

⑧

扫描隧道显微镜畸变图象的校正

49-53

THE CORRECTION TO THE DISTORTED IMAGE OF THE SCANNING TUNNELING MICROSCOPE

蔡 从 中 陈 新 镭 舒 启 清 郑 小 林
Cai Congzhong Chen Xinyong Shu Qiqing Zheng Xiaoling
(重庆大学应用物理系) (重庆大学无线电系)

TN16

摘 要 从扫描隧道显微镜(STM)的工作原理出发,分析了STM图象畸变产生的原因,建立了一种相应的物理数学模型。利用计算机通过数值解,校正了STM畸变图象,并得到了满意的效果。

关键词 扫描隧道显微镜;石墨;图象校正,畸变,STM
中国图书资料分类法分类号 TH742; TN153

ABSTRACT The reason of the STM image distortion is analyzed according to the principle of the Scanning Tunneling Microscope (STM). A physical and mathematical model is established and the numerical value solution is obtained by the computer. Finally, the STM distorted image is corrected with a satisfactory result.

KEY WORDS scanning tunneling microscope; graphite; image correction

0 引 言

扫描隧道显微镜(Scanning Tunneling Microscope,缩写为STM)是80年代初发展起来的一种新型显微镜和表面分析仪器^[1-2]。它主要用于研究导电物质的表面结构和性质。STM已广泛应用到物理学、化学、生物医学、材料科学和微电子学等多学科领域。STM的诞生给表面显微科学带来一场巨大革命,为显微学的发展奠定了又一新的里程碑。自问世起,STM一直成为显微学和表面科学领域中的一个热点问题,为科学技术界普遍关注。目前国内外许多大学和研究所都相继开展了STM的理论和实验研究工作。

图象处理是STM研究中的关键技术之一。传统的光学显微镜或电子显微镜都是用光学透镜或电磁透镜对光束或电子束进行聚集、偏转等控制,将其投射于样品,再控制其透射或反射束成象,往往存在象差。而STM无需任何聚焦系统,它是利用扫描探针与试样表面之间的电子隧道效应而获得高分辨率图象的,不存在传统显微象差。本文述及的STM畸变图象是我们在STM研究过程中遇到的问题之一,它有别于普通光学象差。

* 修改稿收到日期 1992-07-15

国家自然科学基金及四川省科委应用基础研究基金资助项目

1 畸变现象及其产生的原因

1.1 STM工作原理

STM的工作原理是基于量子力学中的电子隧道效应。当一具有原子尺度的针尖足够接近样品表面,使得针尖上的电子波函数与样品表面的电子波函数产生交叠时,加在针尖和样品间的电压(又称“偏压”)将使电子穿过它们之间的势垒形成隧道电流。随着针尖与试样间距的增加,隧道电流呈指数衰减。如果保持隧道电流恒定,而使针尖在样品表面光栅式扫描,同步地采集探针尖的运动数据,经过计算机处理后,在屏幕上显示出来,即可得到样品表面的三维图象(如图1)。

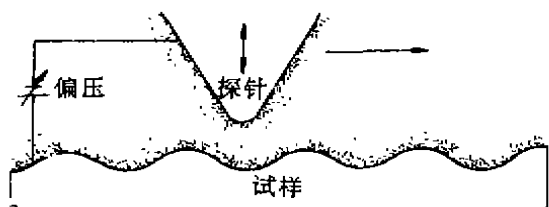
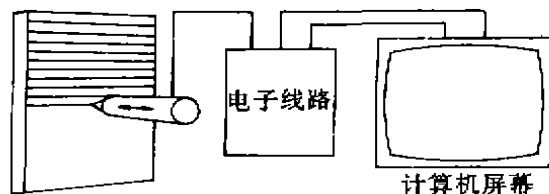


图1 STM工作原理

1.2 畸变实例

石墨晶体表面a位原子^[3]呈正六角点阵排列,每两个相邻a位原子相距为 2.46 \AA 。我们在用自制的STM观测石墨晶体表面形貌时达到了原子分辨本领^[4],但得到的表面原子呈非正六角点阵排列,图6(a)即为石墨表面形貌STM畸变图。

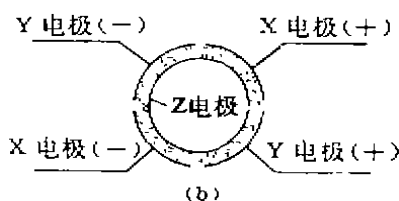
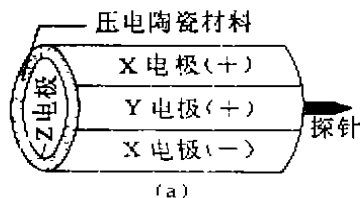


图2 扫描探针组件

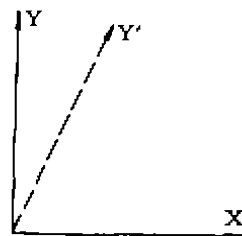


图3 X-Y非正交扫描

1.3 畸变原因分析

X、Y扫描的非正交性是引起STM图象畸变的原因之一。以单管扫描探针组件(如图2)为例,由于X、Y电极分配不够均匀和对称,以及针尖不是严格放在陶瓷管中心等原因,导致在实际扫描时X轴和Y轴的夹角不是 90° ,即在X电极伸长扫描又退回原位完成X方向一行扫描后,Y电极不是沿Y方向伸长,而是沿Y'方向伸长(如图3),从而导致了在X-Y平面二维扫描时X轴与Y轴的非正交性。

导致STM图象畸变的另一原因是压电陶瓷管在X及Y扫描方向上的压电系数不一致。

以上两方面因素是导致STM图象畸变的主要原因。由于电噪声等干扰所引起的图象失真不在本讨论范围之列。

2 物理数学模型

我们先从标准的石墨晶体表面原子的正六角点阵出发,探究在STM的扫描和显示过程中是如何引起图象畸变的,然后针对畸变图相应地用数学处理方法计算出扫描探针组件的

非正交角及 X 和 Y 扫描方向的压电系数比。

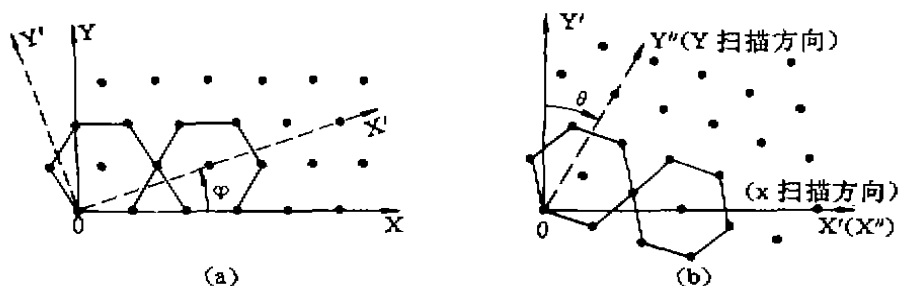


图4 STM扫描模型

2.1 扫描

图4(a)为石墨晶体 a 位原子间正六角点阵排列,先选定标准笛卡尔坐标系 XOY ,使原点 O 位于一 a 位原子中心处, X 轴与 a 层原子正六角形的一边重合。在STM探针的扫描过程中,扫描的 X 、 Y 方向不一定刚好与 X 轴和 Y 轴分别平行。假如实际的 X 扫描方向为 X' ,在扫描探针组件完全不存在非正交因素时, Y 扫描方向则为 Y' ,这样直角坐标系 $X'OY'$ 是通过坐标系 XOY 绕原点 O 旋转 φ 角(以逆时针方向为正)而得到的(图4(a)),而实际 Y 扫描方向 Y'' 并没有与 Y' 重合,而是偏离了 Y' 轴 θ 角(以顺时针方向为正),因而实际扫描的坐标系应为 $X''OY''$ (图4(b))。

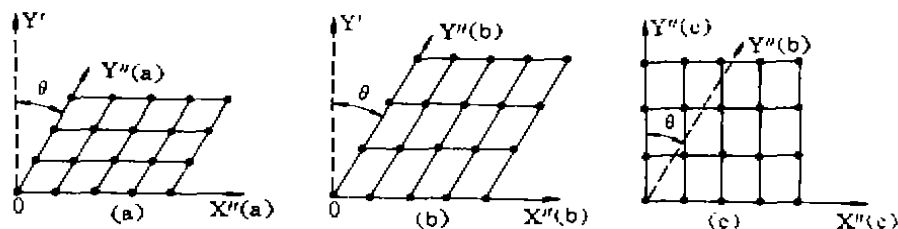


图5 STM显示模型

2.2 显示

注:图5(a)中 $OX''(a)$ 和 $OY''(b)$ 为实际扫描方向, $X''(a)OY''(a)$ 为实际扫描坐标系。图5(b)中 $X'(b)OY'(b)$ 坐标系是对 $X'(a)OY'(a)$ 坐标系在 Y' 方向放大所得。图5(c)中直角坐标系 $X''(c)OY''(c)$ 是由非正交坐标系 $X''(b)OY''(b)$ 拓扑而成。

按图4(b)中 $X''OY''$ 非正交方式扫描而采集的数据应以图5(a)方式显示出来才能反映出样品表面的真实形貌。我们实际显示是按照图5(c)的方式显示的。由于实际扫描时 X'' 、 Y'' 方向还存在由于压电系数不相等及其他因素而引起的比例匹配问题,为此 $Y''(b)$ 相对于 $Y''(a)$ 来说,被线性放大(或缩小),而 $X''(c)$ 则相当于 $X''(b)$ 向左进行了一系列平移操作所致。

2.3 数学处理

校正工作的目的就是要将实际显示的畸变图(图5(c))还原成真实图(图5(a))。对于 XOY 坐标系中的 (x, y) 点先逆时针旋转 φ 角,即得到 $X'OY'$ 坐标系中的 (x', y') 点:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (1)$$

然后仍在 $X'OY'$ 坐标系中将 y' 在 Y' 轴上按比例 $\frac{1}{k}$ 放大:

$$\begin{pmatrix} x'_k \\ y'_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{k} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \quad (2)$$

再将 (x'_k, y'_k) 点在 $X''(c)$ (亦为 X') 方向作平移操作变换:

$$\begin{pmatrix} x'' \\ y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\tan\theta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x'_k \\ y'_k \end{pmatrix} \quad (3)$$

这样在图 5(c) 上 $X''OY''$ 坐标系中的 (x'', y'') 点就是 $X'OY'$ 坐标系中 (x', y') 点的畸变点。因此:

$$\begin{pmatrix} x'' \\ y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\tan\theta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{k} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (4)$$

(4)式也可表述成:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \tan\theta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x'' \\ y'' \end{pmatrix} \quad (5)$$

(5) 式的物理图象十分清楚:它是将实际显示点 (x'', y'') 先沿 X'' 轴水平平移,然后在 Y'' 轴上以比例 k 缩小,最后再将坐标系逆时针旋转 $(-\varphi)$ 角,得到标准坐标系 XOY 下的 (x, y) 点,以上操作是推导过程的逆操作。

3 校 正

由(5)式可得:

$$\begin{cases} x = \cos\varphi \cdot x'' + \cos\varphi \cdot \tan\theta - k\sin\varphi \cdot y'' \\ y = \sin\varphi \cdot x'' + (\sin\varphi \cdot \tan\theta + k\cos\varphi) \cdot y'' \end{cases} \quad (6)$$

设:
$$f(\varphi, \theta, k) = |[\cos\varphi \cdot x'' + (\cos\varphi \cdot \tan\theta - k\sin\varphi) \cdot y''] - x| + |\sin\varphi \cdot x'' + (\sin\varphi \cdot \tan\theta + k\cos\varphi) \cdot y'' - y| \quad (7)$$

选择 (x, y) 点及其对应的 (x'', y'') 点,当 φ, θ, k 取真值时, $f(\varphi, \theta, k)$ 应取极小值。该极小值在理论上应等于零,但由于测量误差,一般不为零。为求解 φ, θ, k 三个参数,至少应选择图上不同两点。为了减小误差,也可以在同一图上选择多个点进行计算, (7) 式相应改为:

$$f(\varphi, \theta, k) = \sum_i \{ |[\cos\varphi \cdot x''_i + (\cos\varphi \cdot \tan\theta - k\sin\varphi) \cdot y''_i] - x_i| + |[\sin\varphi \cdot x''_i + (\sin\varphi \cdot \tan\theta + k\cos\varphi) \cdot y''_i] - y_i| \} \quad (8)$$

针对图6(a)我们选择了 A、B、C、D、E 五点:

$$\begin{array}{ll} A: \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.866 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} x''_1 \\ y''_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.286 \\ 0.955 \end{pmatrix} \\ B: \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} x''_2 \\ y''_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.955 \\ 0.0909 \end{pmatrix} \\ C: \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} x''_3 \\ y''_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.98 \\ 0.314 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$D: \begin{pmatrix} x_4 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.5 \\ 2.60 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x''_4 \\ y''_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4.34 \\ 3.68 \end{pmatrix}$$

$$E: \begin{pmatrix} x_5 \\ y_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1.732 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x''_5 \\ y''_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.659 \\ 2.27 \end{pmatrix}$$

将以上数据代入(8)式,经过计算机数值计算,解出了 φ, θ, k :

$$\varphi \approx -4.89^\circ \quad \theta \approx -16.3^\circ \quad k \approx 0.784$$

以 θ 和 k 为解对畸变图6(a)进行计算机校正处理即得到图6(b)。

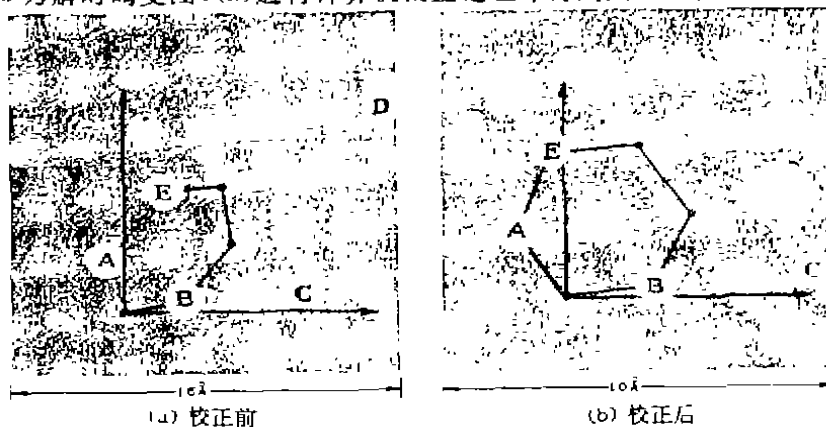


图6 石墨表面STM原子分辨畸变图象的计算机校正

4 校正结果及讨论

1) 由前面的分析和讨论, $X-Y$ 轴的夹角 θ 约为 106.3° , X 及 Y 扫描方向的压电系数之比 k 约为 0.784。通过精心设计扫描探针组件,可以大大减少上述两项畸变因素。

2) 本文首次对由于非正交扫描探针组件所导致的 STM 畸变图象进行了校正。图6(b)是对石墨表面原子 STM 畸变图6(a)的校正结果。图6(a)中的斜六角点阵排列结构被校正为图6(b)中的正六角点阵结构。

3) 通过本方法求出的扫描非正交角 θ 及比例系数 k , 可用于对由同一扫描探针组件获得的其它试样的 STM 畸变图象进行校正。本方法还可用于其它研究领域由类似原因引起的畸变图象的校正处理。

4) 在 STM 实时观测、显示试样表面形貌时,畸变图象不能真实地反映试样表面形貌的本来面目,并直接影响人们对事物本质的实时分析和正确判断,给研究工作带来诸多不便。因此,对 STM 畸变图象进行合理的校正处理是十分重要的。

参 考 文 献

- 1 Binnig G, Rohrer H, Gerber C and Weibel E. Tunneling through a controllable vacuum gap. Appl Phys Lett, 1982, 40(2), 178-180
- 2 Hansma P K and Tersoff J. Scanning tunneling microscopy. J Appl Phys, 1987, 61(2): R1-R23
- 3 梶村 皓二, 水谷 亘, 岡山重夫著, 肖蕴译. 以原子标度探索物质结构的 STM 的作用. 日本的科学与技术, 1988, (1), 3-10
- 4 蔡从中等. 扫描隧道显微镜(STM)的稳定性及图象校正研究, 重庆大学硕士学位论文, 1991, 4