

规则表面形貌的分形和多重分形描述

孙 霞 吴自勤

(中国科学技术大学基础物理中心, 合肥 230026)

(2001 年 3 月 28 日收到, 2001 年 6 月 22 日收到修改稿)

以 6 种具有典型特征的生成元构造了 6 个具有相同 rms 粗糙度的规则表面, 用变分法计算了这些表面的分形维数, 结果表明, 分形维数可以将具有相同 rms 粗糙度的表面区分开来, 它定量表征了表面的总体形貌。进一步将多重分形的方法应用到对这些表面的分析中, 发现多重分形谱可以全面反映表面概率的分布特征。多重分形谱的宽度可以定量表征表面的起伏程度, 多重分形谱最大、最小概率子集维数的差别可以统计表面最大、最小概率处的数目比例。

关键词: 粗糙度, 分形维数, 多重分形谱

PACC: 0555, 6116P

1 引 言

薄膜表面的结构和形貌与薄膜的生长机理以及许多表面现象(如吸附、反射等)密切相关, 同时表面的粗糙程度还直接关系到薄膜的机械、电学、光学等方面的性质和功能^[1]. 因此, 对薄膜表面粗糙化机制及特性的研究由于具有理论和应用的重要意义而一直是薄膜研究领域的重要课题。

传统上用以描述粗糙表面的参数主要有斜率、曲率、峰密度及粗糙度等. 其中粗糙度的概念最为常用. 薄膜表面的粗糙度 σ 定义为被考察区域高度的方差, 即各点偏离该区域平均高度位置的方均根, 因此也称为 rms 粗糙度:

$$\sigma = \left[\sum (h_{ij} - h_{av})^2 / (N - 1) \right]^{1/2},$$

其中 h_{ij} 为点 (i, j) 处的高度, N 为所考察区域总点数, $h_{av} = \sum h_{ij} / N$ 为该区域内点的平均高度。

近年来, 随着表面探针技术的进步和分辨率的提高, 人们发现, 在微米以下尺度, 粗糙度无法可靠地描述薄膜的粗糙表面, 它的局限性主要体现在: 1) rms 粗糙度依赖于考察的范围, 在两个不同的尺度上考察粗糙度时结果可能会有显著的差别; 2) rms 粗糙度无法体现空间频率的差别; 3) rms 粗糙度还依赖于测量仪器的分辨率. 提高仪器的分辨率, 粗糙表面会不断出现更新的粗糙细节, 而引起粗糙度值的改变。

为此, 有必要在表面描述中引入其他的度量方

法. Spanos 等人^[2]模拟了一维分数布朗运动 (fBm) 曲线, 发现观察尺度从 L 降到 $L/2$ 时, fBm 曲线的 rms 粗糙度变化很大, 分别为 12.065 和 20.733, 而其分形维数却保持 1.70 不变. 借鉴于分形描述具有标度不变性的优点, 他们将分形的方法扩展到二维粗糙表面的表征中, 对 Si 表面原子力显微镜图像用变分法求其分形维数, 并以此定量表征表面的粗糙程度. 分形的特点之一是自相似性^[3], 将分形理论引入到对薄膜表面的表征中可以很好地克服 rms 粗糙度的缺点, 它不依赖于观察尺度和仪器的分辨精度, 并能体现出表面的粗糙结构在不同尺度下具有自相似性的本质. 然而简单分形维数对所研究的对象也只能作整体上的表征, 无法体现出更全面更精细的信息, 多重分形可以弥补这一缺陷。

本文用一系列生成元模拟了一些具有相同 rms 粗糙度的二维规则表面, 并用分形和多重分形的方法对它们进行分析, 结果表明简单分形维数可以将具有相同 rms 粗糙度的表面区分开来, 而进一步用多重分形的方法描述薄膜表面, 可以全面反映薄膜表面粒子生长概率的分布. 多重分形谱的宽度可以定量表征薄膜表面的起伏程度, 多重分形谱最大、最小概率子集维数的差别可以统计粒子沉积在峰、谷位置的数目比例. 本文通过对规则表面多重分形谱的分析, 讨论了多重分形谱在表面描述中的意义。

2 规则表面的构造

参照 Cantor 集的生成方法, 二维规则表面也可

以用一些生成元逐步迭代而成,具体构造步骤如下:每操作一次,将原有正方形区域等分为4个小区域,高度概率分布分别为 P_1, P_2, P_3 和 P_4 ,其中 $P_1 + P_2 + P_3 + P_4 = 1$,即二维规则表面的生成元是 $P_1/P_2/P_3/P_4$ 分布;接着再在4个小区域内作一次类似的操作,得到16个区域,高度分布概率有10种,如图1所示.这样操作 k 次后(或一代一代生成到 k 代后),总区域数有 4^k 个,每个小区域的尺寸 $\epsilon = (1/2)^k$,其高度分布概率分别为 $P_i(\epsilon) =$

$P_1^m P_2^s P_3^t P_4^{k-m-s-t}$, $m, s, t = 0, 1, 2, 3, \dots, k$ ($m, s, t \geq 0$).具有相同概率的区域数分别为 $N(P_i) = k! / [m! s! t! (k - m - s - t)!]$. P_i 和 $N(P_i)$ 形成一个集(整个集应该延伸到 $k = \infty$).为了与实际生长的薄膜相比较,可将概率转化为高度,本文中将所有生成元构造的表面都转化成平均高度为20nm的薄膜.在图2(a)和(b)中分别以生成元0.26/0.24/0.24/0.26和0.26/0.29/0.28/0.17为例示出由其构造出的规则表面的灰度图.

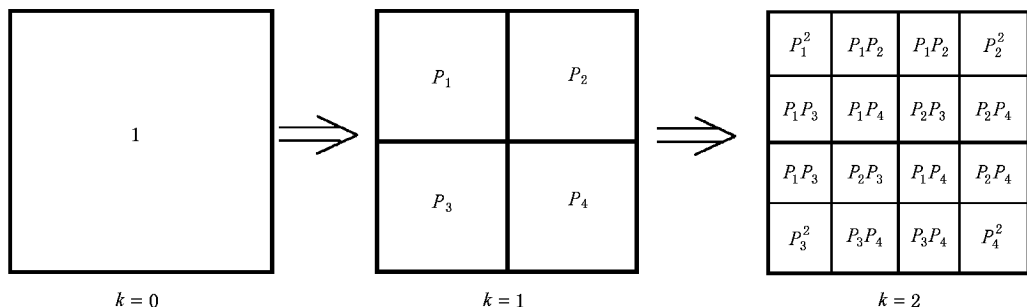
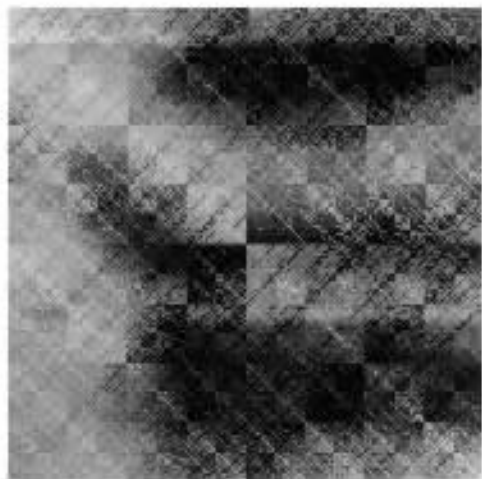
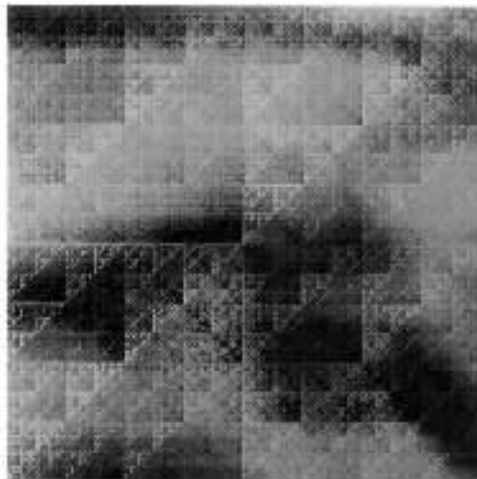


图1 二维规则分形表面构造示意图



(a) 0.26/0.24/0.24/0.26



(b) 0.26/0.29/0.28/0.17

图2 由二维规则表面生成元模拟的灰度图

3 简单分形维数和多重分形谱的计算

分维的计算方法多种多样,归纳起来主要的方法有面积-周长法^[4]、功率谱法^[5]、结构函数法^[6]、方差法^[7]和变分法^[8].本文采用变分的方法.变分法最初是由 Dubuc^[8]在一维情况下引入的,后又推广到二维^[9],它的原理是利用包围粗糙表面所需的体积

$V(\epsilon)$ 与尺寸 ϵ 之间满足幂函数关系: $V(\epsilon) \sim \epsilon^{3-D_s}$.因此求出不同尺寸下的体积 $V(\epsilon)$,作对数-对数曲线 $\ln[V(\epsilon)\epsilon^3] - \ln(1/\epsilon)$,斜率即为曲面的分形维数 D_s .体积 $V(\epsilon)$ 的具体求法如下:在 $N \times N$ 的二维点阵中,以点 (i, j) 为中心,作边长为 ϵ 的正方形区域,定义曲面的上表面和下表面分别为该正方形区域内的局域最高点 u_n 和局域最低点 b_n ,包围表面的体积近似为上表面和下表面之间的体积: $v_i(\epsilon) = (u_n -$

b_n). 不断改变中心点的位置并对所有中心点的 $v(\epsilon)$ 求平均, 就可得到尺寸为 ϵ 下的体积 $V(\epsilon)$.

多重分形谱可用盒计数法进行计算, 将表面划分为许多尺寸为 ϵ (ϵ 小于 1) 的小盒子, P_{ij} 为第 (i, j) 个小盒子中的分布概率, 如果概率分布属于多重分形, 则有

$$P_{ij}(\epsilon) \sim \epsilon^\alpha, \quad (1)$$

α 一般称为奇异指数, 它反映了分形体各个小盒子尺寸 ϵ 下高度分布概率随 ϵ 变化的各个子集的性质, α 越大, 子集的概率越小 (因为 ϵ 小于 1). 若把分形体上以 α 标记的子集中具有相同概率的盒子数记为 $N_\alpha(\epsilon)$, 一般 $N_\alpha(\epsilon)$ 随 ϵ 的减小而增大, 如高度分布属于多重分形, $N_\alpha(\epsilon)$ 可写为

$$N_\alpha(\epsilon) \sim \epsilon^{-\tau(\alpha)}, \quad (2)$$

可以采用统计物理中常用的矩表示法求 $f(\alpha)$ - α 定义 q 阶配分函数 $\chi_q(\epsilon)$ 后可得

$$\chi_q(\epsilon) = \sum P_{ij}(\epsilon)^q = \epsilon^{\tau(q)}, \quad (3)$$

$$\tau(q) = \lim [\ln \chi_q(\epsilon) / \ln \epsilon], \quad (4)$$

即从 $\ln \chi_q(\epsilon) - \ln \epsilon$ 的斜率中得到 $\tau(q)$ 曲线. $\ln \chi_q(\epsilon) - \ln \epsilon$ 曲线的线性范围称为标度不变范围. 只有具有标度不变性并在标度不变范围内才能求得准确的多重分形谱. 理想的规则多重分形具有无限的标度不变范围. 作下列勒让德变换可得

$$\alpha = [\tau(q)] / dq, \quad (5)$$

$$f(\alpha) = \alpha q - \tau(q), \quad (6)$$

$f(\alpha)$ - α 为表面的多重分形谱. 规则分形的多重分形谱可以通过 (1) 和 (2) 式的推导求出解析表达式, 也可以通过 (3)-(6) 式的统计物理方法由计算机数值求解. $f(\alpha)$ - α 一般为钟罩状和钩状, 分形谱的宽度 $\Delta\alpha = \alpha_{\max} - \alpha_{\min}$, 相应的最大、最小概率子集分形维数的差别 $\Delta f = f(\alpha_{\min}) - f(\alpha_{\max})$.

4 结果与讨论

表 1 列出 6 种具有不同典型特征的生成元, 第一、二两种生成元为 $P : P : P(1-3P)$, 前一种 $P < 1-3P$, 后一种 $P > 1-3P$; 第三、四种生成元为 $P_1 : P_2(1-P_1-P_2)2 : (1-P_1-P_2)2$, 前一种 $P_1, P_2 > (1-P_1-P_2)2$, 后一种 $P_1, P_2 < (1-P_1-P_2)2$; 第五种生成元为 $P : P : 1-P : 1-P$; 第六种生成元为 $P_1 : P_2 : P_3(1-P_1-P_2-P_3)$. 很显然, 由于生成元的不同, 构造的表面会有很大区别. 然而, 如表 1

中第三列所示, 这里所选择的 6 种生成元虽然具有不同的特征, 但由它们构造的表面却具有相同的 rms 粗糙度 ($\sigma = 7.63$), 也就是用传统的 rms 粗糙度不足以描述这些表面形貌间的差别.

表 1 6 种具有不同典型特征的生成元及其 rms 粗糙度和简单分形维数

	生成元	rms(σ)	D_0
I	0.2322/0.2322/0.2322/0.3034	7.63	2.39763
II	0.2678/0.2678/0.2678/0.1966	7.63	2.57023
III	0.27/0.29/0.22/0.22	7.63	2.42684
IV	0.21/0.23/0.28/0.28	7.63	2.4781
V	0.2808/0.2808/0.2192/0.2192	7.63	2.4420
VI	0.25/0.28/0.27/0.20	7.63	2.53225

与文献 [2] 相似, 也将分形的方法引入到对这些规则表面的表征中. 表 1 中第四列是用变分法计算得的简单分形维数. 可以看出, 虽然 rms 粗糙度的数值相同, 然而由不同的生成元构造的表面分形维数有明显差别. 生成元 4 个概率中大概率占主导地位时构造的表面维数较大, 如 II, VI, 小概率占主导地位时则维数较小, 如 I. 这在一定程度上反映了表面的总体形貌特征.

表 1 所列 6 种生成元构造的表面具有不同的概率分布特征. 而求简单分形维数时, 一方面在每一个局域正方形区域内体积的计算采取了近似的方法, 另一方面某一尺寸 ϵ 下的体积是对所有 $\epsilon \times \epsilon$ 大小的区域的体积作平均, 而没有考虑不同位置处的差别. 因此所得到的分形维数对表面也只是作整体上的描述, 不能全面反映概率分布的特征. 与之不同的是多重分形根据实际的高度计算各区域的概率, 统计所有的概率差别, 并通过加权处理将表面分成许多子集 α 来研究, 每一个子集代表一种类型的概率 $P(\epsilon) \sim \epsilon^\alpha$.

图 3 示出上述 6 种生成元的多重分形谱, 它们的参数列于表 2. 多重分形谱是呈钩状或钟罩状. 然而对不同的生成元, 多重分形谱有不同的形状和参数. 第 I, II 类生成元 4 个概率中有三个概率相同, 小概率占主要地位时 $f(\alpha_{\min}) = 0$, $f(\alpha_{\max}) = \ln 3 / \ln 2$, $\Delta f = -\ln 3 / \ln 2$, $f(\alpha)$ 呈右钩; 而大概率占主要地位时则正好相反, $f(\alpha_{\min}) = \ln 3 / \ln 2$, $f(\alpha_{\max}) = 0$, $\Delta f = \ln 3 / \ln 2$, $f(\alpha)$ 呈左钩. 第 III, IV 类生成元 4 个概率中有且只有两个概率相同, 它们的多重分形谱也呈右

钩和左钩,然而 Δf 的值发生变化,分别为 -1 和 1 . 第 V 类生成元 4 个概率中概率两两相同,其 $f(\alpha_{\min}) = f(\alpha_{\max}) = 1, \Delta f = 0, f(\alpha)$ 呈钟罩状. 第 VI 类生成元 4 个概率互不相同, $f(\alpha)$ 虽也呈钟罩状,但其 $f(\alpha_{\min})$ 和 $f(\alpha_{\max})$ 都等于零. 具有这 6 种特征的生成

元,不管其内部概率的数值如何变化,相应多重分形谱的 Δf 值都保持各自原有的值,亦即多重分形谱的形状是与生成元的特征密切相关的,而生成元又从根本上决定了概率分布,因此多重分形谱的形状反映了概率分布的特征.

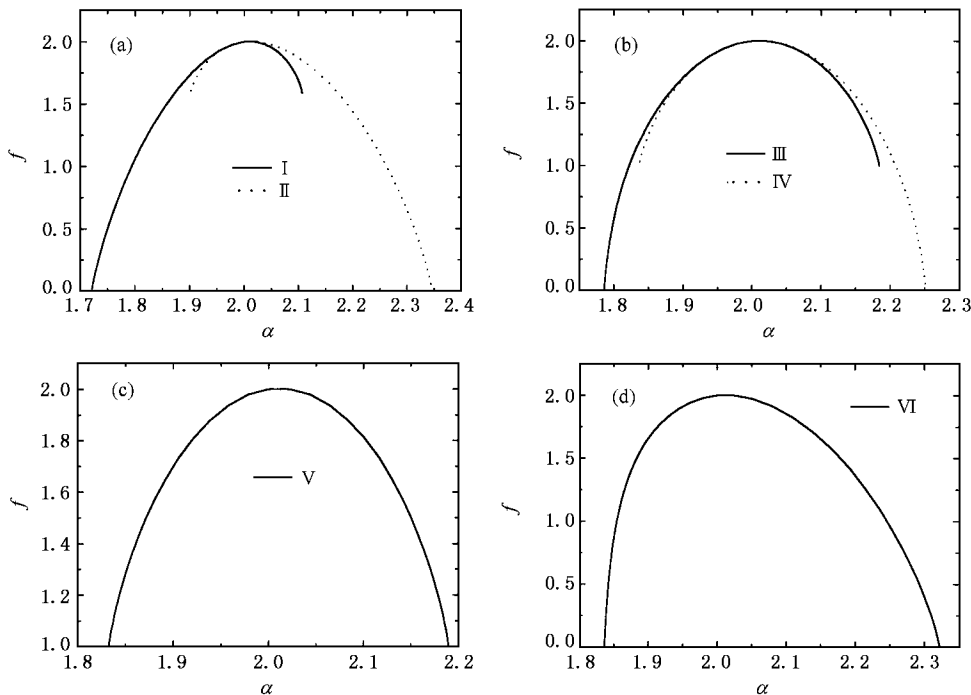


图 3 表 1 中 6 种生成元的多重分形谱

表 2 表 1 中 6 种生成元构造的表面多重分形谱参数

生成元	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta\alpha$	Δf
I	1.72071	0	2.10656	1.58496	0.38585	-1.58496
II	1.90077	1.58496	2.34666	0	0.44589	1.58496
III	1.78587	0	2.18442	1	0.39855	-1
IV	1.83650	1	2.25154	0	0.41504	1
V	1.83238	1	2.18968	1	0.35730	0
VI	1.83650	0	2.32193	0	0.48543	0

由 $N_\alpha \sim \epsilon^{-f(\alpha)}$ 式,可得 $f(\alpha) = -\ln N / \ln \epsilon, \Delta f = f(\alpha_{\min}) - f(\alpha_{\max}) = -(\ln N_{\alpha_{\min}} - \ln N_{\alpha_{\max}}) / \ln \epsilon = -(\ln N_{p_{\max}} - \ln N_{p_{\min}}) / \ln \epsilon = -\ln(N_{p_{\max}} / N_{p_{\min}}) / \ln \epsilon$. 也就是 Δf 的大小还可以统计最大、最小概率数目间的比例,应用到实际的薄膜生长中, Δf 反映了薄膜表面粒子沉积在峰、谷位置数目的比例,因而也就反

映了表面岛屿的形状. 由于 ϵ 小于 1, Δf 小于 0 则概率最大子集的数目小于概率最小子集的数目,粒子更多地沉积在谷位置,相应的岛屿比较尖锐;相反 Δf 大于零粒子更多地沉积在峰位,岛屿比较圆润;而 Δf 等于零时粒子沉积在峰、谷位置的概率相等.

多重分形谱的宽度用 $\Delta\alpha$ 来表示,从表 2 中的数据可以看出不同生成元的 $\Delta\alpha$ 也不一样,图 4 中以最大、最小概率比值的对数为横坐标画出了 $\Delta\alpha$ 的变化, $\Delta\alpha$ 随 $\ln(P_{\max} / P_{\min})$ 的增大而增大,并随之呈线性变化. 由公式 $P \sim \epsilon^\alpha$, 有 $\alpha = \ln P / \ln \epsilon, \Delta\alpha = \alpha_{\max} - \alpha_{\min} = \ln P_{\min} / \ln \epsilon - \ln P_{\max} / \ln \epsilon = \ln(P_{\min} / P_{\max}) / \ln \epsilon$, 因此多重分形谱宽度定量表征了最大、最小概率间的差别. 在实际的薄膜生长中, $\Delta\alpha$ 定量表征了薄膜表面的沉积粒子的起伏程度.

由于多重分形谱的计算是在尺寸不断变化的过程中进行的,所得到的 Δf 和 $\Delta\alpha$ 并不是对 $\ln(N_{p_{\max}} / N_{p_{\min}})$ 和 $\ln(P_{\max} / P_{\min})$ 的简单重复,而是在具有标度

不变性前提下的统计结果.这一点在随机的分形中的作用显得尤为重要,因为规则分形具有理想的标

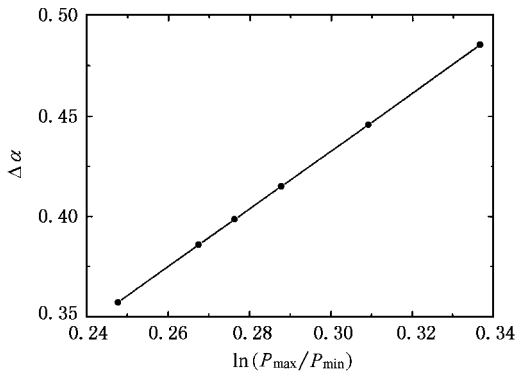


图 4 $\Delta\alpha$ 随最大、最小概率比值的变化

度不变性,其 Δf 和 $\Delta\alpha$ 始终与 $\ln(N_{P_{\max}}/N_{P_{\min}})$ 和 $\ln(P_{\max}/P_{\min})$ 成正比,而在随机分形中,概率的分布不可避免地有一些涨落,由实际的某一尺寸下计算的 $\ln(N_{P_{\max}}/N_{P_{\min}})$ 和 $\ln(P_{\max}/P_{\min})$ 因为这些涨落的缘故而可能与统计结果差别很大,此时用多重分形的方法得到的统计结果更能反映表面的特征^[10].

总之,由于具有标度不变性,分形和多重分形对表面的描述克服了 rms 粗糙度的缺点.简单分形维数是对表面形貌的整体表征,而多重分形谱全面反映了表面概率的分布.多重分形谱的宽度可以定量表征表面的起伏程度,多重分形谱最大、最小概率子集维数的差别可以统计表面最大、最小概率处的数目比例.

[1] N. E. Lee, D. G. Cahill, J. E. Greene, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 7876.
 [2] L. Spanos, E. A. Irene, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A12**(1994), 2646.
 [3] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (3rd ed.) (Freeman, New York, 1983).
 [4] B. B. Mandelbrot *et al.*, *Nature* **308**(1984), 721.
 [5] H. Iwasaki, T. Yoshinobu, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 8282.
 [6] N. Almqvist, M. Rubel, P. Wienhold, *Thin Solid Films*, **270**(1995), 426.

[7] M. V. H. Rao, B. K. Mathur, K. L. Chora, *Appl. Phys. Lett.*, **65**(1994), 124.
 [8] B. Dubuc, *Phys. Rev.*, **A39**(1989), 1500.
 [9] B. Dubuc, S. W. Zucker, C. Tricot *et al.*, *Proc. Roy. Soc. London*, **A425**(1989), 113.
 [10] X. Sun, G. Xiong, Z. X. Fu, Z. Q. Wu, *Acta Phys. Sin.*, **49**(2000), 854 (in Chinese) [孙 霞、熊 刚、傅竹西、吴自勤, *物理学报* **49**(2000), 854].

FRACTAL AND MULTIFRACTAL DESCRIPTION OF SURFACE TOPOGRAPHY

SUN XIA WU ZI-QIN

(*Centre for Fundamental Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China*)

(Received 28 March 2001 ; revised manuscript received 22 June 2001)

ABSTRACT

Six regular surfaces with same root-mean-square (rms) roughness are constructed by six typical generators . Variation method is used to calculate the fractal dimensions of these surfaces . The results suggest that fractal dimension can describe total topography of a surface quantitatively and can distinguish the surfaces which have same rms roughness . Multifractal method is further used in the analysis of surface . It is found that multifractal spectrum can reflect the overall characteristic of the distribution of probability of a surface . The width of multifractal spectrum can characterize the degree of the undulation of a surface quantitatively . The difference of the fractal dimensions between the maximum probability and the minimum probability subsets can give a statistical result of the ratio between the numbers of lowest and highest sites .

Keywords : roughness , fractal dimension , multifractal spectrum

PACC : 0555 , 6116P