

УДК: 621.315.592:621.385.883

Фрактальные методы анализа степени упорядоченности наноструктур

Н.Н. Герасименко, С.А. Апрелов*Московский институт электронной техники (Технический университет)*

Поступила в редакцию 30.12.2006

Принята в печать 17.01.2007

Существующие на сегодняшний день методы описания морфологических особенностей самоорганизованных наноразмерных структур имеют качественный характер и нередко являются визуальными. В связи с масштабным переходом мировой науки и технологии к манипуляции объектами наноразмера и усложнением методов анализа результатов, проблема количественного определения степени упорядоченности систем таких объектов является в последние годы очень актуальной. В данной статье предложен метод количественной оценки степени упорядоченности наноразмерных структур на основе анализа фрактальной размерности данных атомно-силовой микроскопии (АСМ) и данных рассеяния рентгеновского излучения.

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к созданию структур с размерами элементов в области нанометров (например, систем квантовых точек) и большой плотностью концентрации таких элементов ($\sim 10^{11} \div 10^{12} \text{ см}^{-2}$) проявился в 90-х годах прошлого столетия в связи с обнаружением в таких системах квантово-размерных эффектов. Практическая направленность исследования свойств квантовых точек (КТ) сосредоточена, главным образом, на изучении их оптических свойств. Системы (КТ) представляют огромный интерес для исследователей в первую очередь для создания квантовых излучателей. Эти системы представляют собой массив наноразмерных атомных кластеров в полупроводниковой матрице. Дискретный спектр энергетических состояний таких кластеров позволяет относить их к искусственным аналогам атомов, несмотря на то, что кластеры содержат большое количество частиц. Особенностью КТ является, в первую очередь, возможность управления спектральной полосой фотоотклика путем предварительного заселения дискретных состояний с требуемой энергией перехода. Изменяя размеры КТ, их форму и состав, с помощью контролируемых технологических

приемов потенциально можно получать аналоги многих природных элементов. Поэтому практически очень важной является задача контроля морфологических особенностей таких структур.

ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ

В последнее время для задач данного типа часто используется количественный параметр — фрактальная размерность (ФР). ФР является характеристикой формы объектов системы и может быть измерена различными экспериментальными методами (сканирующая зондовая микроскопия, рентгеновские методы). Процесс вычисления ФР условно можно разбить на два этапа, этап получения экспериментальных данных и этап математической обработки экспериментальных данных. В мировой литературе опубликовано большое число работ, посвященных описанию математических методов определения ФР. Среди них метод подсчета ячеек [1], метод высотно-высотной корреляционной функции [2], метод структурной функции [3]. Авторами работы [4] был предложен метод определения ФР, основанный на вычислении дисперсии высоты. Подробнее хотелось бы остановиться на методе расчета

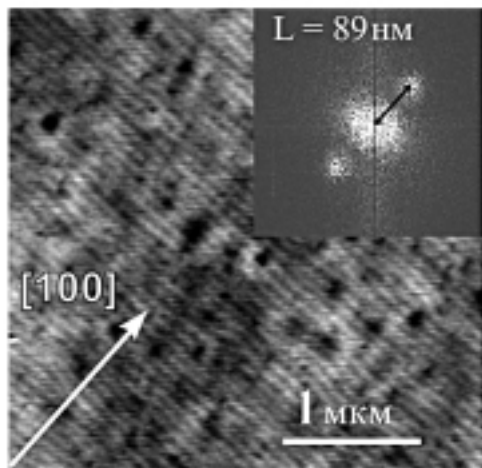


РИСУНОК 1 | АСМ скан образца с проволоками SiGe (образец имеет поверхностный слой Si толщиной 10 нм). Во вставке представлено 2D Фурье преобразование.

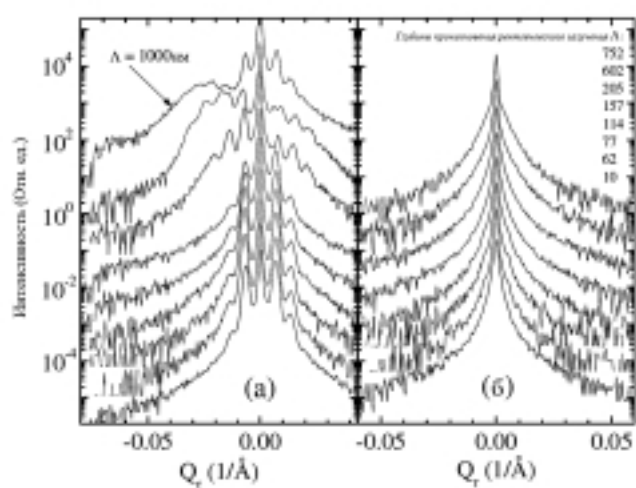


РИСУНОК 2 | Экспериментальные данные рассеяния рентгеновского излучения для различных Λ , где $\Lambda \approx 1/q_z$, q_z — угол скольжения: (a) при наличии периодических проволок, (b) при их отсутствии. Для (a) была использована дополнительная глубина $\Lambda = 1000$ нм.

ФР трехмерных СТМ-изображений, предложенном в работе [5] авторами Гомес-Родригесом (ГР) и др.

Самоподобная поверхность с помощью компьютерного моделирования рассекается в горизонтальном направлении, образуя тем самым на поверхности образца «островки» или «озера». Затем вычисляется зависимость периметра L от площади A для каждого из островков. L и A для объектов в системе связаны соотношением:

$$L(\delta) = \gamma \cdot d' \cdot A^{\delta/2}, \quad (1)$$

где γ — константа, d' — фрактальная размерность береговой линии озер, δ — величина измерения. Величина измерения δ (число пикселей в нм) будет равна общей длине сканирования, разделенной на число пикселей в каждом направлении. Фрактальная размерность трехмерной поверхности D_f связана с d' соотношением:

$$d' = D_f - 1. \quad (2)$$

Периметр, площадь, а следовательно, и ФР при расчете этим методом зависят от выбора величины измерения. Тем не менее фрактальная размерность d' представляет собой коэффициент МНК-прямой (метод наименьших квадратов), построенной на логарифмическом графике зависимости L от A , независимо от величины измерения. Основным условием является то, что для точного вычисления небольших объектов цифрового изображения величина измерения d должна быть достаточно малой величиной. Для определения ФР упорядоченных и неупорядоченных структур нами использовался этот метод.

Все перечисленные способы математического расчета ФР основаны на анализе данных СЗМ. Однако существуют и другие экспериментальные методы, позволяющие количественно определять фрактальные пара-

метры образцов. В работе [6] предложен способ моделирования рассеяния рентгеновского излучения шероховатой поверхностью на основании фрактального подхода в рамках приближения Борна для искаженных волн. Для описания поверхности в расчете используется корреляционная функция:

$$C(R) = \sigma^2 \exp(-[R/\xi^{2h}]), \quad (3)$$

где σ — интегральный параметр, который является среднеквадратичной суммой высот шероховатости в области, засвечиваемой рентгеновским излучением, h — это экспонента шероховатости (в разных источниках параметр Хелдера [7], параметр Хаста [8]), а ξ — длина корреляции шероховатости.

Величина h описывает фрактальные свойства поверхности (текстуру) и связана с фрактальной размерностью поверхности соотношением

$$D_f = |3 - h|. \quad (4)$$

Значение параметра h может меняться от 0 до 1 и в случае h , близкой к 0, поверхность будет сильно искаженной (зазубренной), а в случае h , близкой к 1, поверхность будет более гладкой со слабыми осцилляциями. Необходимо отметить, что параметр h не зависит от значения σ и описывает морфологические особенности поверхности.

Очень важным является тот факт, что картина рассеяния рентгеновского излучения от упорядоченной структуры будет существенно отличаться от случая неупорядоченной системы. Авторами работы [9] с помощью рентгеновского рассеяния проводились исследования самоорганизованных упорядоченных проволок SiGe. На рис. 1 показана топография поверхности исследуемого образца, полученная с помощью атомно-силового микроскопа. Как видно из рисунка, на по-

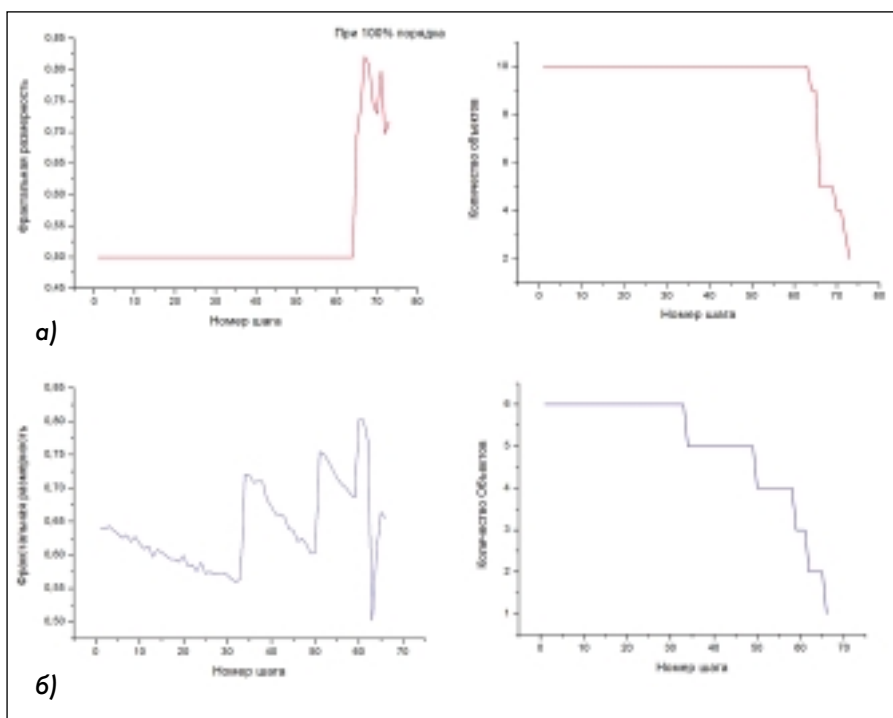


РИСУНОК 3 | Изменение фрактальной размерности при заданных морфологических преобразованиях системы: а) 100% порядка; б) 50% порядка.

верхности образца присутствуют упорядоченные холмы. На *рис. 2* представлены данные рентгеновского рассеяния при различных углах скольжения, полученные для случая упорядоченной (*рис. 2 а*) и неупорядоченной (*рис. 2 б*) структуры. Даже на основе визуального анализа можно сделать вывод, что метод рассеяния рентгеновских лучей является чувствительным к наличию упорядоченности или неупорядоченности в исследуемых системах.

Авторами работы [7] проводилось сравнение экспериментальных методов определения фрактальных параметров поверхности образцов *Si*, подвергавшихся окислению с различным временным интервалом. В результате исследований показано, что рентгеновские и зондовые методы являются мощными инструментами, позволяющими получать сведения о фрактальных свойствах поверхности, а фрактальные параметры, полученные с помощью различных экспериментальных методов, совпадают между собой в случае $\sigma < 5$ нм. Отсутствие приемлемого совпадения при значениях $\sigma > 5$ нм авторы объясняют ограничениями модели Синга, одно из которых заключается в том, что распределение высот в исследуемой области образца должно быть Гауссовым. Однако в настоящее время существуют модели, позволяющие учитывать и не Гауссово распределение высот [10], для которых подобного рода ограничения отсутствуют.

Экспериментальные исследования СТМ-изображений поверхности *Si*, облученной ионами Co^+ , показали, что данные, полученные фрактальным анализом и Фурье-анализом, коррелируют между собой. А фрак-

тальная размерность является самостоятельной величиной, не зависит от размеров, перепада высот на поверхности и шероховатости и позволяет судить о структуре и особенностях деталей поверхности [11].

До настоящего времени количественный параметр использовался лишь для контроля формы объектов на поверхности. Как будет показано ниже, на основе ФР возможно проводить количественный анализ упорядоченности в системах на поверхности.

АНАЛИЗ УПОРЯДОЧЕННОСТИ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

При изначально известном проценте порядка в системе мы можем определить ФР, используя для этого различные экспериментальные и математические методы (в нашем случае метод ГР). Не имеет принципиального значения, какой метод выбран, т. к. фрактальная размер-

ность является неизменной характеристикой системы для выбранного состояния, и результаты, полученные различными способами, хорошо согласуются [2, 11]. Для качественного определения порядка в структуре интерес представляет решение обратной задачи. В работе [12] сделана попытка определить некоторые подходы к решению обратной задачи, предложена модель для выявления упорядочения путем анализа поведения фрактальной размерности.

Суть модели заключается в определении методом ГР фрактальной размерности системы идеальных двумерных объектов, расположенных с заданным процентом упорядочения и отслеживании динамики ее изменения при варьировании геометрического местоположения объектов в системе. Элементарными объектами были выбраны окружности и квадраты. Совокупность таких элементов представлялась как горизонтальный срез трехмерной структуры. Изменяя начальные параметры в системе (процент порядка, количество элементов и т.д.), мы можем контролировать форму получаемых объектов и, соответственно, фрактальную размерность всей системы в целом. Чем сложнее форма полученных объектов, тем фрактальная размерность, как будет показано позже, выше.

На начальном шаге для анализа выбирается заданное параметрами системы расположение объектов. Эти параметры могут быть изменены для различных систем, и на их основе можно контролировать результат измерений. Суть геометрических преобразований заключается в сближении центров объектов без изменения их формы. Для каждого случая весь процесс разбивается

на определенное количество шагов I , и для каждого шага подсчитывается величина фрактальной размерности D_f и количество объектов N . Каждый следующий шаг является приближением центров на 1% от начального расстояния между объектами. Важную роль в процессе измерения играет вероятность пересечений объектов в процессе изменения их положения в системе. Для случая 100%-го порядка вероятность соприкосновений объектов в системе будет меньше, чем для остальных случаев, и графики изменения фрактальной размерности и количества объектов в системе будут выглядеть так, как показано на рис. 3 а. А для случая 50%-го упорядочения — как на рис. 3 б. Как видно из графиков, при соприкосновении (слиянии) объектов фрактальная размерность резко возрастает, что обусловлено усложнением формы получаемого объекта. В результате многочисленных экспериментов было замечено, что при одновременном соприкосновении большого числа объектов изменение фрактальной размерности больше, чем при соприкосновении малого числа элементов. Этот факт позволяет сделать заключение об упорядоченности или неупорядоченности системы в целом.

В работе с помощью фрактального анализа исследованы упорядоченные и неупорядоченные структуры поверхности $CoSi_2$, наблюдаемые сканирующей туннельной микроскопией. Был проведен отбор полученных СТМ-изображений наиболее характерных образцов для каждой из плотностей тока (5, 15, 30 и 100 мкА/см²), и все они были разбиты на 5 групп. Несколько образцов, полученных при плотности тока 100 мкА/см², а затем отожженных и протравленных, были выделены в отдельную группу. Упорядоченные и неупорядоченные структуры исследовались методами

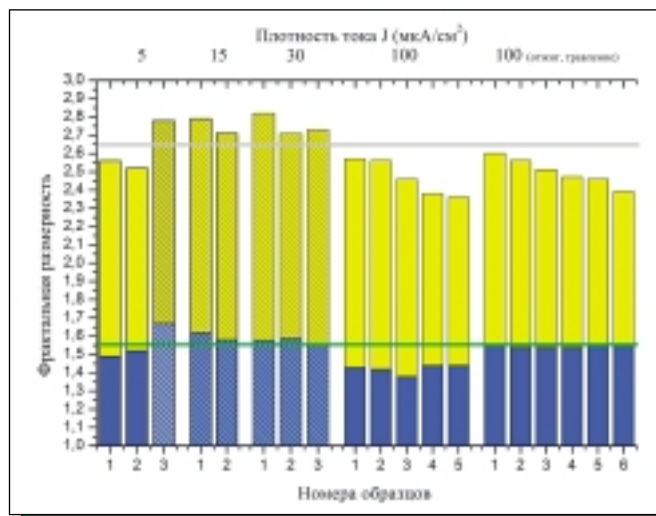


РИСУНОК 4 | Результаты расчета фрактальной размерности методами Гомеса-Родригеса (светлая область) и подсчета ячеек (темная область).

Гомеса-Родригеса и методом подсчета ячеек. Результаты измерений фрактальной размерности для описанных выше образцов представлены на рис. 4. Для каждого образца показано среднее значение фрактальной размерности, полученной различными методами. Заштрихованные области содержат значения фрактальной размерности для неупорядоченных образцов, незаштрихованные области, соответственно, для упорядоченных образцов. Значения фрактальной размерности упорядочен-

ных образцов отделены от аналогичных значений для неупорядоченных образцов горизонтальными линиями. Из рисунка явно видно, что фрактальная размерность может служить критерием оценки порядка в системе.

ВЫВОДЫ

Экспериментальные методы (рассеяние рентгеновского излучения, атомно-силовая микроскопия) позволяют наблюдать наличие упорядочения или разупорядочения в системах на поверхности. Однако для количественного описания степени упорядочения необходимо использование фрактальной размерности в качестве численного критерия оценки порядка в системе.

Сравнивая результаты, полученные на основе модели, и результаты исследования изображений поверхности образцов $CoSi_2$, можно сказать, что фрактальная размерность является критерием оценки порядка, а сама модель может служить инструментом для выявления степени упорядочения в системе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chesters S., Wang H.C., Kasper G. // A fractal based method for describing surface roughness and texture. In Proc. of Institute of Environmental Science. — 1990. — P. 316.
2. Jianming Li, Li Lu, Ying Su, Man on Lai. // Fractal-based description for the three-dimensional surface of materials. Journal of Applied Physics. — 1999. — Vol. 86. — No 5. — P. 2526— 2532
3. Oden P.I., Majumdar A., Bhushan B et al // AFM Imaging, Roughness Analysis and Contact Mechanics of Magnetic Tape and Head Surfaces. Transactions of ASME, Journal of Tribology. — 1992. -Vol.114. — P. 666— 674
4. Hedman A. Surface // Characterization and Applications to Atomic Force Microscopy Graduate diploma thesis. HLU-TH-EX— 1994/72-E— SE.
5. Gomez-Rodriguez J.M., Baro A.M., Salvarezza R.C. // Fractal characterization of gold deposits by scanning tunneling microscopy Journal of Vacuum Science and Technology B. — 1991. — Vol.9. — No 2. — P. 495—499.
6. Sinha S.K. // J. Phys. III 4 (1994) 1543.
7. Arnault J.C., Knoll A., Smigiel E., Cornet A. // Roughness fractal approach of oxidized surfaces by AFM and diffuse X-ray reflectometry measurements. Applied Surface Science 171 (2001) 189-196.
8. Stoev K.N., Sakurai K. // Spectrochimica Acta Part B 54 (1999) 41-82.
9. Roch T., Holy V., Daniel A. et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 34 (2001) A6— A10.
10. Press W., Schlomka J.P., Tolan M., Assmussen B. // J. Appl. Cryst. 30 (1997).
11. Герасименко Н.Н., Павлюченко М.Н., Джаманбалин К.К. // Фрактальный анализ поверхности $CoSi_2$, полученного ионным синтезом. Известия ВУЗов: Электроника №6, 2002.
12. Апрель С.А., Гайдуков Г.Н., Герасименко Н.Н., Медетов Н.А. // Фрактальный анализ упорядоченности поверхностных микроструктур Известия вузов: Электроника №2. 2004. С. 25—32.