. Поскольку влияние термодрейфа и крипа устраняется в процессе измерения, то калибровочная сетка оказывается независимой от скорости сканирования и его направления.

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

слишком мелкие, плохо воспроизводимые от скана к скану, игнорируются. В-четвёртых, алгоритм может быть отнесён к классу адаптивных, поскольку содержит элементы, обеспечивающие самонастройку программы к текущим окружающим условиям, особенностям поверхности и конкретному оборудованию.

В шестом параграфе описывается распределённая калибровка сканера микроскопа: вместо четвёрки фиксированных усреднённых калибровочных параметров, характеризующих сканер, в процессе измерения эталонной поверхности ищется сетка локальных коэффициентов, покрывающая поле сканера. В результате, при проведении сборки изображения появляется возможность в один приём откорректировать все пространственные искажения, вносимые пьезоманипуляторами микроскопа, а именно: нелинейность, неортогональность и паразитное воздействие друг на друга.

ООС.

Рассмотрим способ в котором удаётся ускорить и упростить процедуру калибровки (за счёт отказа от связывания особенностей), а также получать менее плотные распределения коэффициентов. Поле сканера “покрывается” сеткой с квадратными ячейками. Размер стороны квадрата приблизительно определяет то, как плавно будут изменяться в найденном распределении калибровочные коэффициенты.

Зонд микроскопа перемещается по узлам сетки как по растру. В каждом узле, используя процедуру привязки, “захватывается” ближайший атом и производится скиппинг его соседей. Определив координаты атомов, образующих локальную калибровочную структуру, вычисляются искомые локальные коэффициенты.

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 XY-манипулятор, то с его помощью предвзято выбранный “правильный” участок поверхности кристалла можно, используя процедуру привязки зонда к особенности, двигать в поле точного манипулятора (см. ниже) и таким образом калибровать всё поле сканера малой областью эталона.

Содержание седьмого параграфа касается способов визуализации полученных данных, для чего используются процедуры: “сборщик” поверхности, который из сегментов строит реальную поверхность, и “стилизер”, создающий гипотетическую поверхность, на которой атомы изображаются схематично в виде полусфер.

Последний восьмой параграф главы посвящён вопросам сканирования разупорядоченной поверхности. Здесь же даётся описание прямого распознавания особенностей через поиск обобщённых седловых точек рельефа. Отличительной чертой прямого распознавания является то, что положение горизонтальной плоскости разреза определяется индивидуально для каждой особенности в локальном скане.

На Рис. 6 представлен результат виртуального сканирования разупорядоченной наноструктурированной поверхности алюминия. Данная поверхность образована в результате электрохимической полировки текстурированной алюминиевой фольги.<sup>5</sup> Виртуальное сканирование выполнено в режиме заполнения окна  $(1.5 \times 1.5)$  мкм<sup>2</sup>, способ связывания – обход затратки с присоединением. Исходное изображение было получено на АСМ в тэппинг моде. Изображение на

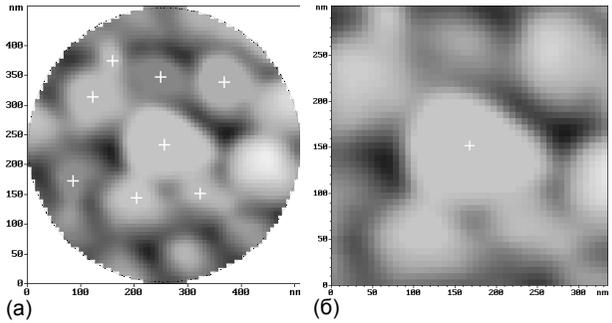


Рис. 8 Типичный вид (а) апертуры и (б) сегмента разупорядоченной поверхности. Для каждой особенности положение горизонтальной плоскости разреза определяется индивидуально. Минимальное основание особенности составляет 5 пикселей. Среднее число пикселей в основании особенности: 73.

<sup>5</sup> Образец изготовлен С. А. Гавриловым (МИЭТ).

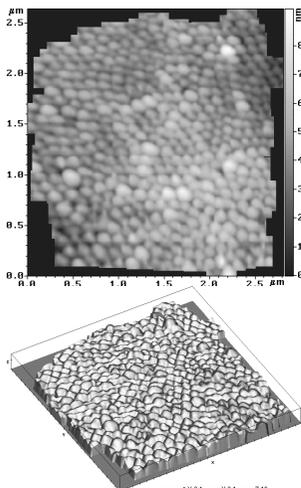


Рис. 9 Реконструкция разупорядоченной поверхности алюминия. Связывание выполнено с использованием вспомогательных квазиistroк. Число подстроек апертуры: 57. Исходный, средний и максимальный размеры стороны апертуры составили 69, 73 и 111 пикселей, соответственно. Размер сегмента фиксированный (45×45) пикселей<sup>2</sup>. Скорость распознавания: 1.7 особенностей/с.

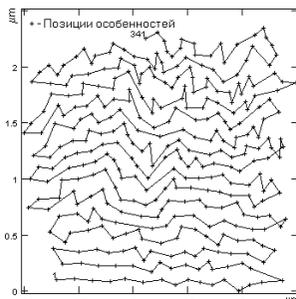


Рис. 10 Структура цепи или "скелет" разупорядоченной поверхности. Можно видеть последовательность связывания особенностей, длину и ориентацию квазиistroк, места переключения квазиistroк.

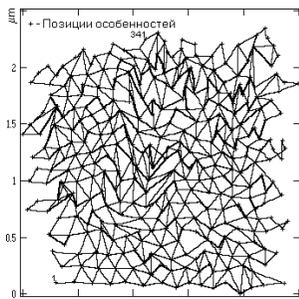


Рис. 11 "Сеть" — траектория "перемещений зонда" при связывании. Из-за наложения линий друг на друга часть перемещений не видна.

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. 1а). Характерные для разупорядоченной поверхности апертура и сегмент приводятся на Рис. 8.

Рис. 9 иллюстрирует связывание особенностей на том же участке разупорядоченной поверхности алюминия посредством вспомогательных квазиistroк. "Рваные" края на приведённом изображении указывают на то, что изображение состоит из сегментов. Рис. 10 отражает связи в полученной цепочке и её структуру: ориентацию, длину, общее количество и места переключения квазиistroк. 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. 5).

На Рис. 12 приведены результаты виртуального сканирования полностью разупорядоченной поверхности углеродной плёнки, осаждённой из плазмы.<sup>†</sup> Связывание особенностей выполнено посредством использования вспомогательных квазиistroк, окончание сканирования наступило после того, как было полностью заполнено задаваемое в начале работы окно размером (2.7×2.7) мкм<sup>2</sup>.

В отличие от поверхности алюминия поверхность углеродной плёнки значительно более развитая, помимо холмов (углеродных кластеров) содержит и ямы (межкластерные пространства), имеет большую дисперсию как размеров самих особенностей, так и расстояний между ними, что нашло отражение в более сложном строении цепи (см. Рис. 13) и сети перемещений (см. Рис. 14).

<sup>†</sup>Образец изготовлен А. Е. Бочкановым и А. Г. Кириленко (НИИФП).

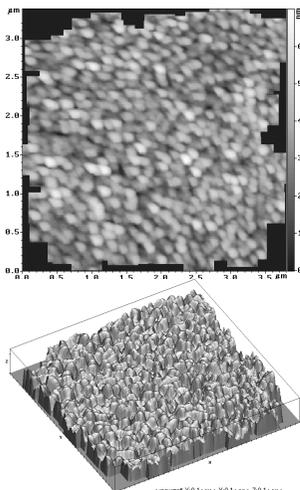


Рис. 12 Реконструкция полностью разупорядоченной поверхности углеродной плёнки. Используемые особенности – холмы (кластеры углерода). Связывание выполнено посредством применения вспомогательных квазистрок. Число подстроек апертуры: 67. Исходный, средний и максимальный размеры стороны апертуры составили 55, 61 и 101 пиксел, соответственно (1 пиксел приблизительно равен 126 Å). Размер сегмента фиксированный (35×35) пикселов<sup>2</sup>. Скорость распознавания: 2 особенности/с.

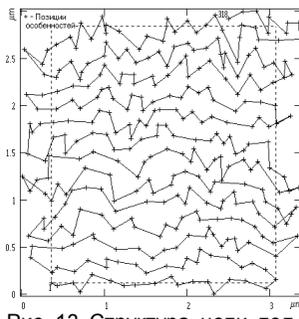


Рис. 13 Структура цепи полностью разупорядоченной поверхности углеродной плёнки. Пунктирной линией показана граница заполняемого окна (2.7×2.7) мкм<sup>2</sup>.

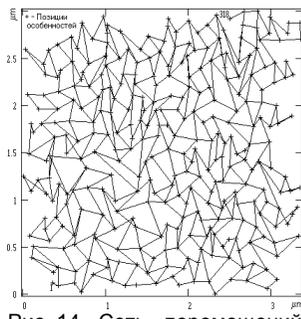


Рис. 14 Сеть перемещений полностью разупорядоченной поверхности углеродной плёнки.

Следует обратить внимание на то, что непосредственное использование в качестве координат привязки зонда относительно просто выявляемых на изображении локальных максимумов (минимумов) рельефа чревато возникновением ошибок. Причина заключается в том, что загрязнения и небольшая модификация поверхности образца и иглы в процессе сканирования приводят к зашумлённости изображения и к нестабильному его воспроизведению. В результате положение максимума оказывается плохо определённым от скана к скану, что вызывает скорее появление ошибок связывания. Повторное сканирование в подобных случаях, как правило, мало эффективно. Тем не менее, путём “травления” рельефа можно перейти от координат экстремума особенности к координатам её центра тяжести.

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 брался с запасом, гарантируя 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 из-за наличия шумов и нестабильностей существует вероятность того, что подобная “плавающая” особенность, обнаруженная в апертуре, может оказаться пропущенной в сегменте (пропуск 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 введе-

нием 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 особенностью признаком может служить её объём, структура ближайших соседей, возможны и более сложные в вычислительном отношении приёмы, основанные на корреляционном анализе, выделении признаков, характеризующих форму контура особенности (здесь, как пример, можно указать упомянутую ранее компактность) и т. п.

Если вместе с измерением рельефа поверхности получать в условиях высокого вакуума спектроскопические данные,<sup>6</sup> несущие информацию о локальном химическом составе поверхности или её локальных механических свойствах, то найденные сведения также могут служить отличительными признаками особенностей при распознавании. К перспективным для использования в ООС методам распознавания особенностей следует отнести нейросетевые алгоритмы,<sup>7</sup> получившие новое развитие в последние годы.

**Вторая глава** диссертации посвящена описанию различных способов позиционирования зонда сканирующего микроскопа по локальным особенностям рельефа поверхности. В первом параграфе показано, что в зависимости от решаемой экспериментальной или технологической задачи позиционирование зонда микроскопа в поле точного манипулятора может быть осуществлено одним из двух способов. В первом из них необходимо предварительное сканирование поверхности, а во втором – нет. Соответственно позиционирование по второму способу требует существенно меньших затрат времени, фактически, оно представляет собой процесс образования затравки, описание которого было дано выше.

В первом способе позиционирование осуществляется только в пределах отсканированного участка поверхности. Для выполнения перемещения 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 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.

Во втором параграфе рассматривается способ прецизионного перемещения зонда в пределах поля грубого манипулятора (прецизионного размещения поля точного манипулятора в поле грубого). Положим для определённости, что исследуемый образец закреплён на точном манипуляторе, а зонд микроскопа – на грубом. Для простоты рассмотрим одномерный случай (см. Рис. 15): пусть требуется переместить зонд из точки А в точку D.

В исходном состоянии (поз. 1, Рис. 15) зонд микроскопа расположен в точке А поверхности. Посредством 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 непрерывное 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. Отличительной чертой предлагаемого способа является то, что на результаты размещения поля точного манипулятора в поле грубого погрешности и нелинейности последнего не влияют.

В третьем параграфе дано описание возможного решения задачи возникающей на практике задачи возврата зонда микроскопа-наноитографа в операционную зону. Данная функция необходима в СЗМ-экспериментах, в которых после какого-либо локального воздействия зондом на поверхность (механическое вдавливание, процарапывание, окисление, нагрев, испарение электрическим полем и т. п.) образец извлекается из микроскопа, подвергается обработке (нанесение плёнки, травление, отжиг и т. п.), а затем устанавливается обратно для того, чтобы увидеть какие изменения произошли с поверхностью в месте воздействия.

В указанных случаях для осуществления автоматического перемещения к месту воздействия необходимо на исходной поверхности образца изготовить разветвлённую систему сходящихся к операционной зоне цепочек из особенностей. На Рис. 16 представлен возможный вид такого рода структуры. Теперь достаточно после подвода захватить любую особенность структуры, задать (приблизительно) направление движения к зоне и дожидаться момента, когда

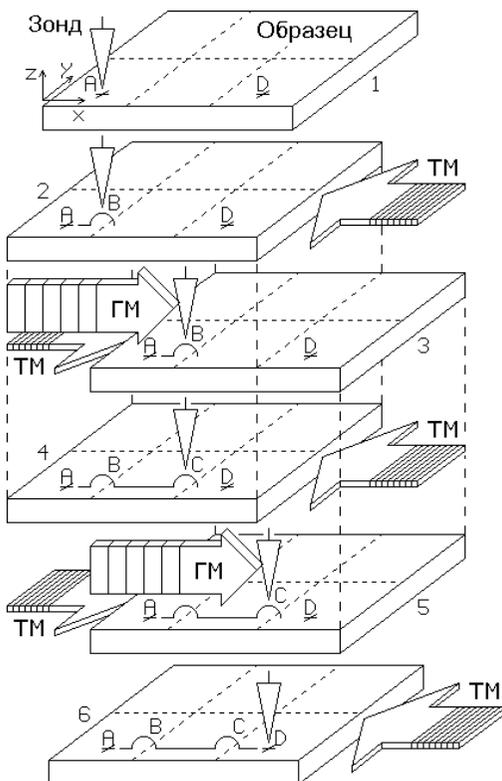


Рис. 15 Прецизионное перемещение зонда микроскопа из точки А в точку D на расстояние более одного диапазона точного манипулятора. Обозначения: ТМ – точный манипулятор, ГМ – грубый манипулятор. Пунктиром на поверхности образца показано разбиение поля грубого манипулятора на смежные диапазоны точного. Дужки в положениях зонда В и С символизируют особенности поверхности.

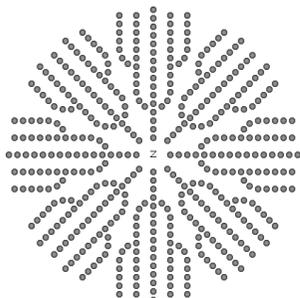


Рис. 16 Навигационная структура в виде системы сходящихся к зоне (обозначена буквой z) цепочек из особенностей.

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, получаем вполне надёжный способ позиционирования рабочего органа нанолитографа.

В четвёртом параграфе приведён способ, позволяющий с высокой точностью определять взаимное положение зондов в многозондовом микроскопе. Экспериментальная практика показывает, что в реальном нанотехнологическом процессе применение СЗМ-литографа целесообразно проводить с использованием двух типов зондов: аналитических и технологических. Аналитические зонды предназначены для выполнения измерений и контроля, а технологические для проведения воздействий на поверхность. Подобное разделение необходимо, поскольку в нанолитографическом процессе, как правило, происходит модификация кончика зонда: изменяется его радиус, форма и физико-химические свойства.

В каждой группе также возможна 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. Предлагаемая особенность-ориентированная методика позволяет осуществить связывание зондов, т. е. точное определение их взаимного положения. Последнее гарантирует возможность использования всей совокупности зондов над одними и теми же объектами, обеспечивая выполнение последовательности разных технологических операций разным инструментом.

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 технологического зонда, особенность поверхности, и найдя 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 / циклов скиппинга зондов (здесь вместо одного зонда и двух особенностей имеем одну особенность и два зонда).

Автоматическое связывание зондов необходимо также в высокопроизводительных многозондовых микроскопах<sup>8</sup> для правильной сборки целого изображения из фрагментов, получаемых при одновременном сканировании поверхности массивом зондов. Зонды можно связать в цепочку, переходя от одного к другому смежному с ним, используя каждый раз новую особенность в области пере-

крытия 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.

### **В третьей главе**

приводятся полученные в реальном режиме сканирования экспериментальные результаты, доказывающие работоспособность предложенного объектно-ориентированного подхода. Перед проведением реального сканирования с целью увеличения производительности и повышения надёжности рекомендуется обычным сканированием получить изображение исследуемой поверхности, а затем выполнить над ним виртуальное сканирование. В результате можно определить оптимальные размеры апертуры и сегмента, правильно подобрать пороги и т. п.

Все представленные ниже измерения проделаны на сканирующем зондовом микроскопе Solver™ P4 фирмы NT-MDT Co.‡ Используемый микроскоп был установлен на тяжёлое основание с пассивной виброизоляции и накрыт пассивным теплоизолирующим коробом для лучшей термостабилиза-

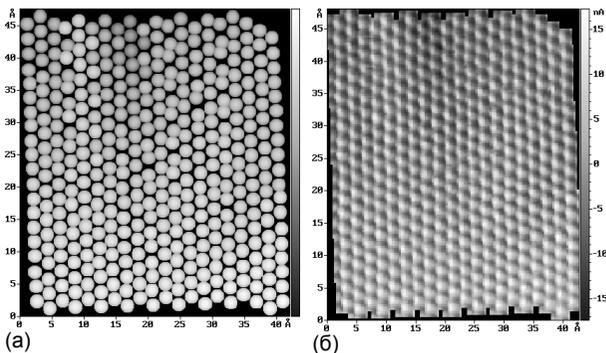


Рис. 17 Атомная поверхность ВОПГ. (а) Стилизованное изображение. Атомы углерода изображены условно в виде полусфер. (б) Реальная поверхность, реконструированная из сегментов (режим постоянной высоты,  $U_{\text{тун}}=-10$  мВ,  $I_{\text{тун}}=998$  пА). Длина цепочки 400 атомов. Число усреднений в точке: 2. 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. Средняя скорость латерального дрейфа около 0.5 Å/с. Интервал привязки зонда не более 500 мс. Время измерения: 23 мин.

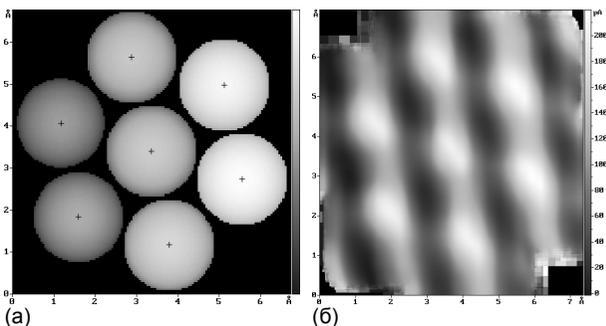


Рис. 18 Атомная поверхность ВОПГ, полученная в режиме высокого разрешения. (а) Стилизованное изображение. (б) “Сырое” сегментное изображение (режим постоянной высоты,  $U_{\text{тун}}=15$  мВ,  $I_{\text{тун}}=401$  пА). Число усреднений в точке: 3. Количество усреднений сегмента: 1000. Усреднённая постоянная 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. Средняя скорость латерального дрейфа около 0.2 Å/с. Интервал привязки зонда не более 500 мс. Время сканирования: 39 мин.

‡Адрес в интернете: <http://www.ntmdt.com>.

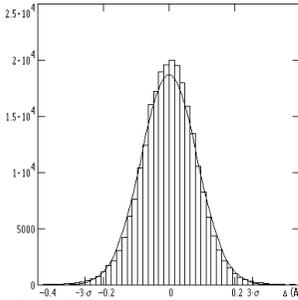


Рис. 19 Гистограмма распределения погрешности измерения постоянной решётки ВОПГ. Количество измерений  $I=2.5 \cdot 10^5$ . Погрешность однократного измерения ( $3\sigma$ ):  $\pm 0.255 \text{ \AA}$ . Коэффициент асимметрии  $k_s=-0.09$ . Эксцесс  $k_k=1.27$ . Время измерения: 7 часов 30 мин.

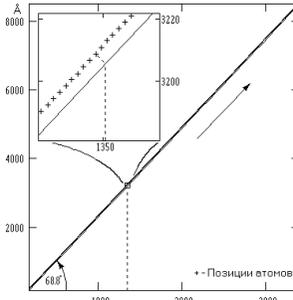


Рис. 20 Перемещение зонда СТМ по атомам углерода в заданном направлении на поверхности ВОПГ. Подрезжим удержания направления включен. Длина пройденного пути  $L \approx 1 \text{ мкм}$ . Число атомов в цепочке: 4060. Число циклов скиппинга: 3. Скорость перемещения: 1 атом/с.

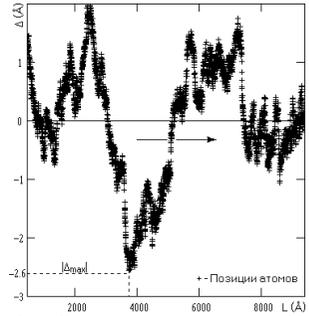


Рис. 21 График отклонения  $\Delta$  положений атомов цепи от осредняющей прямой. Поперечная нелинейность: 0.03 %.

ции. В качестве управляющего применялся IBM-совместимый компьютер i486DX4 100 МГц.

Одна из проблем, с которой пришлось столкнуться при реализации реального режима работы ООС, была связана с возникновением нестабильностей во время сканирования апертуры или сегмента. Нестабильности имели случайный характер и приводили к резкому ухудшению качества изображения, а иногда даже и к полному исчезновению картинки, появлению тренда несвойственного данному участку поверхности, мгновенному сдвигу всего изображения, инверсии рельефа и к некоторым другим искажениям.

Поскольку эксперименты проводились на воздухе, то причина большинства наблюдавшихся нестабильностей связана главным образом с наличием на поверхности некоторого адсорбционного слоя. Другими причинами являются: неопределённость структуры кончика механически срезанной иглы, а также проникновение в систему внешних сейсмических и акустических возмущений случайного характера.

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 его измерений отбрасываются. Повторное сканирование выполняется до тех пор, пока не будет получено изображение приемлемого качества и/или изменение скорости дрейфа не окажется меньше наперед заданной величины.

При сборке реальных поверхностей, представленных ниже, вызываемые дрейфом искажения сегмента не корректировались, исправление нелинейности, неортогональности и кауплинга манипуляторов не производилось, в местах перекрытия сегментов выполнялось только усреднение, для вычисления среднего по модулю дрейфа использовались мгновенные значения, получаемые в процессе измерения разностей.

В первом параграфе дан пример ООС атомного рельефа поверхности графита (см. Рис. 17). Локальное связывание особенностей выполнено с использованием вспомогательных квазистрок. Затравка содержит 20 атомов углерода,

затравка ориентирована вдоль оси X-пьезо манипулятора. Из-за больших временных нестабильностей и малого числа усреднений звеньев цепи положения некоторых атомов в скане заметно смещены (см. Рис. 17а). Усреднённое значение постоянной решётки отличается от номинального значения 2.464 Å, указывая на то, что микроскоп раскалиброван. Артефакты, связанные с сегментной структурой изображения (см. Рис. 17б), практически отсутствуют. Следует обратить внимание на низкий уровень шума в сегментном изображении, хотя никакого сглаживания данных не выполнялось.

Во втором параграфе продемонстрировано ООС небольшого участка поверхности графита (см. Рис. 18) в режиме высокого разрешения. В ходе эксперимента для каждого из 7 атомов углерода было произведено по 1000 измерений сегмента и разностей. 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. 3а).

В третьем параграфе показано, что измерение постоянных решётки фактически представляет собой скиппинг с большим числом усреднений ( $I=10^4 \dots 10^6$ ). Поскольку при выполнении скиппинга ориентация отрезка, соединяющего две особенности, измеряется относительно оси X-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 250000 измерений постоянной решётки ВОПГ, на что потребовалось 7.5 часов непрерывной работы СТМ. В результате постоянная решётки графита определена с погрешностью  $\pm 0.00051$  Å (погрешность однократного измерения с вероятностью  $P=0.9973$  равнялась  $\pm 0.255$  Å). На Рис. 19 показана функция распределения погрешности измерения  $\Delta$  постоянной решётки графита, там же для сравнения дана функция нормального распределения.

В четвёртом параграфе описано перемещение иглы СТМ вдоль кристаллографического направления на поверхности ВОПГ (см. Рис. 20). Цель опыта со-

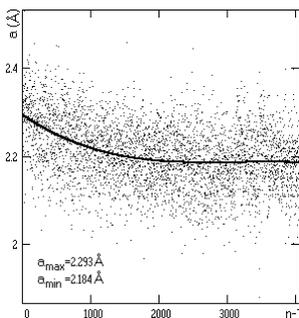


Рис. 22 Изменение атомного периода  $a$  по мере продвижения по цепочке. Среднее значение  $\bar{a} = 2.205$  Å. Регрессия выполнена с использованием полинома третьего порядка. Продольная нелинейность: 4.94 %.

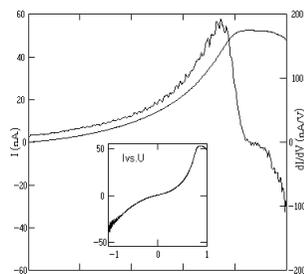
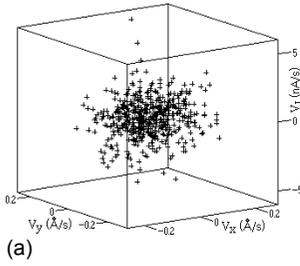
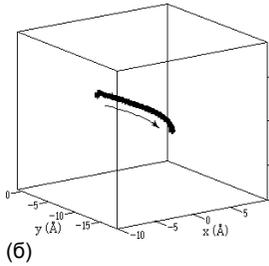


Рис. 23 Усреднённая ВАХ туннельного зазора, локализованного непосредственно на вершине атома углерода. Число усреднений:  $10^4$ . Количество точек в однократно измеренной характеристике: 800. Время преобразования АЦП 25 мкс. Средний модуль скорости латерального дрейфа около 0.29 Å/с. Время измерения: 57 мин. Производная кривой получена дифференцированием по трёхточечной симметричной схеме.



(а)



(б)

Рис. 24 Дрейф микроскопа. (а) Распределение векторов дрейфа в пространстве скоростей. Средняя и максимальная скорости дрейфа в латеральной плоскости: 0.12 Å/с и 0.33 Å/с, соответственно. (б) Эволюция атома привязки в пространстве (направление перемещения обозначено стрелкой). Вероятное направление дрейфа в латеральной плоскости:  $265^\circ$ . Вектора и положения зонда обозначены значком “+”. Количество привязок зонда микроскопа: 500. Интервал времени между привязками  $T=700$  мс.

стояла в экспериментальном подтверждении возможности прецизионного позиционирования на атомарно-гладкой поверхности, а также в демонстрации способности предложенного алгоритма точно отмерять расстояния в несколько микрон, подсчитывая атомные периоды. Длина пройденного пути  $L$  составила  $\sim 1$  мкм (длина цепочки: 4060 атомов углерода). Полученные результаты непосредственно доказывают факт существования на поверхности графита атомарно-гладких участков микронных размеров.

Если предположить, что собственное искривление решётки графита в мезоскопическом масштабе незначительно, то по полученным данным можно судить о величине нелинейности, вносимой сканером микроскопа. Через изменяющиеся положения атомов методом наименьших квадратов проведена осредняющая прямая (см. Рис. 20), которая при определении нелинейности была принята за “эталонную структуру”. Максимальное поперечное отклонение от линейности  $|\Delta_{\max}|$  (см. Рис. 21) составило около 2.6 Å или  $|\Delta_{\max}|/L 100\% = 0.03\%$ .

Если пренебречь незначительным искривлением цепочки, то продольную нелинейность можно определить по изменению атомного периода (см. Рис. 22) как  $(a_{\max} - a_{\min})/\bar{a} 100\%$ , где  $a_{\max}$ ,  $a_{\min}$ ,  $\bar{a}$  – 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 %.

Необходимо отметить, что малая поперечная нелинейность это результат случайной взаимной компенсации искривления решётки кристалла и нелинейности сканера. Таким образом, предположение о несущественном искривлении решётки графита является в нашем случае не совсем верным. Строго говоря, оценку нелинейности сканера следует проводить по распределённым в пространстве сканирования калибровочным коэффициентам. Скорректировав ко-

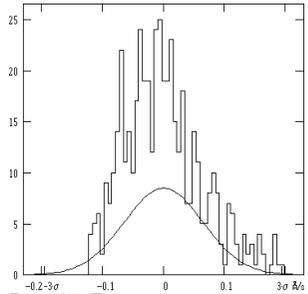


Рис. 25 Гистограмма распределения модулей латеральных скоростей дрейфа, лежащих в секторе  $\pm 45^\circ$  от направления вероятного дрейфа. Хотя число векторов составило 46 % от исходного, средняя скорость дрейфа осталась приблизительно той же 0.12 Å/с. Среднеквадратическое отклонение  $\sigma = \pm 0.06$  Å/с. Коэффициент асимметрии  $k_s = 0.88$ . Экссесс  $k_k = 0.49$ .

ординаты атомов пройденной цепочки по калибровочной базе данных, можно по остаточной кривизне цепочки выявить дефекты и/или механические напряжения в кристалле.

В пятом параграфе демонстрируются возможности метода, связанные с получением спектроскопической информации. В ходе проведенного эксперимента было выполнено  $10^4$  измерений вольтамперной характеристики (ВАХ) туннельного зазора. Измерения ВАХ чередовались с привязками зонда микроскопа к выбранному атому углерода на поверхности графита. На Рис. 23 показана найденная после усреднения ВАХ перехода и её производная. Данная ВАХ измерена непосредственно на вершине атома углерода. Поскольку получение достоверной спектроскопической информации возможно только в высоком вакууме, то приведённые результаты следует рассматривать исключительно как демонстрацию потенциальных возможностей метода.

Отметим, во-первых, что число усреднений в данной методике ограничено главным образом долговременной стабильностью задатчика зондирующего напряжения; во-вторых, низкий уровень шума, достигнутый при измерениях, позволяет применять непосредственное дифференцирование экспериментальной кривой; в-третьих, ВАХ перехода можно получать в любой точке окрестности атома.

В шестом параграфе описывается методика измерения дрейфа микроскопа, которая заключается в выполнении последовательности привязок зонда к выбранной особенности на поверхности. В процессе слежения за особенностью по её перемещению определяется вектор дрейфа, т. е. направление дрейфа и его скорость (величина смещения, отнесённая к интервалу привязки  $T$ ).

На Рис. 24а показано распределение полученных векторов дрейфа в пространстве скоростей. На Рис. 24б представлена пространственная траектория

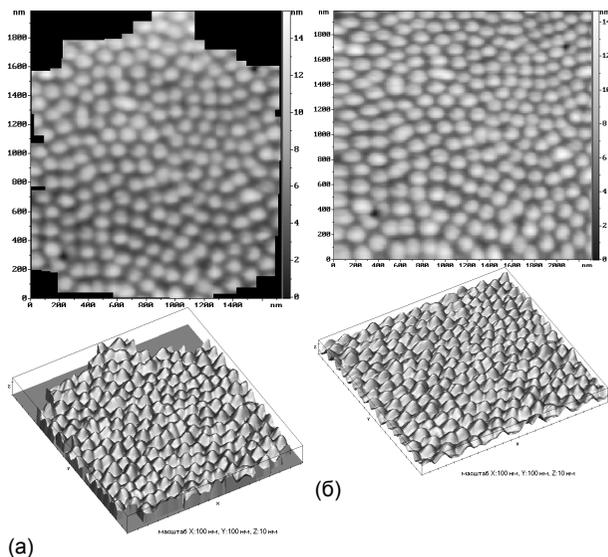


Рис. 26 Разупорядоченная поверхность электрохимически полированного алюминия. Шаги микроскопа в латеральной плоскости:  $\Delta_x=8.53$  нм,  $\Delta_y=8.58$  нм. Изображение (а) получено по методу ООС. Средний размер апертуры (59×59) пикселов<sup>2</sup>. Размер сегмента (35×35) пикселов<sup>2</sup>. Число усреднений в точке: 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: 0.40 Å/с. Средний модуль скорости вертикального дрейфа: 0.08 Å/с. Время сканирования: 8.5 часов. Изображение (б) (198×190) пикселов<sup>2</sup> получено обычным сканированием. Число усреднений в точке: 4. Скорость сканирования 3485 нм/с. Время сканирования: 2 мин.

движения атома привязки в процессе измерения. Средняя скорость дрейфа микроскопа в латеральной плоскости составила около  $0.12 \text{ \AA}/\text{с}$ . Вероятное латеральное направление дрейфа:  $265^\circ$ . Близость вероятного направления дрейфа к направлению “медленно” сканирования, по-видимому, указывает на присутствие значительной составляющей крипа Y-манипулятора. Из Рис. 24б можно заключить, что скорость дрейфа микроскопа на протяжении десятков секунд остаётся приблизительно постоянной.

На Рис. 25 дана гистограмма распределения модулей латеральных скоростей, ориентированных вдоль вероятного направления дрейфа. Из графика следует, что на случайный процесс, скорее всего, накладываются периодические процессы, вызванные в том числе периодическими тепловыделениями и крипами пьезоманипуляторов во время привязки. Однако для большей уверенности здесь требуется дополнительное исследование. В целом дрейф выглядит как квазислучайный процесс.

В седьмом параграфе представлены примеры ООС разупорядоченной поверхности. На Рис. 26а изображена наноструктурированная поверхность алюминия. Здесь и ниже по тексту применяется способ связывания, использующий вспомогательные квазистроки, прямое распознавание особенностей реализовано через поиск седловых точек рельефа, сканирование апертур и фиксированного размера сегментов выполнено на АСМ в тэппинг моде с постоянным шагом, коэффициент упругости кантилевера производства фирмы NT-MDT равен  $\sim 20 \text{ Н/м}$ , резонансная частота равна  $153.403 \text{ кГц}$ , радиус кончика зонда состав-

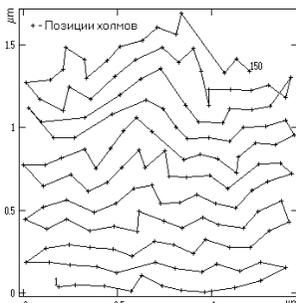


Рис. 27 Структура цепочки особенностей.

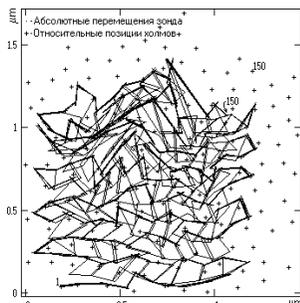


Рис. 28 Реальная сеть из абсолютных положений особенностей, на которую наложены относительные положения особенностей. Большая разница в позициях одних и тех же особенностей свидетельствует о сильных искажениях, возникающих в процессе измерений на СЗМ.

Таблица 1 Статистика (средние значения) особенностей разупорядоченной поверхности. Длина цепочки (размер выборки) – 150 особенностей.

Поверхность	Расстояние, нм	Площадь основания, нм <sup>2</sup>	Диаметр, нм	Высота/глубина, нм	Объём, нм <sup>3</sup>	Компактность, %	Плотность, мкм <sup>-2</sup>
Алюминиевая фольга (холмы)	132.42	6890.1	93.7	3.46	11933.7	78.5	51.4
	129.39	7328.1	96.6	4.04	14595.7	78.3	52.8
Плётка углерода (холмы и ямы)	86.82	1821.3	48.2	1.31	1309.2	71.6	118.7

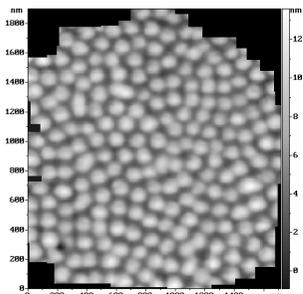


Рис. 29 Тот же участок поверхности алюминия, те же условия, режимы и параметры, что и при измерении рельефа на Рис. 26а, за исключением скорости сканирования, которая в апертуре, в сегменте и при скиппинге составляла половину от соответствующего первоначального значения.

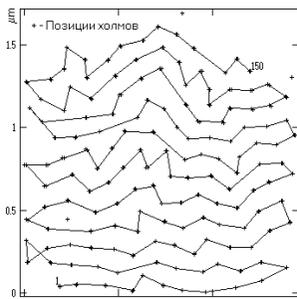


Рис. 30 Структура цепочки особенностей, соответствующая скану на Рис. 29. Для сравнения даны координаты особенностей рельефа Рис. 26а. Среднее рассовмещение координат составляет 3.79 нм.

бенностей показана на Рис. 27. В Таблице 1 приводятся найденные в процессе измерений статистические данные, характеризующие особенности разупорядоченной поверхности. Диаметр особенности определён как диаметр окружности, описанной вокруг основания особенности. При необходимости для указанных параметров могут быть построены их функции распределения.

Всего за время сканирования было получено 142 апертуры и 600 сегментов, что говорит о высокой избыточности метода ООС, а также выполнено 420 привязок, 364 цикла прескиппинга (см. ниже), 97 пересканов апертуры, 178 пересканов сегмента, что указывает на присутствие сильного вызываемого крипом движения, подстройка апертуры производилась 14 раз. Вычитание тренда перед распознаванием особенности осуществлялось локально, т. е. в каждом сегменте и в каждой апертуре из рельефа удалялся уникальный свойственный только данному участку средний наклон поверхности. Рис. 28 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.

На Рис. 29 показан тот же участок поверхности алюминия, что и на Рис. 26а, 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, размеры апертур, сегментов, пороги, допуски и т. п.). Отличия состоят в скорости сканирования в апертуре и в сегменте, а также в скорости перемещения при скиппинге, которые были вдвое меньше первоначальных. Непосредственное сравнение рельефа Рис. 29 с рельефом Рис. 26а подтверждает слабую зависимость реконструированных изображений от скорости сканирования. Для большей наглядности совпадения измеренных координат особенностей на Рис. 30 дана цепочка, соответствующая рельефу Рис. 29, и позиции особенностей рельефа на Рис. 26а (совмещение особенностей выполнено по методу наименьших квадратов). В среднем взаимное отклонение составило 3.79 нм, что чуть меньше половины от используемого шага сканирования.

ляет менее 10 нм, после сборки из реконструированных изображений был вычтен глобальный тренд, никакого сглаживания изображений не производилось.

Сравнение с тем же участком поверхности, полученным обычным сканированием (см. Рис. 26б), показывает полную адекватность изображений друг другу. На Рис. 26б хорошо видны вызываемые крипом искажения рельефа, которых нет на Рис. 26а.

Структура цепочки осо-

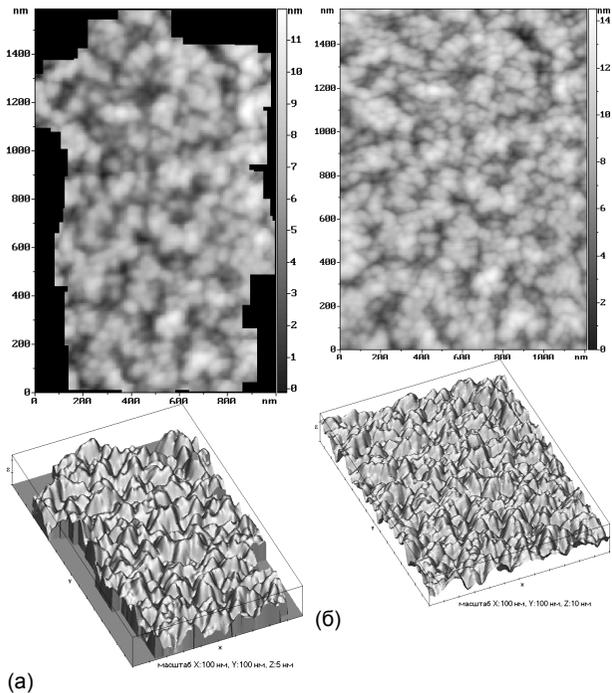


Рис. 31 Полностью разупорядоченная поверхность осаждённой из плазмы плёнки углерода. Шаги микроскопа в латеральной плоскости:  $\Delta_x=5.39$  нм,  $\Delta_y=5.42$  нм. Изображение (а) получено по методу ООС. В качестве особенностей использовались и холмы и ямы (95 и 55, соответственно). Средний размер апертуры (61×61) пиксел<sup>2</sup>. Размер сегмента (41×41) пиксел<sup>2</sup>. Число усреднений в точке: 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: 0.018 Å/с. Время сканирования: 10 часов 10 мин. Изображение (б) (180×245) пикселов<sup>2</sup> получено обычным сканированием. Число усреднений в точке: 4. Скорость сканирования 1927 нм/с. Время сканирования: 3 мин 40 сек.

как основа для последующего изготовления упорядоченных массивов из квантовых нитей,<sup>9</sup> применяемых в новейших оптоэлектронных структурах.

В качестве ещё одного примера сканирования разупорядоченной поверхности на Рис. 31 приведена поверхность осаждённой из плазмы плёнки углерода. В роли подложки использовался электронный резист (метилметакрилат-метилметаоксид 98:2), который с целью сглаживания рельефа был предварительно облучён ультрафиолетом (источник: ртутно-ксеноновая лампа ДРКС 500,

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.

Прямое сравнение цепочек на Рис. 27 и на Рис. 30 позволяет выявить небольшие различия в их структуре, что указывает на отсутствие точно воспроизводимой траектории перемещения от особенности к особенности в реальном режиме. Хотя макроусловия проведения измерений остаются неизменными, микроусловия в данном конкретном месте образца и в данном частном состоянии прибора при сканировании одной и той же особенности цепочки каждый раз разные.

При внимательном рассмотрении на поверхности алюминия можно обнаружить квазиупорядоченные участки. Представленная поверхность используется

$\lambda=180...260$  нм). В отличие от предыдущих сканов здесь в качестве особенностей использовались и холмы и ямы. Структура цепочки особенностей показана на Рис. 32, по Рис. 33 можно судить об искажениях, возникающих в процессе сканирования плёнки углерода. Представленная поверхность полностью разупорядочена, её характеристики даны в Таблице 1.

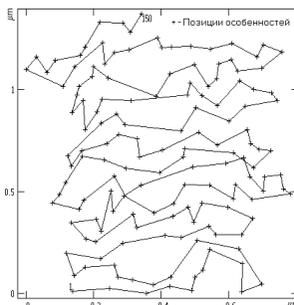


Рис. 32 Структура цепочки особенностей, полученная в процессе ООС поверхности плёнки углерода.

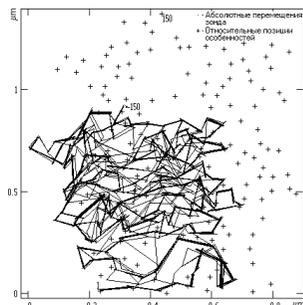


Рис. 33 Реальная сеть из абсолютных положений особенностей углеродной плёнки, на которую наложены относительные положения особенностей.

Если при сканировании алюминиевой поверхности источником дополнительной погрешности и даже ошибки связывания могла служить неконтролируемая модификация мягкой поверхности, то в случае достаточно прочной плёнки углерода таким источником может быть пластичная основа – электронный резист.

В процессе сканирования плёнки углерода было получено 154 апертуры и 600 сегментов, выполнено 353 привязки, 312 циклов прескиппинга, 95 пересканов апертуры, 162 перескана сегмента, 33 подстройки апертуры. Вычитание тренда перед распознаванием особенности осуществлялось глобально, т. е. в каждом сегменте и в каждой апертуре из рельефа удалялась одна и та же плоскость, определяемая в начале работы по приблизительно той площади поверхности, которую предполагалось отсканировать.

Следует обратить внимание на большую в сравнении с предыдущей поверхностью дисперсию размеров особенностей и расстояний между особенностями, а также на меньшие размеры особенностей. Приведённая поверхность является прототипом поверхности искусственного хрусталика глаза человека. Наличие углеродного покрытия обеспечивает более быстрое заживление имплантата после операции. Сходная технология осаждения углерода на полиэтилене низкой плотности представляется перспективной при создании протезов кровеносных сосудов человека, имеющих меньшую склонность к образованию тромбов.<sup>10</sup>

Крайне большое время сканирования разупорядоченных поверхностей объясняется как невысоким быстродействием зондового микроскопа и сравнительно большим числом пикселей в апертуре и сегменте, так и достаточно сильным развиваемым во время работы крипом. Для сдерживания крипа в процессе сканирования автоматически инициировались дополнительные привязки, а также использовался прескиппинг. Прескиппинг или холостой скиппинг вводится перед основным циклом скиппинга, из-за сильных искажений результатов 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. В процессе прескиппинга происходит перераспределение погрешности

измерения позиции текущей и следующей особенностей.

Изначально искажающие факторы в предлагаемом методе были разделены на две группы, в первую временную вошли термодрейф и крип, а во вторую пространственную – нелинейность, кауплинг, неортогональность. В пределах каждой из групп дальнейшее разделение не требуется и, по-видимому, в полной мере невозможно. Так как в данном алгоритме гистерезис никак не компенсирован, то измерения будут содержать погрешности. Учитывая сказанное, метод рекомендуется применять в микроскопах, где гистерезис либо устранён, либо мал.<sup>11</sup>

Поскольку в способе ООС высокая точность измерений достигается ценой резкого 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.

В восьмом параграфе дана оценка погрешности, накапливаемой в цепочке особенностей. Показано, что для достижения высокой точности измерения цепи в целом необходимо увеличивать посредством усреднения точность измерения каждого отдельного её звена.

**В заключение** диссертации обсуждаются основные результаты, делаются общие выводы, а также перечисляются приложения, в которых предложенный метод может найти применение в ближайшей перспективе.

### III. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- Предложен, разработан и экспериментально подтверждён объектно-ориентированный подход к сканированию и позиционированию на поверхности образца. Развиваемый метод без какой-либо переделки микроскопа может применяться на любом сканирующем зондовом приборе для изучения широкого класса упорядоченных, частично упорядоченных и разупорядоченных поверхностей.
- Решена задача непрерывного измерения, компенсации и исправления дрейфа зонда микроскопа относительно исследуемой поверхности.
- Нечувствительность результатов измерений к дрейфу позволяет выполнять большие усреднения данных, что в свою очередь открывает путь для эффективной борьбы с шумами как в системе стабилизации туннельного тока (силы), так в системе латерального позиционирования. В результате многократного усреднения удаётся повысить точность измерений и достичь предельного пространственного разрешения микроскопа.
- Предложен способ автоматической распределённой калибровки сканера зондового микроскопа, благодаря которому, возможно исправление нелинейности, неортогональности, паразитных взаимовлияний манипуляторов, а также устранение погрешности смещения Аббе. При наличии грубого позиционера всё поле точного манипулятора можно калибровать лишь небольшой заранее выбранной лишённой дефектов областью поверхности эталона.
- Разработаны приемы позиционирования зонда сканирующего микроскопа-нанолитографа по локальным особенностям поверхности в поле точного манипулятора. Наличие встроенной в алгоритм функции привязки зонда к объекту позволяет неограниченно долго удерживать зонд в заданном месте поверхности. Если конструкция микроскопа имеет в своём составе грубый манипулятор, то в поле этого грубого манипулятора можно выполнять прецизионное разме-

шение поля точного манипулятора, не предъявляя при этом к грубому жёстких требований по точности.

- Продемонстрировано повышение чувствительности спектроскопических измерений и точности их локализации на поверхности. Полученный результат достигнут за счёт надёжной фиксации в пространстве положения зонда процедурой привязки и многократного измерения вольтамперных характеристик с последующим их усреднением.
- Реализовано автоматическое накопление в процессе ООС статистической информации об особенностях исследуемой поверхности.
- Создан полный пакет прикладных программ, функционирующих по принципам ООС.
- На базе разработанного подхода открываются перспективы: автоматического поиска и “залечивания” дефектов поверхности, автоматического возврата зонда в операционную зону после снятия образца, автоматического определения взаимного положения аналитических и технологических зондов, манипулирования нанообъектами и модификации поверхности в автоматическом режиме.

### Публикации по теме диссертации

1. R. V. Lapshin, O. V. Obyedkov, Fast-acting piezoactuator and digital feedback loop for scanning tunneling microscopes, *Review of Scientific Instruments*, vol. 64, № 10, pp. 2883-2887, 1993.
2. R. V. Lapshin, Hysteresis compensation model for STM scanning unit, *Proceedings of the Second International Conference on Nanometer Scale Science and Technology (NANO-II)*, Herald of Russian Academy of Technological Sciences, vol. 1, № 7, part B, pp. 511-529, Moscow, Russia, 1994.
3. R. V. Lapshin, Analytical model for the approximation of hysteresis loop and its application to the scanning tunneling microscope, *Review of Scientific Instruments*, vol. 66, № 9, pp. 4718-4730, 1995.
4. Р. В. Лапшин, В. Н. Рябоконь, А. В. Денисов, Измерение пространственных характеристик упорядоченных поверхностных наноструктур на сканирующем туннельном микроскопе, *Труды второй международной научно-технической конференции “Микроэлектроника и информатика”*, выпуск 2, стр. 349-357, Москва, Зеленоград, 1997.
5. Р. В. Лапшин, Процедура распознавания атомов в СТМ изображениях, Тезисы докладов третьей международной научно-технической конференции “Микроэлектроника и информатика”, стр. 222-223, Москва, Зеленоград, 1997.
6. R. V. Lapshin, Automatic lateral calibration of tunneling microscope scanners, *Review of Scientific Instruments*, vol. 69, № 9, pp. 3268-3276, 1998.
7. Р. В. Лапшин, Способ считывания цифровой информации в зондовом запоминающем устройстве, Патент РФ на изобретение, № 2181218, приоритет от 02.11.1998.
8. Р. В. Лапшин, Способ измерения рельефа поверхности сканирующим зондовым микроскопом, Патент РФ на изобретение, № 2175761, приоритет от 08.06.1999.
9. Р. В. Лапшин, Способ перемещения зонда сканирующего микроскопа-наноитографа в поле грубого X-Y позиционера, Патент РФ на изобретение, № 2181212, приоритет от 07.09.1999.
10. Р. В. Лапшин, Исправление искажённых дрейфом СЗМ-изображений, Тезисы докладов третьей международной научно-технической конференции “Элек-

троника и информатика – XXI век”, стр. 76-77, Москва, Зеленоград, 2000.

11. Р. В. Лапшин, Позиционирование зонда сканирующего микроскопа нанолитографа по локальным особенностям поверхности, Тезисы докладов третьей международной научно-технической конференции “Электроника и информатика – XXI век”, стр. 167-168, Москва, Зеленоград, 2000.
12. Р. В. Лапшин, Способ считывания цифровой информации в зондовом запинающем устройстве, Тезисы докладов третьей международной научно-технической конференции “Электроника и информатика – XXI век”, стр. 169-170, Москва, Зеленоград, 2000.
13. R. V. Lapshin, Digital data readback for a probe storage device, *Review of Scientific Instruments*, vol. 71, № 12, pp. 4607-4610, 2000.
14. A. P. Alekhin, A. G. Kirilenko, R. V. Lapshin, A. A. Sigarev, AFM studies of the morphology of the carbon layers deposited on medical low-density polyethylene films by the method of pulsed plasma-arc sputtering of graphite, Report Abstracts, International Conference on Nanotechnology and MEMS, Galway, Ireland, 2002.
15. R. V. Lapshin, Feature-oriented scanning for spacecraft-borne remote SPM-investigations, Workshop on Micro-Nano Technology for Aerospace Applications, Montreal, Canada, 2002.
16. R. V. Lapshin, Feature-oriented scanning for probe microscopy and nanotechnology, *Review of Scientific Instruments*, 2002, в печати.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup>J. E. Griffith, G. L. Miller, C. A. Green, D. A. Grigg, P. E. Russell, A scanning tunneling microscope with a capacitance-based position monitor, *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 8, № 6, p. 2023, 1990.
- <sup>2</sup>R. C. Barrett, C. F. Quate, Optical scan-correction system applied to atomic force microscopy, *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 62, № 6, p. 1393, 1991.
- <sup>3</sup>H. Kawakatsu, Y. Hoshi, T. Higuchi, H. Kitano, Crystalline lattice for metrological applications and positioning control by a dual tunneling-unit scanning tunneling microscope, *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 9, № 2, p. 651, 1991.
- <sup>4</sup>J. E. Griffith, D. A. Grigg, Dimensional metrology with scanning probe microscopes, *J. Appl. Phys.*, vol. 74, № 9, p. 83, 1993.
- <sup>5</sup>V. V. Yuzhakov, H. C. Chang, A. E. Miller, Pattern formation during electropolishing, *Phys. Rev. B*, vol. 56, № 19, p. 12608, 1997.
- <sup>6</sup>W. J. Kaiser, R. C. Jaklevic, Scanning tunneling microscopy study of metals: spectroscopy and topography, *Surf. Sci.*, vol. 181, p. 55, 1987.
- <sup>7</sup>C. M. Bishop, Neural networks and their applications, *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 65, № 6, p. 1803, 1994.
- <sup>8</sup>S. A. Miller, K. L. Turner, N. C. MacDonald, Microelectromechanical scanning probe instruments for array architectures, *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 68, № 11, p. 4155, 1997.
- <sup>9</sup>С. А. Гаврилов, В. В. Гусев, В. С. Днепровский, Е. А. Жуков, Е. А. Муляров, А. Н. Сырников, И. В. Яминский, Оптические свойства экситонов в квантовых нитях полупроводник (CdS) - диэлектрик, Письма в ЖЭТФ, том 70, вып. 3, стр. 216, 1999.
- <sup>10</sup>В. И. Севастьянов, И. А. Титушкин, С. Л. Васин, И. Б. Розанова, А. П. Алёхин, В. И. Исаев, Влияние структурных и энергетических свойств углеродных покрытий на адгезию тромбоцитов человека, Перспективные материалы, № 5, стр. 24, 1999.
- <sup>11</sup>О. Nishikawa, M. Tomitori, A. Minakuchi, Piezoelectric and electrostrictive ceramics for STM, *Surf. Sci.*, vol. 181, p. 210, 1987.