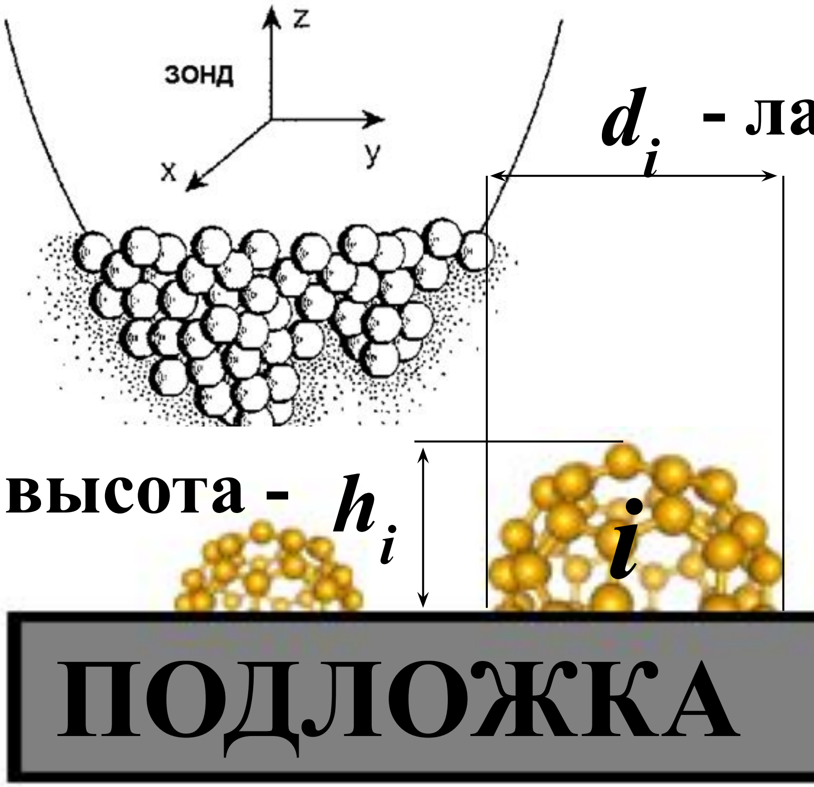
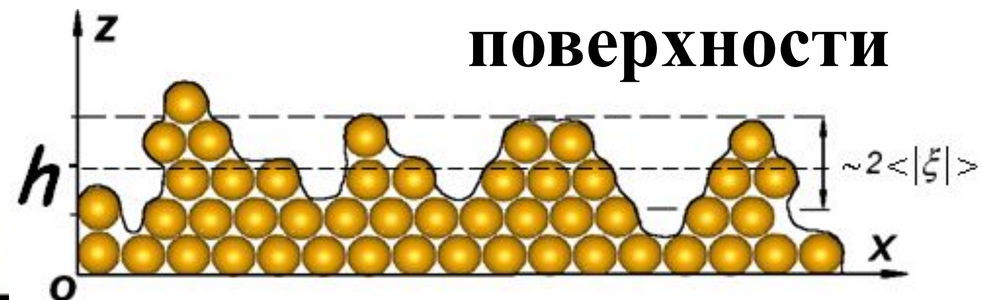
Лекция 11 Сканирующая туннельная микроскопия. Определение формы нанокластеров. Фрактальная размерность. Зависимость туннельного тока от расстояния между зондом и образцом. Определение локальной работы выхода образца.

d_i - латеральный размер

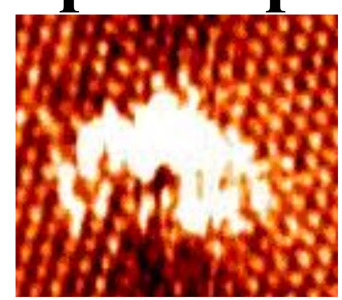


высота - h_i

$<\xi^2>$ - шероховатость поверхности



D - шероховатость периметра



$$\langle d \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N} d_i}{N} \qquad \langle h \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N} h_i}{N}$$

Одним из способов описания нерегулярной структуры физических объектов является определение фрактальной размерности их границы

Согласно Мандельброту, фракталом называется структура, в которой один и тот же фрагмент повторяется при любом уменьшении масштаба. Существуют различные формулировки размерности Хаусдорфа-Безиковича, характеризующей фракталы. В частности, фрактальную размерность D множества можно определить как критическое значение показателя *d* в выражении меры множества M_d, при котором она изменяет свое значение с нуля на бесконечность:

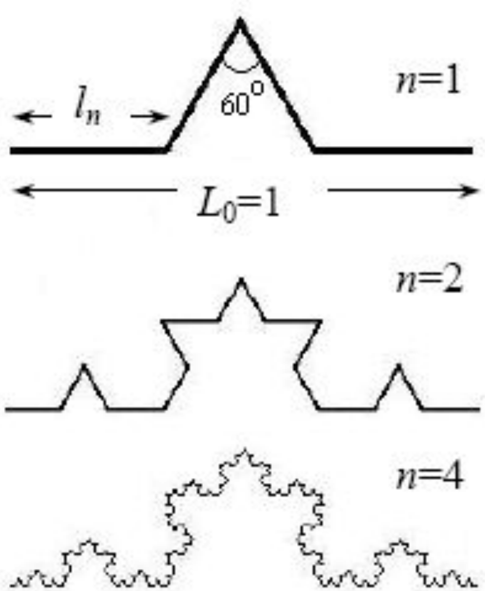
$$M_d = \gamma(d) N(\delta) \delta^d \xrightarrow[\delta \to 0]{} \begin{cases} 0 & \text{при } d > D \\ \infty & \text{при } d < D \end{cases}$$

Мерой кривой является ее длина *L*, которая определяется как предел произведения числа N прямолинейных отрезков, умещающихся на кривой, на длину такого отрезка δ при ее стремлении к нулю. Для фрактальной размерности следует соотношение:

$$D = \lim_{\delta \to 0} \frac{\ln N}{\ln(1/\delta)}$$

Кривая Коха- один из стандартных примеров фрактальной кривой.

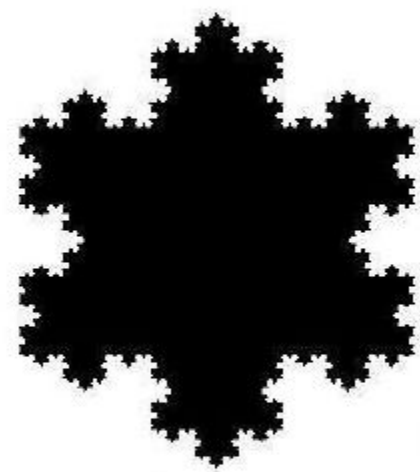
Построение кривой начинается с прямолинейного отрезка единичной длины. Этот исходный отрезок может быть заменен каким-нибудь многоугольником, например, равносторонним треугольником, квадратом. Построение кривой Кох продолжается заменой каждого звена образующим элементом. В результате такой замены для триадной кривой Кох получается: первое поколение — кривая из *N*=4 прямолинейных звеньев, каждое длиной δ=1/3. Следующее поколение получается при замене каждого прямолинейного звена уменьшенным образующим элементом. Кривая *n*-го поколения состоит из отрезков $N=4^n$ **длиной** $\delta=3^{-n}$ **каждый, с фрактальной размерностью**



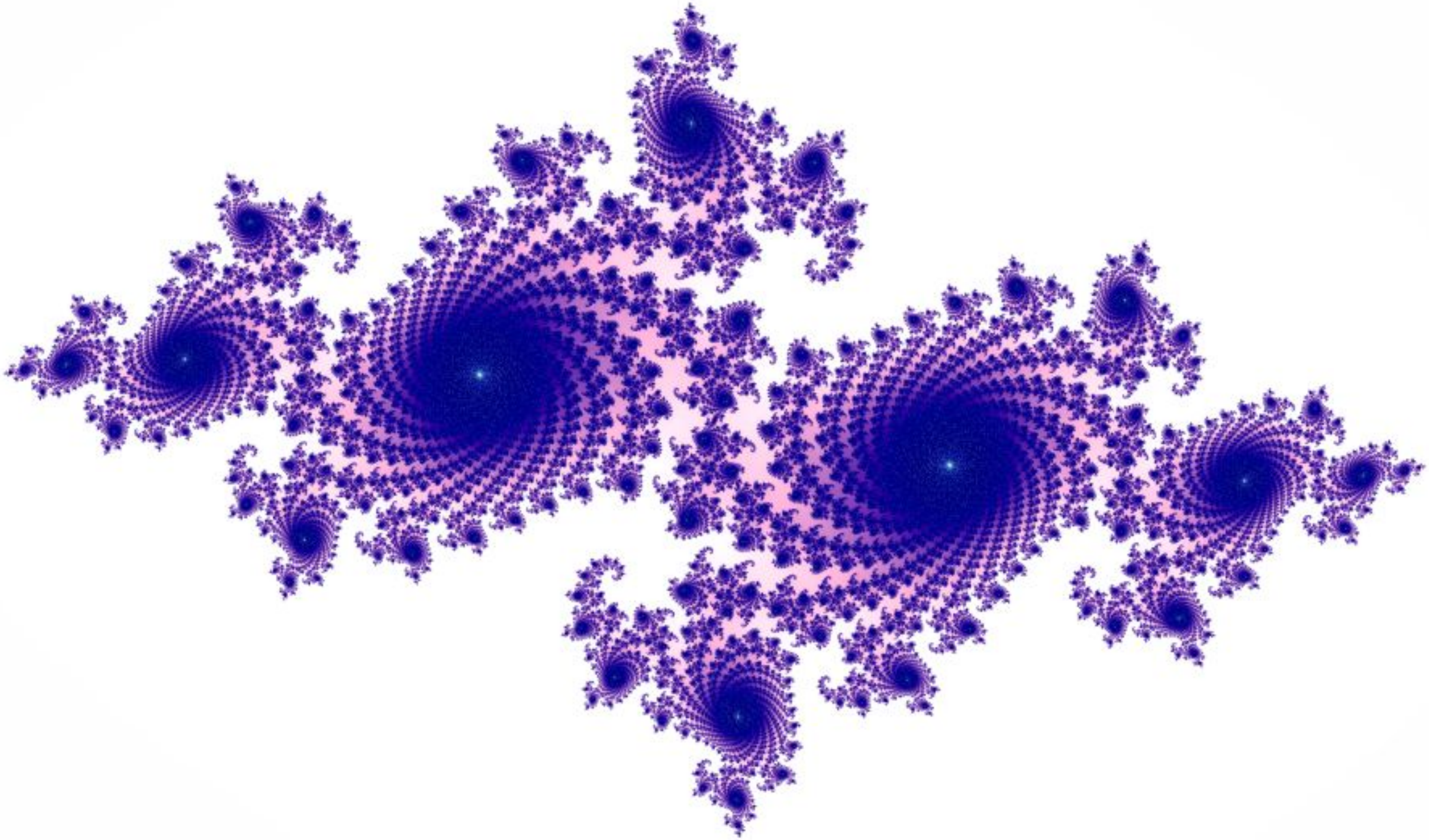
$$D = \lim_{\delta \to 0} \frac{\ln N}{\ln(1/\delta)}$$

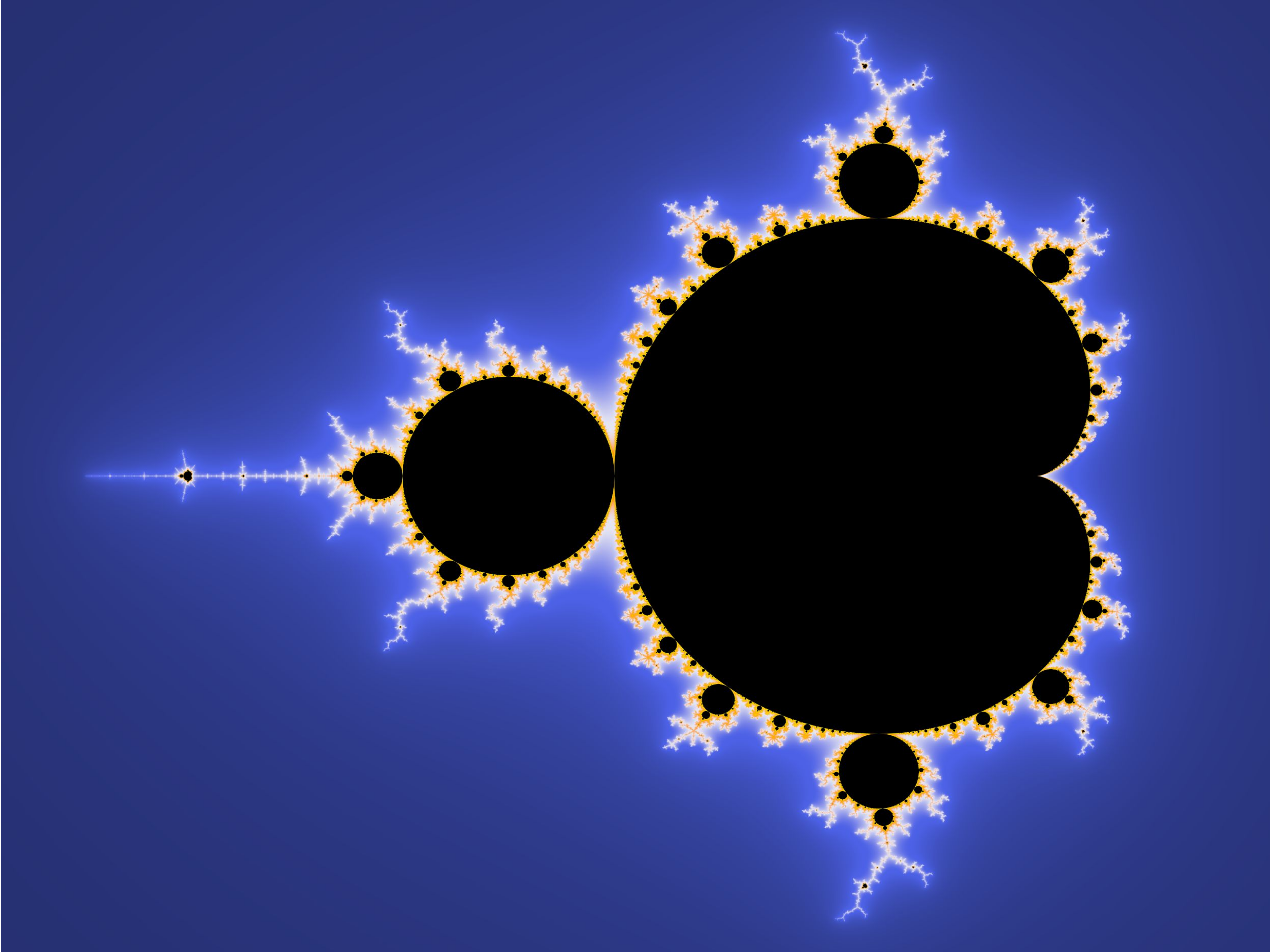
$$N = 4^n \qquad \delta = 3^{-n}$$

$$D = \ln 4 / \ln 3 \approx 1.26$$



Снежинка Коха





Основные алгоритмы нахождения фрактальной размерности:

•алгоритм Ричардсона (измерение длины береговой линии)

Алгоритм Ричардсона основан на измерении периметра (границы) исследуемого объекта *L* линейкой длины δ. Изменяя длину линейки δ, получаем серию значений периметра *L*(δ). По мере уменьшения значения δ измеренная длина границы фрактального объекта увеличивается, поскольку становится возможным измерить более мелкие детали границы. Строя в двойном логарифмическом масштабе ln(*L*) как функцию ln(δ) и аппроксимируя ее линейной зависимостью, из тангенса угла наклона *m* находим значение фрактальной размерности границы объекта *D*=1-*m*, что следует из непосредственного определения фрактальной размерности:

$$D = \lim \frac{\ln N}{\ln(1/\delta)} = 1 - \lim \frac{\ln N\delta}{\ln \delta} = 1 - \lim \frac{\ln L}{\ln \delta} = 1 - m$$

Данный алгоритм применим для анализа изображения единичного объекта с развитой структурой границы. Поскольку впервые он был применен для измерения длины береговой линии побережья Норвегии, то он также называется алгоритмом «измерения береговой линии».

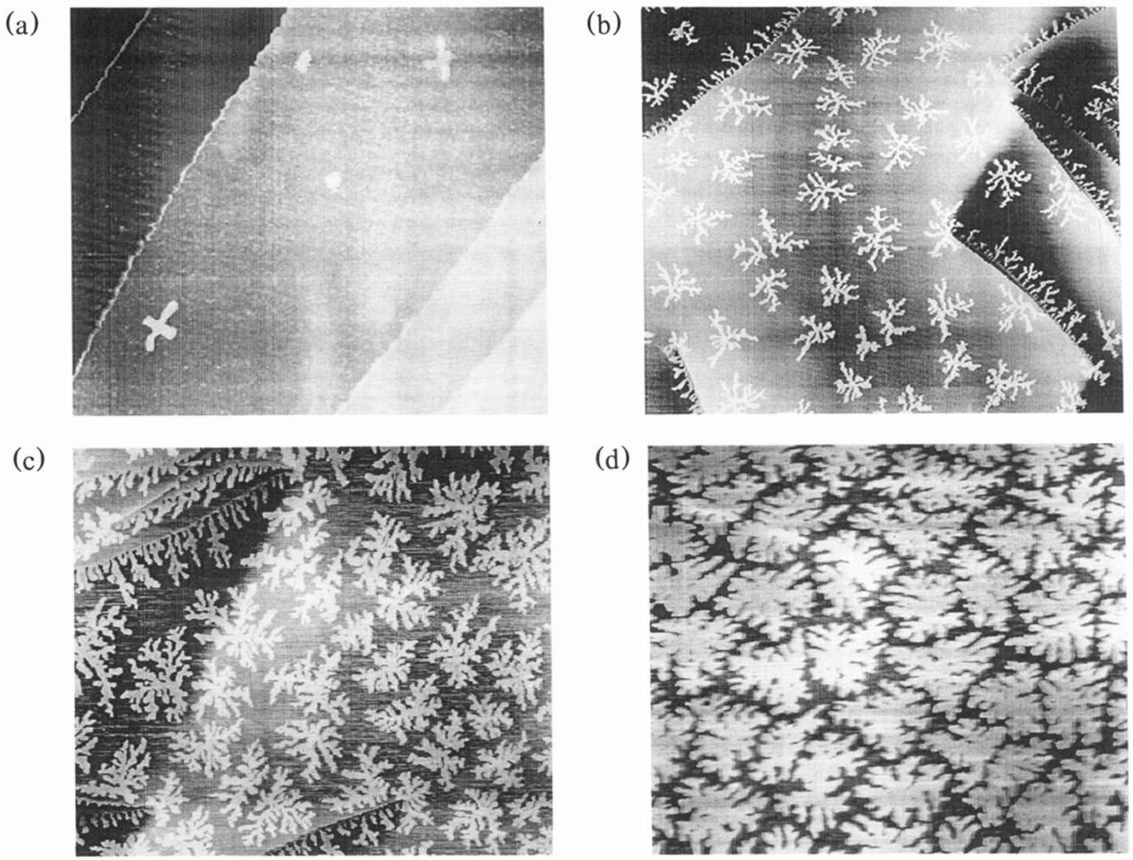
•алгоритм озер (измерение площади и периметра объектов)

Алгоритм озер основан на определении соотношения между площадью *S* и периметром *p* исследуемого объекта. В общем случае это соотношение представляется в виде:

$$S = \mu(D)p^{\nu}$$

где *μ(D)* – величина, определяющаяся формой объекта, ν=2/*D* – показатель, *D* - фрактальная размерность границы. Построение зависимости *ln(S)* от *ln(p)* позволяет получить значение размерности исследуемых кластеров. В случае гладкой границы исследуемых объектов *D*=1 (*S*~*p*^{2}). Существенным отличием данного алгоритма от алгоритма Ричардсона является то, что его невозможно использовать для определения фрактальной размерности единичного объекта.

Примеры нанокластеров металла фрактальной формы



$$N \sim R_g^D$$

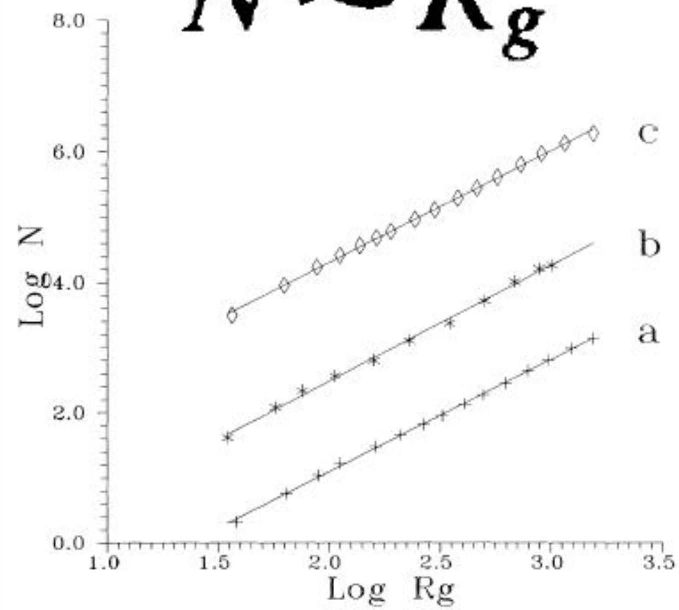


FIG. 4. Graphs of $\log_{10}N(r)$ vs $\log_{10}R_g$ from, curve *a*, single dendrite grown at 0.2 ML/min, curve *b*, single dendrite grown at 2 ML/min, and curve *c*, averaged data from six dendrites grown at 0.2 ML/min. (Offsets in the graphs are artificial.)

В работе [Hwang R.Q., Schrӧder J., Gϋnter G., Behm R.J. Fractal growth of two-dimensional islands: Au on Ru(0001) // Phys. Rev. Lettr., 1991, v. 67, 23, pp. 3279-3282.] исследовались in situ методом СТМ начальные стадии роста Au на поверхности Ru(0001) при ТО с субмонослойными покрытиями. Наблюдалось образование 2D дендритных кластеров с размером *d*~0.01÷0.3 мкм и фрактальной размерностью *D*=1.72±0.07, что указывает на механизм ОДА. Образование наблюдаемых структур объясняется различием диффузии одиночных атомов по поверхности подложки и краевой диффузии атомов по периметру кластера. Термодинамическая неустойчивость таких структур проявляется при отжиге при температуре 650 К, который приводит к превращению дендритов в компактные кластеры.

ФРАКТАЛЬНАЯ СТРУКТУРА КЛАСТЕРОВ Au/ВОПГ – СТМ

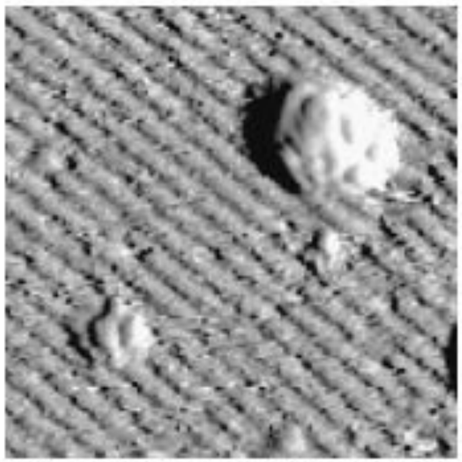
Фрактальная обработка СТМ изображения по алгоритмуозёр

$$S \sim p^{2/D}, \quad \ln \sim 2/D \cdot \ln p$$

S - площадь, p - периметр кластера,

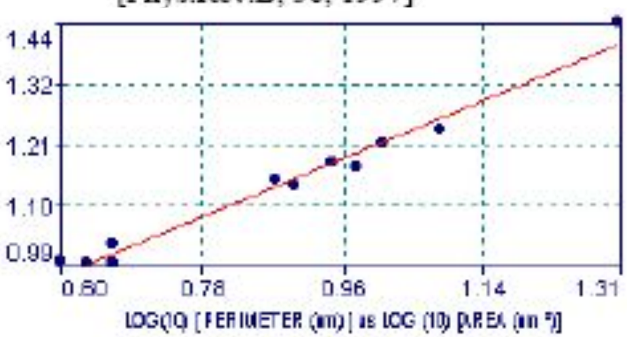
D - фрактальная размерность границы кластера ($1 \le D \le 2$)

Термическое Осаждение



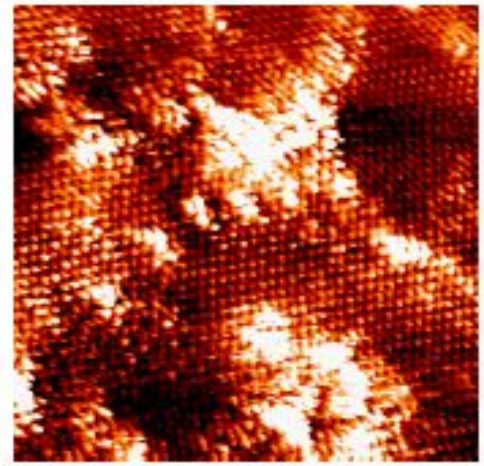
СТМ изображение ТО кластеров Pd/TiO_2, скан 100×100 Å, $n=3.8\times10^{14}$ ат.см^2

[Phys.Rev.B, 56, 1997]

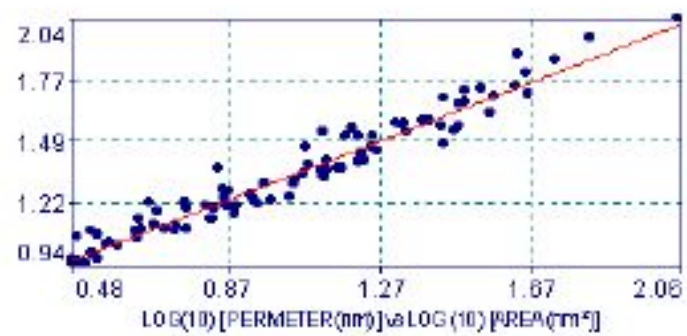


ТО: *D*≈1.02±0.02

Импульсное Лазерное Осаждение

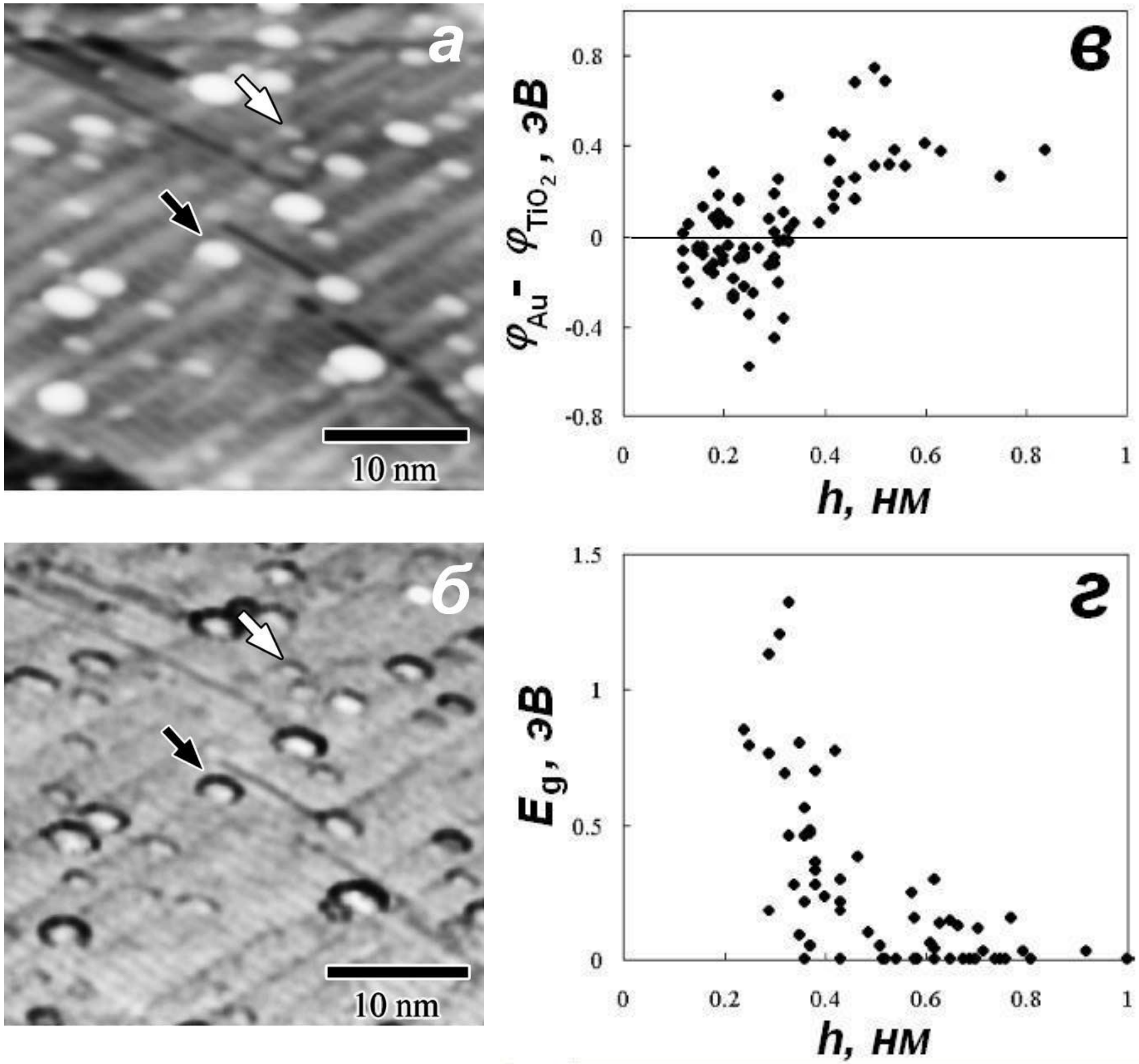


СТМ изображение ИЛО кластеров Au/ВОПГ, скан 100×100 Å $n=0.58\text{x}10^{14}$ ат/см².



ИЛО: *D*≈1.33±0.08

Измерение локальной работы выхода наноразмерных кластеров металла на поверхности подложки



СТМ изображения поверхности $TiO_2(110)$ с нанокластерами Au в топографическом режиме (*а*) и в режиме измерения работы выхода (*б*).

Экспериментальные зависимости разности работ выхода нанокластера Au и подложки $TiO_2(110)$ (*в*) и эффективной ширины запрещенной зоны *Eg* в нанокластере Au (*г*) от высоты кластера *h*, полученные методом СТС.

$$\frac{d\ln I}{dd} = -\frac{2\sqrt{m(\varphi_s + \varphi_t + eV)}}{\hbar}$$

[Y.Maeda, et al. // Appl.Surf.Sci. 222 (2004) p.409]