

Восстановление СТМ изображений атомарной структуры поверхности пиролитического графита методом деконволюции с учётом нелокальности взаимодействия в системе зонд-поверхность

К.П.Гайкович, Б.А.Грибков, А.В.Жилин, В.Л.Мионов

Институт физики микроструктур РАН, 603950, г. Нижний Новгород, ГСП-105

В работе рассмотрена возможность получения субапертурного разрешения в сканирующей зондовой микроскопии на основании методов деконволюции изображений с учётом нелокальности взаимодействия в системе зонд-поверхность. На основании развитых методов по данным туннельной микроскопии удалось восстановить тонкую структуру плотности электронных состояний в атомарной решетке на поверхности пиролитического графита.

Введение

Одним из основных факторов, ограничивающих разрешающую способность методов сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ), является конечная апертура используемых зондов. Это приводит к тому, что получаемое двумерное СЗМ изображение поверхности представляет собой сложную функцию, содержащую информацию, как о рельефе поверхности, так и о структуре рабочей части зонда. При СЗМ исследованиях образцов с сильно развитым рельефом основным сглаживающим фактором является геометрический фактор, обусловленный тем, что при сканировании зонд взаимодействует с поверхностью различными своими точками. В этом случае восстановление рельефа поверхности осуществляется методами, основанными на учете конкретной формы зонда и геометрии взаимодействия зонда с поверхностью [1-4], при этом взаимодействие в системе зонд – поверхность считается локальным. Однако для атомарно гладких поверхностей и в условиях, когда неровности рельефа много меньше характерных размеров рабочей части зонда, геометрический фактор становится менее существенным и основным фактором, сглаживающим изображение, становится существенная нелокальность взаимодействия в системе зонд-поверхность. В данной ситуации получаемое СЗМ изображение можно представить в виде двумерной свертки истинного изображения поверхности и передаточной функции зонда. В настоящей работе рассматриваются возможности повышения пространственного разрешения методов СЗМ на основе восстановления истинного изображения методом деконволюции уравнения свертки изображения поверхности с передаточной функцией зонда.

Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) позволяет исследовать рельеф поверхности образцов с разрешением вплоть до атомарного. Для реализации атомарного разрешения необходимо, чтобы размеры зонда, его расстояние до поверхности и характерный радиус взаимодействия с поверхностью имели масштабы порядка размера атома. В этом случае взаимодействие зонда с поверхностью определяется перекрытием волновых функций пустых и заполненных электронных состояний зонда и образца. При удалении зонда от поверхности данное взаимодействие спадает экспоненциально с характерным масштабом порядка 1 \AA [5]. Это приводит к тому, что туннельный ток протекает практически только между крайним атомом зонда и поверхностью образца. Таким образом, при СТМ исследованиях атомарно гладких поверхностей рабочая апертура зонда определяется фактически крайним атомом на его кончике. В случае, когда кончик зонда не удаётся сделать достаточно острым, наблюдаются проявления многоатомного взаимодействия зонда с поверхностью [6], но такие случаи легко идентифицируются по характерным деталям получаемого СТМ изображения. На основании теории симметричной передаточной функции зонда (“s-wave tip” [7]) получаемое двумерное распределение туннельного тока интерпретируется как изображение локальной плотности электронных состояний образца. Эта теория, достаточно хорошо работает для металлов, но для полупроводников (в частности, для исследуемого в данной работе графита) или полупроводников, имеющих более тонкую структуру плотности состояний, получаемое изображение существенно сглаживается и может быть описано сверткой распределения локальной плотности состояний с передаточной функцией зонда [8]. В настоящей работе решается обратная задача восстановления СТМ изображения атомарной структуры на поверхности пиролитического графита на основе деконволюции уравнения свертки.

Восстановление электронной структуры поверхности пиролитического графита по данным СТМ

СТМ исследования поверхности пиролитического графита проводились с помощью многомодового микроскопа “Solver P-47”, разработанного фирмой НТ-МДТ (Зеленоград, Россия). В эксперименте измерялось двумерное распределение туннельного тока между зондом из платино-иридиевого сплава и

поверхностью графита в режиме постоянной высоты ($z = const$). Начальное значение туннельного тока устанавливалось порядка 2,5 нА при напряжении на туннельном промежутке - 20 мВ. Скорость сканирования зонда над поверхностью составляла 4100 Å/с. Получаемое СТМ изображение представляло собой массив данных, состоящий из 128×128 элементов с размером пикселя порядка 0,1 Å.

Плотность состояний на поверхности пиролитического графита исследовалась во многих работах. Особенностью СТМ изображений пирографита с гексагональной решёткой является то, что туннельный ток в местах расположения атомов, имеющих ближайший соседний атом во втором слое, существенно меньше, чем для мест атомов, под которыми атом углерода во втором слое отсутствует. На изображении атомы первого типа (А-тип) выглядят как тени между атомами второго типа (Б-тип) [9,10]. То есть в СТМ изображении отчётливо наблюдается только половина атомов решётки графита.

Согласно работе [8] двумерное распределение (изображение) туннельного тока, измеренное в режиме $z = const$, может быть представлено в виде двумерной свертки истинного изображения и передаточной функции зонда:

$$j_m(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x-s, y-t) j(s, t) ds dt, \quad (1)$$

где ядро K - это передаточная функция, $j_m(x, y)$ - измеренное распределение, $j(s, t)$ - искомое истинное распределение. Уравнение (1) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма 1-го рода. Нахождение решения данного уравнения представляет собой некорректную задачу, требующую использования дополнительной априорной информации о точном решении (регуляризации). Очевидно, что в СТМ исследованиях поверхности с атомарным разрешением характерная ширина (локальный носитель) передаточной функции зонда должна быть порядка размера отдельного атома и эта функция должна экспоненциально спадать на атомном масштабе. Поэтому естественным представляется выбрать передаточную функцию зонда в виде двумерной гауссовой функции так же, как это было сделано в работе [9] для расчёта наблюдаемых эффектов сглаживания в распределениях туннельного тока:

$$K(x, y) = \frac{4}{\pi \sigma_x \sigma_y} \exp\left[-4\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)\right] \quad (2)$$

Вследствие симметрии волновой функции зонда [7] можно считать, что $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$. Для решения (1) относительно $j(s, t)$ с ядром (2) нами использовался метод обобщенной невязки Тихонова [11]. Данный метод широко применяется для решения некорректных задач рассматриваемого типа в различных физических задачах [12-16]. В рассматриваемом случае для построения алгоритма решения уравнения типа свёртки можно использовать быстрое преобразование Фурье, что существенно увеличивает скорость вычислений. Единственным параметром метода обобщенной невязки, определяющим значение параметра регуляризации является величина ошибки измерений δ в метрике L_2 [11]. Данный параметр определяет оптимальную степень сглаживания восстановленного изображения. Чем меньше уровень ошибки δ , тем более тонкие детали изображения могут быть восстановлены. По мере уменьшения ошибки восстановленное распределение сходится к истинному, причём большим достоинством использованного метода Тихонова является равномерная сходимост.

На рис.1а представлено измеренное распределение туннельного тока на поверхности пиролитического графита. Среднеквадратичное значение погрешности измерений составляло 0,08 нА (около 10% от максимального перепада тока в измеряемом сигнале). Ошибка в соседних пикселях была практически некоррелированная. Несмотря на довольно высокий уровень ошибки, в экспериментальных данных имеется значительная статистическая избыточность, которая позволяет эффективно уменьшить ошибки восстановления. На рис. 1б приведено восстановленное СТМ изображение, полученное при решении уравнения (1) с использованием значения $\sigma = 2\text{Å}$. Следует отметить, что результат восстановления не очень критичен к вариациям этого параметра в пределах $\pm 0,5\text{Å}$. Можно видеть, что в восстановленном изображении не содержится высокочастотного шума и проявляется некоторая тонкая структура в изображениях отдельных атомов. Однако реализованный уровень точности измерений не позволяет отчётливо видеть атомы А-типа.

Ошибки исходного изображения для периодических структур могут быть значительно уменьшены путём пространственного усреднения данных по периоду решётки. На рис. 2а представлено изображение, полученное в результате усреднения СТМ данных (по 40 атомам). Из сравнения с рис.1а видно, что качество изображения существенно возрастает, поскольку соответствующая среднеквадратичная ошибка уменьшается примерно в 6 раз и составляет менее 0,15 нА. При таком низком уровне погрешности оказывается возможным восстановить существенно более тонкие детали

изображения (см. рис.2б). Во-первых, на восстановленном изображении можно ясно видеть структуру гексагональной решётки графита: атомы А-типа различимы так же хорошо, как и атомы Б-типа. Во-вторых, проявляется более тонкая, субатомная структура электронных состояний в решетке (размер наименьших деталей в изображении составляет около 0,4 Å). Полученное в результате восстановления СТМ изображение качественно согласуется с результатами расчетов локальной плотности состояний, приведённых в работе [9].

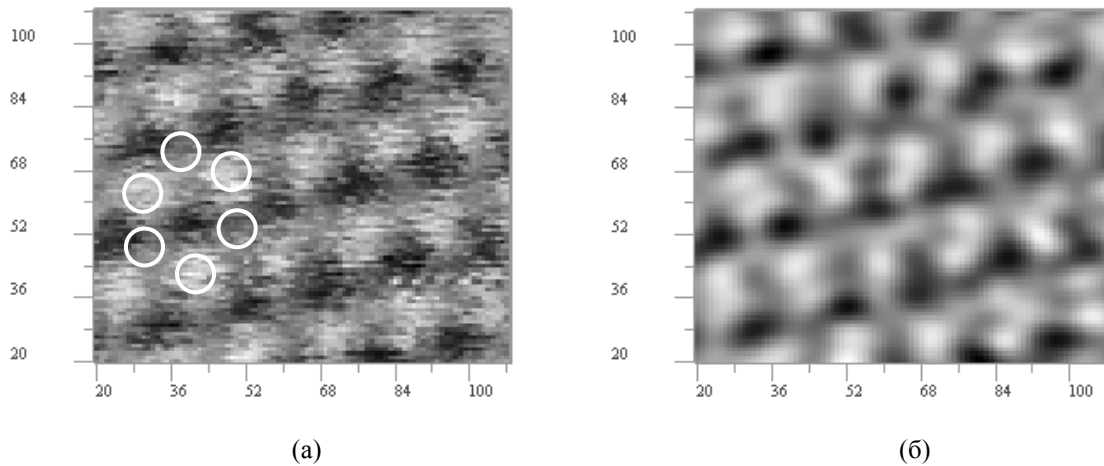


Рис. 1. Восстановление СТМ изображения атомарной структуры на поверхности пиролитического графита. а) исходное распределение туннельного тока. Круги – положения атомов А- и Б-типов, образующие гексагональную ячейку решётки; б) восстановленное СТМ изображение при уровне ошибки измерений $\delta = 0,08$ нА. Размер пиксели: 0.135×0.101 ангстрем.

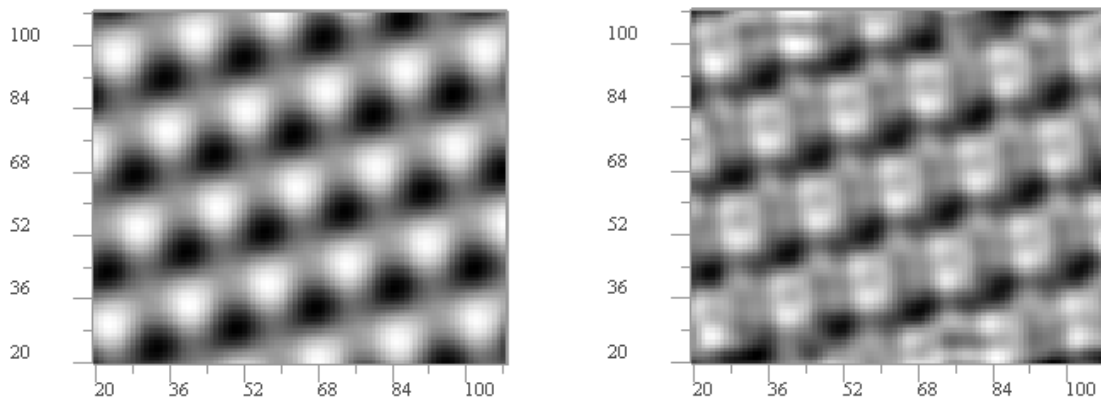


Рис.2а.

Рис.2б.

Рис. 2. Восстановление СТМ изображения пиролитического графита. а) СТМ изображение, полученное путём пространственного усреднения исходного изображения по периоду решётки; б) восстановленное СТМ изображение при уровне погрешности $\delta = 0.015$ нА. Размер пиксели: 0.135×0.101 ангстрем.

Следует отметить, что в восстановленном изображении содержатся некоторые погрешности, связанные с недостаточной точностью исходных данных и передаточной функции зонда. Однако существует возможность достижения более высокого разрешения в СТМ измерениях на атомарно гладких поверхностях посредством усреднения по большему числу периодов решётки. Более того, сравнивая полученные изображения с результатами теоретических расчетов плотности электронных состояний, можно попытаться уточнить вид передаточной функции и реализовать еще более высокое пространственное разрешение.

Заклучение

Таким образом, представленные результаты показывают, что развитый в работе метод восстановления СЗМ изображений с учётом нелокальности взаимодействия в системе зонд-поверхность позволяет существенно улучшить пространственное разрешение при исследовании атомарно гладких поверхностей. Применение этого метода для восстановления СТМ изображений поверхности пиролитического графита позволило восстановить изображение тонкой структуры локальной плотности электронных состояний и впервые достичь субатомного разрешения.

Работа выполнялась при поддержке РФФИ, гранты № 00-02-16487, 01-02-16444.

Литература

- [1] J.S.Villarrubia - Surface Science, 321, (1994) 287.
- [2] J.S.Villarrubia - J. Vac. Sci. Technol. B 14(2), (1996) 1518.
- [3] P.M.Williams, K.M.Shakesheff, M.C.Davies, D.E.Jackson, C.J.Roberts, and S.J.B.Tendler - J. Vac. Sci. Technol. B 14(2), (1996) 1557
- [4] N.V.Buckaraev, D.V.Berdunov, K.M.Ovchinnikov, K.M.Salikov - Scanning Microscopy, 11 (1997), 25.
- [5] G.Binning - Reviews of Modern Physics. Special Issue, March, s324 (1999).
- [6] H.A.Mizes, Sang-il Park, W.A.Harrison - Phys. Rev. B. 36, 4491, (1987).
- [7] J.Tersoff and D.R.Hamann - Phys. Rev. Lett. 50, 1998 (1983).
- [8] J.Tersoff - Phys. Rev. B. 41, 1235 (1990).
- [9] D.Tomanek and S.G.Louie - Phys. Rev. B. 37, 8327 (1988).
- [10] G.Binning, H.Fuchs, Ch.Gerber, H.Rohrer, E.Stall and E.Tosatti - Europhys. Lett. 1, 31 (1986).
- [11] A.N.Tikhonov - Solution of ill-posed problems. New York, Winston, 1977.
- [12] В.П.Тычинский - УФН, 166(1996), 1219.
- [13] Г.И.Василенко, А.М.Тараторкин - Восстановление изображений. М.: Связь, 1986.
- [14] B.G.Clark - Astron. Astrophys., 89(1980), 377.
- [15] B.R.Frieden, D.G.Wells - J. Opt. Soc. America, 68(1978), 93.
- [16] K.P.Gaikovich, A.N.Reznik, V.L.Vaks, N.V.Yurasova - Phys.Rev.Lett., 88 (2002), 104302.