

表面粗さの評価/パワースペクトル密度と傾きヒストグラム

小澤 亮*, **・鈴木 豊*・森 尚子***

矢口富雄***・伊藤順司****・山本恵彦*, **

*筑波大学物理工学系および**先端学際領域研究センタ ☎ 305-8573 茨城県つくば市天王台
***日立製作所ディスプレイグループ開発本部画像開発センタ ☎ 185-8601 東京都国分寺市東恋ヶ窪
****工業技術院電子総合研究所 ☎ 305-0045 茨城県つくば市梅園

(1999年5月22日受付; 1999年7月7日掲載決定)

Surface Roughness Evaluation/Power Spectral Density and Slope Histogram

Ryo OZAWA*, **, Yutaka SUZUKI*, Naoko MORI***,
Tomio YAGUCHI***, Junji ITOH**** and Shigehiko YAMAMOTO*, **

*Institute of Applied Physics and **Center for Tsukuba Advanced Research Alliance,
The University of Tsukuba, Tennoudai, Tsukuba, Ibaraki 305-8573

***Image-Related Device Development Center, Displays, Hitachi, Ltd., Kokubunji, Tokyo 185-8601

****AIST Electrotechnical Laboratory, Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-0045

(Received May 22, 1999; Accepted July 7, 1999)

Technical surfaces are composed of numbers of protrusions and grooves microscopically, however the appearances of the surfaces seem smooth. Surface roughness may be characterized by their intervals, periodicity, gradients and so on. We measured topographs of Fe-42 Ni alloys by atomic force microscopy. Surface roughness was evaluated in terms of power spectral density (PSD) which provides information on periodicity, and of slope histogram. It is found that a gradient of PSD is proportional to $1/f^2$, and the slope histogram is well fitted with the Gaussian distribution. The data of PSD show that the surface is naturally random with a strong correlation between neighborhood. It is found that our findings are explained by a simulated surface based on a random walk.

1. は じ め に

圧延された金属の表面などは一見滑らかに見えるが、ミクロに観察すると当然凹凸があり大小さまざまな山や谷で構成される。表面の粗さは、その山や谷がどのような間隔で並び、またその勾配はいかほどであるかなどで表現されるであろう。実際、規格に採用されている表面粗さの表示法には、中心線平均粗さ、自乗平均平方根粗さ、凹凸の平均間隔など様々ある¹⁾。一般的に用いられる自乗平均平方根粗さは、高さの情報を測定領域全体で平均したものであり、表面の凹凸を構成する波の周期や、斜面の傾きの大きさについての情報は含まない。そのため、近年、その波の周期に注目した詳細な評価も行われ

ている²⁾。また、従来のダイヤモンドをプローブに用いた触針型の計測装置では横方向の分解能が $0.1 \mu\text{m}$ 程度であった。それに比べて現在では、走査型プローブ顕微鏡により nm オーダーでの表面形状観察が可能である。そこで我々は工業材料である Fe-42 Ni 合金の表面形状を原子間力顕微鏡 (AFM) を用いて測定した。その表面粗さを次の2通りの方法で評価した。1つは表面構造物の周期についての情報を得るためにパワースペクトル密度 (PSD) を求め、もう1つは傾きの大きさに対する度数分布を求めた。

2. 実験および解析方法

測定試料には Fe-42 Ni 合金 ($10 \times 10 \times 0.33 [\text{mm}^3]$) を用いた。これは組成比が Fe 約 58%, Ni 約 42% の合金で、熱膨張率が $1.2 \times 10^{-6} [\text{K}^{-1}]$ と非常に小さく、イン

E-mail: ozawa@bk.tsukuba.ac.jp

バー材として工業的に使用されている³⁾。

表面形状観察には接触型原子間力顕微鏡 (SPI 3800 SII 社製) を用いた。測定はすべて真空槽内で行われ、真空度は 2×10^{-9} [Torr] 程度に保たれている。用いたカンチレバーのバネ定数は 0.16 [N/m] である。測定は 3×3 [μm^2] の範囲を 256×128 画素に分割し、それぞれの高さ Z を測定した。試料表面の酸化状態を5段階に変えながら計約100か所での測定を行った。

測定された表面形状からパワースペクトル密度 (PSD) を空間周波数 f について求めた。その定義を以下に示す。

$$P(s) = \left| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{r=0}^{N-1} Z_r \exp \left[\frac{2\pi i r s}{N} \right] \right|^2, \quad f = s / (N-1) d$$

(1)

ここで、 Z_r , N , d はそれぞれ r 番目の画素における高さ、データ数、サンプリング距離である。ただし、このフーリエ変換は水平走査方向 (x 方向) についてのみ行い、 y 方向の測定データは単純に統計平均するために用いた。その理由は AFM では2次元の情報を得るためにピエゾ素子を用いてラスタ走査を行うが、そのヒステリシスにより y 方向の信頼性を得ることが困難であるからである。これにより、表面構造物を周期別に評価する

ことができる。

また隣り合う画素間の高さの差より、傾き (dZ/dx) ヒストグラムを求めた。ここでも y 方向の信頼性がないため走査方向のみについて求めた。このときヒストグラムは測定領域全体の平均の傾きにおける度数が最大になり、そこを中心とした山型になる。これより、ヒストグラムがブロードな山型を示すほど試料表面に、より鋭い傾きがより多く存在することを意味する。よって、ヒストグラムの分布の広がり具合が表面粗さの1つの指標となる。

3. 結果および考察

Fig. 1 に測定された表面形状像の一例を示す。段差などの特徴的な構造が見られない領域を選び測定した。測定範囲全体にわたる大きなうねりは見られるものの特に目に付く構造物もなく、表面粗さは一様であるように見える。そこで周期構造の観点から評価するため、この像から PSD を求めた。その結果を Fig. 2 に示す。横軸が空間周波数、縦軸が PSD で、両対数表示である。グラフを見ると、PSD が空間周波数 f について傾き -2 の直線に載っていることがわかる。これは自然界でのランダ

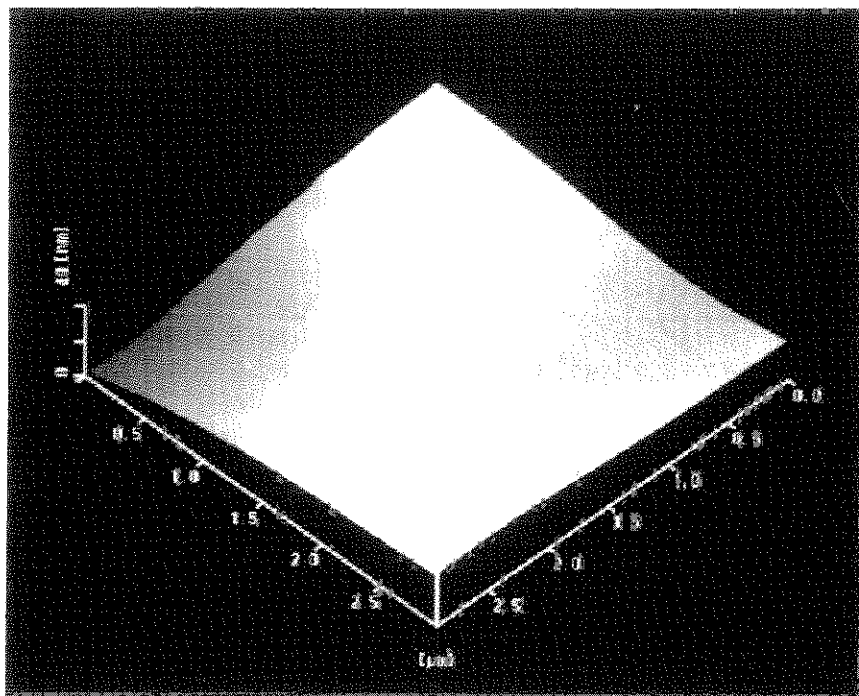


Fig. 1 Three-dimensional representation of a topographic AFM image ($3 \mu\text{m} \times 3 \mu\text{m}$) obtained from the Fe-42 Ni alloy. The vertical axis is presented by 40 nm full scale. The scanning speed per line is 0.4 Hz.

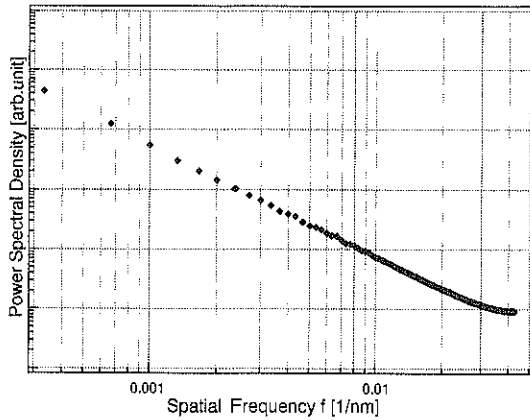


Fig. 2 Power spectral density as a function of the spatial frequency. A gradient of the PSD is proportional to $1/f^2$.

ム現象に良く見られる「 $1/f^2$ ゆらぎ」である。例えば、一次元での分子のブラウン運動もその例で、時刻 t における分子の位置 $X(t)$ の PSD の傾きは $1/f^2$ に比例する^{4,5)}。このように $1/f^2$ ゆらぎとは、1つ前の値を起点としたランダムな変動である。よって、この測定領域では特定の空間周波数を持つ構造物の突出は観られず、自然なランダムさを有する表面形状であるといえる。

次に同じ像から傾きヒストグラムを求めた (Fig. 3)。その結果は正規分布によくフィッティングされることが

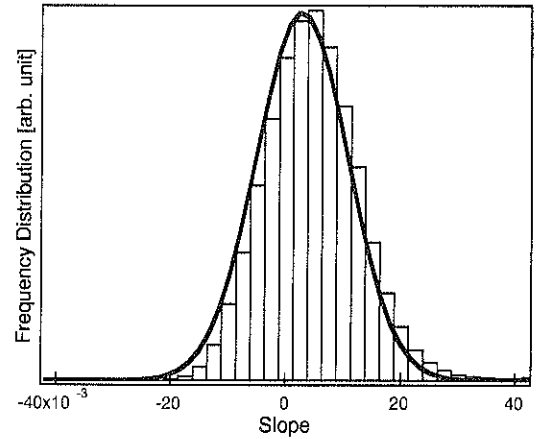


Fig. 3 Slope histogram. A curve shows the Gaussian distribution fitted with the histogram. A peak position is not located at zero as a results of a slight gradient of the whole area.

わかった。図中の実線が最小二乗法により行ったフィッティングの結果である。正規分布のピークが水平を意味する 0 からずれているが、これは測定領域全体の平均の傾きを表している。フィッティングにより標準偏差が決定されるが、それは前に述べた表面粗さの指標となりうる分布の広がり具合の度合いそのものである。よって、この指標を用いた表面粗さの比較も可能となる⁶⁾。

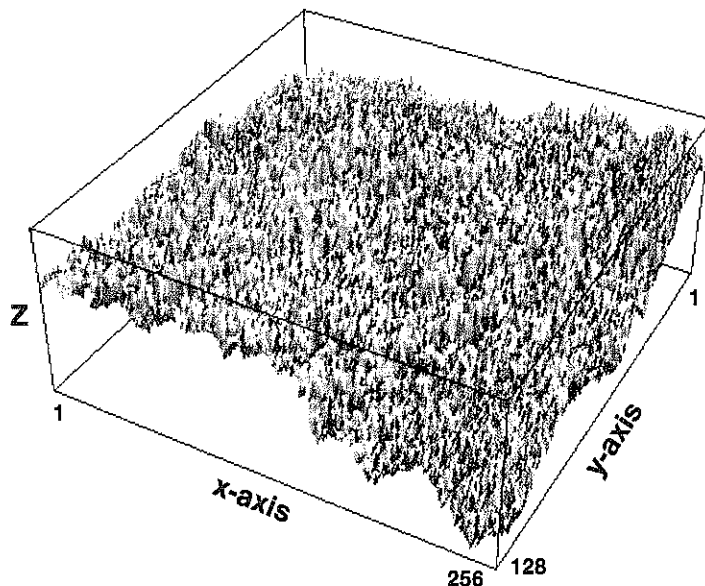


Fig. 4 A topograph calculated using the equation-2. It is calculated over 256×128 pixels, and the random function is defined to arbitrary integers from -200 to $+200$.

計127か所での測定中63%はPSDが $1/f^2$ 型になり、傾きヒストグラムは各試料の表面粗さの違いに伴い標準偏差の大きさに違いはあるものの、すべて正規分布となった。残りの個所では、特徴的な構造物が観察され、その構造物に起因すると思われる変調がPSDに見られた。よって、PSDおよび傾きヒストグラムの上記の結果は、一様に見える表面というものの本質を表しているのではないと思われる。

ここでは、次に示す単純な式に従う表面モデルを考えることで、PSDが $1/f^2$ 型であること、および傾きヒストグラムが正規分布に従うことが説明できることを示す。

ここで、 $Z(x, y)$ を位置 (x, y) での高さ、 R をランダム関数とし、

$$Z(x, y) = (Z(x-1, y) + R + Z(x, y-1) + R) / 2, \\ (1 \leq x \leq 256, 1 \leq y \leq 128) \quad (2)$$

で定義される表面を考える。ただし、1行目および1列目についてはそれぞれ $Z(x, 1) = Z(x-1, 1) + R$, $Z(1, y) = Z(1, y-1) + R$ とした。このモデルは、1つ前の値を起点としたランダムな変動である、いわゆる「酔歩」と呼ばれるものを、二次元に拡張したものである。この定義を用いて作成した疑似表面をFig. 4に、その断面図をFig. 5に示す。ランダム関数(R)は-200から+200までの任意の整数とした。

この表面についてPSDおよび傾きヒストグラムを求めると実験と同様に、PSDの傾きは $1/f^2$ に比例し(Fig. 6)、傾きヒストグラムは正規分布になる(Fig. 7)ことが示された。

その理由は、式2は漸化式であるが、任意の点においてすべて書き下してみると、最終的にはランダム関数の和になることからわかる。これは酔歩問題と同じ形式であり、その時のPSDはほぼ $1/f^2$ 型であることが知られている^{4, 5)}。また、傾きヒストグラムについて、傾き Δx , $y = Z(x, y) - Z(x-1, y)$ を考えると、同様に最終的には酔歩型で表現される。このとき、傾きの頻度分布は二項分布に従い、 x, y が十分大きいときは正規分布で近似される。

このように、PSDおよび傾きヒストグラムの結果は、それぞれ独立したものではなく、1つの原因、すなわち表面の形状は「1つ前の高さを起点としたランダムな変動で表される」ということから派生した結果であるといえる。

4. ま と め

今回、我々は試料表面の形状を測定し、その表面粗さを評価するために、周期構造の観点からPSDを、どの

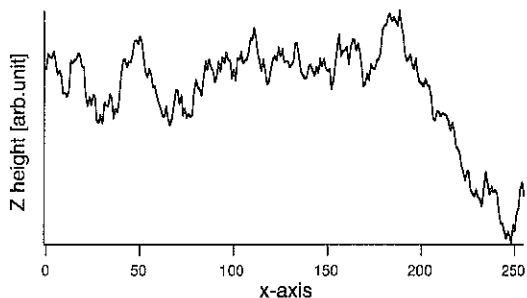


Fig. 5 A cross section along the scanning direction (x -direction) at a central area ($y = 64$).

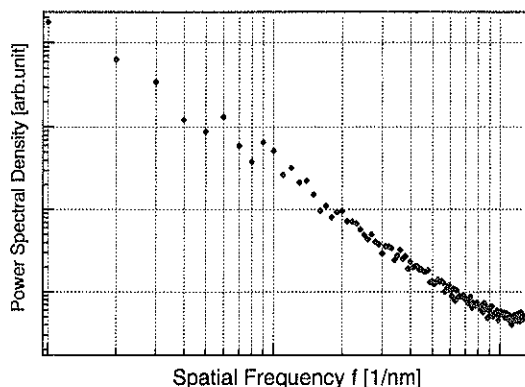


Fig. 6 Power spectral density for the calculated topograph (Fig. 4). It is found that a gradient of PSD is proportional to $1/f^2$.

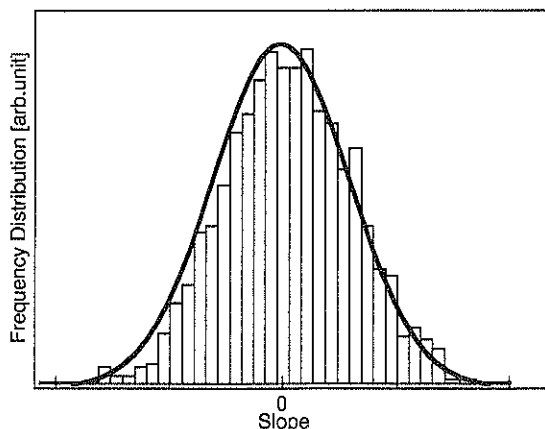


Fig. 7 Slope histogram for the calculated topograph (Fig. 4). It is well fitted the Gaussian distribution, and a curve shows a result of fitting.

ような大きさの傾きで表面が構成されているかという観点から傾きヒストグラムを求めた。その結果、PSDは $1/f^2$ 型を示し、傾きヒストグラムは正規分布になった。また、これらの結果は表面凹凸が隣の高さを起点としたランダムな変動であると考え、両者とも説明できることがわかった。なお、正規分布から決定される標準偏差は表面粗さの1つの指標になるであろう。

文 献

- 1) 奈良治朗：“表面粗さの測定・評価法”（総合技術セ

ンター，1983）。

- 2) 角田 均：応用物理学会誌 **66**, 1316 (1997).
- 3) J.M. Lohr and C.H. Hopkins: Trans. A.I.M.E. **135**, 535 (1939).
- 4) H.-O. Peitgen and D. Saupe: “The Science of Fractal Images” Chap. 1 (Springer-Verlag, New York, 1988).
- 5) 小出昭一郎：“物理現象のフーリエ解析”（東京大学出版，1981）。
- 6) R. Ozawa, K. Kaykham, A. Hiraishi, Y. Suzuki, N. Mori, T. Yaguchi, J. Itoh and S. Yamamoto: Appl. Surf. Sci. **146**, 162 (1999).