

# 压电陶瓷对 STM 图像的影响及计算机校正

江月山 王晓光 杨乃恒 高聚宁 刘 宁 杨海强 时东霞 庞世瑾  
(东北大学真空工程系 沈阳 110006) (中国科学院北京真空物理实验室 北京 100080)

1996年4月23日收到

## Computer Correction for Distorted STM Images Caused by Piezoceramics

Jiang Yueshan, Wang Xiaoguang, Yang Naiheng

(The Department of Vacuum Engineering, Northeastern University, Shenyang, 110006)

Gao Jiuning, Liu Ning, Yang Haiqiang, Shi Dongxia, Pang Shijing

(Beijing Laboratory of Vacuum Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100080)

**Abstract** In quite a few cases, the image distortion of a scanning tunneling microscope (STM) is essentially caused by thermal drift, the different piezoelectric constants between the X and Y scanners and the nonorthogonal scanning. A physical and mathematical model is proposed to correct such distortions, with satisfactory results. Using this model, one can perform the STM calibration with a known surface structure (for example, the highly oriented pyrolytic graphite surface) even in the presence of a drift. Using such a calibrated STM and the described model, it is possible to obtain the real STM image and make measurements for unknown surfaces on the atomic scale.

**Keywords** STM image, Piezoceramics, Model

**摘要** 在很多情况下,扫描隧道显微镜(STM)图像的几何形貌方面的误差主要是由压电陶瓷的漂移、X扫描器和Y扫描器的压电系数的不一致性和压电陶瓷扫描时的非正交性引起的。本文建立了一种物理数学模型来校正这些误差,取得了满意的结果。即使在漂移的状态下,也可以利用已知结构的表面对STM仪器进行校准(例如,高定向石墨表面)。用校准以后的STM仪器,可以获得样品表面的真实图像,并使对样品进行原子级的测量成为可能。

**关键词** 扫描隧道显微镜图像 压电陶瓷 模型

## 1 引言

扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope, STM)具有原子级分辨率,是实时观察样品表面形貌和态密度分布的有力工具<sup>[1]</sup>。在对样品表面的原子结构进行研究时,有时需要准确地知道原子间的间距和键角。在STM中是用压电陶瓷(PZT)控制针尖的位置和移动的,而压电陶瓷的特性随所加的扫描电压的大小、扫描电压的频率、偏压的大小、电压加载的时间、环境温度的变化而改变<sup>[2~7]</sup>,使显示的STM图像和实际扫描出的STM图像之间存在一定的差异,在一定程度上掩盖了样品表面的真实信息,并使图像中原子间的间距及键

角和实际的原子间的间距及键角有差异。因此有必要分析PZT的特性,找出扫描图像和样品表面实际形貌间的关系,恢复真实的图像,以反映样品表面的真实形貌。

## 2 成像原理和压电陶瓷的特性

### 2.1 成像原理<sup>[1]</sup>

由扫描隧道显微镜的测量原理可知,隧道电流 $I$ 与针尖和样品表面间的间距 $s$ 及针尖和样品的平均功函数 $\Phi$ 之间的关系为

$$I \propto U_b \exp(-A\Phi^{1/2}s) \quad (1)$$

式中 $U_b$ 为针尖和样品间的偏压; $A$ 为一个常数。针尖固定在压电陶瓷上,根据式(1),用电子反馈线路控制隧道电流 $I$ 恒定,在压电陶瓷的 $X, Y$ 方向上施加扫描电压,使针尖在样品表面进行二维扫描。当偏压 $U_b$ 恒定时,样品表面的起伏会引起间距 $s$ 的变化,从而使隧道电流 $I$ 变化。为使隧道电流 $I$ 恒定,反馈线路在 $Z$ 方向给压电陶瓷施加电压,使压电陶瓷伸缩,从而带动针尖移动,使 $s$ 恒定。此时用微机记录在 $Z$ 方向施加的电压值,并用计算机技术使其成像,这样就得到样品的表面形貌像。

### 2.2 压电陶瓷的特性

在理想的STM设计中,要求针尖在 $Z$ 方向的伸缩范围至少为 $1 \mu\text{m}$ ,精度约为 $0.001 \mu\text{m}$ ,在 $X$ 和 $Y$ 方向的扫描范围至少为 $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ ,精度应在 $0.01 \mu\text{m}$ 左右。要控制针尖在样品表面作如此高精度的扫描,目前普遍采用压电陶瓷作扫描控制器件。现以国产的CSPM-930型STM为研究对象,此STM仪器采用PZT-5H型压电陶瓷管作为三维扫描和控制器<sup>[8]</sup>。

在PZT的 $X, Y$ 方向上各加一个直流偏压,PZT带动针尖到样品表面相应的区域,然后在压电陶瓷的 $X$ 方向和 $Y$ 方向施加扫描电压,使针尖在样品表面扫描。这样,就要研究压电陶瓷的特性与所加的直流偏压的大小、扫描电压的大小、扫描电压的频率、电压加载的时间和环境温度的变化之间的关系。它们之间有如下的关系

$$\Delta L = U(l/d)K \quad (2)$$

式中 $\Delta L$ 为PZT的伸长量; $U$ 为施加的电压; $l$ 为管长度; $d$ 为管壁厚; $K$ 为压电系数,且可表示为

$$K = A[\theta(0) + cT^n]U + \rho \ln t \quad (3)$$

式中 $T$ 为温度; $t$ 为时间; $\rho \propto T^k$ (其中 $k$ 是一个常数,并和电压的大小和频率有关); $c, n$ 为与压电陶瓷材料和结构有关的常量; $\theta(0)$ 是温度为零时的值,它和温度没有关系,但和电压(大小和频率)有关。

式(2),(3)反映了PZT的伸长量与电压的大小、电压的加载时间和温度间的关系,但只能定性地说明它们间的关系,而且式中的参数与PZT的材料和结构有关。即使是同一种材料和结构的PZT扫描器,由于加工和制造方面的原因,式中参数间也有差异。因此必须对所用STM仪器中的PZT元件进行校准。压电陶瓷的位移和电压间大致呈二次多项式关系<sup>[9]</sup>。

## 3 模型

实际的PZT扫描单元在 $X, Y$ 方向的 $K$ 值略有不同并且它们之间存在非正交性。 $X, Y$ 轴的非正交性和 $K_x, K_y$ 的不同引起的误差如图1所示,由 $X$ 和 $Y$ 方向的漂移引起的误差如

图2所示。

用高定向石墨(HOPG)表面作为测试和检验 STM 仪器的标准<sup>[10]</sup>,以 HOPG 的(001)面作为研究对象,图3示出各坐标系间的关系示意图,扫描坐标系: $X'OY'$ ,显示坐标系: $X''OY''$ ,校正以后的坐标系: $XOY$ 。 $K_X$ 是与压电陶瓷 X 方向的压电系数有关的量; $K_Y$ 是与压电陶瓷 Y 方向的压电系数有关的量。 $X, Y$  方向的漂移值分别设为  $d_x, d_y$ 。这样就得到实际的位置( $X^*, Y^*$ )和像素位置( $x, y$ )间的关系式为

$$\begin{pmatrix} X^*(t, x, y) \\ Y^*(t, x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_X & 0 \\ 0 & K_Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_x t \\ d_y t \end{pmatrix} \quad (4)$$

设定 X 方向为快扫描方向, Y 方向为慢扫描方向,“扫完一条 X 线为一个时间单元”,每条线上有  $N$  个元素,则  $t(x, y) = y + x/N$ ,因此结合式(4)得

$$\begin{pmatrix} X^*(x, y) \\ Y^*(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_X + d_x/N & d_x \\ d_y/N & K_Y + d_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (5)$$

$N \gg d_x, N \gg d_y$ ,式(5)可简化为

$$\begin{pmatrix} X^*(x, y) \\ Y^*(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_X & d_x \\ 0 & K_Y + d_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (6)$$

旋转坐标系  $XOY$  一个角度  $\alpha$ (约定以顺时针方向的角度为正),使  $OX$  和  $OX'$  重合,得到坐标系  $X''OY''$ 。这样下式成立

$$\begin{pmatrix} X'' \\ Y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (7)$$

$X', Y'$  轴的非正交性,使  $OY'$  轴和  $OY''$  轴间存在一个夹角  $\beta$ (约定以顺时针方向的角度为正),结合式(6),坐标系  $X'OY'$  和坐标系  $X''OY''$  间存在下式关系

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_X & d_x \\ 0 & K_Y + d_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\tan\beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X'' \\ Y'' \end{pmatrix} \quad (8)$$

综合式(7),(8)得

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_X & d_x \\ 0 & K_Y + d_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\tan\beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (9)$$

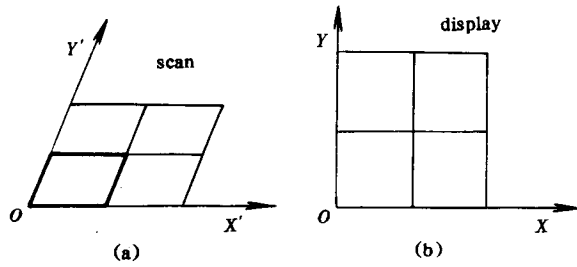


图1 扫描图像和显示图像示意图

Fig. 1 The scanning coordinate and the displaying coordinate

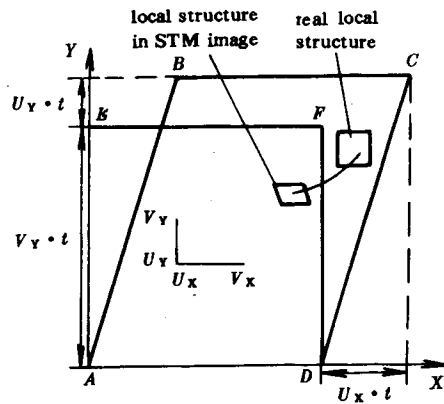


图2 扫描图像和漂移图像对照示意图

Fig. 2 Transformation of the scanned area shape and distortion of STM image by drift in XY plane of a scanner ( $U_x, U_y$ : the drift velocity,  $t$ : image recording time)

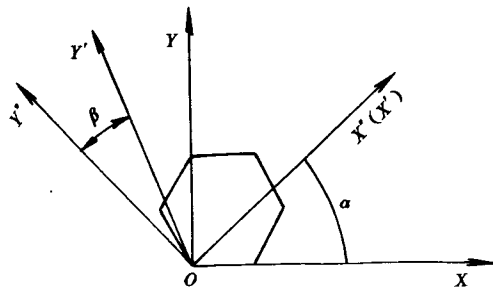


图3 各坐标系间的关系示意图

Fig. 3 Illustration of coordinate transformation

扫描范围小,所加的扫描电压就低。在低扫描电压的作用下,可以将压电陶瓷的位移和电压间的关系近似为线性关系。扫描范围为1 μm 时,非线性误差为30%;扫描范围为10 nm 时,非线性误差为0.5%<sup>[9]</sup>。本算法中将压电值近似为一个常量,即在 PZT 上所加的电压和伸长量间近似为线性关系,这样  $K_x, K_y$  亦近似为常量。要想得到原子像,扫描范围一般来说都很小,本文得到原子像的扫描范围为2.5 nm。所以将  $K_x, K_y$  近似为常量所带来的非线性误差小于0.5%,即测量 HOPG 的原子间距的误差小于0.001 nm,这样的精度足够了。为了计算方便,设  $K_x=1$ ,将  $K_y$  用  $K$  代替,这时  $K$  的含义则为:在相同的扫描电压作用下,压电陶瓷 Y 方向的位移和 X 方向的位移之比,即反映了压电陶瓷 X, Y 方向压电系数间的不一致性对 STM 图像的影响。这种简化算法不影响对 STM 图像的校正<sup>[11]</sup>,则式(9)可变为

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & d_x \\ 0 & K+d_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\tan\beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (10)$$

可将  $d_y$  包含到  $K$  中,因为在数学上无法知道  $(K+d_y)$  项的  $K$  对 STM 图像的影响占多少,  $d_y$  对 STM 图像的影响占多少。这种算法亦不影响对 STM 图像的校准<sup>[11]</sup>。如果确定想知道  $d_y$  的值为多少,可以通过比较连续扫描得出的几幅 STM 图像得到<sup>[10]</sup>。这样由式(10)可得

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & d_x \\ 0 & K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\tan\beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (11)$$

选取  $N$  个网格点  $\{(X'_i, Y'_i), i=1, \dots, N\}, \{(X_i, Y_i), i=1, \dots, N\}$ , 将它们代入式(11)中,用最小二乘法求出  $\alpha, \beta, K, d_x$  等参数值<sup>[12]</sup>。 $\{(X'_i, Y'_i), i=1, \dots, N\}$  直接在 STM 显示图像上选取,  $\{(X_i, Y_i), i=1, \dots, N\}$  按标准的网格点在 STM 图像上标定。

### 4 结果和讨论

选取 HOPG(001)面的 STM 像的数据点的值(如表1所示),可算出:

$$\alpha = -10.09^\circ, \quad \beta = -0.166^\circ, \\ K = 0.877, \quad d_x = -0.031.$$

将上述参数代入式(11),对 HOPG 的 STM 图像进行校正。图 4 示出对 HOPG 校正前后的 STM 图像,校正后的图像如图4(b)所示。

参数  $\alpha$  取决于样品安装时相对于压电陶瓷 X, Y 扫描方向的位置,模型中用它是为了标定方便。参数  $\beta, K, d_x$  由压电陶瓷扫描单元和所加的电压决定。用 HOPG 对 STM 仪器进行校准,得到  $\beta, K, d_x$  的值,并在完全相同的条件下扫描未知表面的原子像,再用  $\beta, K, d_x$  的值对未知原子结构的表面像进行校正,

表1 HOPG 图像相同点在坐标系  $X'OY'$  和坐标系  $XOY$  中的坐标对照图

Tab. 1 The coordinates of points in a distorted HOPG image and their corresponding coordinates in the lattice coordinate

校正点	$x'$	$y'$	$x$	$y$
A	1.689	0.257	2.000	0.000
B	3.021	-0.172	3.500	-0.866
C	4.753	2.404	6.000	1.732
D	2.634	2.748	3.500	2.598
E	5.669	4.981	7.500	4.330
F	1.833	4.981	3.000	5.196
G	4.552	6.412	6.500	6.062
H	3.121	6.942	5.000	6.928
I	0.086	7.128	1.500	7.794
J	7.014	6.985	9.500	6.062

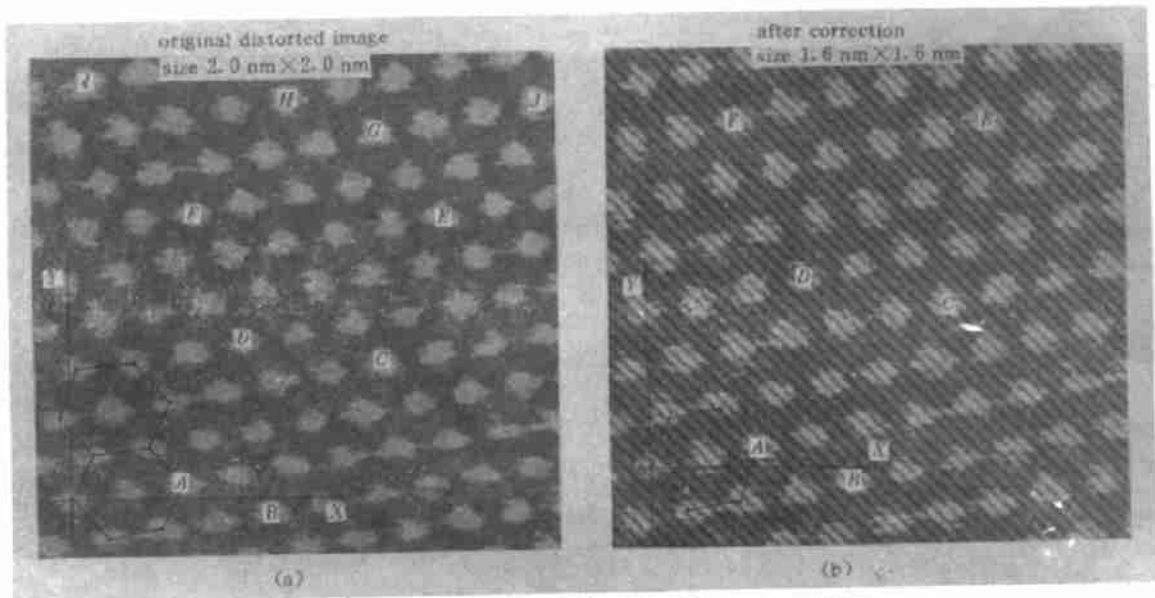


图4 HOPG 的 STM 原误差图像及校正后的图像

Fig. 4 STM image of HOPG for the original distorted and after correction

得到真实的表面原子形貌像。这样就消除了压电陶瓷的漂移,压电系数的一致性和压电陶瓷扫描时的非正交性给图像带来的误差,使对样品表面进行原子级的测量成为可能。

由上述可知,国产的 CSPM-930型 STM 仪器 的非正交角  $\beta$  和 X, Y 方向的漂移值都很小,这样得出的 STM 图像和样品表面原子的实际形貌间不会存在“面目全非”的差异。但是 X, Y 方向的压电系数的一致性却较显著。通过计算机软件对 STM 仪器进行校准后,就可以消除这些误差对 STM 图像的影响,再用国产的 STM 仪器照样能得出好的结果。如果用仪器测量这些校准参数,费用非常昂贵,而且精度也较差。这种方法简单经济,经过中国科学院北京真空物理室的实验验证,效果较好。在大范围扫描时的校正方法尚待进一步的研究。

#### 参 考 文 献

- 1 Binnig G *et al.* Phys Rev Lett, 1982; 49: 57
- 2 Basedow R W, Cocks T D. J Phys E Sci Instrum, 1980; 13: 840
- 3 Dieter W Pohl. IBM J Res Dev, 1986; 30(4): 417
- 4 Viera S. IBM J Res Dev, 1986; 30(5): 553
- 5 Simpson A M, Wolfs W. Rev Sci Instrum, 1987; 58(11): 2193
- 6 Poirier G E, White J M. Rev Sci Instrum, 1990; 61(12): 3917
- 7 Van de Leemput L E C *et al.* Rev Sci Instrum, 1991; 62(4): 989
- 8 Yao J E *et al.* Journal of Microscopy, 1988; 152: 671
- 9 Libloulle L *et al.* J Vac Sci Technol, 1991; B9(2): 655
- 10 Yurov V Y, Klimov A N. Rev Sci Instrum, 1994; 65(5): 1551
- 11 J Φ rgensen J F *et al.* J Vac Sci Technol, 1994; B12(3): 1698
- 12 Siegmund Brandt. Statistical and Computational Methods in Data Analysis. North-holland Publishing Company, 1976