

# 纳米硅薄膜表面形貌分形特征的 STM 研究

万明芳 魏希文 李建军 邹赫麟

(大连理工大学物理系 大连 116023)

袁凯华 何宇亮

(北京航空航天大学非晶态物理研究室 北京 100083)

**摘要** 利用扫描隧道显微镜(Scanning Tunneling Microscope, 简称 STM)对纳米硅薄膜在纳米尺度上的表面微观形貌进行了研究, 结合分形理论, 计算出样品表面形貌的分形维数  $D$ , 从而得出  $D$  与有关样品微结构参数之间的关系. STM 结合图象处理和傅利叶分析法可以很好地研究薄膜材料表面形貌的分形特征. 纳米硅薄膜的表面在纳米尺度上的微观形貌呈现出分形特征.

**PACC:** 6510C, 6114H, 6855

## 1 引言

纳米固体材料自从问世以来<sup>[1]</sup>, 就以其独特的结构特性和新颖的物性引起学术界的注目<sup>[2-8]</sup>. 纳米硅薄膜是由纳米尺寸的硅微晶粒构成的一种纳米固体材料, 其晶粒所占的体积百分比(简称晶份) $X_c$  约为50%, 另外的50%则为晶粒之间的大量界面原子所占据<sup>[1]</sup>, 由于纳米硅薄膜结构上的新颖性, 这种结构使其具有一系列不同于单晶硅或非晶硅的特殊性能, 有利于在器件中的应用<sup>[3,9-11]</sup>.

Mandelbrot 提出的分形理论<sup>[12]</sup>可用于材料显微结构的定量表征, 分形的一个重要特征是自相似性, 简单地说就是局部的形态与整体的形态相似, 这些具有自相似性的图形称之为分形. 分形维数是描述分形结构特征的重要的几何参量. 近年来, 人们利用光学显微镜和 SEM 等手段对薄膜材料和金属断口的表面形貌进行了很多研究<sup>[13-15]</sup>, 但由于实验手段的限制, 通常只能获得材料在微米尺度上的分形特征, 而且存在实验过程和数据处理复杂繁琐

万明芳 男, 1969年, 博士生, 主要从事纳米硅薄膜材料的生长和特征的研究

魏希文 女, 1936年生, 教授, 主要从事新型材料在半导体器件中的应用和物理方面的研究

李建军 男, 1966年生, 讲师, 主要从事新材料和新器件的计算机模拟

1994年6月27日收到初稿, 1994年8月30日收到修改稿

等缺点. STM 是八十年代初发展起来的研究物质表面结构的新一代电子显微镜<sup>[16-18]</sup>, 具有纳米级乃至原子级的分辨率, 能够非破坏性地直接获得样品表面形貌的实空间三维图象, 便于进行数据处理. 利用 STM 研究薄膜材料表面形貌分形特征的工作, 国外刚刚起步<sup>[19-21]</sup>, 国内还未见报道. 我们首次利用 STM 研究了纳米硅薄膜表面在纳米尺度上的微观形貌, 结合分形理论, 计算了样品表面形貌的分形维数  $D$ , 获得了  $D$  与有关样品微观结构参数之间的相关信息.

## 2 实验方法

纳米硅薄膜样品是在常规的 PECVD 系统中, 使用大量氢稀释的硅烧作为反应气体, 利用 RF+DC 双重功率源激励等离子体辉光放电在盖玻片上制备得到的.

纳米硅薄膜样品表面微观形貌的观测是采用 CSTM-9000 型 STM<sup>[22]</sup> 在常温和大气中完成的. 扫描针尖系 Pt-Ir 合金丝 (Pt:Ir 为 80:20), 其直径为 0.1 nm. STM 的扫描方式为恒流模式; 样品表面的起伏是通过不同的灰度级别反应出来的.

用图象软件对获得的 STM 图象进行处理, 计算出样品表面形貌的分形维数. 具体步骤如下: ①利用图象软件对 STM 观测得到的纳米硅薄膜样品的表面形貌图象进行处理, 从而获得在不同位置上的样品表面形貌的轮廓线. ②将所得到的这些轮廓线进行傅利叶变换, 求出其相应的功率谱. ③为减小图象处理误差, 将所得功率谱曲线进行平均. ④将平均后的功率谱曲线由频率高端向低端进行积分. ⑤在双对数坐标上作出积分后的功率谱曲线, 用线性回归法求出其直线部分的斜率  $m$ , 则样品表面形貌的分形维数  $D$  可以表述成

$$D = 2.0 + m/2 \quad (1)$$

通过上述步骤求得的分形维数  $D$ , 可以用来定量地描述样品表面形貌轮廓线的分形特征.

为了很好地研究纳米硅薄膜表面形貌的分形维数  $D$  与有关样品微结构参数之间的关系, 利用 STM 在样品表面的不同位置上进行观测, 并对所得的每一幅样品表面微观形貌图象求出若干个分形维数, 则样品表面形貌的实际分形维数, 其作为随机表面粗糙度的一种度量, 不应该小于其中的任何一个, 即取其中之最大者, 作为所观测样品的表面形貌的实际分形维数. 以上计算工作是采用 C 语言编写的程序, 在 AST-486 微机上完成的.

## 3 结果与讨论

在观测纳米硅薄膜样品的表面微观形貌之前, 首先用石墨样品来校准 STM. 在常温和大气中, 采用恒高模式, 获得了如图 1 所示的石墨原子像 (见图版 I). 图中, 周期性排列的碳原子清晰可见, 其分辨率比常用的 SEM 要高三个数量级以上.

图 2 是纳米硅薄膜样品的表面微观形貌图象 (见图版 I), 其尺度为  $80 \times 80$  nm, 偏置电压为 1.50 V, 针尖电压为正, 隧道电流为 0.2 nA.

图 3 为纳米硅薄膜样品表面 10 个不同位置上的轮廓线经傅利叶分析法所得的平均积分功率谱曲线 (见图版 I), 其中坐标为双对数坐标. 由图中可见, 曲线的中间部分具有很好的线性, 直线拟合的结果, 其斜率为  $m = -1.362$ , 相关系数为 0.993. 说明样品的表面微观形貌确实呈现出分形特征, 其分形维数为  $D = 1.319$ . 在分形的数学理论中, 自相似具有无穷

嵌套结构;但在物理实体和过程中,无究嵌套一般是不存在的,即物理实体仅在一定尺度上呈现出分形特征.图3中曲线仅在中间部分呈现出很好的线性,其对应的尺度范围约为2—6nm,正说明了这一点.

Mitchell 等人曾指出<sup>[19]</sup>,在傅利叶变换计算分形维数的过程中,决定误差的主要因素是傅利叶变换的精度,由于傅利叶变换的精度与数据点的数目密切相关,所以如果描述轮廓线的数据点过少,求得的分形维数  $D$  误差就会很大.在本计算过程中所取的描述样品表面形貌轮廓线数据点为1600个,根据 Mitchell 计算,其误差应小于0.03.表1所示为纳米硅薄膜样品的表面形貌分形维数  $D$  与其晶份  $X_c$  之间的关系.其中的数据说明,随着纳米硅薄膜中晶份  $X_c$  的增加,其表面形貌的分形维数  $D$  增大.对这一实验结果的解释为:样品表面形貌的分形维数  $D$  是随机表面粗糙度的一种度量,虽然无定形态样品在细部更为无序,但在一定数量的尺寸范围内,其表面形貌反而更为平坦,反不如少量细微晶粒散布于无定形态成份中的样品表面来得粗糙.

表1 样品表面分形维数  $D$  与晶份  $X_c$  之间的关系

$X_c(\%)$	29.4	33.4	35	40	41.3
$D$	1.26	1.30	1.32	1.35	1.40

## 4 结论

对纳米硅薄膜表面形貌分形特征的 STM 研究结果表明:利用 STM,结合分形理论,是研究材料的表面微观形貌分形特征的有力手段;纳米硅薄膜的表面形貌在纳米尺度上呈现出分形特征,其分形维数  $D$  随着薄膜中晶份  $X_c$  的增加而增大.

## 参 考 文 献

- [1] R. Birringer, H. Gleiter, H. P. Klein, *et al.*, Phys. Rev. Lett., 1984, **102A**, 365.
- [2] F. Mattenberger and S. Veprek, Chemtronics, 1986 **1**:107.
- [3] M. Konuma, H. Curtins, F. -A. Sarott, *et al.*, Philos. Mag., 1987, **B55**(3):377.
- [4] You-wei Du *et al.*, J. Appl. Phys., 1987, **61**(8):3314.
- [5] R. W. Siegel and H. Hahn, in M. Yussouff(ed), Current trends in the Physics of Materials, World Scientific, Singapore 1987.
- [6] J. A. Cowen, Barry Stolzman, R. S. Averbach, *et al.*, J. Appl. Phys., 1987, **61**:3317.
- [7] 何宇亮,全国首届纳米固体研讨会文集,合肥,1990.
- [8] 何宇亮,物理,1991,**1**:29.
- [9] J. D. Zook, Appl. Phys. Lett., 1980, **37**(2):223—226.
- [10] Z. Iqbal *et al.*, J. Phys., 1983, **C16**:2005.
- [11] P. Ashburn and B. Soerowirdjo, IEEE Trans. Electron. Devices, 1984, **ED-31**:853—860.
- [12] B. Mandelbrot, Fractal Geometry of Nature, W. H. Freeman & Co., San Francisco, CA, 1982.
- [13] B. Mandelbrot *et al.*, Nature, 1984, **308**:721.
- [14] C. W. Lung and Z. Q. Mu, Phys. Rev., 1988, **B38**(16):11781.
- [15] 黄荣芳等,薄膜科学与技术,1992,**5**:36.

- [16] G. Binning, H. Rohrer, Ch. Gerber, *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1982, **40**: (2)178.
- [17] G. Binning *et al.*, Phys. Rev. Lett., 1982, **49**(1):47.
- [18] 汪世才, 物理, 1987, **16**:321.
- [19] Morgan W. Mitchell and Dawn A. Bonnell, J. Mater. Res., 1990, **5**(10):2344.
- [20] J. M. Gomez-Rodriguez *et al.*, Ultramicroscopy, 1992, **42-44**:1321.
- [21] M. Aguilar *et al.*, Ultramicroscopy, 1992, **42-44**:1329.
- [22] 白春礼、戴长春、黄桂珍等, 物理化学学报, 1989, **5**(1):3.

## Study on Fractal Characteristics of Surface Morphology of Nano-Crystalline Silicon Film

Wan Mingfang, Wei Xiwen, Li Jianjun, Zou Helin

*(Department of physics, Dalian University of Technology, Dalian 116023)*

Yuan Kaihua and He Yuliang

*(The Amorphous Physics Research Laboratory of Beijing University  
of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083)*

Received 27 June 1994, revised manuscript received 30 August 1994

**Abstract** The surface micro-morphology of nano-crystalline silicon film is studied by using scanning tunneling microscope (STM). The fractal dimension  $D$  of the sample surface morphology is calculated by associating with the fractal theory. The dependence of  $D$  on the related parameters of the sample microstructures is obtained. the fractal characteristics of the surface morphology of films can be well studied by STM, which combines with the methods of the image processing and Fourier analysis. The micromorphology of the surface of nano-crystalline silicon films presents fractal characteristics in nanometer size.

**PACC:** 6510C, 6114H, 6855