

На правах рукописи

01.02.01 -

Рехвиашвили Серго Шотович

**РАЗРАБОТКА И АНАЛИЗ ЗОНДОВЫХ
МИКРОМЕХАНИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ**

05.27.01 -Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,
микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук

Нальчик - 2004 г.

Работа выполнена в Кабардино-Балкарском госуниверситете на кафедре материалов и компонентов твердотельной электроники.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор **Тимашев Сергей Федорович**
доктор технических наук,
профессор **Нестеров Сергей Борисович**
доктор технических наук,
профессор **Альтудов Юрий Камбулатович**

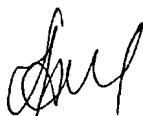
Ведущая организация Московский энергетический институт
(МЭИ), г. Москва

Защита диссертации состоится " 18 " декабря 2004 г. в 10.00 часов на заседании диссертационного совета Д-212.076.08 в Кабардино-Балкарском государственном университете по адресу: 360004, КБР, г.Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Кабардино-Балкарского госуниверситета

Автореферат разослан " 18 " ноября 2004 г.

Ученый секретарь
специализированного совета



А.М. Кармоков

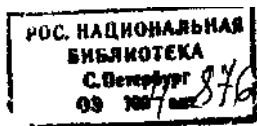
2005-4
21744

924298

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. В настоящее время микромеханика находится на новом этапе развития. Прежде всего, это связано с развитием нанотехнологии, которая уже широко используется в биологии, медицине и электронике. Микро-механические устройства, создаваемые с помощью базовых технологических процессов микроэлектроники, насчитывают десятки - сотни наименований - от простейших механических резонаторов и акселерометров до микророботов, способных совершать манипуляции на расстояниях порядка долей микрометров. Отдельный класс микромеханических устройств представляют зондовые микро-механические устройства (ЗМУ). Их всевозможные модификации применяются в атомно-силовом микроскопе (АСМ). Принцип работы АСМ основан на зондировании поверхности исследуемого образца (в контактном или бесконтактном режиме) специальным чувствительным элементом - кантилевером (от англ. cantilever - консоль), состоящим из держателя и упругой консоли с маленькой иглой на конце. Силы, возникающие между иглой и поверхностью образца, вызывают деформацию консоли, которая в процессе сканирования детектируется различными электрическими или оптическими методами. Сканирующая атомно-силовая микроскопия в настоящее время стала одним из приоритетных методов исследования поверхности твердых тел на атомарном уровне разрешения. Другой важной областью применения ЗМУ систем является технология записи, считывания и хранения информации. В настоящее время в этом направлении активно работают фирмы IBM, Hewlett-Packard и Samsung Electronics, которые реально планируют создание запоминающих устройств с плотностью хранения данных примерно в 100 раз выше, чем у нынешних жестких дисков персональных ЭВМ. Уже имеется опытный образец схемы памяти под названием MILLIPEDE, который использует набор из 1024 микромеханических датчиков для записи, считывания и хранения информации. Одному информационному биту соответствует маленькое углубление размером 30-40 нанометров на поверхности специальной полимерной матрицы. Как считают разработчики данной системы, в скором времени станет возможным создание устройств памяти сверхвысокой емкости размером "с булавочную головку" и такие устройства будут использоваться в мобильных вычислительных устройствах, в сотовых телефонах или часах. При достаточно эффективном функционировании технологии плотность записи можно будет довести до 400 Гбайт на квадратный дюйм.

Удовлетворительная теория зондовых микромеханических устройств до сих пор отсутствует. В частности, не всегда представляется возможным точно описать аналитически выходной сигнал ЗМУ. Сложность этой проблемы обусловлена невозможностью учесть все силы, действующие между отдельными атомами, плохо контролируемой формой зонда и неизвестным



атомным рельефом поверхности. Кроме того, на практике трудно добиться хорошей разрешающей способности ЗМУ. Чаще всего это вызвано особенностями силовых взаимодействий в системе зонд-образец и, как следствие, неудачно выбранным режимом сканирования. Прямые эксперименты с АСМ, а также численное моделирование изображений свидетельствуют о том, что структура и форма зонда могут оказывать существенное влияние на контраст изображения, продольное разрешение, а также на распределение сил при зондировании образца в вертикальном направлении. Очевидно, что все эти факторы затрудняют применение АСМ как точного инструмента для диагностики материалов. Решение этих и других подобных задач возможно лишь при наличии универсальной математической модели ЗМУ, которая бы учитывала основные особенности силовых взаимодействий в системе зонд-образец и последующее преобразование этих сил в электрический сигнал в различных режимах регистрации. На основе такой модели можно осуществлять выбор оптимального режима функционирования, что позволит значительно улучшить эксплуатационные характеристики ЗМУ. Известно, что силовые взаимодействия в системе зонд-образец приводят к возникновению всевозможных необратимых (диссипативных) процессов и являются главной причиной износа сканирующих элементов ЗМУ. Выявление физических механизмов таких процессов и расчет сил взаимодействия также представляют значительный интерес. Наконец, очень важной практической задачей является разработка новых методов и технологий изготовления и тестирования ЗМУ. В настоящее время наиболее перспективным считается метод, основанный на полупроводниковой технологии. Процессы ионного распыления, анизотропного травления и фотолитография позволяют изготавливать универсальные диэлектрические и проводящие зондовые микросенсоры, способные измерять малые нормальные и тангенциальные силы.

Все перечисленные выше задачи в научной литературе до настоящего времени обсуждались очень мало, несмотря на важность их прикладного значения. Их решение позволит глубже понять особенности физических процессов в зондовых микромеханических устройствах, выявить новые закономерности и установить условия для их практического применения. По этой причине исследования в данной области являются актуальными, а их результаты имеют большое прикладное значение.

Цель работы. Разработка новых конструкций и технологий, методов проектирования и тестирования ЗМУ. Разработка и исследование теоретических моделей для зондовых микромеханических устройств с целью расширения их применения для диагностики поверхности твердого тела и создания принципиально новых систем для записи, считывания и хранения информации.

Основные задачи:

1. Разработка новых конструкций и технологий изготовления, а также методов проектирования и тестирования ЗМУ для атомно-силового микроскопа и запоминающих устройств.

2. Исследование особенностей силовых взаимодействий в ЗМУ; расчет сил взаимодействия для зондов разного типа (в том числе и для нанотрубок) и моделирование силовых сигналов в ЗМУ. Исследование влияния внешней среды на силовые взаимодействия в ЗМУ.

3. Теоретический анализ различных режимов функционирования ЗМУ. Разработка и исследование математической модели ЗМУ и эффективных методов обработки сигналов. Применение разработанной модели для исследования формирования сигналов в ЗМУ.

4. Разработка новых зондовых методов диагностики поверхности твердого тела с целью определения термодинамических и механических свойств.

Научная новизна:

1. Предложены новые конструкции пассивных и активных ЗМУ и разработана технология их изготовления, основанная на фотолитографии, анизотропном травлении и ионном распылении. Определены оптимальные режимы технологического процесса в целях получения ультраострых выступов на кончике иглы ЗМУ (радиус кривизны кончика составляет менее 10 нм). Предложены качественно новые методы контроля ЗМУ.

2. Выполнены сравнительные расчеты сил взаимодействия для различных ЗМУ в приближении дискретных атомных плоскостей и континуальном приближении. Разработана теоретическая модель ЗМУ с наноструктурными зондами - углеродными нанотрубками. Для системы зонд-образец проведен расчет капиллярной силы, определена роль электрокапиллярных сил и найдены флуктуации основных термодинамических параметров, влияющих на разрешающую способность АСМ. В рамках термодинамического подхода показано, что гистерезис, наблюдаемый при зондировании образца в вертикальном направлении, обусловлен термодинамическим циклом "поверхностная энергия - работа".

3. Предложен дислокационный механизм трения нанозонда с поверхностью твердого тела. Разработана статистическая модель трения в наноконтактах, основанная на понятии фрактала. Показано, что для анализа физических процессов в наноконтактах может применен формализм дробного интегро-дифференцирования - математический аппарат, широко используемый в теории фракталов.

4. На основе полученных выражений для сил взаимодействия проведен анализ различных режимов (модуляционного и фрикционного) работы ЗМУ в приближении эффективной массы осциллятора. Теоретически показано, что в колебательном режиме работы ЗМУ происходит увеличение силы взаимодейст-

вия. Предложено новое уравнение движения зонда вдоль поверхности с учетом эффекта "прилипания-скольжения" и получено его аналитическое решение. Предложена математическая модель ЗМУ, учитывающая основные особенности формирования сигнала в системе зонд-образец и блоке электроники. С помощью численного эксперимента проанализирована работа ЗМУ. Для расчетов сил взаимодействия в ЗМУ предложено использовать модельный межатомный потенциал с параметрами, вычисляемыми в приближении электронного газа.

5. Впервые предложено использовать вейвлет-преобразование для обработки сигналов в ЗМУ. С помощью численного моделирования показана высокая эффективность предлагаемого метода для фильтрации шумов. Отмечено, что вейвлет-преобразование может использоваться для обработки изображений в ближнепольной, туннельной и магнитной силовой микроскопии.

6. На основе предложенных теоретических моделей и экспериментальных результатов предложено оценивать такие важные термодинамические параметры, как поверхностная энергия и энергия Гиббса. С помощью зондового микроскопа предложено измерять акустическую эмиссию в режиме регистрации боковых сил и полуконтактном режиме. Аналитически решена задача о восстановлении парного потенциала взаимодействия атомов по измеренной в системе зонд-образец силе.

Практическая значимость. Настоящая работа представляет интерес для специалистов, занимающихся теоретической и практической микромеханикой, зондовой микроскопией и нанотехнологией.

1. Предложенные в работе метод проектирования, изготовления и тестирования ЗМУ используются в ЗАО СКБ "Алмаз-37" (г. Москва).

2. Полученные в работе формулы могут использоваться для расчета силовых взаимодействий в различных режимах функционирования ЗМУ, калибровки атомно-силового микроскопа при определении формы зонда и интерпретации различных экспериментов с атомно-силовым микроскопом.

3. Путем сравнения проделанных расчетов с экспериментальными данными можно определять такие важные физические характеристики как константу ван-дер-ваальсовского взаимодействия, модуль упругости, теплоту сублимации, поверхностную энергию и др.

Положения, выносимые на защиту. Анализ полученных результатов дает возможность сформулировать следующие научные положения, которые выносятся на защиту.

1. Разработаны новая конструкция и технология изготовления активного тензорезистивного датчика для АСМ. Проведено схемотехническое, физико-топологическое и технологическое моделирование тензодатчика. Произведен расчет резонансной частоты и жесткости чувствительных элементов различной формы.

2. Теоретически исследованы различные виды силовых взаимодействий в системе зонд-образец ЗМУ. С использованием модельных потенциалов проведены расчеты сил взаимодействия (притяжения и отталкивания) для зондов ЗМУ различной формы в континуальном приближении и приближении дискретных атомных плоскостей. Исследовано влияние сил Казимира в ЗМУ. Рассмотрен случай, когда в качестве зонда ЗМУ используется углеродная нанотрубка. Вычислена энергия адгезии для системы "нанотрубка-поверхность твердого тела". Получена формула для критического расстояния сближения нанотрубки с поверхностью образца. С помощью компьютерного моделирования показано, что нанотрубка способна обеспечить атомный уровень разрешения в АСМ. Рассмотрено взаимодействие зонда ЗМУ параболической формы с адсорбированной жидкой пленкой. Получены выражения для силы отрыва зонда и флуктуации основных термодинамических характеристик контакта.

3. Рассмотрены силы трения в ЗМУ. Предложен дислокационный механизм трения при взаимодействии нанозонда с поверхностью твердого тела. Развита статистическая теория трения в наноконтактах, основанная на понятии фрактала. В рамках статистического подхода получена формула, связывающая силу трения с фрактальной размерностью, упругими и адгезионными свойствами контакта.

4. Проанализированы основные режимы работы ЗМУ на примере АСМ. На основе проведенных расчетов сил взаимодействия построена теоретическая модель модуляционного режима работы ЗМУ. Дано объяснение явлению увеличения силы взаимодействия в модуляционном режиме. Предложена математическая модель режима регистрации боковых сил, соответствующая дислокационному механизму трения. Выведено новое уравнение движения зонда, учитывающее эффект "прилипания-скольжения", и получено его аналитическое решение. Для получения сигнала в ЗМУ предложено регистрировать акустическую эмиссию в контактном и полуконтактном режимах работы.

5. Предложена математическая модель ЗМУ, учитывающая взаимодействие зонда с образцом и последующее формирование электрического сигнала. Модель реализуется в схемотехнических САПР (Pspice, EWB, Micro Cap V) и позволяет более корректно интерпретировать экспериментальные данные в АСМ. Предложена методика обработки изображений в АСМ с помощью вейвлет-преобразования, которая обеспечивает глубокое подавление шума при сохранении исходной структуры изображения.

6. Продемонстрирована возможность применения ЗМУ для диагностики поверхности твердого тела. По результатам измерения сил можно оценить константу Гамакера, прочность образца, коэффициент трения, теплоту сублимации. Предложен качественно новый метод спектроскопии в режиме регистрации боковых сил АСМ, позволяющий измерять поверхностную энергию. Рассмотрена контактная емкостная мода (режим регистрации диэлек-

трических свойств поверхности), для которой выведено уравнение движения зонда и получено его аналитическое решение. В континуальном приближении получено аналитическое решение обратной задачи о восстановлении парного межатомного потенциала по измеренной между зондом и образцом силе.

7. Получено выражение для действующей на зонд силы в режиме нанолитографии, которое позволяет из экспериментальных данных оценить модуль упругости образца. На основе проведенных расчетов предложен простой метод определения формы зонда АСМ в режиме нанолитографии.

Личный вклад автора. Диссертация представляет итог самостоятельной работы автора, обобщающей полученные им результаты, а также в соавторстве с коллегами. В работах, выполненных в соавторстве, научные вклады авторов приблизительно равноценны. В опубликованных автором работах ему лично принадлежат выбор направлений и методов решения задач, трактовка и обобщение полученных результатов. Все сделанные в диссертации выводы принадлежат автору.

Апробация работы. Основные положения диссертационной работы докладывались на Всероссийских научно-технических семинарах "Шумовые и деградиационные процессы в полупроводниковых приборах" (Москва, МЭИ, 1997-2002 г.), на Второй Всероссийской научно-технической конференции с международным участием "Электроника и информатика-97" (Москва, МИЭТ, 1997 г.), на Всероссийских научных совещаниях "Зондовая микроскопия" (Н.Новгород, ИФМ РАН, 1999-2001 г.), на Четвертом Всероссийском симпозиуме "Математическое моделирование и компьютерные технологии" (Кисловодск, 2000 г.), на Всероссийской научной конференции "Материаловедение-96" (Нальчик, КБГУ, 1996 г.), на Международной научно-практической конференции "Elbus-97" (Нальчик, п. Эльбрус, 1997 г.), на Пятнадцатой Международной конференции "Воздействие потоков энергии на вещество" (Нальчик, п.Терскол, 2000 г.), на Межведомственном семинаре по проблемам современного анализа, информатики и физики "Нальчик-2000" (Нальчик, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 2001 г.), на Второй международной конференции "Нелокальные краевые задачи и родственные проблемы математической биологии, информатики и физики" (Нальчик, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 2001 г.), на заседаниях научного семинара, проводимых в НИИ ПМА КБНЦ РАН (Нальчик, 1999-2003 г.).

Объем и структура диссертации. Диссертация содержит 225 страниц текста и состоит из введения, шести глав основного текста, 6 таблиц, 34 рисунка, заключения, библиографического списка и 2 приложений. Библиографический список включает 181 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Введение включает обоснование актуальности темы, формулировку целей и задач работы. Отмечены личный вклад автора, апробация работы и новое научное направление. Изложены научная новизна и практическая значимость результатов, приведена краткая информация о содержании каждой главы.

В первой главе представлен литературный обзор по существующим модификациям ЗМУ для АСМ, СТМ и запоминающих устройств, а также выявлены наиболее важные направления в разработках.

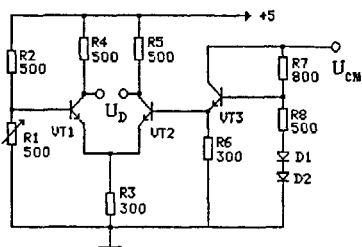
Были предложены несколько конструкций и общая технология изготовления ЗМУ с диэлектрическими и проводящими чувствительными элементами. В частности, разработана конструкция активного кремниевого тензорезистивного датчика, состоящего из интегральной схемы (ИС) и чувствительного элемента - консоли (прямоугольной и треугольной формы) с зондом на конце. Такие датчики могут применяться как отдельно, так и в составе многозондового картриджа, изготавливаемого по гибридной технологии. На рис. 1а показана электрическая схема тензодатчика, принцип работы которой состоит в следующем. Диффузионный резистор R1 встроен в консоль, а остальная часть схемы расположена на кремниевой подложке. При деформации консоли происходит изменение сопротивления резистора, которое в линейной области оценивается по формуле

$$\Delta R = \frac{KRx_j^2}{4L^3} \Delta z, \quad (1)$$

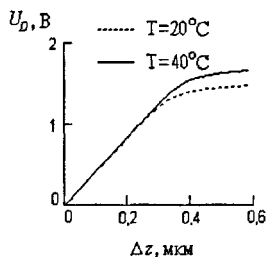
где R - сопротивление диффузионного резистора, Δz - отклонение консоли в вертикальном направлении, K - коэффициент тензочувствительности (для кремния $K=150-200$), x_j - глубина залегания резистивной области. Изменение ΔR регистрируется активной мостовой схемой на основе дифференциального каскада R2-R5, VT1, VT2. Разность потенциалов на выходе каскада равна

$$U_D = r\beta_N(I_{b1} - I_{b2}) \quad (2)$$

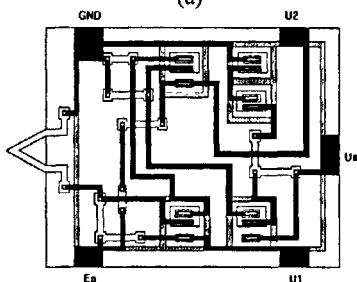
где $r=R4=R5$, β_N - коэффициент усиления транзисторов, $I_{b1}-I_{b2}$ - разность токов базы транзисторов VT1, VT2, зависящая от сопротивления консоли. Из формулы (2) следует, что для увеличения чувствительности схемы необходимо увеличивать коэффициент усиления транзисторов VT1, VT2. При изготовлении датчика неизбежны отклонения параметров элементов схемы от их номиналов. Для устранения этого недостатка в схему включен каскад R6-R8, D1, D2, VT3, обеспечивающий смещение нуля на выходе и температурную стабилизацию схемы.



(a)



(б)



(в)

Рис. 1. (а) - электрическая схема тензодатчика;
 (б) - зависимость напряжения на выходе схемы от деформации консоли;
 (в) - вариант топологии интегральной схемы тензодатчика (не в масштабе)

На рис. 1б показаны результаты моделирования тензорезистивного датчика, проведенного с помощью программы PSpice. Параметры моделей активных компонентов схемы (диодов и транзисторов) находились методом физико-топологического моделирования и соответствовали стандартному планарно-эпитаксиальному процессу. Из рис. 1б видно, что линейная область изменения выходного напряжения U_D соответствует смещениям $\Delta z \approx 0,3$ мкм, что является вполне приемлемым. При необходимости этот диапазон может быть увеличен путем подбора номиналов схемы. Из рисунка можно также видеть, что изменение температуры в линейной области практически не влияет на работу схемы. На рис.1 в показан один из возможных вариантов топологии тензодатчика. При ее прорисовке предполагалось, что технология изготовления является планарно-эпитаксиальной с изоляцией элементов pn - переходом.

При изготовлении ЗМУ с заданными характеристиками возникает необходимость их оптимального проектирования. Основной функциональной частью ЗМУ, изготавливаемых с помощью полупроводниковой технологии, является пленочный чувствительный элемент. Наиболее важными его параметрами являются жесткость и резонансная частота. При проектировании микросенсоров для ЗМУ необходимо знать, как связаны эти параметры с особенностями технологического процесса, геометрическими размерами и свойствами исходного материала. Были получены расчетные формулы для

жесткости и резонансной частоты пленочных микросенсоров прямоугольной, цилиндрической, треугольной и мембранной конструкций. Вывод этих формул основан на вычислении потенциальной энергии деформации и применении приближенного метода Рэлея для конкретной конструкции микросенсора. Результаты расчета приведены в табл. 1.

Таблица 1

Резонансная частота и жесткость консолей ЗМУ различной формы

Форма консоли	Резонансная частота, Гц	Жесткость, Н/м
Прямоугольная	$f_0 = 0,162 \frac{d}{L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}}$	$k_{\perp} = \frac{EB}{4} \left(\frac{d}{L}\right)^3$
<i>L, B и d – длина, ширина и толщина консоли</i>		
Треугольная	$f_0 = 0,648 \frac{d \operatorname{tg}^2(\vartheta/2)}{H^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}}$	$k_{\perp} = 4EB \left(\frac{d \operatorname{tg}(\vartheta/2)}{H}\right)^3$
<i>B, d – ширина и толщина консолей</i> <i>H и ϑ – расстояние и угол между консолями</i>		
Цилиндр	$f_0 = 0,14 \frac{d}{L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}}$	$k_{\perp} = \frac{3\pi d^4 E}{64L^3}$
<i>L и d – длина и диаметр консоли</i>		
Мембрана	$f_0 = 0,882 \frac{ad}{R^2} \sqrt{\frac{Ed}{\rho_s}}$	$k_{\perp} = \frac{16Ea^2 d^3}{3R^4}$
<i>a – сторона основания зонда</i> <i>d и R – толщина и радиус мембраны</i> <i>ρ_s – поверхностная плотность материала</i>		

Технологический маршрут изготовления тензодатчика приведен на рис. 2. Для нахождения требуемых режимов технологических операций использовался пакет прикладных программ STAMP (АТН РФ, ПО "Конверсия", г.Москва, 1992 г.). В едином технологическом цикле предложено использовать ионное распыление для получения ультраострых зондов. Известно, что ионное распыление позволяет получать наноскопические выступы на кончике зонда (Л.Хопкинс, Дж.Гриффитс, 1995 г.). С помощью компьютерного моделирования впервые исследовались условия образования подобных выступов. Показано, что при изотропном процессе распыления на вершине иглы конической формы возникают более острые выступы, если начальный радиус кривизны острия не слишком велик, и если угловая зависимость коэффициента распыления имеет достаточно резкий максимум при углах падения 60-70 градусов. При длительной обработке боковая поверхность выступов приобретает цилиндриче-

скую форму, а вершина уплощается. В случаях, когда выступы не образуются, форма иглы с течением времени стремится к конической с углом раствора, близким к $\pi - 2\theta_0$. Это хорошо согласуется с теоретическими оценками и с экспериментальными результатами (Р.Бериш и др., 1986 г.).

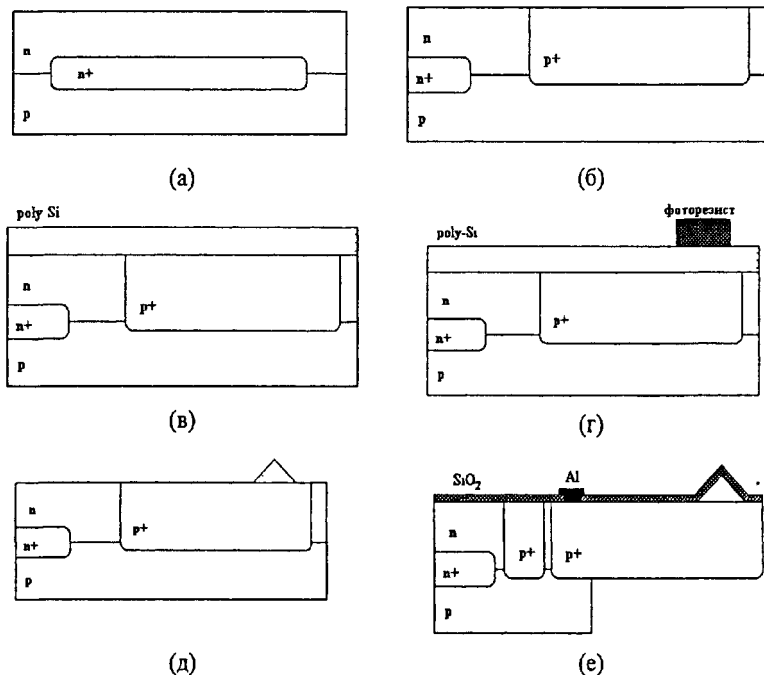


Рис. 2. Технологический маршрут изготовления тензодатчика:

- (а) - формирование исходной структуры;
- (б) - диффузия бора для формирования тела тензорезистора;
- (в) - нанесение пленки поликристаллического кремния;
- (г) - фотолитография на поликристаллическом кремнии;
- (д) - травление поликристаллического кремния;
- (е) - конечная структура тензодатчика

Разработанная технология изготовления ЗМУ имеет ряд достоинств. Во-первых, для ее реализации не требуется большого количества фотошаблонов, во-вторых, технологические операции являются стандартными и хорошо отработанными. С помощью фотолитографии можно получать различные

топологические размеры консоли, а, изменяя режимы нанесения рабочего слоя, можно регулировать его толщину. При жидком травлении *poly-Si* получается зонд с коническим профилем. При этом радиус кривизны кончика острия не должен превышать 100 нм. Использование в данной технологии ионного распыления позволяет уменьшить радиус кривизны до единиц нанометров. Предлагаемая технология является универсальной и без труда может быть адаптирована под различные конструкции ЗМУ.

Все перечисленные выше результаты в настоящее время используются в ЗАО СКБ "Алмаз-37" (г. Москва) для создания качественно новых микромеханических систем для зондовой микроскопии и нанотехнологии.

Вторая глава посвящена теоретическому расчету сил взаимодействия для зондов ЗМУ различной формы. В расчетах используется потенциал Леннарда-Джонса. При выводе основных соотношений применялись континуальное приближение и приближение дискретных атомных плоскостей. Получены следующие выражения для сил взаимодействия зондом цилиндрической, параболической, конической и пирамидальной формы с плоским образцом

$$F = a \left(\frac{b}{h^{n+6}} - \frac{1}{h^n} \right), \quad (3a)$$

$$F = \frac{a}{d_p^n} \left(\frac{2}{8!15} \left(\frac{r_0}{d_p} \right)^6 \psi \left(n + 6, \frac{h}{d_p} \right) - \psi \left(n, \frac{h}{d_p} \right) \right), \quad (3б)$$

$$\psi(n, x) = \frac{d^{n+1} \ln \Gamma(x)}{dx^{n+1}}, \quad \Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt,$$

где h - расстояние между зондом и образцом, a, b, n - параметры, зависящие от формы иглы и свойств материалов образца и зонда (см. табл. 2), d_p - межплоскостное расстояние, r_0 - равновесное расстояние между атомами, $\Gamma(x)$ - гамма функция Эйлера.

Таблица 2

Параметры в формулах (3а, б)

Форма иглы	a	b	n
Параболоид Полусфера	πRC	$r_0^6/60$	2
Конус	$\pi C \operatorname{tg}^2(\theta/2)$	$r_0^6/56$	1
Пирамида	$C \operatorname{tg}^2(\theta/2)$	$r_0^6/56$	1
Цилиндр	ΩC	$r_0^6/15$	3

В данной табл. используются следующие обозначения: R - радиус полусферы и радиус кривизны кончика зонда в случае параболоида; Ω - площадь основания цилиндра; θ - угол при вершине конуса и угол между противоположными гранями четырехугольной пирамиды; $C = \hbar \bar{\omega} / 8\pi^2$ - константа Лифшица; $\bar{\omega}$ - характерная частота спектра поглощения. При выводе формул (3а, б) применялось правило перенормировки константы ван-дер-ваальсова взаимодействия (Ю.Моисеев, В. Мостепаненко В. Панов и др., 1990 г.). Используя свойства функции $\psi(x, n)$, можно убедиться, что при $d \rightarrow 0$ из формулы (3б) точно следует формула (3а), соответствующая континуальному приближению. Показано, что численные расчеты по формулам (3а, б) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными (Ю. Моисеев, В. Панов и др. 1989-1990 г.; Р. Ирландссон, В. Якимов, 2000 г.). Формулы (3а, б) обобщают большинство известных результатов, которые были получены ранее другими авторами (Ю.Моисеев, В. Панов, У. Хартман, Ч. Жирард, С. Сирэйси, Ф. Тоухари и др., 1989-1998 гг.), поскольку учитывают структурный фактор, а также силы притяжения и отталкивания для зондов различной формы.

Исследовалась роль сил Казимира в ЗМУ. Отмечено, что действие этих сил существенно зависит от конкретной конструкции ЗМУ. В частности, если зонд имеет малую высоту (менее 1 мкм), то при увеличении расстояния сканирования доминирующую роль начинает играть взаимодействие между образцом и массивной частью датчика (консолью), обусловленное действием запаздывающих сил. Эти силы крайне нежелательны, поскольку являются причиной возникновения дополнительной вертикальной нагрузки в системе зонд-образец. Расчет приводит к следующему выражению для силы взаимодействия между плоской консолью ЗМУ и полубесконечным образцом

$$F = - \frac{23\hbar c \alpha_1 \alpha_2 n_1 n_2 S d(4x^3 + 6dx^2 + 4xd^2 + d^3)}{20 (x+d)^4 x^4} \quad (4)$$

где $x=h+z_0$ - расстояние от консоли до поверхности образца, h - расстояние от кончика зонда до поверхности образца, z_0 - высота зонда, S - площадь торцевой части консоли, d - толщина консоли, c - скорость света, $\alpha_{1,2}$ - поляризуемости атомов образца и зонда, $n_{1,2}$ ~ плотности атомов образца и зонда. Расчеты с помощью формулы (4) показывают, что вклады силовых взаимодействий с консолью ЗМУ, обусловленные силами Казимира, нужно учитывать уже на расстояниях $h > 1-2$ нм.

Предложена теоретическая модель для зонда в виде нанотрубки. Получено выражение для силы взаимодействия нанотрубки с поверхностью твердого тела

$$F = 2\pi CRd_p \left(\frac{r_0^6}{15} \frac{1}{h^9} - \frac{1}{h^3} \right), \quad (5)$$

где R - радиус нанотрубки, $d = 0,34$ нм - межплоскостное расстояние для графита. Если сравнить выражения (5) и (3а), то можно заметить, что зависимость силы взаимодействия от расстояния для нанотрубки с точностью до числового множителя совпадает с соответствующей зависимостью для сплошного цилиндра. С помощью формулы (5) вычисляется энергия адгезии, которая определяется как работа, требуемая для разрыва контакта:

$$W = \frac{\sqrt[3]{15} \pi R C d_p}{4 r_0^2} \quad (6)$$

Расчет по формуле (6) для контакта нанотрубки радиусом $R=5$ нм с поверхностью графита ($r_0 = 0,31$ нм) дает значение $W=9,7$ эВ. Если предположить, что атомы контактирующих тел теряют связь при удалении их друг от друга на расстояние равное r_0 , то сила отрыва будет равна $F_a = W/r_0$. Таким образом, для силы отрыва получаем численное значение $F_a=5$ нН, которое в точности совпадает с экспериментальным значением (Х. Дай, Р. Смэйлли, 1996 г.). Определено критическое расстояние сближения нанотрубки с образцом: $h_{min} \sim 0,1$ нм. С помощью компьютерного моделирования показано, что при $h > h_{min}$ острие зонда АСМ, образованное нанотрубкой, способно обеспечить истинное атомное разрешение.

Рассмотрено взаимодействие зонда ЗМУ при наличии жидкой прослойки. При сканировании на воздухе в системе зонд-образец всегда имеется тонкий слой адсорбированной влаги. Зонд прилипает к образцу за счет капиллярных сил, что является причиной гистерезиса отклонения консоли кантилевера, наблюдаемого при зондировании образца в вертикальном направлении. Сила отрыва зонда и ее среднеквадратичное отклонение находятся из условия равновесия механической силы, действующей со стороны консоли ЗМУ, и силы поверхностного натяжения пленки. В рамках термодинамического метода для параболического зонда получены выражения

$$F = 2\pi R\sigma, \quad \langle \Delta F \rangle = \sqrt{2\pi\sigma k_B T} \quad (7)$$

где R - радиус кривизны кончика зонда, σ - поверхностное натяжение пленки, T - абсолютная температура, k_B - постоянная Больцмана. Для H_2O ($T=300$ К, $\sigma=0,07$ Дж/м²) и $R=20$ нм имеем $F=8,8$ нН, $\langle \Delta F \rangle=0,043$ нН. Данные численные значения являются типичными для большинства экспериментов с АСМ (М. Рэдмэчер, Д. Базельт, 1994 г. и др.). Из формул (7) видно, что сила отрыва пропорциональна радиусу кривизны R , а среднеквадратичное отклонение силы не зависит от размеров зонда. Это означает, что для ультраострых зондов ($R < 10$ нм) роль флуктуации возрастает.

В третьей главе рассмотрены фрикционные взаимодействия в ЗМУ. Предложен новый механизм трения при взаимодействии нанозонда с атомарно гладкой поверхностью твердого тела, согласно которому область контакта сравнивается с краевой дислокацией. В основе данной модели лежат следующие предпосылки.

1. Смещение дислокации кратно вектору Бюргерса (т.е. фактически периоду решетки). Движение дислокации происходит скачкообразно в поле сил Пайерлса-Набарро, что соответствует эффекту прилипания-скольжения, наблюдаемому в экспериментах с АСМ.

2. Из теории дислокаций известно, что касательное напряжение минимально при скольжении плотноупакованных атомных плоскостей или плоскостей с несоизмеримыми структурами. С этим могут быть связаны малые значения коэффициентов трения и скорости износа при трении твердых тел на наноструктурном уровне.

3. Как известно, в кристаллах с кубической симметрией вектор Бюргерса скользящей краевой дислокации вдоль некоторых кристаллографических направлений может составлять $d/2$, где d - период решетки. Такая же особенность характерна и для АСМ-экспериментов: при измерении сил трения на щелочно-галогидных кристаллах наблюдается "удвоенное" скачкообразное движение зонда, связанное с эффектом прилипания-скольжения.

4. Компьютерное моделирование контактного взаимодействия зонда АСМ с поверхностью твердого тела методами молекулярной динамики и Монте-Карло обнаруживает образование области "плохого" кристалла. При сканировании эта область перемещается вслед за зондом.

5. Скольжение краевой дислокации сопровождается генерацией низкочастотных звуковых волн. При этом интенсивная акустическая эмиссия должна наблюдаться при максимальном ускорении дислокации. В работе экспериментально показано, что такая же ситуация имеет место при движении зонда АСМ (измерения трибоакустической эмиссии проводились с помощью специально разработанного стенда, а также с помощью сканирующего зондового микроскопа SOLVER P47-SPM-MDT).

6. В рамках предложенной дислокационной модели получено аналитическое выражение для силы трения, которое по форме соответствует известному приближению Дерягина-Муллера-Топорова (ДМТ).

Развита статистическая теория трения в наноконтактах ЗМУ. Ее суть состоит в предположении о случайном характере возникновения и разрыва отдельных межатомных связей в процессе скольжения зонда. С использованием данного предположения вычислена сила трения для контактного режима работы ЗМУ:

$$F_{\parallel} = \frac{\pi \langle E_i \rangle}{2r_A^{d+1}} \left[\frac{R}{\Lambda} (F_{\perp} + F_0) \right]^{d/3} \quad (8)$$

где F_{\perp} - сила нагрузки; F_o - остаточная сила, действующая при $F_{\perp}=0$; $\langle E_i \rangle$ - средняя энергия межатомной связи; r_A - приведенный атомный радиус ($r_A \sim 0,1-0,2$ нм); d - фрактальная размерность наноконтакта; Λ - приведенный модуль упругости, зависящий от свойств зонда и образца; R - радиус кривизны кончика зонда. Показано также, что выражение (8) можно получить с применением формализма дробного интегро-дифференцирования - математического аппарата, широко применяемого в теории фракталов.

Из формулы (8) следует, что при изменении фрактальной размерности наноконтакта от 1 до 3 степенной показатель зависимости трение-нагрузка меняется от $1/3$ до 1, что объясняет практически все имеющиеся противоречивые экспериментальные результаты с АСМ. Так, степенная зависимость силы трения от нагрузки с показателями от 0,1 до 0,3 обнаруживается при компьютерном моделировании взаимодействия открытых однослойных нанотрубок с гранью (100) алмаза. В рамках представленной модели это соответствует фрактальной размерности $d \leq 1$. В случае обычного двумерного контакта ($d=2$) из формулы (8) точно получается формула, соответствующая ДМТ-приближению. Если в процессе скольжения образование межатомных связей имеет объемный характер, то $d \rightarrow 3$ и соответствующая зависимость трение-нагрузка становится линейной. Такая ситуация, например, наблюдалась в АСМ-экспериментах на щелочно-галоидных кристаллах (Р. Карпик, М. Салмерон, 1996 г.).

Для трения на наноструктурном уровне характерна и другая ситуация - возникновение отличной от нуля силы трения при движении зонда на некотором небольшом расстоянии от поверхности. Это явление получило название бесконтактного трения. Физическая трактовка этого явления основывается на флуктуационно-электромагнитной теории (Г.Дедков, А.Кясов, 1999-2002 г.). В третьей главе рассчитана сила флуктуационно-электромагнитного взаимодействия для зондов различной формы

$$F_{\perp} = \frac{3\hbar V_o J g}{4\pi h^m} \quad (9)$$

где V_o - скорость движения зонда, J - постоянная, зависящая от диэлектрических свойств образца и зонда. Параметры m и g зависят от формы зонда: $m=3$ и $g=R/8$ для параболоида и полусферы; $m=2$ и $g = tg^2(\theta/2)/16$ для конуса; $m=2$ и $g = (g^2(\theta/2)/16\pi)$ для пирамиды; $m=4$ и $g = 3\Omega/16\pi$ для цилиндра .

Отмечено, что весьма перспективным является создание запоминающих зондовых устройств, принцип работы которых основан на регистрации в бесконтактном режиме флуктуационно-дисперсионных сил взаимодействия. При работе ЗМУ в бесконтактном режиме существенно повышается их долговечность и надежность, поскольку в данном случае отсутствует механический износ зондов. При разработке подобных устройств необходимо исполь-

зовать специальные образцы (матрицы) с локально модифицированными диэлектрическими свойствами. Модификация диэлектрических свойств может быть осуществлена с помощью процессов ионной имплантации или локального термического окисления.

В четвертой главе проведен теоретический анализ основных режимов работы ЗМУ. На основе расчетов, выполненных во второй главе, разработана теоретическая модель модуляционной силовой микроскопии в приближении эффективной массы осциллятора. Эффективная масса вводится с помощью соотношения: $m = k_{\perp} / (2\pi f_0)^2$, где k_{\perp} f_0 - жесткость и резонансная частота консоли в отсутствие взаимодействия (см. табл. 1). Расчеты показывают, что для прямоугольной, треугольной и цилиндрической консолей эффективная масса имеет одно и тоже характерное значение: $m = 0,24\rho V$, где ρ и V - плотность материала и объем консоли. Движение осциллятора описывается классическим уравнением движения, которое в нашем случае принимает вид

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + 2\gamma \frac{dz}{dt} + \frac{1}{m} \left(k_{\perp} - \frac{dF}{dz} \right) z + \frac{F}{m} = \frac{F_u}{m} \exp(-i\omega_g t), \quad (10)$$

где F - определяется формулами (3а) или (3б), γ - коэффициент затухания осциллятора в вертикальном направлении, F_u - амплитуда внешней силы (ее величина зависит от модулирующего напряжения и свойств пьезокерамики), ω_g - частота, на которой возбуждаются колебания кантилевера. Решение уравнения (10) имеет вид

$$z(t) = A \exp[i(\omega_g t + \varphi)] - \frac{F}{k_{\perp}}.$$

В данном выражении A и φ - амплитуда и фаза колебаний, зависящие от расстояния сканирования:

$$\varphi = \arctg \left(\frac{\omega \omega_g}{Q(\omega_g^2 - \omega^2)} \right),$$

$$A = \frac{F_u}{k_{\perp}} \frac{\omega^2}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_g^2)^2 + \left(\frac{\omega \omega_g}{Q} \right)^2}}, \quad (12)$$

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{1}{m} \frac{dF}{dh}}, \quad |\varphi_{\max}| = \frac{\pi}{2}, \quad A_{\max} = Q \frac{F_u}{k_{\perp}}, \quad \gamma \ll \omega,$$

где Q - добротность кантилевера. Из (12) видно, что резонансная частота, амплитуда и фаза колебаний консоли кантилевера изменяется по мере изменения градиента силы взаимодействия и расстояния сканирования. Проведенные в работе численные расчеты показывают удовлетворительное согласие с известными экспериментальными результатами (Б. Готсманн и др. 1999 г.).

Из практики известно, что в динамической моде АСМ колебания консоли кантилевера приводят к увеличению сигнала обратной связи (т.е. фактически к увеличению средней действующей на зонд силы). В работе дано объяснение этому явлению. Получена следующая формула для средней силы, действующей на зонд в колебательном режиме

$$\langle F \rangle = \frac{a h^{n-1}}{\sqrt{(h^2 - A^2)^{2n-1}}}, \quad (13)$$

где n и a - имеют тот же смысл, что и в формулах (3а, б). Формула (13) справедлива при $h > A$. Данное условие должно выполняться в бесконтактном режиме работы ЗМУ при малых амплитудах колебаний. Легко также убедиться в том, что при $A \rightarrow 0$ из (13) точно следует ван-дер-ваальсова часть выражения (3а), соответствующая случаю статического кантилевера. Из (13) получается выражение для относительной девиации силы: $\Delta F / \langle F \rangle \sim nA / h$. Из данного выражения следует, что с уменьшением расстояния h роль колебаний возрастает.

Предложена новая теоретическая модель латерального движения зонда ЗМУ, соответствующая дислокационному механизму скольжения. Ее суть состоит в следующем. Предполагается, что движение кантилевера вдоль поверхности образца осуществляется с постоянной скоростью V_0 . Поскольку в моменты времени t_k консоль кантилевера совершает мгновенные скачки, приобретая при этом конечные приращения скорости V_k , то действующая сила представляется в виде:

$F = m \sum_{k=1}^N V_k \delta(t - t_k)$, где N - число скачков

вдоль траектории, $\delta(t)$ - дельта-функция Дирака. При $t \neq t_k$ имеет место обычное затухающее движение. С учетом этого уравнение движения записывается в виде

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \omega_0^2 V_0 t - \sum_{k=1}^N V_k \delta(t - t_k)$$

где γ , ω_0 - латеральные коэффициент затухания и резонансная частота консоли кантилевера. Первое слагаемое в правой части (14) задает координату держателя кантилевера. Решение уравнения (14) удовлетворяет следующим начальным условиям

$$x(0) = 0, x'(0) = V_0 \quad (15)$$

Возникновению устойчивых колебаний соответствует условие $D < 0$ где D - дискриминант характеристического уравнения: $p^2 + 2\gamma p + \omega_0^2 = 0$. Условие критического демпфирования, при котором начинается регулярное скольжение зонда, имеет вид $D=0$ (или $\gamma = \omega_0$). Решение уравнения (15) записывается в виде

$$x(t) = \exp(-\gamma t)(C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t) + \bar{x}(t) \quad (16)$$

$$\bar{x}(t) = \frac{\omega^2 V_0 t}{\gamma^2 + \omega^2} - \frac{2\gamma \omega^2 V_0}{(\gamma^2 + \omega^2)^2} + \frac{\omega V_0 \exp(-\gamma t)}{(\gamma^2 + \omega^2)^2} \left[(\gamma^2 - \omega^2) \sin \omega t + 2\gamma \omega \cos \omega t \right] + \sum_{k=1}^N V_k \exp(-\gamma(t-t_k)) \frac{\sin \omega(t-t_k)}{\omega},$$

$$C_1 = -\bar{x}(0), C_2 = \frac{V_0 - \bar{x}'(0) - \gamma \bar{x}(0)}{\omega}, \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2},$$

$$\bar{x}(0) = -\sum_{k=1}^N V_k \exp(\gamma t_k) \frac{\sin \omega t_k}{\omega},$$

$$\bar{x}'(0) = \frac{2\omega^4 V_0}{(\gamma^2 + \omega^2)^2} + \sum_{k=1}^N V_k \exp(\gamma t_k) \frac{\gamma \sin \omega t_k + \omega \cos \omega t_k}{\omega}.$$

Полученное решение моделирует траекторию латерального движения зонда ЗМУ с учет эффекта прилипания-скольжения. Основным преимуществом предложенной модели (по сравнению с другими известными моделями) является то, что в ее рамках удается получить точное аналитическое выражение для траектории. При условии критического демпфирования из (16) имеем

$$x(t) = t \sum_{k=1}^N V_k \exp(-\gamma(t-t_k)) \quad (17)$$

Решение (17) естественным образом описывает эффект прилипания-скольжения: в моменты времени $t = t_k$ зонд прилипает (отлипает), а в моменты времени $t \neq t_k$ - совершает затухающее латеральное движение, которое характеризуется показателем γ . Если в пределах этого движения затуханием можно пренебречь, то из (17) будем иметь

$$x(t) = t \sum_{k=1}^N V_k \quad (18)$$

С учетом (18) энергия, которую затрачивает кантилевер на один скачек, равна

$$w_k = \int_0^{t_k} P_k dt = k_{\parallel} V_k \int_0^{t_k} x(t) dt = \frac{k_{\parallel} V_k^2 t_k^2}{2} = \frac{k_{\parallel} b_k^2}{2}$$

где k_{\parallel} - латеральная жесткость консоли, b_k - величина скачка. Таким образом, полная энергия сканирования равна

$$W = \sum_{k=1}^N w_k = \frac{k_{\parallel}}{2} \sum_{k=1}^N b_k^2 \quad (19)$$

С физической точки зрения результат (19) является очевидным. На практике его можно использовать для оценки полной энергии сканирования в режиме латеральных сил.

Для построения изображений в АСМ предложено регистрировать акустическую эмиссию в модуляционном режиме. В рамках контактной теории Герца получена формула для интенсивности звука, возникающего вследствие удара зонда о поверхность образца

$$I = \frac{F_{\perp}^{4/3}}{2\pi\rho v_s} \left(\frac{\Lambda}{R} \right)^{2/3} \quad (20)$$

где F_{\perp} - сила удара зонда о поверхность, ρ - плотность образца, v_s - скорость звука в образце. Так, для для вольфрамового зонда ($R=100$ нм) и кремниевое образца ($\rho=2300$ кг/м³, $v_s(111)=5090$ м/с) при $\Lambda=142,7$ ГПа и $F_{\perp}=0,1$ мкН получим $I=8$ мкВт. Данное значение может быть надежно измерено с помощью чувствительного пьезоэлектрического датчика. Таким образом, измеряя интенсивность акустической эмиссии в процессе сканирования в модуляционном режиме, можно строить изображения, контраст которых будет определяться локальными упругими свойствами исследуемого образца.

Пятая глава посвящена моделированию сигналов в ЗМУ. Предложен новый метод моделирования ЗМУ, учитывающий основные особенности формирования сигнала в системе детектирования и блоке электроники прибора. Система детектирования, включающая чувствительный элемент и регистрирующий (например, оптический или тензометрический) тракт, линейно преобразовывает силовой рельеф исследуемой поверхности в электрический сигнал. Этот сигнал рассчитывается по формуле

$$s(t) = Ah \left(V_0 t - \left[\frac{V_0 t}{L_1} \right] L_1, \left[\frac{V_0 t}{L_1} \right] L_2 \right) + \sigma, \quad (21)$$

где A - коэффициент преобразования, $h(x,y)$ - функция, определяющая топографию образца, V_0 - скорость сканирования, L_1 - длина отдельной строки, L_2 - расстояние между строками, σ - "белый" (случайный) шум. Квадратные скобки в (21) означают целую часть числа. Если известен исходный рельеф поверхности, то с помощью формулы (21) можно моделировать работу системы детектирования ЗМУ. Сигнал с системы детектирования поступает на

блок электроники, который моделируется комплексной функцией цепи: $\underline{K}(i\omega) = |\underline{K}(i\omega)| \exp(i\varphi(\omega))$, где $|\underline{K}(i\omega)|$ и $\varphi(\omega)$ - амплитудно-частотная и фазочастотная характеристики блока электроники. При известной функции $\underline{K}(i\omega)$ выходной сигнал блока электроники находится по формуле обратного преобразования Фурье

$$u(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underline{u}(i\omega) \exp(i\omega t) d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underline{K}(i\omega) \underline{s}(i\omega) \exp(i\omega t) d\omega, \quad (22)$$

где $\underline{s}(\omega)$, $\underline{u}(\omega)$ - спектральные плотности входного и выходного сигналов. Для подавления шумов в блоке электроники АСМ используются активные фильтры. Их действие моделируется с помощью Фурье-фильтрации

$$u^*(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underline{u}(i\omega) \Phi(|\underline{u}(i\omega)| - \varepsilon) \exp(i\omega t) d\omega \quad (23)$$

где $\Phi(x)$ - функция Хевисайда, ε - уровень подавления шума. Формулы (21) - (23) представляют основу математической модели ЗМУ. Данная модель реализуется с помощью современных схемотехнических САПР. В работе для моделирования использовался пакет программ Pspice. С помощью численного эксперимента, выполненного по данной методике, проанализирована работа ЗМУ. В расчетах сил взаимодействия использовался модельный потенциал, параметры которого оценивались в приближении электронного газа. Предложенная методика моделирования позволяет более корректно с учетом характеристик конкретного прибора интерпретировать экспериментальные результаты. Математическая модель может использоваться при схемотехническом моделировании сложных цифровых и аналоговых электронных схем, содержащих запоминающие устройства с зондовым принципом действия. В работе показано, что в рамках данной математической модели обратная задача (восстановление сигнала $s(t)$ по известному сигналу $u(t)$) сводится к уравнению Вольтерра 2-го рода, которое всегда имеет единственное решение.

Проанализированы различные причины, приводящие к искажению сигналов в ЗМУ. Подробно рассмотрен артефакт, обусловленный конечным размером контактной зоны. Показано, что данный артефакт может приводить к инверсии изображения и исчезновению атомного разрешения в СТМ и АСМ. Для обработки АСМ-изображений впервые предложено использовать вейвлет-преобразование. Вейвлет-преобразование произвольного сигнала $u(t)$ заключается в его разложении по солитоноподобным функциям (базовым вейвлетам) $\psi(t)$, что обеспечивает двумерную развертку соответствующего спектра по координате и частоте. Для покрытия всего сигнала короткими вейвлетами используются процедуры сдвига и масштабного преобразования.

В итоге сигнал представляется совокупностью параметрических "вейвлетных волн", зависящих от частоты (масштаба) и координаты (сдвига). Математически это выражается следующим образом

$$u(t) = \frac{1}{a_0 C_\psi} \int_{-\infty}^{\infty} db \int_{-\infty}^{\infty} W\left(\frac{a}{a_0}, \frac{b-b_0}{a_0}\right) \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) \frac{da}{a^2}, \quad (24)$$

$$W(a,b) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} u(t) \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt, \quad C_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\psi}(\omega)|^2 \frac{d\omega}{|\omega|},$$

где $W(a, b)$ - функция, определяющая вейвлет-спектр, переменные a и b задают расширение и сдвиг для покрытия сигнала вейвлетом, a_0 и b_0 - управляющие параметры, позволяющие увеличивать, уменьшать и перемещать изображения, C_ψ - нормализующий коэффициент, $\hat{\psi}(\omega)$ - Фурье-образ базового вейвлета. Фильтрация искаженного шумом сигнала осуществляется пороговым обрезанием вейвлет-спектра

$$W^*(a,b) = W(a,b) \Phi(|W(a,b)| - \varepsilon) \quad (25)$$

где $\Phi(x)$ - функция Хевисайда, ε - уровень подавления шума. После замены $W(a,b)$ на $W^*(a,b)$ в (24) получается отфильтрованный сигнал.

Для реализации метода вейвлет-фильтрации проводился расчет АСМ-изображений различных модельных поверхностей. В расчетах использовались процедура быстрого вейвлет-преобразования, МНАТ-вейвлет (аббревиатура МНАТ происходит от англ. Mexican Hat - мексиканская шляпа), представляющий собой вторую производную от функции Гаусса, и потенциал Леннарда-Джонса для системы углерод-углерод с параметрами, вычисленными в приближении электронного газа. Показано, что метод вейвлет-фильтрации обеспечивает глубокое подавление шума при сохранении исходной структуры сигнала (изображения). В целом, численный эксперимент выявляет высокую эффективность вейвлет-фильтрации при обработке сигналов сложной формы, что объясняется основными свойствами самих базовых вейвлетов, а именно их ограниченностью и автомодельностью. С его помощью, в частности, удастся успешно обработать искаженное шумом изображение модельной атомной решетки со случайным расположением дефектов (вакансий). Фурье-фильтрация в данном случае оказывается малоэффективной.

Метод вейвлет-обработки СЗМ-изображений в настоящее время используется в программном обеспечении зондовых микроскопов фирмы НТ-МДТ (г. Москва).

В шестой главе рассматриваются некоторые возможные применения ЗМУ для диагностики поверхности твердого тела и нанотехнологии. Предложен принципиально новый метод АСМ-спектроскопии. Метод основан на измерении

полной энергии сканирования (или же удельной энергии - энергии, отнесенной к площади всего изображения), которая, как нетрудно догадаться, должна отчетливо коррелировать с такой важной термодинамической характеристикой, как поверхностная энергия. Энергия, которую затрачивает кантилевер на прорисовку всего изображения, выражается через мощность фрикционных потерь:

$$U = \int_0^{T_0} P dt, P = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta U}{\Delta t} = V_0 F_{\parallel} \quad (26)$$

где T_0 - полное время сканирования, $\Delta U = \Delta Q + \sum_k \Delta W_k$ - изменение внутренней энергии системы зонд-образец за время Δt , ΔQ - приращение теплоты, ΔW_k - отдельные вклады в энергию взаимодействия, обусловленные межатомным взаимодействием (например, ван-дер-ваальсовым или магнитно-дипольным), изменением объема и формы контактирующих тел, фазовыми переходами (плавлением, сублимацией), химическими реакциями и износом. Если температура системы в процессе сканирования остается постоянной, то ΔU будет равно изменению свободной энергии. Если же остается постоянным и внешнее давление, то полная энергия сканирования, очевидно, будет равна энергии Гиббса. Экспериментально спектроскопия осуществляется путем многократного сканирования одного и того же участка поверхности при различных вертикальных нагрузках и скоростях. Для того чтобы исключить влияние наклона поверхности, необходимо получать и анализировать изображения сразу в двух режимах - режимах регистрации нормальных и боковых сил.

Теоретически рассмотрен метод исследования диэлектрических свойств образца с использованием модуляционного режима АСМ и проводящего кремниевго кантилевера (контактная емкостная мода). Этот режим недавно реализован в мультимодовых зондовых микроскопах фирмы НТ-МДТ (www.ntmdt.ru). Здесь зонд и образец приводятся в жесткий контакт. На зонд подается переменное напряжение U , а образец заземляется. В результате консоль кантилевера, на которой закреплен зонд, совершает колебания, амплитуда которых определяется диэлектрическими свойствами исследуемого образца. С использованием соотношений контактной механики действующая на зонд сила записывается в виде

$$F = \frac{U^2}{2} \frac{dC}{dz} = \frac{\pi RC_0 U^2}{2},$$

где C - емкость контакта, C_0 - удельная (приходящаяся на единицу площади) емкость контакта, R - радиус кривизны кончика зонда. Таким образом, при $U = U_0 \cos(\omega_g t)$ уравнение колебаний зонда имеет вид

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + 2\gamma \frac{dz}{dt} + \omega_0^2 z = \frac{\pi RC_0 U_0^2}{2m} \cos^2(\omega_g t) \quad (27)$$

где γ - коэффициент затухания ω_0 - резонансная частота, $m = k_{cont} / \omega_0^2$ - эффективная масса осциллятора, k_{cont} - контактная жесткость. Решение уравнения (24) удовлетворяет следующим начальным условиям

$$z(0) = 0, z'(0) = 0. \quad (28)$$

Возникновению устойчивых колебаний соответствует условие $D < 0$, где D - дискриминант характеристического уравнения $p^2 + 2\gamma p + \omega_0^2$. Решение уравнения (24) с учетом начальных условий (25) записывается в виде

$$z(t) = \exp(-\gamma t) \left(C_1 \cos(t\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}) + C_2 \sin(t\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}) \right) + \bar{z}(t), \quad (29)$$

$$z(t) = \frac{\pi RC_0 U_0^2}{4m} \left(\frac{1}{\omega_0^2} + \frac{(\omega_0^2 - 4\omega_g^2) \cos(2\omega_g t) + 4\gamma\omega_g \sin(2\omega_g t)}{16\gamma^2\omega_g^2 + (\omega_0^2 - 4\omega_g^2)^2} \right)$$

$$C_1 = -\frac{\pi RC_0 U_0^2}{4m} \left(\frac{1}{\omega_0^2} + \frac{\omega_0^2 - 4\omega_g^2}{16\gamma^2\omega_g^2 + (\omega_0^2 - 4\omega_g^2)^2} \right),$$

$$C_2 = -\frac{1}{\omega_0} \left(\gamma C_1 + \frac{\pi RC_0 U_0^2}{4m} \frac{8\gamma\omega_g^2}{16\gamma^2\omega_g^2 + (\omega_0^2 - 4\omega_g^2)^2} \right).$$

Полученное решение моделирует траекторию деформации консоли кантилевера в режиме детектирования диэлектрических свойств. Из выражения (29) видно, что максимальная амплитуда колебаний кантилевера будет проявляться на второй гармонике относительно возбуждающего сигнала, то есть когда выполняется условие: $\omega_g \approx \omega_0$. Амплитуда колебаний пропорциональна удельной емкости контакта, которая, в свою очередь, определяется диэлектрическими свойствами контакта. На практике это можно использовать для усиления силового отклика кантилевера на приложенное переменное напряжение при построении изображений. Для этого в систему зонд-образец следует помещать каплю жидкого электролита с большим значением диэлектрической проницаемости.

Рассмотрена задача о восстановлении парного потенциала взаимодействия атомов по данным атомно-силовой спектроскопии. В континуальном приближении эта задача сводится к интегральному уравнению Фредгольма 1-го рода

$$k_{\perp} \Delta z - 4\pi^2 R n_1 n_2 \int_0^{\infty} z dz \int_{z+h}^{\infty} r U(r) dr = 0 \quad (30)$$

где R - радиус кривизны кончика зонда, k_{\perp} и Δz - коэффициент жесткости и деформация консоли кантилевера, $n_{1,2}$ ~ объемные концентрации атомов образца и зонда. Решение уравнения (30) имеет вид

$$U(h) = \frac{k_{\perp}}{4\pi^2 R n_1 n_2} \frac{1}{h} \frac{d^3 \Delta z}{d h^3}. \quad (31)$$

Расчет парного потенциала по данным атомно-силовой спектроскопии относится к классу некорректных задач, поскольку сила взаимодействия между зондом и образцом в (30) может быть задана только приближенно. Это означает, что в практических расчетах необходимо использовать процедуру регуляризации решения (31).

На рис.3 квадратиками приведены результаты расчета парного потенциала для системы W-Si по экспериментальным данным (Р.Ирландссон, В.Якимов, 2000 г.). Регуляризация осуществлялась сглаживанием данных с помощью усреднения по функции Гаусса. При этом учитывалось, что погрешность эксперимента не превышала 5%. Сплошной кривой на рис.3 показан расчет по формуле Лондона: $U(h) = C_6 / r^6$, $C_6 = 5,94 \cdot 10^{-5}$ эВ-нм⁶. Можно видеть, что полученная в результате обработки экспериментальных данных зависимость хорошо согласуется с теоретической зависимостью. Из формулы (31) видно, что парный межатомный потенциал взаимодействия определяется третьей производной от действующей в системе зонд-образец силы. Это может лечь в основу новой АСМ-методики, в которой указанная производная измеряется в процессе сканирования поверхности образца; контраст полученных таким образом изображений будет определяться межатомным взаимодействием.

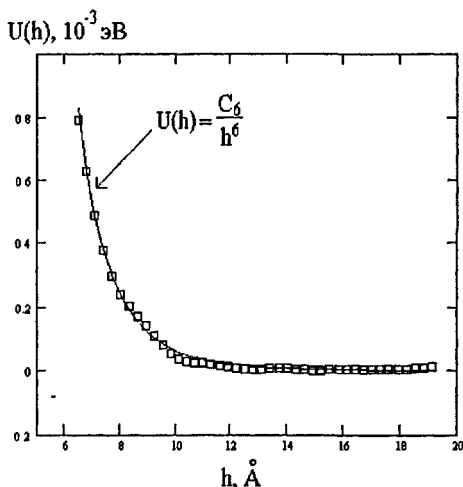


Рис. 3. Зависимость парного потенциала взаимодействия от межатомного расстояния для атомов W и Si

Теоретически проанализирован метод АСМ-склерометрии. Для упругой силы, действующей на образец со стороны параболического зонда АСМ, получена следующая формула

$$F = \frac{2EbH}{3}, \quad (32)$$

где b и H - ширина и глубина царапины, E - модуль упругости образца. Вывод формулы (32) согласуется с современной теорией наноиндентации (В.Оливер, Г.Фарр, 1992 г.). На практике ее можно использовать для определения модуля упругости образца. Показано, что расчеты сил взаимодействия по формуле (32) находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными АСМ-данными (В.Бланк и др. 1997 г.). На основе проделанных расчетов было предложено использовать метод АСМ-склерометрии для определения радиуса кривизны зонда. Для этого выбирается мягкий образец (чтобы не повредить кончик зонда) и в контактном режиме АСМ царапается его поверхность. Затем выбранный участок повторно сканируется для получения изображения царапины. Зная средние размеры царапины, радиус кривизны зонда рассчитывается по формуле:

$$R = \frac{b^2}{8H}. \quad (33)$$

Для реализации данного метода в работе проводился эксперимент с использованием мультимодового сканирующего зондового микроскопа SOLVER P47-SPM-MDT. Исследования надежно подтвердили возможность использования метода для оценки радиуса кривизны кончика зонда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам работы можно сделать следующие выводы.

1. В рамках метода Рэля получены соотношения для расчета резонансной частоты и жесткости пленочных сенсоров различной конфигурации. Разработаны различные конструкции пассивных и активных зондовых микросистем и технология их изготовления. Предложенная технология имеет ряд достоинств. Во-первых, для ее реализации не требуется большого количества фотошаблонов, во-вторых, технологические операции являются стандартными и хорошо отработанными. В технологический маршрут предложено включить операцию ионного распыления для получения атомарно острых зондов.

2. Проведен расчет сил взаимодействия для зондов различного типа (в том числе для нанотрубок) в континуальном приближении и приближении дискретных атомных плоскостей. Определена роль дальнедействующих сил Казимира в зондовых микросистемах. Показано, что расчеты удовлетворительно согласуются с имеющимися экспериментальными результатами.

Предложен метод расчета межатомного потенциала по данным атомно-силовой микроскопии, основанный на решении уравнения Фредгольма 1-го рода. Полученные аналитические выражения можно использовать для численного расчета сил взаимодействия в атомно-силовом микроскопе и зондовых запоминающих устройствах.

3. В рамках термодинамического подхода рассмотрено взаимодействие в зондовых микромеханических устройствах, работающих в атмосферных условиях. Проведен расчет силы взаимодействия между образцом и иглой АСМ, имеющей форму параболоида вращения. Найдены флуктуации основных термодинамических параметров.

4. Развита теория фрикционных взаимодействий в наноконтактах, образованных зондом атомно-силового микроскопа. Предложен дислокационный механизм трения при взаимодействии зонда с атомарно гладкой поверхностью твердого тела. Предложена статистическая модель трения в наноконтактах, основанная на понятии фрактала. Модель позволяет естественным образом интерпретировать различные экспериментальные результаты, получаемые с помощью атомно-силового микроскопа.

5. В рамках единого подхода проанализированы различные режимы функционирования зондовых микромеханических устройств. Получены в явном виде выражения для латеральной и нормальной траекторий движения зондовых сенсоров. Выражения можно использовать для моделирования работы атомно-силового микроскопа и зондовых систем для записи и считывания информации.

6. Предложена математическая модель зондового микромеханического устройства, учитывающая силовое взаимодействие в системе зонд-образец и дальнейшее преобразование этого взаимодействия в электрический сигнал с учетом характеристик регистрирующего прибора. Предложен метод обработки сигналов с помощью вейвлет-преобразования. На основе предложенной модели проведены численные расчеты, которые согласуются с экспериментальными данными.

7. На основе расчетов предложен ряд новых измерительных методик, осуществляемых с помощью зондовых микромеханических устройств: измерение акустической эмиссии в режиме боковых сил и полуконтактном режиме; измерение диэлектрических свойств образца в модуляционном режиме; измерение поверхностной энергии в режиме боковых сил; исследование электрокапиллярного эффекта. Получены соотношения для расчета прочности образца, контактной жесткости, энергии Гиббса и константы Гамакера по данным атомно-силовой микроскопии. Проанализированы различные методы зондовой нанолитографии с целью их применения для формирования поверхностных структур.

Основные материалы диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Метод контроля формы иглы атомно-силового туннельного) микроскопа с помощью спектроскопии обратного рассеяния // Письма в ЖТФ. 1997. Т.23. №11. С.88-92.

2. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Яганов Д.В. Влияние геометрии острия на распределение сил в атомно-силовом микроскопе // Вестник Кабардино-Балкарского госуниверситета, 1997. С.2-5.

3. Рехвиашвили С.Ш., Дедков Г.В., Гаев Д.С. Разработка конструкции и технологии изготовления пленочных кронштейнов для атомно-силового микроскопа // Вторая всероссийская научно-техническая конференция с международным участием. Тезисы докладов. Часть 1. Москва, МИЭТ, 1997. С. 124-125.

4. Рехвиашвили С.Ш. К вопросу о распределении сил в атомно-силовом микроскопе // Вестник Кабардино-Балкарского отделения академии технологических наук РФ, выпуск 1, серия технология, 1997. С.4-11.

5. Гаев Д.С., Рехвиашвили С.Ш. О влиянии "свирл"-дефектов на параметры биполярных интегральных схем // Вестник Кабардино-Балкарского отделения академии технологических наук РФ, выпуск 1, серия технология, 1997.С.19-23.

6. Рехвиашвили С.Ш., Дедков Г.В. Простой способ изготовления кронштейнов для атомно-силового микроскопа // Микроэлектроника. 1998. Т.27.№2.С.158-160.

7. Рехвиашвили С.Ш., Дедков Г.В. Разрешающая способность атомно-силовой микроскопии // Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах (метрология, диагностика, технология): Материалы докл. Науч.-техн. семинара. Москва, МНТОРЭС им. А.С.Попова, МЭИ, 1998. С.205-209.

8. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. О формировании изображений в атомно-силовом микроскопе с зондом в виде нанотрубки // Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах (метрология, диагностика, технология): Материалы докл. Науч.-техн. семинара. Москва, МНТОРЭС им. А.С.Попова, МЭИ, 1998. С. 117-121.

9. Рехвиашвили С.Ш., Гаев Д.С., Тешев Р.Ш. Исследование электрофлуктуационных характеристик структур, сформированных на пластинах со свирлевой неоднородностью // Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах (метрология, диагностика, технология): Материалы докл. науч.-техн. семинара. Москва, МНТОРЭС им. А.С.Попова, МЭИ, 1998. С.210-214.

10. Рехвиашвили С.Ш. Проводящие кремниевые кронштейны для атомно-силового микроскопа // Физика и химия перспективных материалов. Сборник научных трудов, г. Нальчик, КБГУ, 1998. С.103-107.

11. Рехвиашвили С.Ш., Рехвиашвили Н.А. Применение Фурье-фильтрации для обработки изображений в атомно-силовом микроскопе // Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах (метрология, диагностика, технология): Материалы докл. Науч.-техн. семинара. Москва, МНТОРЭС им. А.С.Попова, МЭИ, 1998.С.113-115.
12. Рехвиашвили С.Ш., Мустафаев Г.А., Тешев Р.Ш. Исследование влияния технологического разброса подвижности на параметры NPN-транзистора методом компьютерного моделирования // Физика и химия перспективных материалов. Сборник научных трудов. Нальчик, КБГУ. 1998. С.99-103.
13. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Модификация формы иглы сканирующего зондового микроскопа с помощью ионного распыления // Письма в ЖТФ. 1999.Т.24.№2.С.61-68.
14. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Нанотрубки и силовые взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // ЖТФ. 1999. Т.69. №8. С.124-129.
15. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Адгезионное трение при контакте нанотрубок с поверхностью твердого тела // Материалы совещания "Зондовая микроскопия-99", Н. Новгород, ИФМ РАН, 1999. С.152-155.
16. Рехвиашвили С.Ш., Дедков Г.В. Мембранный датчик для атомно-силового микроскопа // Материалы совещания "Зондовая микроскопия-99", Н. Новгород, 1999, ИФМ РАН. С.381-383.
17. Рехвиашвили С.Ш. Применение вейвлет-преобразования для обработки изображений в атомно-силовом микроскопе // Материалы совещания "Зондовая микроскопия-2000". Н.Новгород, ИФМ РАН, 2000. С.265-269.
18. Рехвиашвили С.Ш. Силы Ван-дер-Ваальса в атомно-силовой микроскопии // Тезисы XV Международной конференции "Воздействие потоков энергии на вещество". Терскол, 2000. С. 51-53.
19. Рехвиашвили С.Ш. Моделирование контактного взаимодействия в атомно-силовом микроскопе методом Монте-Карло // Сборник научных трудов IV Всероссийский симпозиум "Математическое моделирование и компьютерные технологии", т.2 "Математическое моделирование и вычислительный эксперимент в естественных и гуманитарных науках", часть 1, Кисловодск, 2000. С.25-26.
20. Рехвиашвили С.Ш., Гаев Д.С. Активный тензорезистивный датчик для атомно-силового микроскопа // Материалы совещания "Зондовая микроскопия - 2000", Н. Новгород, ИФМ РАН, 2000. С.270-273.
21. Рехвиашвили С.Ш. Термодинамика контактного взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // Материалы совещания "Зондовая микроскопия -2000", Н. Новгород, ИФМ РАН, 2000. С.113-119.
22. Рехвиашвили С.Ш. Флуктуационные свойства микроконтактов, образованных иглой атомно-силового микроскопа // Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах (метрология, диагностика,

технология): Материалы докл. Науч.-техн. семинара. Москва, МНТОРЭС им. А.С. Попова, МЭИ, 2000. С.343-347.

23. Рехвиашвили С.Ш. Особенности силовых взаимодействий в бесконтактном режиме атомно-силового микроскопа // Письма в ЖТФ. 2000. Т.26. №12. С.46-50.

24. Рехвиашвили С.Ш., Гаев Д.С. К теории модуляционной атомно-силовой микроскопии // Известия вузов. Электроника. 2001. №2. С.101-106.

25. Рехвиашвили С.Ш., Гаев Д.С. Конструкция активного тензорезистивного датчика для атомно-силового микроскопа // Микросистемная техника. 2001. №3. С.11-12.

26. Рехвиашвили С.Ш. Некоторые вопросы термодинамики контактного взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // ЖТФ. 2001. Т.71. №10. С.131-134.

27. Рехвиашвили С.Ш. Расчет термодинамики контактного взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // Микросистемная техника. 2001. №3. С.28-31.

28. Рехвиашвили С.Ш. Теоретический анализ модуляционного и фрикционного режимов атомно-силового микроскопа // Микросистемная техника. 2001. №12. С.25-30.

29. Рехвиашвили С.Ш. Современные методы сканирующей зондовой микроскопии и спектроскопии // Препринт №2. НИИ ПМА КБНЦ РАН, 2001.51 с.

30. Рехвиашвили С.Ш., Гаев Д.С. Активный тензорезистивный датчик для атомно-силового микроскопа // Доклады Адыгской международной академии наук. 2001. Т.5. №2. С. 102-107.

31. Рехвиашвили С.Ш. Математическая модель зондового микроскопа // Вторая международная конференция "Нелокальные краевые задачи и родственные проблемы математической биологии, информатики и физики". Тезисы докладов. Нальчик, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 2001. С.139-141.

32. Rekhviashvili S.Sh. The some theory questions in atomic-force microscopy // Proceeding of the All-Russia Conference "Scanning probe microscopy-2001", N.Novgorod, 2001, IPM RAS. P.217-220.

33. Рехвиашвили С.Ш. Дислокационный механизм трения при взаимодействии нанозонда с поверхностью твердого тела // ЖТФ. 2002. Т.72. №2. С.140-142.

34. Рехвиашвили С.Ш. Применение вейвлет-преобразования для обработки изображений в атомно-силовом микроскопе // Письма в ЖТФ. 2002. Т.28. №6. С.46-50.

35. Рехвиашвили С.Ш. Дислокационный механизм трения в наноконтактах // Поверхность. 2002. №12. С.48-50.

36. Рехвиашвили С.Ш. Современные методы сканирующей зондовой микроскопии и спектроскопии // ПТЭ. 2002. №5. С.149-152.

37. Рехвиашвили С.Ш. Сканирующий атомно-силовой микроскоп // Математическое моделирование. 2003. Т. 15. №2. С.62-68.

38. Рехвиашвили С.Ш. О силовых взаимодействиях в зондовых микро-механических системах // Микросистемная техника. 2003. №2. С.33-37.

39. Рехвиашвили С.Ш. Статистическая теория трения при взаимодействии нанозонда с поверхностью твердого тела // ИФЖ. 2003. Т.76. №4. С.168-170.

40. Рехвиашвили С.Ш. Статистическая модель трения в наноконтактах // Поверхность. 2003. №8. С.62-64.

В печать 18.11.2004. Тираж 100 экз. Заказ № 4277
Типография КБГУ
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

№ 2 18 95

РНБ Русский фонд

2005-4

21744