

ZnO 薄膜原子力显微镜图像的多重分形谱

孙 霞¹⁾ 熊 刚²⁾ 傅竹西²⁾ 吴自勤¹⁾

¹⁾ 中国科学技术大学基础物理中心, 合肥 230036)

²⁾ 中国科学技术大学物理系, 合肥 230036)

(1999 年 10 月 8 日收到)

用原子力显微镜测定了 Si 衬底, 未退火和退火 ZnO 薄膜的表面形貌, 为了获得 AFM 图像的多重分形谱, 比较了 5 种计算局域高度分布概率的方法(相对平均高度的方差、相对平均高度的绝对偏离、以粗糙表面最低点为基准面、以一定深度为基准面和以薄膜平均底面为基准面), 发现前三种方法在小概率的子集起主要作用时不能很好地满足标度不变性, 后两种方法则能很好地满足标度不变性, 其范围可达三个数量级, 并且可以对不同样品进行定量的比较.

PACC: 0555, 6116P, 6820

1 引 言

分形具有不依赖于观察尺度的标度不变性, 它已被广泛用于复杂图形和复杂过程的表征. 对于一个分形体, 可以用简单的分形维数对它进行描述, 但分形维数与计算的方法有关. 主要计算方法有功率谱法^[1]、面积-周长法^[2]、结构函数法^[3]、变分法^[4]、方差法^[5]. Almqvist^[6]分别用面积-周长法、方差法和结构函数法计算了置于等离子体中的石墨样品的原子力显微镜 (AFM) 图像的分形维数, 结果表明后两种方法能给出较可信的分形维数, 但和已知分形维数的理论粗糙表面相比, 仍有系统的误差.

简单的分形维数对所研究的对象只能作一整体上的表征, 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. Lee 和 Stanley^[7]在扩散限制凝聚 (DLA) 团簇周界的生长概率的多重分形中发现, 在小概率的子集起主要作用时(配分函数中的权重因子 $q \leq -1$ 时)不存在标度不变性, 并且他们把标度不变到标度改变的过渡称为“相变”. 李华等^[8]用多重分形分析了固体内部和表面二次电子的空间分布, 发现一次电子能量、元素的原子序数等引起的二次电子空间分布的差别可以用多重分形谱的参数来表征. 他们也发现, 小概率子集起主要作用时, 多重分形谱也出现异常. 在配分函数和测量尺寸的对数-对数图上出现两段不同的线性区, 而且在小尺寸范围内出现异常分形谱. Sánchez 等^[9]对激光辐照快速晶化的 GeAl 薄膜的电镜图像的多重分形研究中

发现, 负 q 范围内的广义分形维数的误差太大, 不能利用. 王兵等^[10]对二维衬底上 SOS 模型生长的薄膜表面的研究表明, 沉积过程可用多重分形表征, 他们发现在配分函数、测量尺寸的对数-对数图上也出现非线性现象. Lee 等^[11]研究了在三个不同的原子簇的分形表面上的反应概率的多重分形谱, 用它来表征复杂结构对局域反应概率的影响, 他们得出, 用降低噪声方法平滑掉一部分过于偏小的概率, 使多重分形谱宽度有明显减小. 我们^[12]在对 Au/a-Ge 双层膜分形晶化的透射电镜 (TEM) 图像进行分析时发现类似现象, 即概率不断减小时上述对数-对数曲线上出现异常, 他们提出舍去少量异常小的分布概率的方法来局部消除异常.

我们以前的工作得出: 要得到准确的多重分形谱, 首先需要考察配分函数的标度不变性, 即对数-对数图中配分函数和测量尺度的线性. 和简单分数维类似, 多重分形中需要的概率也有不同的确定方法. 本文以 ZnO 薄膜的 AFM 图像为研究对象, 对比了 5 种多重分形谱的确定方法, 并对它们的标度不变性给出了评价.

2 实 验

ZnO 薄膜样品是以 Si(100) 为衬底, 在 $\text{Ar}:\text{O}_2 = 1:1$ 的气氛中通过对 Zn 靶进行反应溅射法制备的. 溅射功率为 3 kW/10 mA, 衬底温度为 300°C, 样品厚度约为 200 nm, 对其中两个样品进行了 800°C, 1000°C 退火处理, 用 AUTOPROBECP 型原子力显

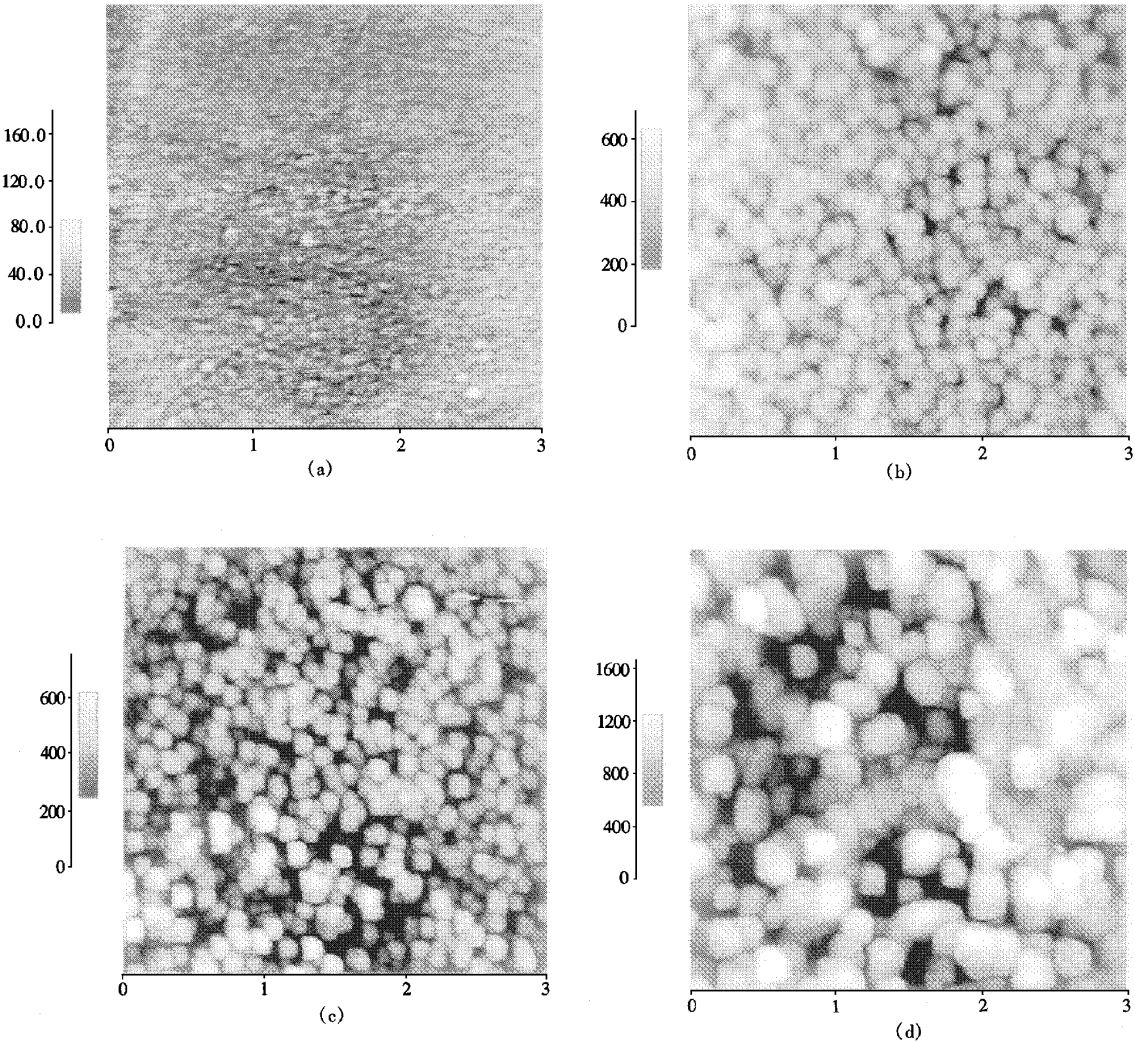


图1 (a) Si衬底 (b) 未退火 ZnO ,(c) 800℃退火 ZnO ,(d) 1000℃退火 ZnO 的 AFM 图

显微镜 (AFM) 以恒力接触模式测量了薄膜表面的形貌. 图 1(a)(b)(c)(d) 分别是 Si 衬底、未退火处理和 800℃、1000℃退火的 ZnO 样品的 AFM 图.

3 多重分形谱的计算

用盒计数法进行多重分形谱的计算, 将 AFM 图按衬底表面或薄膜平均表面划分为许多尺寸为 ϵ ($\epsilon < 1$) 的小盒子, P_{ij} 为第 (i, j) 个小盒子中薄膜高度分布概率 (如以衬底表面算起它就是粒子的沉积概率), 如薄膜的局域高度分布属于多重分形, 则有

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

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 愈大, 子集的概率愈小 (因为 $\epsilon < 1$). 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

$$N_\alpha(\epsilon) \sim \epsilon^{-f(\alpha)}. \tag{2}$$

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

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

$$\tau(q) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\ln \chi_q(\epsilon) / \ln \epsilon], \tag{4}$$

即从 $\ln \chi_q(\epsilon) / \ln \epsilon$ 的斜率中得到 $\tau(q)$ 曲线. 理想的规则多重分形的 $\ln \chi_q(\epsilon) / \ln \epsilon$ 曲线有严格的线性关系, 而随机多重分形也应该有较好的线性关系, 否则将在 $q \leq -1$ 处出现异常. 相应地, 广义分形维数 D_q 被定义为

$$D_q = \tau(q) / (q - 1). \tag{5}$$

作下列勒让德变换可得

$$\alpha = d[\tau(q)] / dq, \tag{6}$$

$$f(\alpha) = \alpha q - \tau(q). \tag{7}$$

理想规则多重分形的 τ - q 曲线的斜率随 q 由小到大而不断减小,如果随机多重分形的 $\tau(q)$ 曲线的斜率先增大后减小, $f(\alpha)$ 就会出现异常. 多重分形谱 $f(\alpha)$ - α 反映了薄膜高度不均匀分布的性质. $f(\alpha)$ - α 一般为钟状和钩状,分形谱的宽度 $\alpha_{\max} - \alpha_{\min}$ ($\Delta\alpha$) 反映了概率分布的范围. $\Delta\alpha$ 越大,概率分布越不均匀.

4 结 果

如上所述,求多重分形谱时,首先要计算出概率分布 $P_{ij}(\epsilon)$,可以有不同的求概率的方法.可以类似于求粗糙度的方法,以薄膜平均表面为基准,如以下的方法 1)和 2).也可以以薄膜的衬底表面或衬底表面以上一定高度的面(低于粗糙表面的最低点)作为基准,如以下的方法 3) 4)和 5).这里对几种方法进行了比较,以确定符合标度不变性的方法.

1) 以偏离平均高度的方差值求概率

$$P_{ij} = |h_{ij} - \bar{h}|^2 / \sum |h_{ij} - \bar{h}|^2,$$

其中 h_{ij} 为第 (i, j) 个盒内高度, \bar{h} 为所有盒子内的平均高度.

以 1000℃ 退火的 ZnO 样品为例,图 2(a)(b)中画出了相应的 $\ln\chi_q(\epsilon)$ - $\ln\epsilon$ 和 τ - q 曲线.可以看出, $q < 0$ 时 $\ln\chi_q(\epsilon)$ 随 $\ln\epsilon$ 的非线性明显.对 $q = -50$ 的 $\ln\chi_q(\epsilon)$ - $\ln\epsilon$ 作线性拟合,所得该曲线的相关系数为 -0.9936 ,这表明标度不变性不好.由(6)式可见, α 值可以通过求某一 q 值处 τ - q 曲线的斜率得

出.从图 2(b)所示的 τ - q 曲线上可以看出, $q = 0$ 两侧曲线的斜率发生明显变化, $q > 0$ 时 τ - q 的斜率较小, $q < 0$ 斜率显著增大.从而使图 2(c)上 f - α 曲线最高点(对应于 $q = 0$)右侧 α 的间隔较大.另外两个 ZnO 薄膜样品及 Si 衬底有类似的结果.它们的多重分形谱一起表示在图 2(c)中.相应的多重分形谱的参数及方均根 rms 粗糙度 $\sigma = \left[\sum (h_{ij} - \bar{h})^2 / (N - 1) \right]^{1/2}$ 列于表 1 中.表中 $\Delta f'$ 和 $\Delta f''$, 分别被定义为 $\Delta f' = f_0 - f(\alpha_{\min})$, $\Delta f'' = f(\alpha_{\max}) - f_0$, f_0 是最或然子集所对应的维数(即 f - α 曲线的最高点).

可以看出, f - α 曲线不光滑,在 f - α 曲线最高点的右侧 α 有相当大的间隔,另外 f - α 曲线在 α_{\max} 附近还出现异常.这是由于 τ - q 曲线的斜率在 q 降低到一定值时其斜率不再随 q 的下降而增加,反而有所减小.表 2 中以 1000℃ 退火 ZnO 样品为例列出了部分 $q, \tau(q), d\tau/dq$ 数据.可以看出, q 降到 -5 时, $d\tau/dq$ 由逐渐增加趋势转为逐渐减小趋势,从而在多重分形谱上表现出 α_{\max} 附近的异常.从反映概率分布不均匀程度的多重分形谱的宽度 $\Delta\alpha$ ($\Delta\alpha = \alpha_{\max} - \alpha_{\min}$) 来看,四个样品中衬底的 $\Delta\alpha$ 最大,不同温度退火 ZnO 样品的 $\Delta\alpha$ 没有明显差别.而直接从 AFM 图中可以看出, Si 衬底表面平整,而对 ZnO 样品, AFM 图随着退火温度的升高,表面愈来愈粗糙(rms 粗糙度愈来愈大).显然,由这种求概率方法得到的多重分形谱的宽度不反映表面粗糙程度的差别.

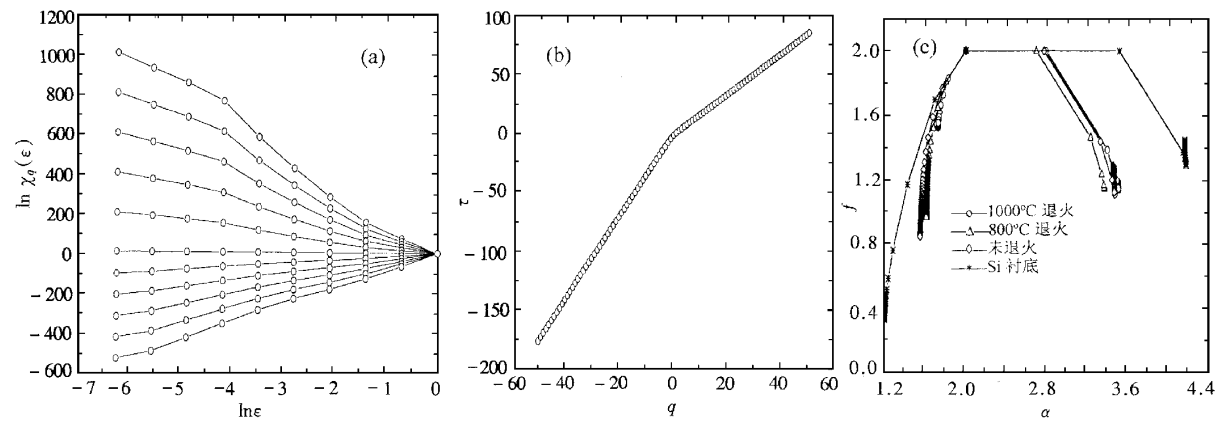


图 2 以偏离平均高度的方差值求概率后得到的 (a) 1000℃ 退火 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)$ - $\ln\epsilon$ 曲线 (b) τ - q 曲线和 (c) 三个 ZnO 薄膜样品及 Si 衬底的多重分形谱

表 1 图 2 中多重分形谱的参数

	σ/nm	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta f'$	$\Delta f''$	$\Delta\alpha$
1000℃	21.87	1.731	1.541	3.515	1.137	0.459	0.863	1.784
800℃	9.44	1.639	1.301	3.369	1.151	0.699	0.849	1.730
as-deposited	7.88	1.583	1.197	3.477	1.107	0.803	0.893	1.894
Si-sub	0.80	1.250	0.580	4.169	1.294	1.420	0.706	2.919

表 2 1000℃ 退火 ZnO 样品的部分 $q, \tau, d\tau/dq$ 数据

q	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8
τ	-8.18732	-11.68331	-15.19613	-18.71098	-22.22563	-25.73998	-29.25408
$d\tau/dq(\alpha)$	3.40092	3.49599	3.51281	3.51485	3.51465	3.51435	3.5141

2) 以偏离平均高度的绝对值求概率

$$P_{ij} = |h_{ij} - \underline{h}| / \sum |h_{ij} - \underline{h}|.$$

图 3(a)(b)是这种计算方法得到的 1000℃ 退火的 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 和 $\tau-q$ 曲线.可以看出,这种计算方法使 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 的线性略有改善, $q=-50$ 时 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 的相关系数为 -0.9977 ,表明标度不变性仍不够好. $\tau-q$ 曲线上(图 3(b)) $q=0$ 两

侧曲线的斜率仍有明显变化.另外两个 ZnO 样品和 Si 衬底也有类似的结果.图 3(c)是它们的多重分形谱.相应的多重分形谱参数列于表 3 中.与方法 1)的结果相比,每一个样品的 $\Delta\alpha$ 几乎缩小了一半,而其 $f-\alpha$ 的形状及相互间的变化趋势与图 2(c)十分相似. $f-\alpha$ 最高点右侧相邻 α 的间隔仍很大, $f-\alpha$ 曲线上 α_{\max} 附近的异常也没有消失.四个样品中仍以衬底的 $\Delta\alpha$ 为最大,而 ZnO 样品的 $\Delta\alpha$ 相差不大.

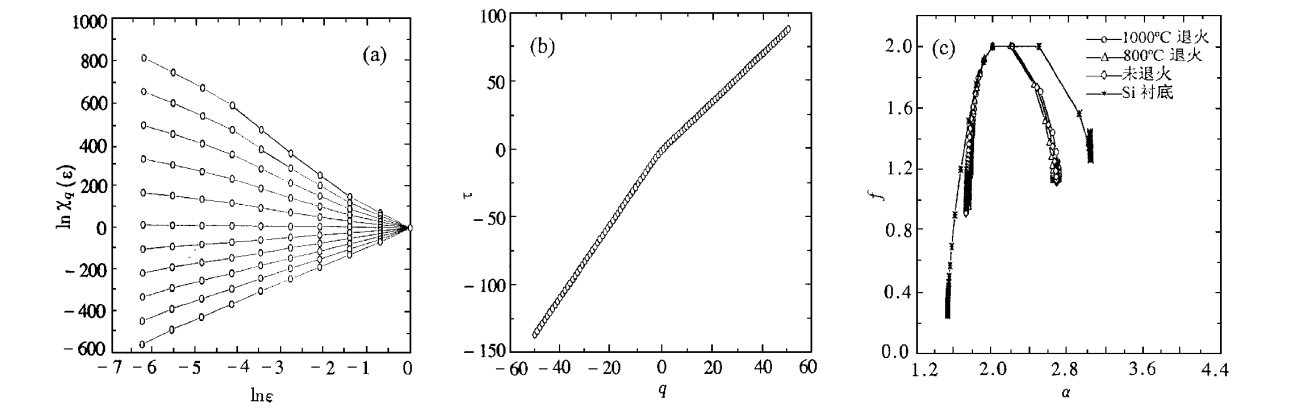


图 3 以偏离平均高度的概率后得到的(a)1000℃ 退火 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线和(b) $\tau-q$ 曲线(c)三个 ZnO 薄膜样品及 Si 衬底的多重分形谱

表 3 图 3 中多重分形谱的参数

	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta f'$	$\Delta f''$	$\Delta\alpha$
1000℃	1.802	1.523	2.716	1.167	0.477	0.833	0.914
800℃	1.781	1.435	2.648	1.166	0.565	0.834	0.867
as-deposited	1.754	1.364	2.689	1.122	0.636	0.878	0.935
Si-sub	1.549	0.503	3.045	1.265	1.497	0.735	1.495

3) 以粗糙表面最低点的高度 h_{\min} 为基准求概率

$$P_{ij} = (h_{ij} - h_{\min}) / \sum (h_{ij} - h_{\min}),$$

其中 h_{\min} 是表面最低点的高度.

图 4(a)(b)是以 1000℃ 退火的 ZnO 样品为例

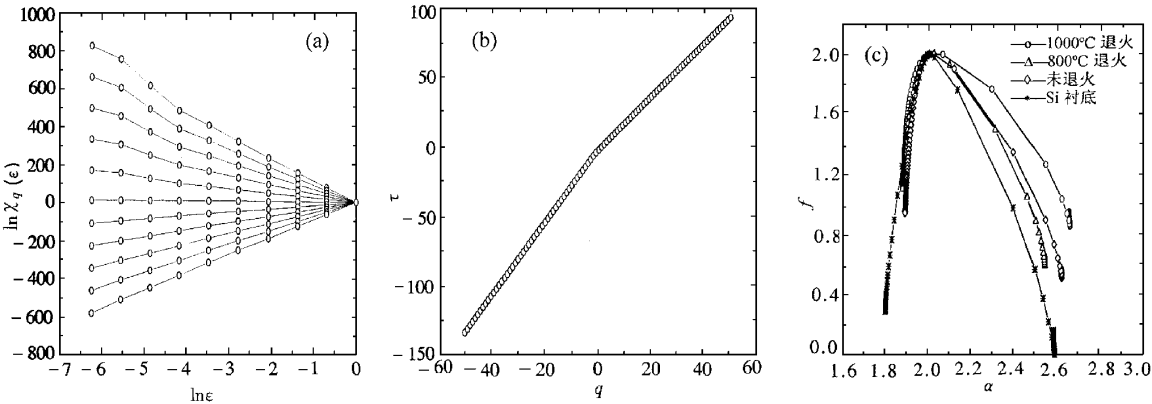


图 4 以表面最低点的高度为基准求概率得到的 (a) 1000℃ 退火 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线和 (b) $\tau-q$ 曲线 (c) 三个 ZnO 薄膜样品及 Si 衬底的多重分形谱

表 4 图 4 中多重分形谱的参数

	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta f'$	$\Delta f''$	$\Delta\alpha$
1000℃	1.900	1.603	2.661	0.856	0.397	1.144	0.761
800℃	1.897	1.456	2.537	0.682	0.544	1.318	0.640
as-deposited	1.919	1.567	2.621	0.545	0.433	1.455	0.702
Si-sub	1.822	0.667	2.586	0.060	1.333	1.940	0.764

用这种方法得到的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 和 $\tau-q$ 曲线. 从 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线可以看出, $q < 0$ 时的线性有改进, 但 $q = -50$ 的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 的相关系数为 0.9952, 标度不变性仍不够好. 这种方法得到的四个样品的多重分形谱也一起示于图 4(c) 中. 相应的 $f-\alpha$ 的参数列于表 4 中. 可以看出, $f-\alpha$ 曲线比方法 1 和 2 中的 $f-\alpha$ 光滑些, 这是 $\tau-q$ 曲线 (图 4(b)) 在 $q = 0$ 两侧的斜率差别有所缩小的缘故. Si 衬底的 $\Delta\alpha$ 也大大降低, 但仍比 ZnO 样品的 $\Delta\alpha$ 大, 不同温度退火的 ZnO 样品的 $\Delta\alpha$ 依旧没有明显差异. 这就是说多重分形谱宽度的变化和表面粗糙度的变化还是不一致.

4) 将基准面设在样品统一的深度 h_f 后求概率

$$P_{ij} = (h_{ij} - h_f) / \sum (h_{ij} - h_f),$$

其中 h_f 是所选定基准面的高度, 不同的样品 (包括衬底) 取相同的平均表层厚度.

表层的选择要合理, 取得太薄, 可能有某些点的局域高度低于基准面而出现负值. 由于所研究的薄膜样品的高度分布近似高斯分布, 以 ZnO 1000℃ 退火样品的 5 倍的半高半宽作为统一的深度 (98 nm),

保证所有表面高度都大于 h_f . 从而求出不同的粗糙表面偏离同一基准面的概率. 这种方法相当于将样品都切出了相同体积. 对不同的样品来说, 由于所取表层厚度一样, 从而可以实现不同样品 (包括衬底) 间的可比性.

图 5(a) 和 (b) 是这种计算方法所得的 1000℃ 退火的 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 和 $\tau-q$ 曲线. 与前面三种方法不同的是, 从图 5(a) 可以看出, $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线族的线性很好, $q = -50$ 时 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 的相关系数达 -0.999 (理想直线的相关系数为 -1), 因此这种方法很好地满足标度不变性. 相应的 $\tau-q$ 曲线 (图 5(b)) $q = 0$ 两侧没有明显的斜率上的突变, 从而使图 5(c) 上 $f-\alpha$ 曲线较光滑, 且由于 $\tau-q$ 曲线的斜率随 q 的下降单调增加使 $f-\alpha$ 曲线 α_{\max} 附近的异常现象也消失了. 另两个 ZnO 样品和 Si 衬底的多重分形谱也一起表示在图 5(c) 中. 相应的 $f-\alpha$ 的参数列于表 5 中. 比较不同样品的多重分形谱宽度发现, 衬底的 $\Delta\alpha$ 远小于 ZnO 样品的 $\Delta\alpha$, 退火使 $\Delta\alpha$ 显著增加, 这是与对 AFM 图的观察是一致的, 也与 rms 粗糙度相吻合. 这表明由这种求概率方法计算的多重分形谱的宽度能反映表面粗糙程度的差别.

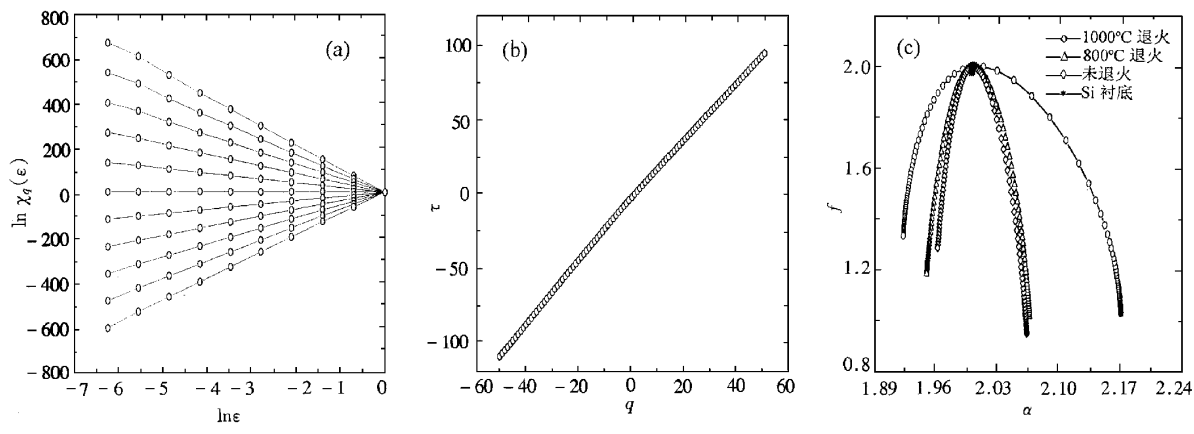


图 5 统一表层厚度求概率后得到的 (a) 1000℃ 退火 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线和 (b) $\tau-q$ 曲线 (c) 三个 ZnO 薄膜样品及 Si 衬底的多重分形谱

表 5 图 5 中多重分形谱的参数

	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta f'$	$\Delta f''$	$\Delta\alpha$
1000℃	1.9222	1.3359	2.1708	1.0313	0.6641	0.9687	0.2486
800℃	1.9497	1.1868	2.0673	1.0207	0.8132	0.9793	0.1176
as-deposited	1.9623	1.2882	2.0645	0.9529	0.7118	1.0471	0.1022
Si-sub	1.9992	1.9771	2.0006	1.9848	0.0229	0.0152	0.0014

5) 用薄膜平均底面为基准面求概率

$$P_{ij} = h_{ij} / \sum h_{ij} ,$$

其中 h_{ij} 是第 (i,j) 个盒子内的高度. 对 Si 衬底也取和 ZnO 同样深度处 (200 nm) 的平面为基准得到 h_{ij} . 以 1000℃ 退火的 ZnO 样品为例, 图 6 (a) (b) 是这种计算方法得到的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 和 $\tau-q$ 曲线. $q = -50$ 时 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 的相关系数为 -1.0000 , 表现出很好的标度不变性. $\tau-q$ 曲线上斜率的差别更小, $f-\alpha$ 曲线 (图 6 (c)) 光滑. 图 6 (c) 中一起画出了三个 ZnO

样品和 Si 衬底的多重分形谱, 相应的参数列于表 6 中. 与方法 4) 相比, 每个样品的 $\Delta\alpha$ 都有所减小, 但相互间变化趋势一样, 由这种方法计算出的 $\Delta\alpha$ 的变化同样表明了 ZnO 样品的表面比 Si 衬底粗糙得多, 退火使粗糙度进一步上升. 实际上粒子的沉积过程就是从衬底表面开始生长, 这样的 P_{ij} 表示薄膜的局域生长概率, 因此这种方法所对应的物理图像比较清晰, 这种方法对于不同样品表面粗糙度的比较也是可行的.

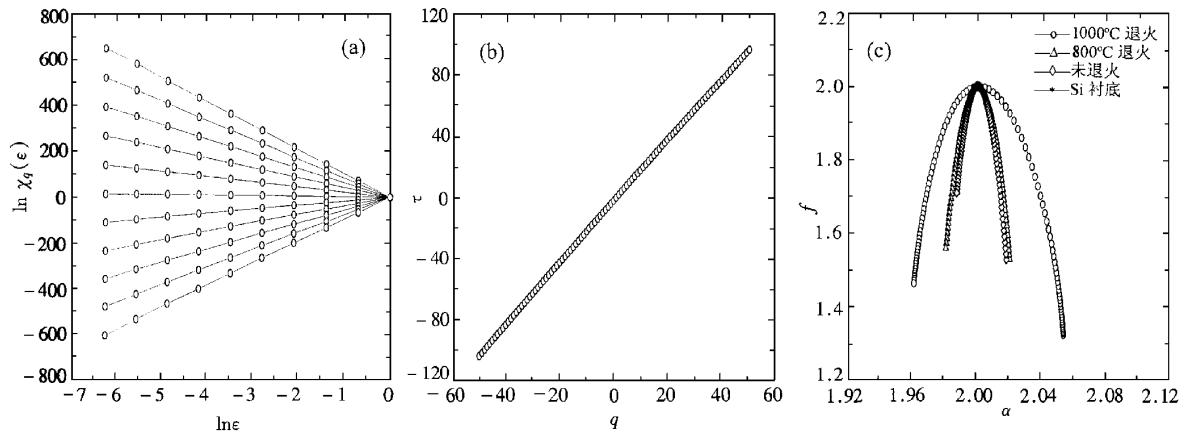


图 6 以衬底表面为基准面求概率后得到的 (a) 1000℃ 退火 ZnO 样品的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线和 (b) $\tau-q$ 曲线 (c) 三个 ZnO 薄膜样品及 Si 衬底的多重分形谱

表 6 图 6 中多重分形谱的参数

	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta f'$	$\Delta f''$	$\Delta\alpha$
1000℃	1.9616	1.4635	2.0541	1.3245	0.5365	0.6755	0.0925
800℃	1.9812	1.5604	2.0206	1.5304	0.4396	0.4696	0.0394
as-deposited	1.9878	1.7110	2.0185	1.5291	0.2890	0.4709	0.0307
Si-sub	1.9998	1.9962	2.0001	1.9967	0.0038	0.0033	0.0003

5 讨 论

从上面的结果可以看出,前三种求概率的方法所得的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 在 $q<0$ 时都不能很好地满足标度不变性,这是由于盒子尺寸 ϵ 变小时,决定 $\chi_q(\epsilon)$ 的小概率不能很好地遵循 ϵ 的幂函数规律,即(1)式,从而偏离了标度不变性.我们在文献[12]中得出规则多重分形(质量分布不均匀的 Cantor 集)的 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线全部是严格线性的,而二维 TEM 图像 $\chi_q(\epsilon)$ 偏离了标度不变性,表现在 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ ($q\leq -1$) 曲线在 ϵ 下降时偏离线性,开始斜率减小,后来斜率又增大.其原因是由于图像中含有一些像素很少的碎片, ϵ 下降时 $P(\epsilon)$ 减小过快,引起 $\chi_q(\epsilon)$ 的异常增大,而随着 ϵ 的继续下降,只含有一个像素点的 $P(\epsilon)$ 增多,最小的 $P(\epsilon)$ 不随 ϵ 的减小而继续减小,导致 $\chi_q(\epsilon)$ 值偏小.这里的情况类似,从图 2—图 4 可见 $q=-50$ 的曲线的斜率也是先随 ϵ 的下降而减小,后来则反过来,看来和二维图像 $\ln\chi_q(\epsilon)-\ln\epsilon$ 曲线偏离线性的原因是类似的.

这三种求概率的方法的共同点是:求概率 P 时所用分母对不同样品是不一样的.表面越粗糙,分母 $\sum |h_{ij}-\underline{h}|^2, \sum |h_{ij}-\underline{h}|, \sum (h_{ij}-h_{\min})$ 越大.因而尽管较为粗糙的表面的 $|h_{ij}-\underline{h}|^2, |h_{ij}-\underline{h}|, (h_{ij}-h_{\min})$ 较大,除以分母后得到的概率并不一定也大.作为例子,在图 7 中对比地画出了各样品 $\epsilon=1/512$ 时的高度分布曲线 $n-h$ 和方法 1)得到的概率分布曲线 $n-p$.虽然经高温退火的样品高度分布较宽(图 7(a)),而求得的概率分布却较窄(图 7(b)),这表明用这种方法求概率并不能反映不同粗糙表面高度分布概率的差别.其他两种方法所得概率变化趋势与方法 1)基本相同.为了消除求概率公式中不同样品不同分母的影响,在后面两种方法中固定所有样品的表层的平均厚度,即用粗糙表面下一定深度的平面作基准,求出局域高度分布的概率,得到了在三个量级范围内的标度不变性(图 5 和图

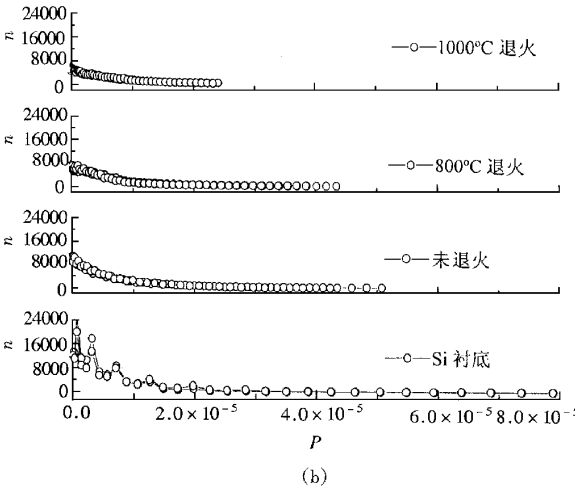
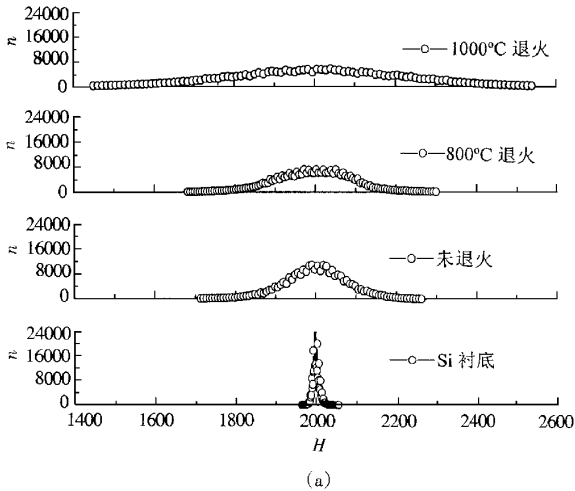


图 7 Si 衬底、不同温度退火及未退火 ZnO 样品 $\epsilon=1/512$ 的 (a) 高度分布曲线 $n-H$ (b) 偏离平均高度的方差的概率分布曲线 $n-p$

6). Arnir 等^[13], Malcar^[14]等统计了 96 篇 *Phys. Rev.* 上发表的分形研究结果后指出,实际得到的分形的标度不变性绝大部分限于两个量级以内,本实验方法 5)得到的标度不变性已接近三个量级,如果 AFM 的分辨率可以进一步提高(图 1 的像素数是 512×512)线性范围预期还可以提高.还需要指出的是,方法 4)特别是方法 5)的多重分形谱的参数

$\Delta\alpha$ 等的绝对值虽然不断减小,但这是由于概率计算中分母增大的结果,概率的有效数字的位数并没有减少.

要得到准确的 $f(\alpha)$, 还需要适当选取求配分函数 $\chi_q(\epsilon)$ 中的权重因子 q . 不同的研究中 q 的取值范围有很大差别. 如李华等^[8]所取的 q 的绝对值最大到 9, Lee 等^[11]所用的 q 的绝对值最大为 30, 王兵等^[10]在对 SOS 模型沉积过程的分析时所用 q 的绝对值达 150. 看来, 不同的研究对象中 q 的取值范围对多重分形谱的影响程度是不同的. 显然, q 的取值范围需要有一个标准. 实际上同一研究对象, 所取 q 的范围不同对结果可能有很大影响. 如图 8 是 800℃ 退火 ZnO 样品不同 q 取值时的多重分形谱. 相应的多重分形谱的参数列于表 7 中. 可见当 q 的绝对值从 9 增加到 50 时 $\Delta\alpha$ 增加了 3 倍, 而继续增加 q 的绝对值到 60 时 $\Delta\alpha$ 基本上没有变化. 由此可见, q 值的范围不能取得太小, 否则所得的结果不能全面反映样品本身的多重分形谱. 理论上多重分形的 q 值应趋向无限, 但其前提是测量尺寸 ϵ 可以趋于无限小, 实际的 ϵ 总是有限的. 当 q 的取值越过一定范围时对计算结果已无显著影响, 我们认为可

以用 q 的绝对值再增大 1 时 $\Delta\alpha$ 的变化小于 1% 作为 q 的取值标准. 本文就是基于此标准将 q 的范围定在 -50 和 50 之间. 此时计算工作量虽然已较大, 但还是可以在微机上进行大量不同条件下的计算.

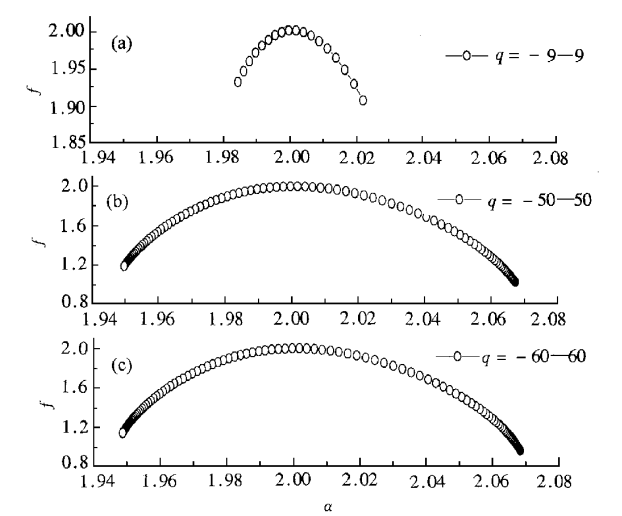


图 8 800℃ 退火 ZnO 样品不同 q 取值时的多重分形谱 (a) $q = -9-9$ (b) $q = -50-50$ (c) $q = -60-60$

表 7 图 8 中多重分形谱的参数

Q	α_{\min}	$f(\alpha_{\min})$	α_{\max}	$f(\alpha_{\max})$	$\Delta\alpha$	$\Delta f(\alpha)$	$\Delta f(\alpha)$
9	1.984	1.932	2.022	1.907	0.038	0.068	0.093
50	1.950	1.187	2.067	1.021	0.117	0.813	0.979
60	1.949	1.137	2.068	0.963	0.119	0.863	1.037

总之, 我们认为可以利用分形理论借助于多重分形谱的计算来比较不同薄膜的局域高度分布. 文中列出了多重分形谱计算中 5 种求概率的方法, 认为前三种方法 $\ln\chi_q(\epsilon) - \ln\epsilon$ 标度不变性不好, 而且在求概率时各自的分母取值不一样, 不同样品没有共同的比较标准, 因而不可取; 后两种方法在不同样品间采取了表层体积相同的基准面 $\ln\chi_q(\epsilon) - \ln\epsilon$ 具有非常好的标度不变性, 其不变性范围达到三个数量级.

[1] J. M. Gómez-Rodríguez *et al.*, *J. Phys. Chem.*, **96**(1992), 347.
[2] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, 3rd ed. (Freeman, New York, 1983) p. 110.

[3] P. I. Oden *et al.*, *J. Tribol.*, **114**(1992) 666.
[4] J. M. Williams, T. P. Beebe *J. Phys. Chem.*, **97**(1993) 6249.
[5] J. Krim *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993) 57.
[6] N. Almqvist, *Surface Science*, **355**(1996) 221.
[7] J. Lee, H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988) 2945.
[8] H. Li, Z. J. Ding, Z. Q. Wu, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 13 554; *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 16 631.
[9] A. Sánchez *et al.*, *Phys. Rev.*, **B46**(1992) 487.
[10] B. Wang, Y. Wang, Z. Q. Wu, *Solid State Commu.*, **96**(1995), 69.
[11] C. K. Lee, S. L. Lee, *Surface Science*, **325**(1995) 294.
[12] Z. Q. Wu, *et al.*, *Proc. Japan-China Joint Seminar on Atomic Level Characterization* (1998) 1.
[13] D. Arnir *et al.*, *Science*, **279**(1998) 39.
[14] O. Malcai *et al.*, *Phys. Rev.*, **E56**(1997) 2817.

MULTIFRACTAL SPECTRA OF ATOMIC FORCE MICROSCOPE IMAGES OF ZnO FILM

SUN XIA¹⁾ XIONG GANG²⁾ FU ZHU-XI²⁾ WU ZI-QIN¹⁾

¹⁾*Center for Fundamental Physics ,University of Science and Technology of China ,Hefei 230026 ,China)*

²⁾*Department of Physics ,University of Science and Technology of China ,Hefei 230026 ,China)*

(Received 8 October 1999)

ABSTRACT

The surface topographies of Si-substrate and ZnO films as-deposited and annealed were measured by atomic force microscope (AFM). Five methods (variance from average height , absolute deviation from average height , height based on the minimum height of the rough surface , height based on a depth from the surface , height based on the bottom of the film) for determining height distribution probability are used to calculate the multifractal spectra of AFM images. It is found that the former three methods could not satisfy the scaling law well when the smaller probability subsets provide the main contribution to the partition function. On the other hand , the latter two methods can satisfy the scaling law close to 3 orders of magnitude and can be used to compare roughness between different rough surface quantitatively.

PACC : 0555 ; 6116P ; 6820