

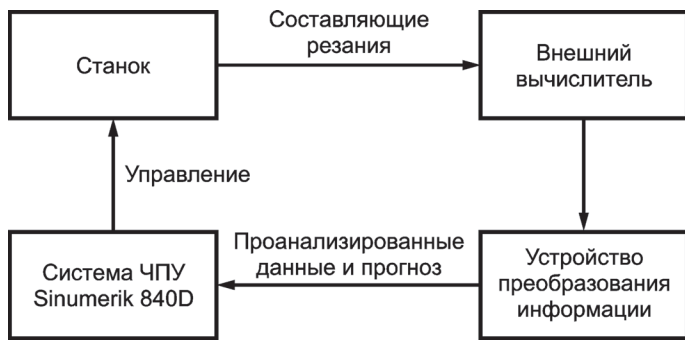


Рис. 3. Схема интеграции подсистемы диагностики и контроля в систему ЧПУ станка

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности № 11.1052.2014/К и государственного контракта № 14.593.21.0004 от 04.12.2014 г.

Л и т е р а т у р а

1. Григорьев С. Н., Синопальников В. А., Терешин М. В., Гурин В. Д. Контроль параметров процесса резания на основе диагностирования инструмента и заготовки // Измерительная техника. 2012. № 5. С. 46—48.

2. Grigoriev S. N., Gurin V. D., Volosova M. A., Cherkasova N. Y. Development of residual cutting tool life prediction algorithm by processing on CNC machine tool // Materialwissenschaft und Werkstofftechnik. 2013. V. 44. N. 9. P. 790—796.

3. Григорьев С. Н., Гурин В. Д., Черкасова Н. Ю. Повышение производительности фрезерования с помощью диагностирования состояния инструмента с учетом достоверности отображения состояния объекта по критерию его отказа // Вестник МГТУ «Станкин». 2011. № 3(15). С. 44—48.

4. Мартинова Л. И., Григорьев А. С., Соколов С. В. Диагностика и прогноз износа режущего инструмента в процессе обработки на станках с ЧПУ // Автоматизация в промышленности. 2010. № 5. С. 46—50.

5. Мартинов Г. М., Нежметдинов Р. А., Никишечкин П. А. Разработка средств визуализации и отладки управляющих программ для электроавтоматики, интегрированных в систему ЧПУ // Вестник МГТУ «Станкин». 2012. № 4(23). С. 134—138.

6. Мартинов Г. М., Мартинова Л. И. Формирование базовой вычислительной платформы ЧПУ для построения специализированных систем управления // Вестник МГТУ «Станкин». 2014. № 1(28). С. 92—97.

Дата принятия 15.04.2015 г.

539.3, 537.29

Интерпретация данных сканирующей туннельной микроскопии

А. М. МАНДЕЛЬ, А. И. ЛОСКУТОВ, В. Б. ОШУРКО, Г. И. СОЛОМАХО,
С. В. ВЕСЕЛКО

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»,
Москва, Россия, e-mail: arkadimandel@mail.ru

Рассмотрены явления, нарушающие однозначную связь силы туннельного тока с шириной туннельного промежутка при измерениях профиля поверхности в сканирующем туннельном микроскопе. Основное внимание уделено влиянию структуры поверхностных электронных состояний на туннельный ток.

Ключевые слова: сканирующая туннельная микроскопия, туннельный ток, поверхностные электронные состояния.

The phenomenon violating of unique relationship between the tunnel current strength and the width of tunnel gap at the surface profile measurements in a scanning tunnel microscope are discussed. The discussion has been focused on the influence of surface electronic states on tunnel current.

Key words: scanning tunnel microscopy, tunnel current, surface electronic states.

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) имеет два режима сканирования поверхности: при заданной силе туннельного тока I , которая поддерживается постоянной в цепи обратной связи, и при постоянном расстоянии между образцом и зондом. При втором режиме требуются достаточно гладкие поверхности, поэтому он применяется сравнительно редко. Первый режим работы используют чаще, и именно поэтому в данной работе будут рассмотрены особенности измерений этим способом и интерпретации получаемых результатов.

Теоретической предпосылкой для успешной реализации первого режима является простая и однозначная связь между силой туннельного тока I при постоянном напряжении U на зонде и промежутком туннелирования — расстоянием d между острием зонда и поверхностью. Известны и нередко обсуждаются факторы, нарушающие указанную связь: вариации площади области сканируемой поверхности, возникающие из-за ее сложной геометрии и морфологии; влияние осцилляций кантилевера; локальные изменения плотностей поверхностных электронных состояний и т. д. По мнению авторов характер поверхностных электронных состояний,

через которые происходит туннелирование электронов, недостаточно изучен. Как показывают эксперименты, симметрия поверхностных электронных состояний существенно влияет на вольт-амперные характеристики (ВАХ) туннельного тока и тем самым на зависимость $I(U)$ даже при постоянных d и площади, с которой туннелируют электроны.

В работах, посвященных теории СТМ [1—3], при анализе основных принципов туннельной микроскопии доминируют два различных подхода. Первый подход предпочитают экспериментаторы, инженеры и разработчики различных пособий по туннельной микроскопии [1, 2], базирующихся на результате [3], суть которого выражена формулой

$$I = A(U/d) \varphi^{1/2} \exp(-Bd\varphi^{1/2}), \quad (1)$$

где A, B — постоянные коэффициенты, φ — потенциал выхода электродов.

Из (1) следует, что если зафиксировать U и поддерживать постоянным I , то значение d также не должно меняться.

Перечислим основные физические предпосылки, при которых получено выражение (1).

1. Вероятность туннелирования оценивают в одномерном, квазиклассическом экспоненциальном приближении, т. е. предэкспоненциальный множитель, учитывающий влияние электрического поля на туннелирующие электроны, полностью игнорируют. По этой причине экспонента в (1) не содержит U . Этот результат имеет следующий физический смысл: небольшое электрическое поле не искажает форму потенциального барьера между поверхностью и зондом.

2. Расчет проводят для структуры металл—диэлектрик—металл, полагая, что поверхностные электроны латерально свободны (имеют две степени свободы, $q = 2$). Подвижность электронов ограничена в направлении нормали к поверхности, вдоль которой и происходит туннелирование. При расчете плотности туннельного тока интегрирование выполняют по двум импульсным переменным вдоль поверхности от нуля до бесконечности.

3. По причине, указанной в п. 2, предполагают, что связанные электроны равномерно заполняют поверхностные энергетические состояния вплоть до уровня Ферми — от него и отсчитываются потенциалы выхода контактирующих материалов. В практических расчетах можно принять, что энергетическая плотность ξ электронных состояний, «освобожденных» электрическим полем на поверхности зонда, прямо пропорциональна напряжению на зонде:

$$\xi \propto U. \quad (2)$$

Таким образом, действие электрического поля в данном приближении сводится лишь к сдвигу системы энергетических уровней квантовых состояний зонда. В результате ток в (1) прямо пропорционален напряжению.

4. Предполагают, что характер начальных и конечных поверхностных электронных состояний влияет на туннельный ток одинаково, поэтому замена начальных состояний на конечные, как и в матричных элементах переходов, не вызывает изменения туннельного тока. Следовательно, прямая ветвь ВАХ в таком приближении не должна отличаться от обратной. Однако известны эксперименты, в основном относящиеся к полупроводникам и сложным органическим соединениям, в которых фиксируют различие этих ветвей [4—6]. Этот факт даже описан в учебных пособиях по СТМ [7].

До сих пор не предложено аналитическое описание данной ситуации, достаточно простое для инженерных приложений. Наоборот, при изложении теории СТМ обычно подчеркивают, что туннельный ток пропорционален интегралу по энергии от свертки электронных плотностей начального и конечного состояний, что отражает кросс-симметрию квантовомеханических реакций.

5. Выражения Симмонса [3] первоначально сформулированы для плотности туннельного тока, поэтому переход к току неявно предполагает постоянство площади туннелирования электронов с поверхности образца. В расчетах этот факт обычно завуалирован, так как оценивают ток, протекающий через острие зонда, и полагают, что через «атомарный выступ» острия проходит примерно 90 % туннельного тока. Тем не менее, упоминания по поводу влияния геометрии и морфологии поверхности на площадь туннелирования встречаются достаточно часто [1, 2].

Второй подход к теории СТМ дают авторы [8] и их последователи. Его предпочитают теоретики, развивающие данную область квантовой физики. Однако результаты [8] менее пригодны для практического инженерного использования. Главный аналитический результат этой работы — оценка латерального разрешения СТМ в зависимости от радиуса кривизны острия зонда и расстояния до поверхности. Отметим, что в отличие от первого подхода во втором конфигурация острия зонда (сфера), ее размер и влияние на результаты измерений учтены в явном виде. Аналогом (1) в подходе, изложенном в [8], является более общее соотношение

$$I = C U \rho_S(0, E_F), \quad (3)$$

где C — постоянная, аналогичная A , т. е. не зависящая от U, φ, d ; $\rho_S(0, E_F)$ — электронная плотность (или плотность заряда), создаваемая поверхностными электронными состояниями образца вблизи поверхности Ферми в нулевой точке центра зонда; E_F — уровень Ферми.

Проанализируем второй подход, т. е. физический смысл выражения (3). Для удобства сопоставления результатов первого и второго подходов ниже сохраняется нумерация пунктов.

1. Какой-либо способ редукции волнового пакета в центре зонда (доставки электрона с поверхности образца в центр зонда) не предполагается. В частности, таким способом доставки может быть и туннельный эффект (автоэлектронная эмиссия через потенциальный барьер), как в (1). Авторы [8] вместо $\exp(-Bd\varphi^{1/2})$ в (1) вводят $\exp(-kd)$, причем коэффициент затухания k оценивают для каждого конкретного материала отдельно. Это, конечно, придает подходу гибкость, но чрезвычайно затрудняет разработку каких-либо общих способов и рекомендаций. По этой причине данный алгоритм применения СТМ не пользуется успехом у экспериментаторов.

2. Выражение (3) допускает формальное обобщение на случай разных материалов поверхности, но обычно с его помощью рассчитывают переход между двумя металлами.

3. Согласно [8] предполагается, что туннельный ток поступает на металлический электрод. Более того, в этом подходе изначально задается сферическая симметрия конечного состояния электрона и электрического поля зонда, поэтому постоянная C неявно содержит коэффициент $D(E_F)$ — плотность состояний зонда на единицу напряжения. По сути

$D(E_F)U$ эквивалентно ξ в (2) — числу состояний на единицу энергии eU (e — заряд электрона), освобожденных на зонде электрическим полем. В металле при равномерном заполнении уровней ниже уровня Ферми коэффициент $D(E_F)$ пропорционален напряжению. Упомянутая выше сферическая симметрия позволяет упростить матричные элементы переходов, изначально присутствующие в формулах туннельного тока, до вида $\rho_S(0, E_F)$.

4. В силу однозначно заданных направления тока от образца к зонду и структуры конечного состояния симметрию тока относительно начальных и конечных состояний электронов в данной теории проверить трудно. Произвольный подбор коэффициентов затухания в экспоненте, входящей в (3), дает возможность согласовать теорию с результатами эксперимента, но затрудняет получение конкретных ответов на интересующие авторов вопросы.

5. Электронная плотность $\rho_S(0, E_F)$ по определению равна сумме квадратов волновых функций (вероятностей пребывания поверхностных электронов в центре зонда) по всем поверхностным состояниям вблизи уровня Ферми:

$$\rho_S(0, E_F) = \sum_n |\psi_n(0)|^2 \delta(E - E_F),$$

где δ — дельта-функция Дирака. Формально гладкость поверхности и постоянство площади туннелирования электронов в данной модели не требуется. Сложную морфологию поверхности можно учесть при произвольном выборе коэффициентов затухания R .

Из сравнения двух подходов к интерпретации данных СТМ следует, что модель (1) является слишком жесткой и специализированной, а модель (3) — недостаточно конкретной и неоднозначной. Поэтому в настоящей работе построим уточненную модель при произвольном выборе минимального числа физически определенных параметров [6]. При этом необходимо учесть следующие факторы.

Во-первых, нужно отказаться от упрощенного выражения (1) и оценивать вероятность туннелирования с учетом предэкспоненциального коэффициента, зависящего от размерности (или числа степеней свободы) q поверхностного состоя-

ния, из которого туннелирует электрон [6, 9—11]. В металлах $q = 2$, но на поверхности полупроводников возможно образование линейных изомеров типа квантовых нитей, протяженных дефектов — ступеней и др. Электроны, локализуемые на таких структурах, имеют одну степень свободы $q = 1$. Нередко встречаются состояния, не имеющие степеней свободы, т. е. для $q = 0$. Они возникают вокруг точечных дефектов — ионов примеси и неколлективизированных s -электронов на поверхности полупроводника. Отметим, что конечные состояния острого зонда в (3) предполагаются именно такими. В связи с тем, что состояния поверхностных электронов могут быть смешанными, эффективное значение q может отличаться от целого. Это отмечалось и в экспериментах [6].

Во-вторых, электроны равномерно заполняют энергетические уровни вплоть до уровня Ферми только в металлах. В полупроводниках электроны туннелируют чаще всего через поверхностные состояния в зоне проводимости. Соответственно энергетическая плотность состояний, освобожденных электрическим полем, описывается более общей, чем (2), формулой $\xi \propto U^\beta$, где β — степень равномерности заполнения конечных состояний.

Для металла $\beta = 1$, тогда как для полупроводника β может значительно отличаться от единицы. Это обстоятельство создает естественные предпосылки для различия прямой и обратной ветвей ВАХ туннельного тока. Физическая причина такого кажущегося нарушения кросс-симметрии — различный характер влияния электрического поля на начальное и конечное состояния.

В результате вместо (1) наша модель приводит к следующей зависимости туннельного тока при малых напряжениях:

$$I = K\phi^{\beta/2+3q/4-3/2} \frac{U^{2-q/2}}{d^{1+\beta-q/2}} \exp(-Bd\phi^{1/2}), \quad (4)$$

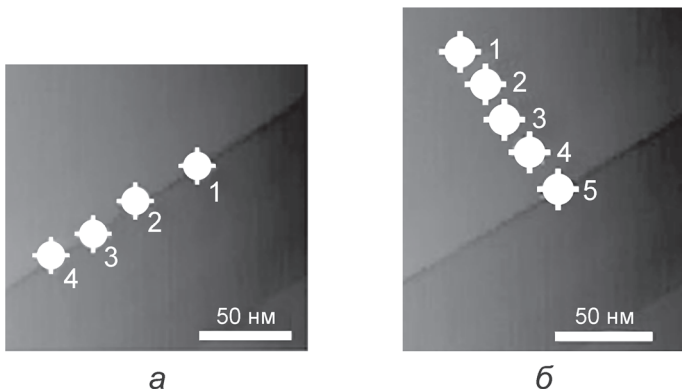
где K — новая размерная постоянная; для перехода металл—металл ($q = 2, \beta = 1$) полученное выражение сводится к (1).

Кратко опишем эксперимент по проверке предложенной модели. Его проводили на образцах высокоориентированного графита HOPG, содержащих протяженные ступени различной высоты (линейные дефекты). На рисунке показаны точки, в которых измерения ВАХ проводили как на краю ступени, так и на разных расстояниях от него. В табл. 1 описаны положения этих точек относительно параллельных ступеней.

Таблица 1

Расположение точек измерения ВАХ на плоскости

Точка	Расстояние от края нижней ступени (точка 5), нм	Расстояние от края верхней ступени, нм
1	94	52
2	72	74
3	48	97
4	26	117
5	0	144



Расположение точек на поверхности графита HOPG, в которых измеряли вольт-амперные характеристики:

а — на краю ступени, б — на ее плоскости

На основании (4) полученные ВАХ аппроксимировали кривой

$$I = aU + bU^{3/2} + cU^2, \quad (5)$$

причем первое слагаемое описывает вклад в туннельный ток двумерных (латерально свободных), второе — одномерных (локализованных на линейных структурах) и третье — нульмерных (локализованных на точечных притягивающих центрах) электронных состояний. Коэффициенты в (5) определяли методом наименьших квадратов. Результаты такой аппроксимации показаны в табл. 2, 3, где знаком «+» обозначены ветви, в которых электроны движутся от образца к зонду, «–» — соответственно в обратном направлении.

Таблица 2

Коэффициенты аппроксимационной кривой для точек на краю ступени

Точка	Ветвь	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
1	+	0,2895	0,3158	0,3947
1	–	0,9821	0,0060	0,0120
2	+	0,3241	0,2990	0,3769
2	–	0,9743	0,0069	0,0294
3	+	0,4984	0,3271	0,1745
3	–	0,9791	0,0004	0,0246
4	+	0,1216	0,0946	0,7838
4	–	0,9923	0,0010	0,0069

Таблица 3

Коэффициенты аппроксимационной кривой для точек на плоскости ступени

Точка	Ветвь	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
1	+	0,5650	0,0003	0,4346
1	–	0,8730	0,0397	0,0873
2	+	0,5224	0,0003	0,4773
2	–	0,8196	0,0074	0,1730
3	+	0,7127	0,0034	0,2840
3	–	0,8561	0,0227	0,1212
4	+	0,2937	0,0093	0,6970
4	–	0,8769	0,0077	0,1154
5	+	0,3069	0,2354	0,4577
5	–	0,9789	0,0017	0,0231

Основные результаты проведенной серии измерений сводятся к следующему. Во-первых, прямые и обратные ветви существенно различаются по вкладу, прежде всего, одномерных состояний, причем для прямой ветви коэффициент *b* значительно больше, во-вторых, по мере удаления от ступени этот вклад убывает, что соответствует предложенной модели туннельного тока и выражению (4). Заметим, что описываемый эффект искажения ВАХ около линейного дефекта давно известен [12], однако чаще всего рекомендуется его не учитывать и проводить измерения не ближе 5–20 нм от краев ступеней [13]. Аналогичные вопросы рассмотрены в [14, 15].

В заключение оценим, насколько однозначна зависимость (1). Влияние площади, с которой туннелируют электроны, по мнению авторов, преувеличено. Ее увеличение не-

сколько приводит к уменьшению напряженности электрического поля на поверхности образца. Согласно (4) указанную однозначность могут нарушать локальные вариации потенциала выхода ϕ , числа степеней свободы поверхностных электронных состояний q и степени равномерности заполнения конечных электронных состояний β . Считается, что оценить ϕ можно с помощью модуляции расстояния d и измерения малой переменной составляющей туннельного тока [1, 2, 8]. Величина β является интегральной, поэтому трудно ожидать ее локальных вариаций. Кроме того, поскольку в режиме сканирования поверхности реализуется прямой туннельный ток, β определяется известными (и неизменными) свойствами металлического зонда. Главную проблему составляют локальные вариации q , которые могут быть значительными, так как связаны со структурными дефектами поверхности и, вероятно, будут влиять на локальное значение работы выхода. Симметрия поверхностных электронных состояний дает ценную информацию об электронной структуре поверхности, в частности, о поверхности полупроводников, структурах типа квантовых нитей и квантовых точек — перспективных элементах современной микроэлектроники. Ввиду того, что туннельный ток в (4) по-разному зависит от q , ϕ , существует теоретическая возможность их независимого оп-ределения.

Выводы. Рассмотрены два наиболее распространенных подхода к интерпретации данных СТМ, предложена и экспериментально проверена новая модель туннельного тока, позволяющая разработать оригинальный подход, частично объединяющий положительные свойства предшествующих моделей и дающий дополнительную информацию об исследуемой поверхности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-07-00562) и Минобрнауки РФ (государственное задание № 1678 и Соглашение № 14.593.21.0004 от 04.12.2014 г., идентификационный номер проекта RFMEFI59314X0004). Измерения проведены на оборудовании Центра коллективного пользования МГТУ «СТАНКИН».

Л и т е р а т у р а

1. **Bhushan B.** Nanotribology and Nanomechanics. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2008.
2. **Миронов В. Л.** Основы сканирующей зондовой микроскопии. Н. Новгород: Ин-т Физики Микроструктур РАН, 2004.
3. **Simmons J. G.** Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film. // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. P.1793—1803.
4. **Bohme T., Simpson C. D., Mullen K., Rabe J. P.** Current-voltage characteristics of a homologous series of polycyclic Aromatic Hydrocarbons // Eur. J. Chemistry A. 2007. V. 13. P. 7349—7357.
5. **Веселко С. В., Лоскутов А. И., Мандель А. М., Ошурко В. Б., Соломахо Г. И.** Особенности туннельного тока с поверхности полупроводника в окрестности линейного дефекта // Нанотехника. 2014. Т. 37. № 1. С. 67—72.
6. **Mandel A. M., Grigoryev S. N., Loskutov A. I., Oshurko V. B., Solomakhov G. I.** Cold Emission Model of Scanning Tunneling Microscopy. // J. Comput. Theor. Nanosci. 2015. V. 12. N. 11. P. 1—8.

7. Филатов Д. О., Круглов А. В. Исследование поверхности твердых тел методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ): Лабораторная работа. Н. Новгород: Нижегородского государственного университета, 2001.

8. Tersoff J., Hamann D. Theory of the scanning tunneling microscope // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. P. 805—813.

9. Мандель А. М., Лоскутов А. И., Ошурко В. Б., Соломахо Г. И., Федотова Ю. А. Изучение поверхностных электронных состояний в полупроводниках посредством холодной эмиссии в сканирующих туннельных микроскопах // Успехи современной радиоэлектроники. 2013. № 11. С. 23—28.

10. Григорьев С. Н., Мандель А. М., Ошурко В. Б., Соломахо Г. И. Об определении эффективной фрактальной размерности нанопокровов с помощью магнитного поля // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. В. 24. С. 74—80.

11. Мандель А. М., Лоскутов А. И., Ошурко В. Б., Соломахо Г. И. О возможности определения локальной фрактальной размерности поверхности по вольтамперным характеристикам туннельного тока // Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологии. 2013. № 2 (298). С. 56—61.

12. Niimi Y., Matsui T., Kambara H., Tagami K., Tsukada M., Fukuyama H. Scanning tunneling microscopy and spectroscopy of the electronic local density of states of graphite surfaces near monoatomic step edges // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. P. 085421—085430.

13. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K. Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge // J. Phys. Soc. Jpn. 1996. V. 65. P. 1920—1923.

14. Бычихин С. А., Галямов М. О., Потемкин В. В., Степанов А. В., Яминский И. В. Сканирующий туннельный микроскоп — измерительное средство нанотехники // Измерительная техника. 1998. № 4. С. 58—61.

15. Кузин А. Ю., Тодуа П. А., Панов В. И., Орешкин А. И. Особенности применения упорядоченных пленок молекул фуллеренов для калибровки сканирующих туннельных микроскопов при измерении геометрических параметров объектов // Измерительная техника. 2013. № 2. С. 10—15.

Дата принятия 15.04.2015 г.

621.9.08

Автоматическая коррекция объемных геометрических погрешностей программно-управляемых измерительных и технологических систем

В. И. ТЕЛЕШЕВСКИЙ, В. А. СОКОЛОВ

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»,
Москва, Россия, e-mail: vitel@stankin.ru

Рассмотрен метод лазерной коррекции геометрических погрешностей многокоординатного оборудования с программным управлением с применением калмановской концепции «наблюдения и управления». Для наблюдения за многокоординатной системой предложено использовать многофункциональную лазерную измерительную информационную систему, а для управления точностью — постпроцессор управляющих программ.

Ключевые слова: многокоординатные системы, объемная точность, лазерная коррекция.

The method of laser correction of geometric errors for multicoordinate program controlled equipment with application of Kalman's concept of «Observation and control» is considered. The multicoordinate system observation the use of versatile laser measuring system is proposed, and for accuracy control — the control programs postprocessor.

Key words: multicoordinate systems, volumetric accuracy, laser measurements.

Современное машиностроение характеризуется принципиально новыми тенденциями развития [1—4]. Во-первых, следует отметить интеграцию измерительных и технологических операций в едином технологическом процессе, что существенно повышает производительность и точность обработки изделий. Оснащение технологического оборудования средствами измерений, например измерительными головками, в настоящее время становится «стандартной опцией поставки», предлагаемой производителями. Во-вторых, повышаются требования к точности изготовления и, как следствие, к точности измерений деталей машиностроения. Каж-

дые десять лет допуски на производство деталей ужесточаются на 1—2 квалитета, что соответствует увеличению точности в 1,6—2,5 раза [3, 4]. В-третьих, во многих отраслях машиностроения (аэрокосмической, энергетическом машиностроении, автомобилестроении и др.) шире применяются детали сложных геометрических форм с более высокими эксплуатационными и эргономическими характеристиками, чем детали с простыми поверхностями (плоскими, цилиндрическими, сферическими, коническими и др.). При этом возрастают требования не только к точности позиционирования отдельных рабочих органов технологического и измеритель-