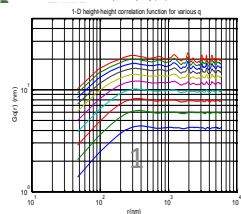
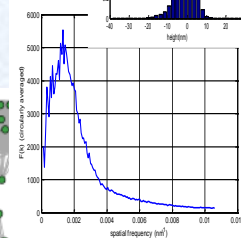
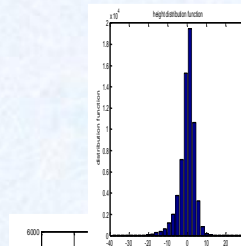
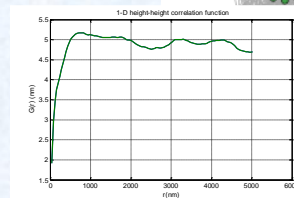
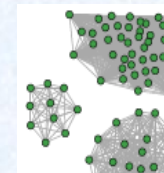
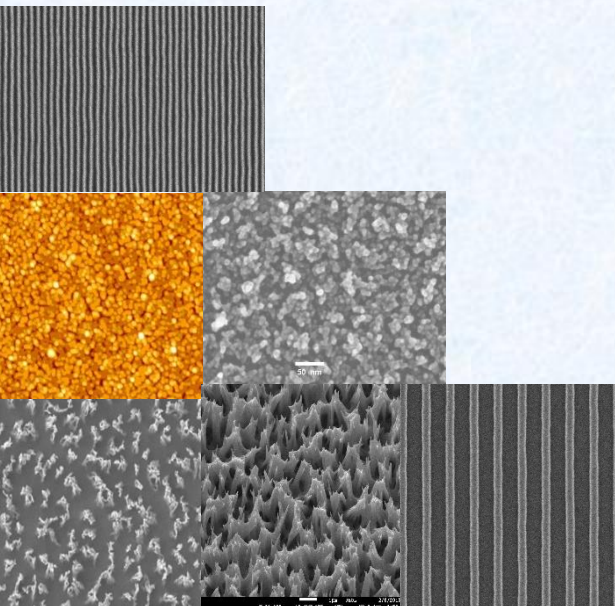


# The multiple faces of spatial complexity: From galaxies to cities and nanosttructures

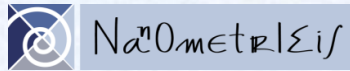
V. Constantoudis, M. Chatzigeorgiou

*Institute of Nanoscience and Nanotechnology & Nanometrisis p.c.  
NCSR "Demokritos", Aghia Paraskevi, Greece*





# In collaboration with:



George Papavieros  
George Patsis  
Evangelos Gogolides  
K. Poullos  
J. Sioulas



Hellenic  
Telecommunications  
Organization

Dimitrios Xenikos  
A. Assimakopoulos  
S.Limnaios

## Acknowledgement

“This project has received funding from the EMPIR programme co-financed by the Participating States and from the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme”

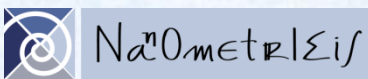


Traceable three-dimensional  
nanometrology

**EMPIR**



The EMPIR initiative is co-funded by the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme and the EMPIR Participating States



# The motivation

Non-equilibrium statistical processes → Complex spatiotemporal structures

**Complexity** : hierarchical behavior, broken symmetries (in between order and chaos), scaling, emergence, self-organization, long-range correlations

## Complexity in spatiotemporal domain

### Time domain

Nonlinear dynamics  
Chaos, strange attractors,  
Phase space structures,  
Sensitivity to initial conditions  
Determinism vs. randomness

### Spatial domain (Spatial complexity)

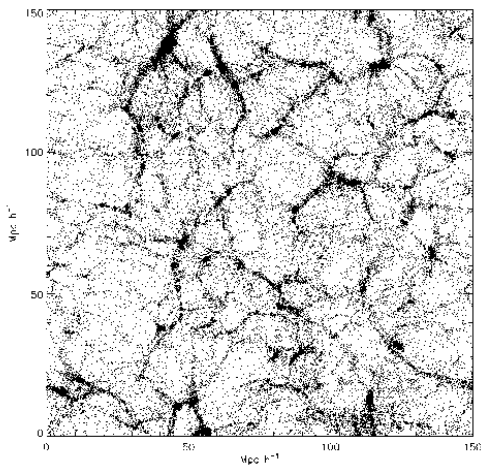
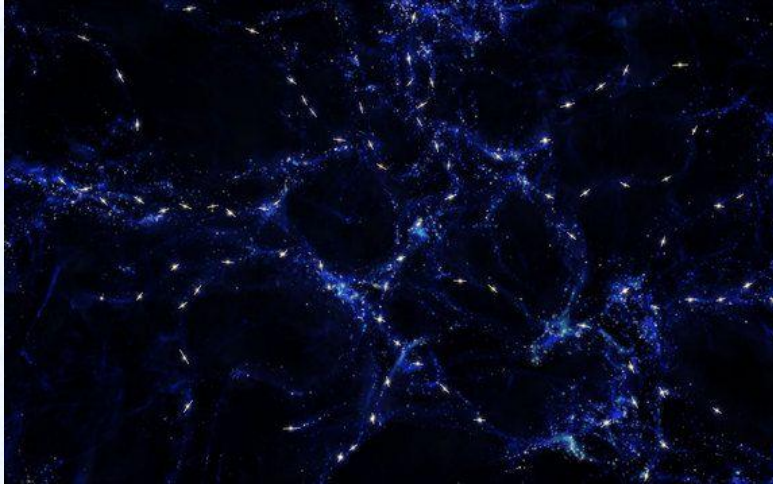
(Multi)Fractality, stochastic geometry  
point pattern analysis, pattern recognition



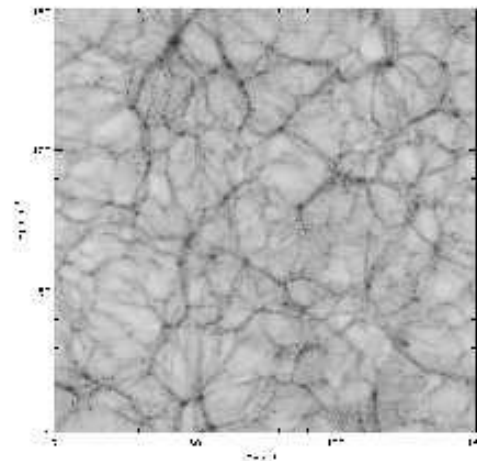


# Spatial complexity : The multi-scale faces

## Galaxies



Simulated star distribution

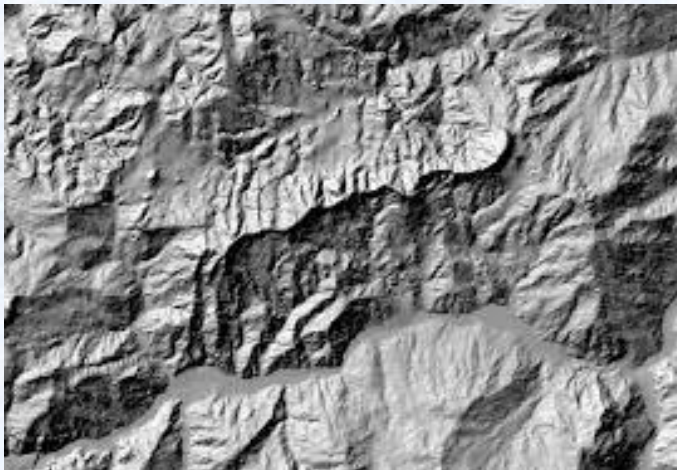


DTFE (Delaunay Tessellation Field Estimator) image of star distribution

- Hierarchical structures
- Web-like geometry
- Presence of large roundish underdense regions (the Voids)

# Spatial complexity : The multi-scale faces

## Earth

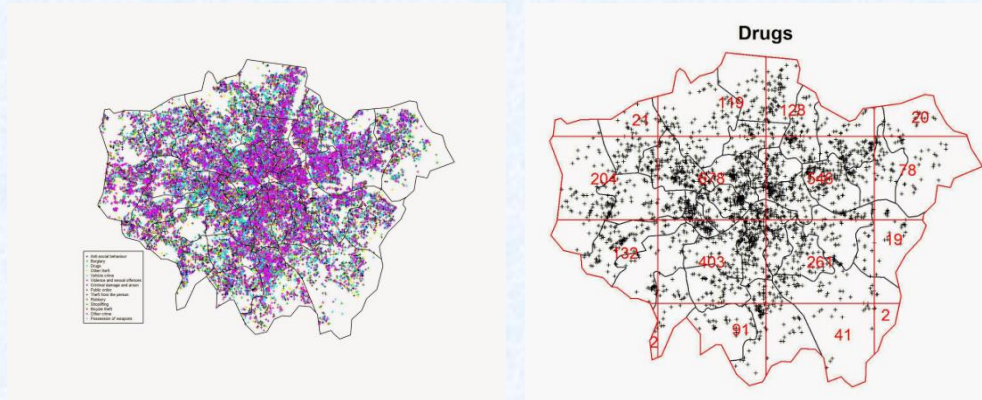


Geocomplexity = > Geostatistics

# Spatial complexity : The multi-scale faces

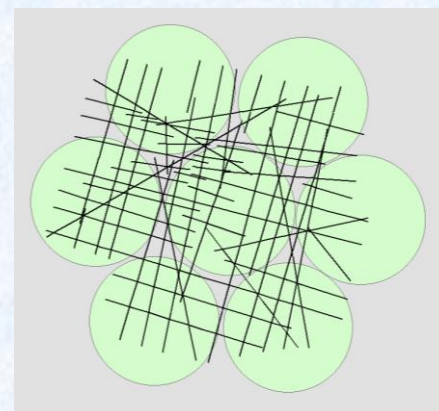
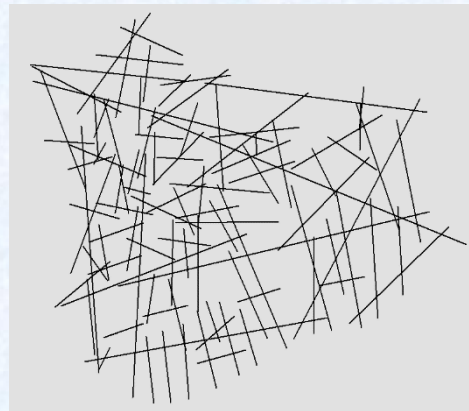
## Cities

Point patterns (Crime positions in London, 2014)



[Fabio Veronesi](#), R-news 2015

Axial patterns (Street networks, Mandra Greece)

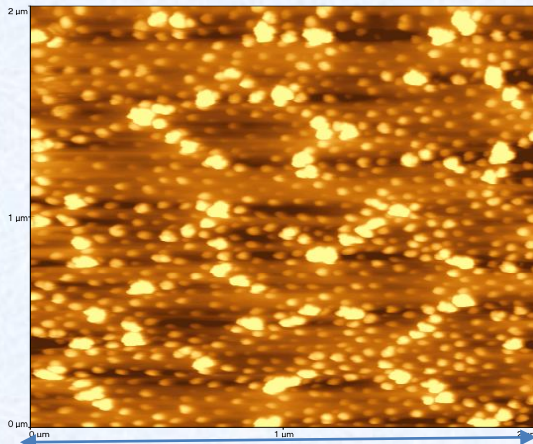




# Spatial complexity : The multi-scale faces

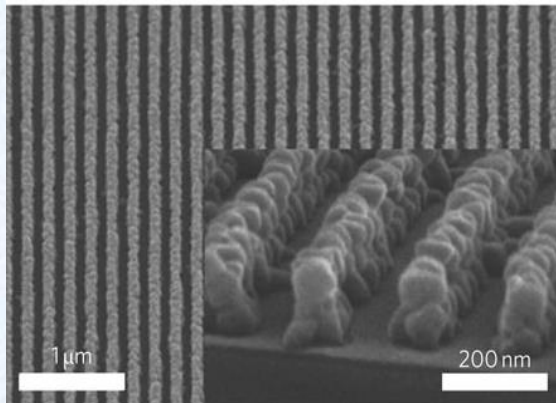
## Material Nanostructures

Nanodots

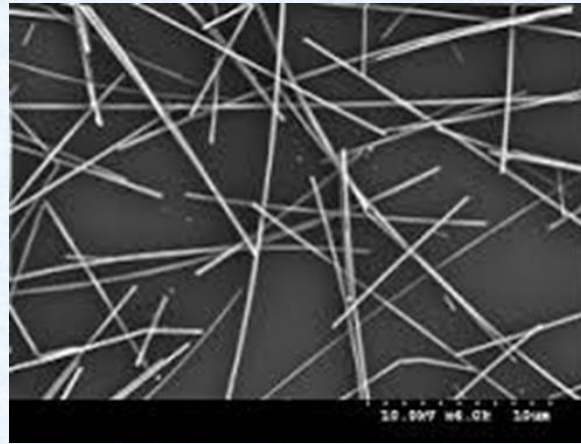


2 μm

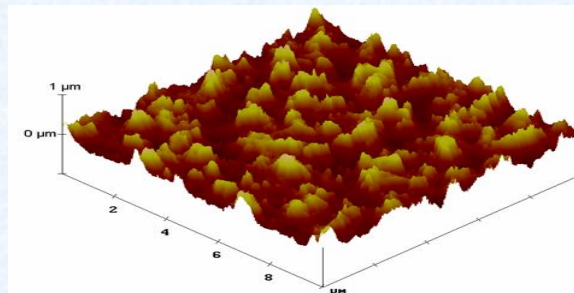
Lithography nanostructures



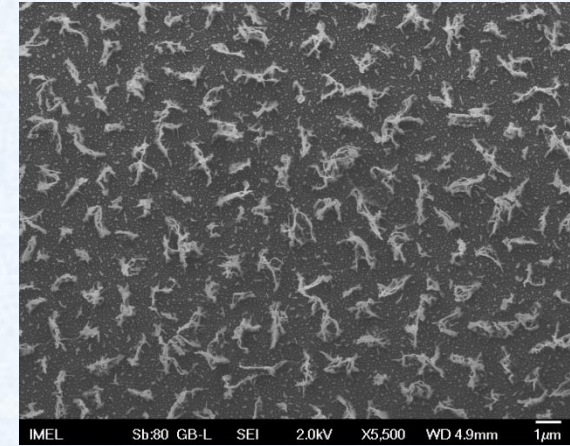
Nanowires



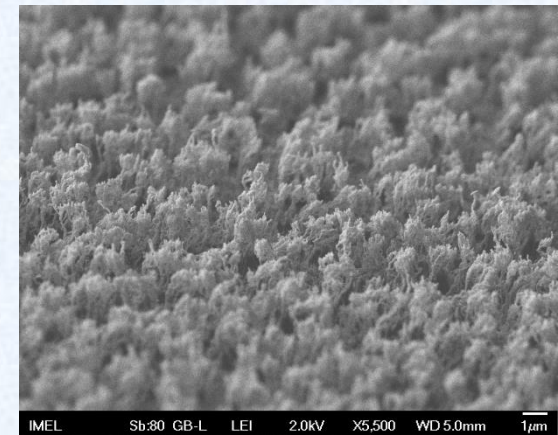
Rough polymer surface



Polymer nanostructures



Polymer nanostructures



Nanostructure morphology resemble larger scale structures in cities, earth and universe

In this talk, I will focus on

- the **spatial complexity of nanostructures** (or simpler **nano-complexity**)
- **Nanotechnology and Nanosurfaces**
- **Complexity and Fractal/Multifractal analysis**
- **Applications of fractal/multifractal analysis in nanotechnology**

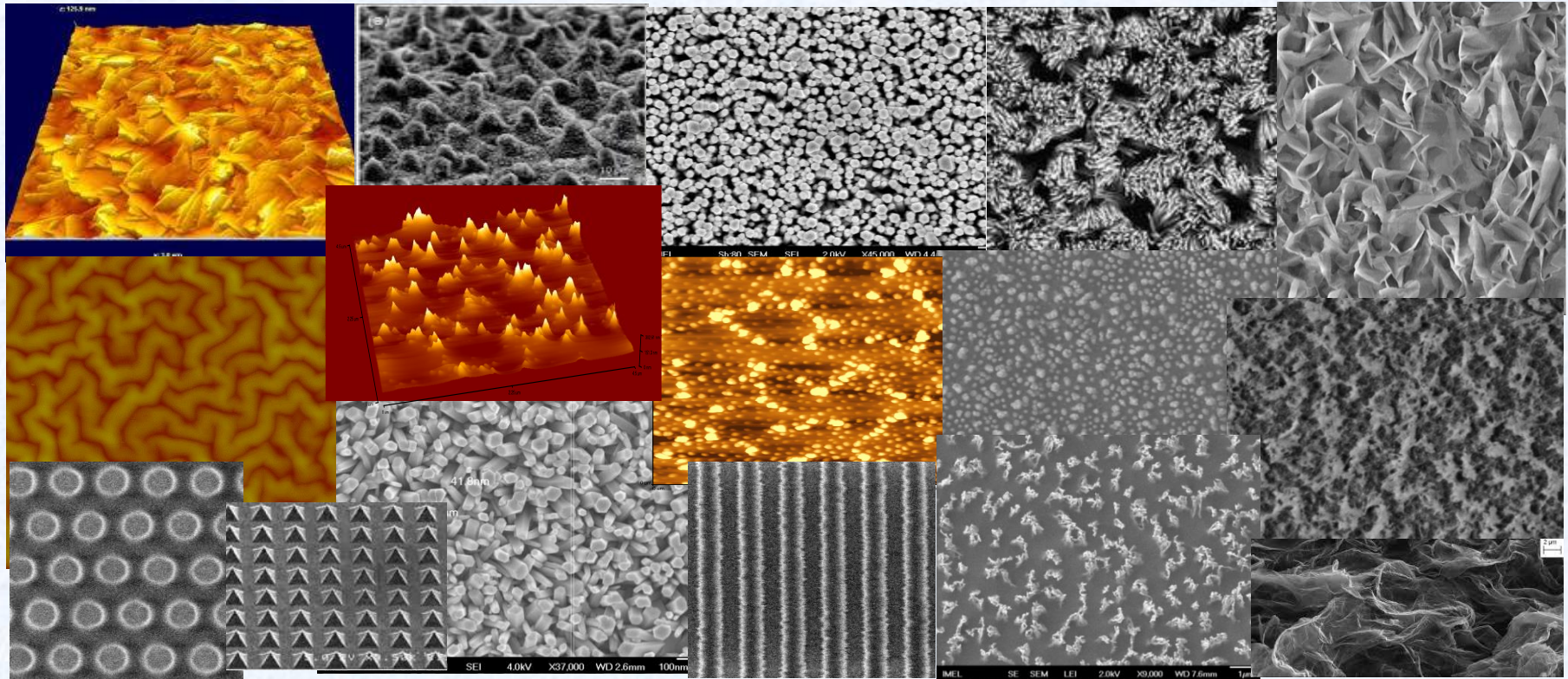


# How do we get data of nanospacial complexity?

1<sup>st</sup> : Explosion of nanofabrication techniques

2<sup>nd</sup> : Advancements in Microscope technology (accuracy, functionality)

A flood of images with a vast variety of nanostructures



# *Why do we need nanocomplexity characterization?*

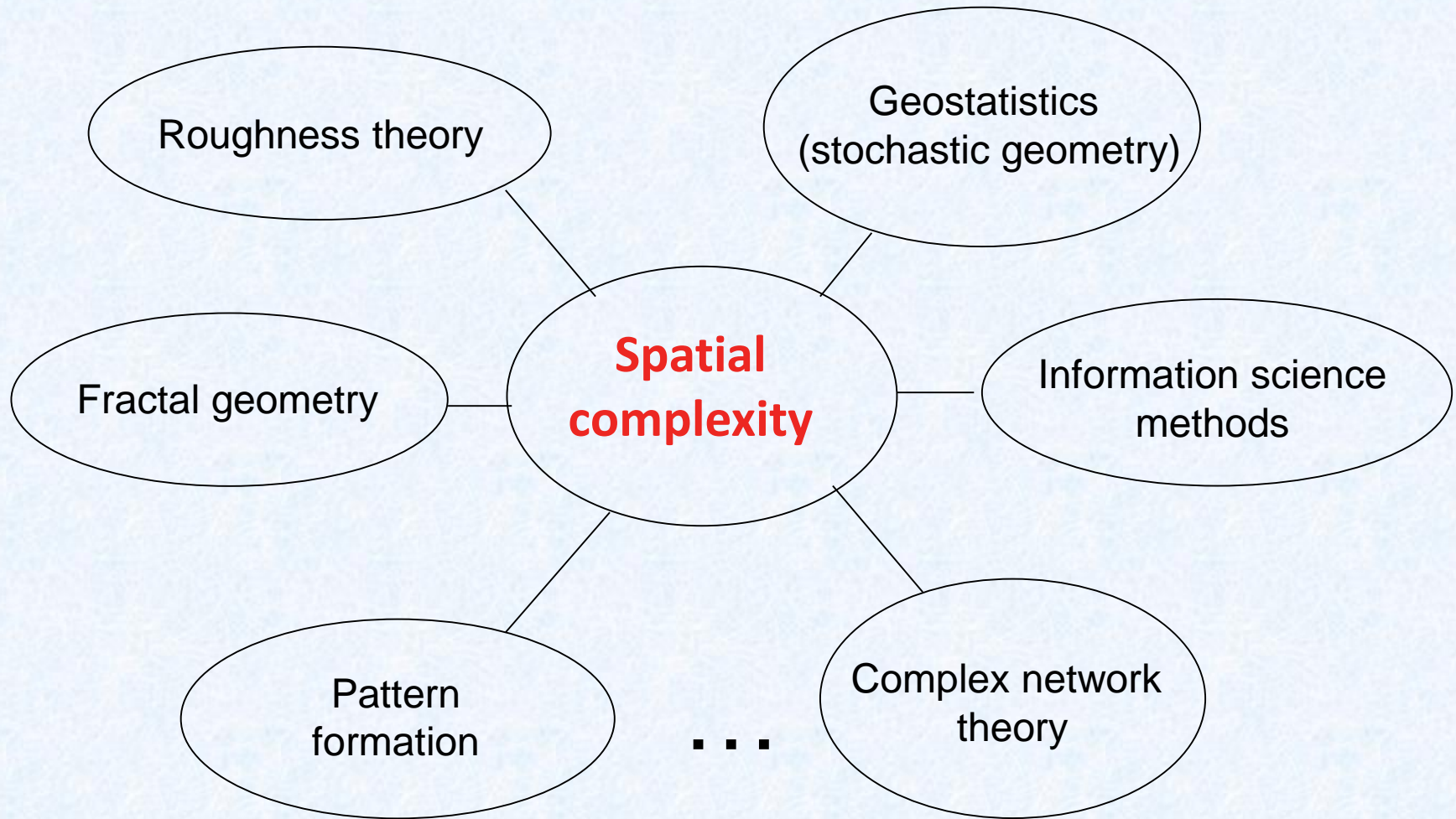
- Understanding of nanostructure fabrication and functionality
- Control and optimization of nanostructure performance
- Provide metrics to nanometrology to evaluate nanomanufacturing
- Reliability and traceability of nanomanufacturing

## How ???

# To face up the challenge



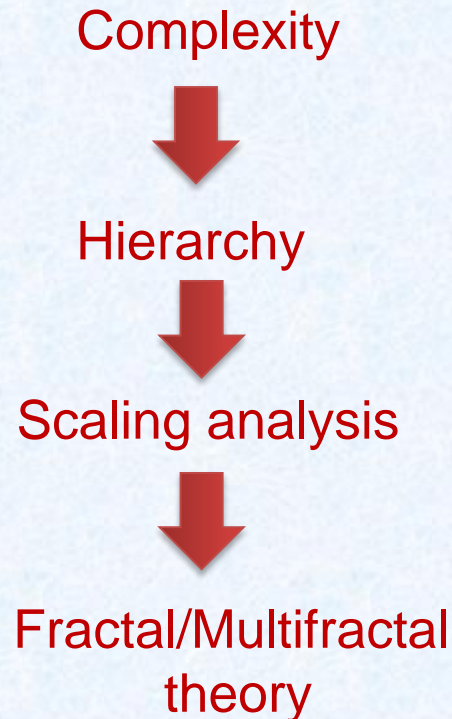
## Inspiration from other related fields - Synergies



“Complexity frequently takes the form of hierarchy”

“One path to the construction of a nontrivial theory of complex systems is by way of a theory of hierarchy”

*(The architecture of complexity, H. Simon, 1962)*





# Φράκταλ προσέγγιση

Φράκταλ γεωμετρία : Η γεωμετρία των αυτοόμοιων δομών δηλ. των αναλλοίωτων υπό αλλαγή κλίμακας (scaling invariance)

ή Η γεωμετρία της συμμετρίας της αυτοομοιότητας (self-similarity symmetry)

## Έννοιες-κλειδιά στην fractal γεωμετρία

- Αυτοομοιότητα
- Νόμος δύναμης (power law)
- Μορφοκλασματική (Fractal) διάσταση  
(μη ακέραια)

- Αυτοομοιότητα τίνος πράγματος;;;
- Νόμος δύναμης μεταξύ ποιών μεγεθών;;;
- Μορφοκλασματική διάσταση;;;

# Φράκταλ προσέγγιση

## Μεταβλητή κλίμακας

Απόσταση σημείων

Χωρική συχνότητα

Πλευρά τετραγώνου  
Τμηματοποίησης

.....

## Μέγεθος χαρακτηρισμού της επιφάνειας

Ύψος – Διαφορά υψών

Κλίση

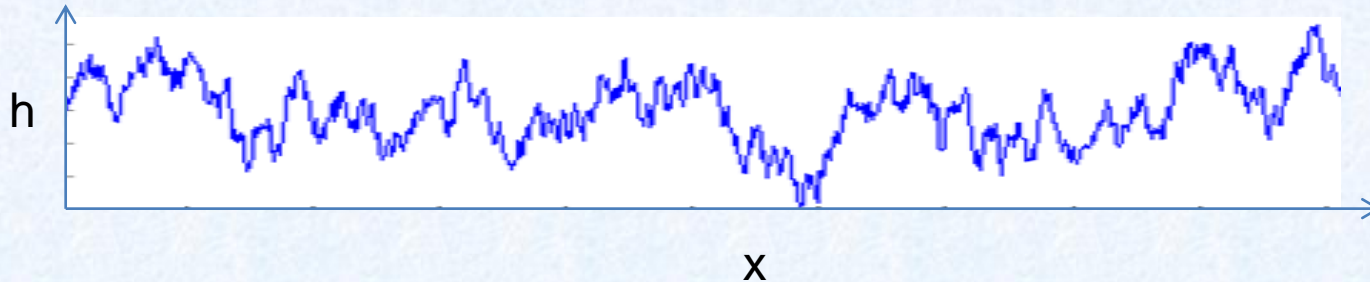
Διακυμάνσεις

.....

- Συνάρτηση συσχέτισης διαφοράς υψών
- Μετασχηματισμός Fourier
- Τυπική απόκλιση συναρτήσεως κλίμακας

- Συνάρτηση συσχέτισης διαφοράς υψών  
(απόσταση – διαφορά υψών)

Για μία γραμμή  $h(x)$  με τραχύτητα



$$H(r) = \langle (\Delta h)^2 \rangle = \langle (h(x+r) - h(x))^2 \rangle \quad (\text{Height difference correlation function})$$

➤ Συνάρτηση συσχέτισης υψών :  $G(r) = \sqrt{H(r)}$  (Height-height correlation function)

Για φράκταλ επιφάνειες ή γραμμές :  $H(r) \sim r^{2\alpha}$  ή  $G(r) \sim r^\alpha$

Βασική ιδιότητα :  $\langle \Delta h(r) \rangle \sim r^\alpha$

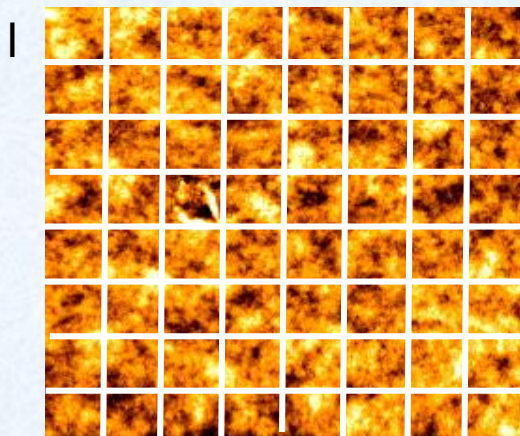
$\alpha$ : εκθέτης τραχύτητας,  
 $\alpha = 2 - d$ ,  $d$ : φράκταλ διάσταση

- Μετασχηματισμός Fourier / Φάσμα ισχύος  
(συχνότητα – ύψος)

$$F(k) = \frac{1}{2\pi} \int_0^L h(x) e^{ikx} dx \quad \longrightarrow \quad \begin{array}{l} F(k) \sim k^{\alpha+0.5} \quad (\text{γραμμές}) \\ F(k) \sim k^{\alpha+1} \quad (\text{επιφάνειες}) \end{array}$$

$\alpha$ : εκθέτης τραχύτητας,  
 $\alpha=2(3)-d$ ,  $d$ : φράκταλ διάσταση

- Τυπική απόκλιση (rms value) συναρτήσει κλίμακας  
(πλευρά τετραγωνικής τμηματοποίησης – διακυμάνσεις)



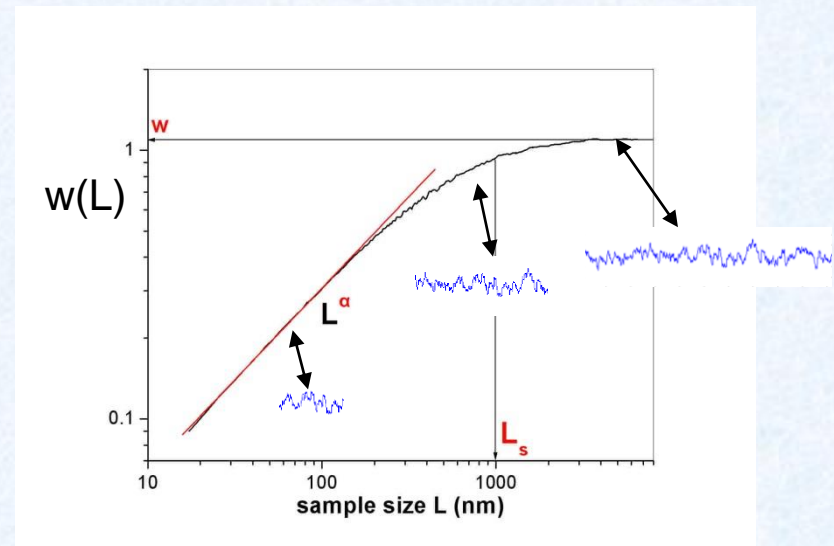
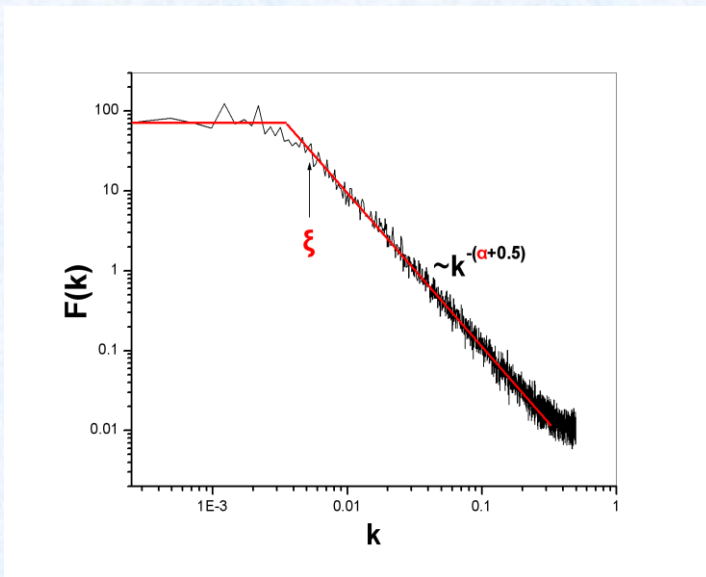
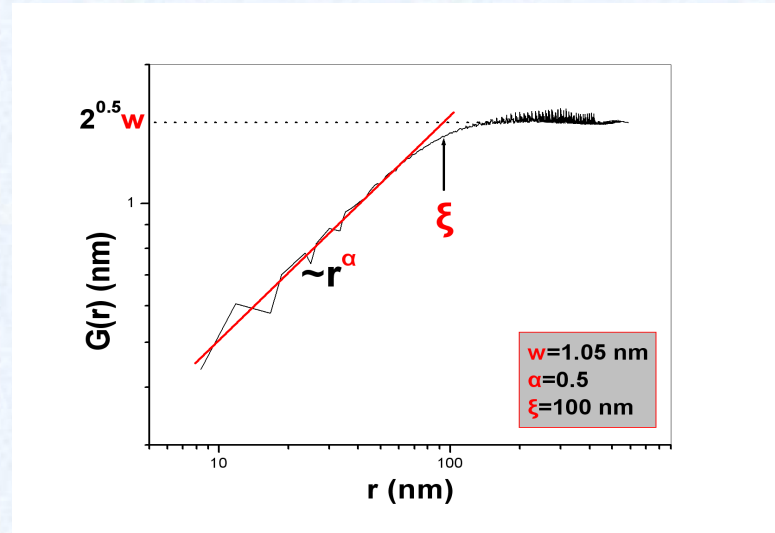
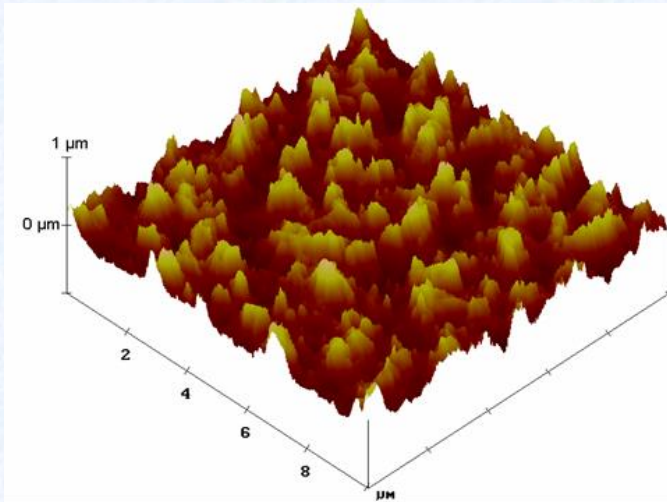
$$w(l) = \frac{1}{l} \int_0^l (h(x) - \langle h \rangle)^2 dx$$

$$w(l) \sim l^\alpha$$

$\alpha$ : εκθέτης τραχύτητας,  
 $\alpha=2(3)-d$ ,  $d$ : φράκταλ διάσταση



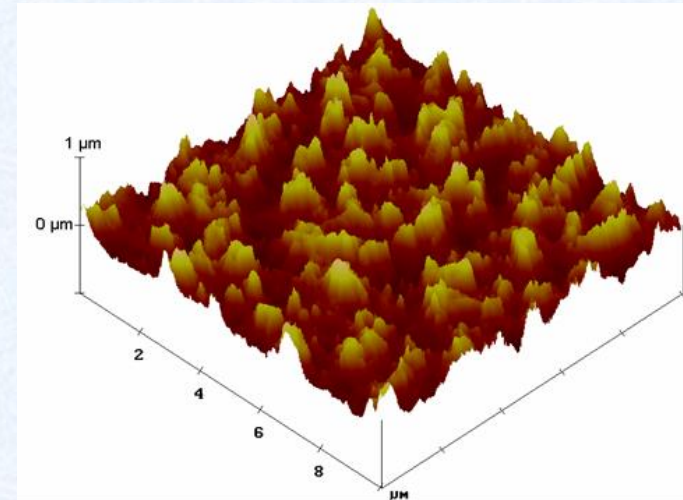
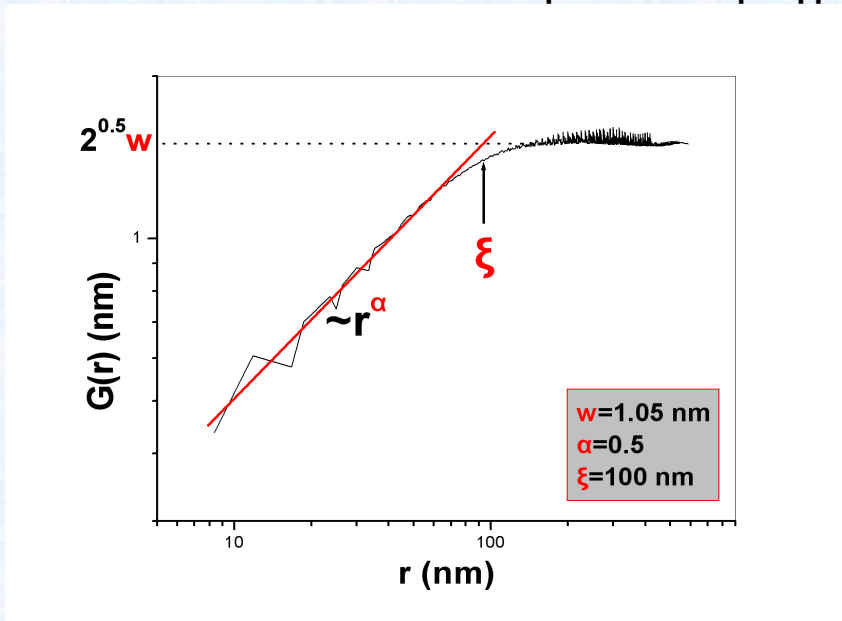
# Τυπικά αποτελέσματα από πραγματικές επιφάνειες





## Φράκταλ προσέγγιση

### Φράκταλ πραγματική επιφάνεια



### Παράμετροι τραχύτητας

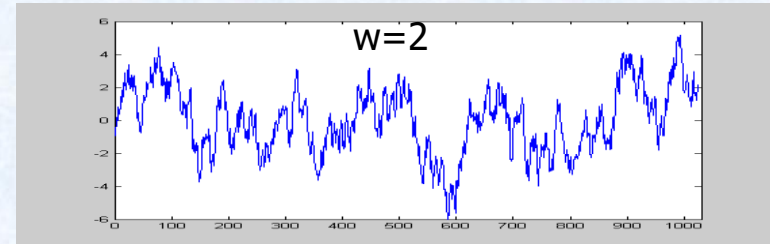
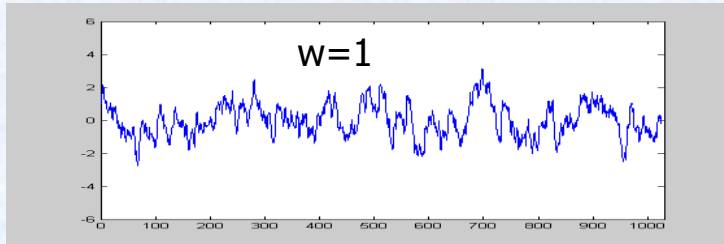
- τυπική απόκλιση  $w$  (κάθετη τραχύτητα, rms value)
- εκθέτης τραχύτητας  $\alpha$   
(δίνει το σχετικό βάρος των υψίσυχνων διακυμάνσεων στην τραχύτητα,  $\alpha=3-d$  (2-d),  $d$ : η fractal διάσταση)
- μήκος συσχέτισης  $\xi$   
(για  $r > \xi$  τα σημεία της επιφάνειας είναι ασυσχέτιστα)



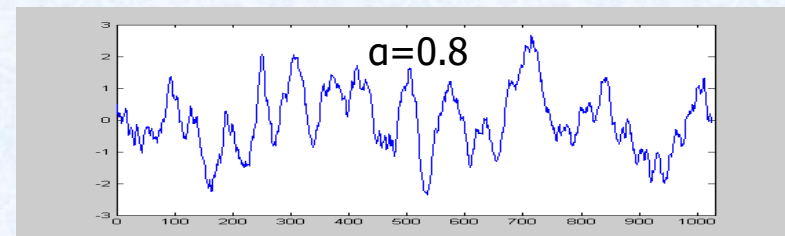
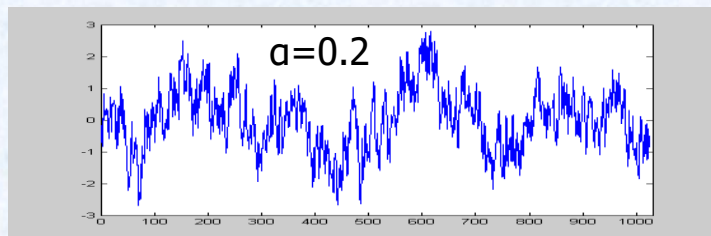
## 2. Φράκταλ προσέγγιση

### 1-D αυτοσυσχετιζόμενες επιφάνειες με διαφορετικά $w, \alpha, \xi$

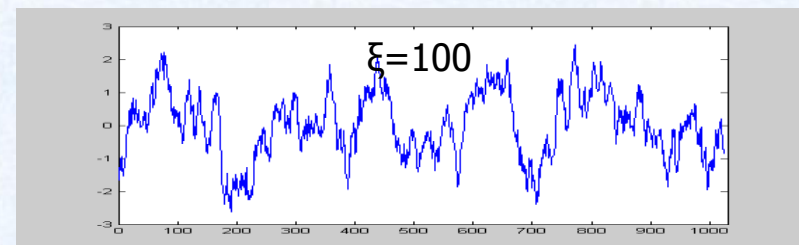
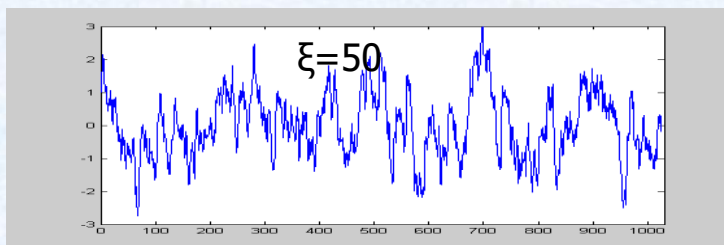
#### 1. Διαφορετικό $w$ , ίδια $\alpha, \xi$



#### 2. Διαφορετικό $\alpha$ , ίδια $w, \xi$



#### 3. Διαφορετικό $\xi$ , ίδια $w, \alpha$

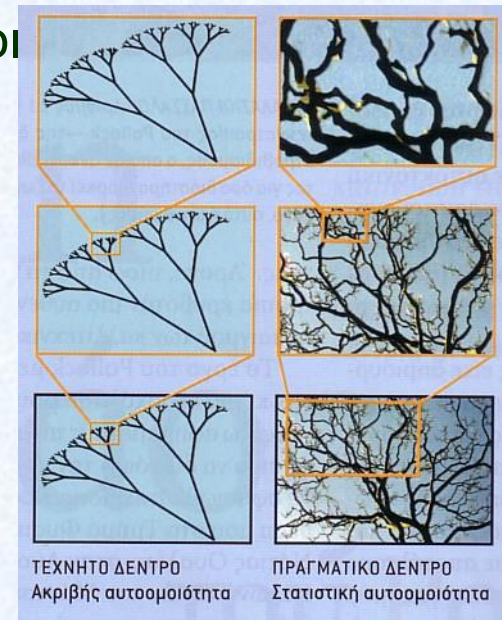




# Φράκταλ προσέγγιση

- Φράκταλ γεωμετρία σε πραγματικές δομές =>  
=> «χαλάρωση» της θεωρίας σε τρία σημεία :

1. Όχι ακριβής αυτοομοιότητα: στατιστική αυτοομοιότητα  
⇒ τυχαία ή στατιστικά fractals.
2. Αυτοομοιότητα όχι σε όλες τις κλίμακες αλλά σε μία περιοχή τους
3. Αυτοομοιότητα με διαφορετικούς συντελεστές σμίκρυνσης σε διαφορετικές διευθύνσεις:  
ανισότροπη αυτοομοιότητα (self affinity)





## 2. Φράκταλ προσέγγιση

Σύνδεση με τα προηγούμενα :

Έννοιες-κλειδιά στην fractal γεωμετρία

- Αυτοομοιότητα (ή scaling invariance)
- Νόμος δύναμης (power law)
- Fractal διάσταση (μη ακέραια)

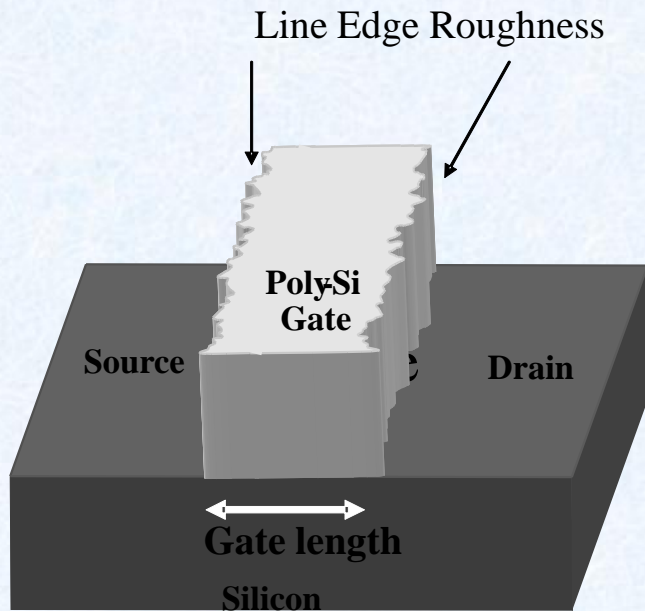
Fractal γεωμετρία σε πραγματικές δομές =>

=> «χαλάρωση» της θεωρίας σε τρία σημεία :

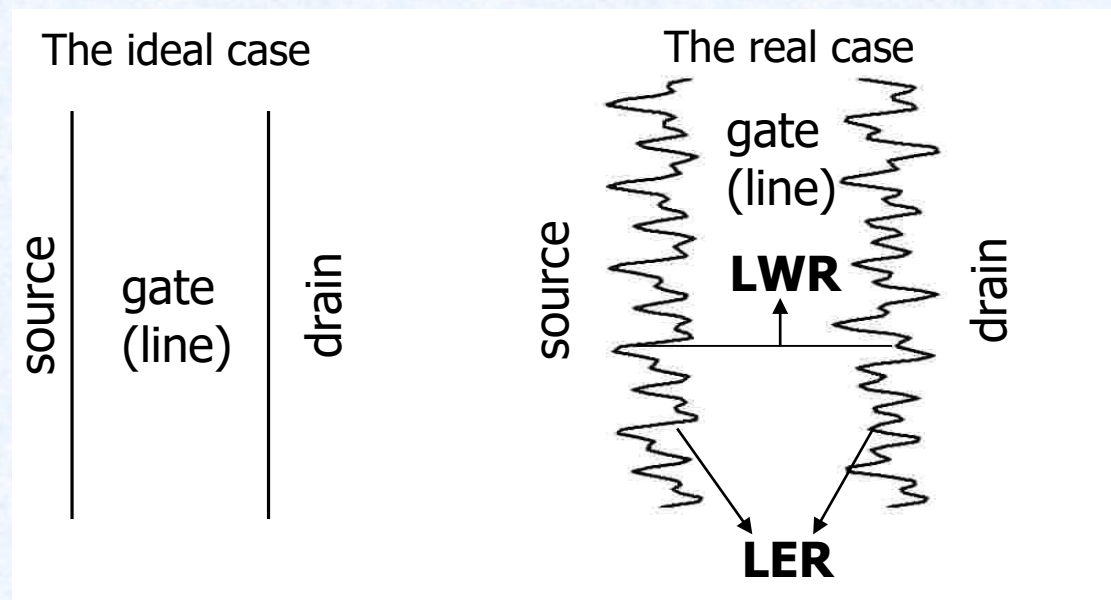
1. Στατιστική αυτοομοιότητα (random fractals)
  2. Περιορισμένης κλίμακας αυτοομοιότητας
  3. Ανισότροπη αυτοομοιότητα (self-affinity)
- } γενίκευση του ορισμού  
box counting dimension
- =>  $\Delta h \sim r^\alpha$  ,

***Φράκταλ γεωμετρία και εφαρμογές:***  
***1. Νανοηλεκτρονική:***  
***ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΤΡΑΧΥΤΗΤΑΣ ΣΤΗΝ***  
***ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑ ΕΝΟΣ ΤΡΑΝΣΙΣΤΟΡ***

➤ Το πρόβλημα της πλευρικής τραχύτητας στην πύλη ενός τρανζίστορ (Line Edge Roughness (LER) or Line Width Roughness (LWR) problem)



Top down view of a gate or resist line



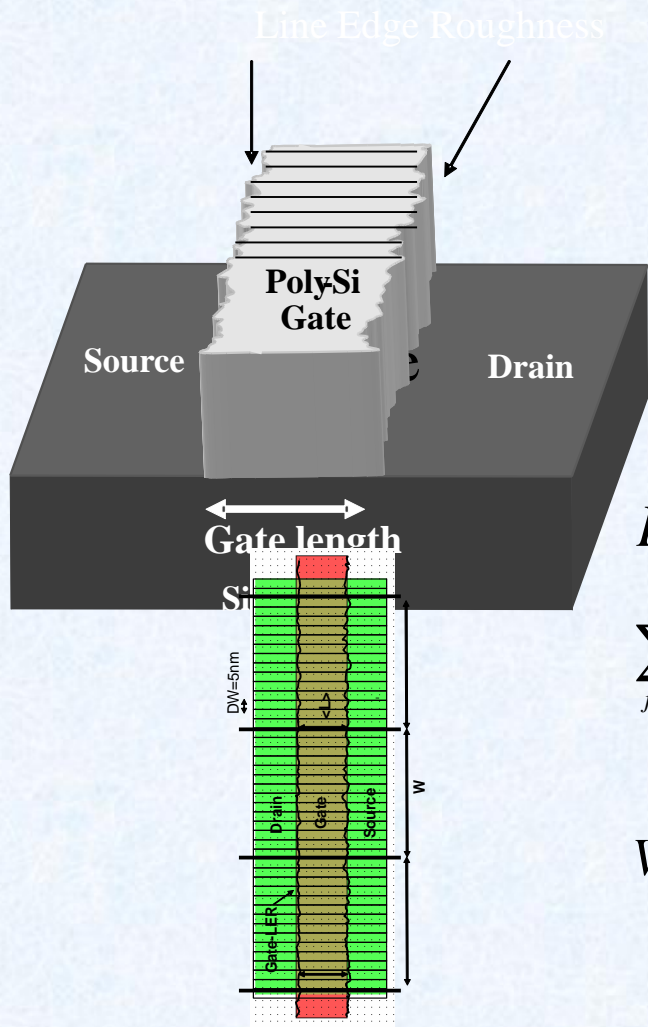
Πλευρική τραχύτητα (LER) : Ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα στη βιομηχανία ημιαγωγών για την παραγωγή τρανζίστορ <50nm

Βασικά μεγέθη λειτουργίας ενός τρανζίστορ :

α) Η τάση λειτουργίας ( $V_{th}$ )

β) Το ρεύμα μηδενικής τάσης λόγω φαινομένου σήραγγας ( $I_{off}$ )

Μεθοδολογία : 2D προτυποποίηση της λειτουργίας του τρανζίστορ



$$\delta V_{th_{i,j}}(CD_{i,j}) = -C_1 e^{-CD_{nom}/l} (e^{CD_{i,j}/l} - 1) + (k-1)C_2 e^{-CD_{nom}/2l} (e^{CD_{i,j}/2l} - 1)$$

$CD_{i,j}$  : the length of the j-th subtransistor of the i-th transistor

$$I_{ds,i}(V_{gs}) =$$

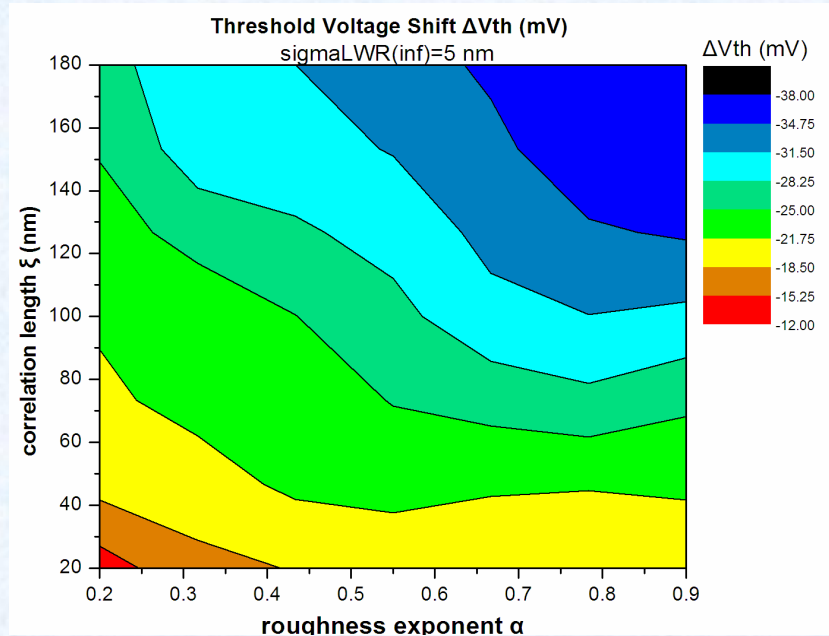
$$\sum_{j=1}^K \frac{DW}{CD_{nom} + CD_{i,j}} \mu C_{ox} (Vt)^2 \exp\left(\frac{V_{gs} - (V_{th,ideal} + \Delta V_{th_{i,j}}(CD_{i,j}))}{\eta Vt}\right)$$

$$V_{th,ideal} = V_{th}(CD_{nom}) = -C_1 e^{-CD_{nom}/l} + (k-1)C_2 e^{-CD_{nom}/2l}$$

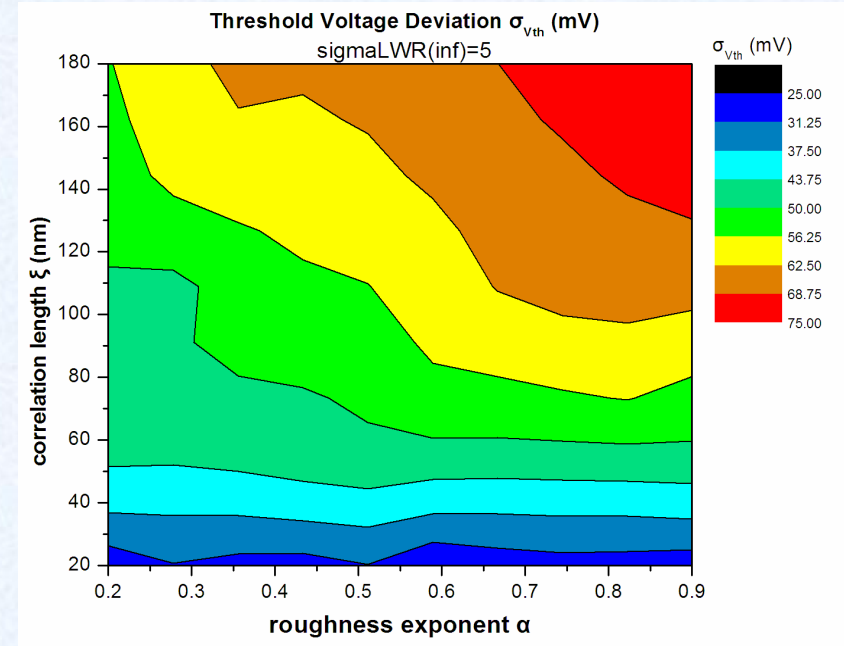


# Αποτελέσματα : Επίδραση της φράκταλ διάστασης (roughness exponent) και του μήκους συσχέτισης (correlation length) στην

α. Απόκλιση της  $V_{th}$  από την ονομαστική τιμή



β. Εύρος των αποκλίσεων της  $V_{th}$  από την ονομαστική τιμή



Συμπεράσματα :

1. Πιό ισχυρή η επίδραση της φράκταλ διάστασης στα μεγάλα μήκη συσχέτισης
2. Πιό σημαντική η επίδραση του μήκους συσχέτισης
3. Μικρά  $\alpha, \xi \Rightarrow$  πιο αξιόπιστη λειτουργία του τρανζίστορ

*Φράκταλ γεωμετρία και εφαρμογές:*

*2. Βιονανοτεχνολογία:*

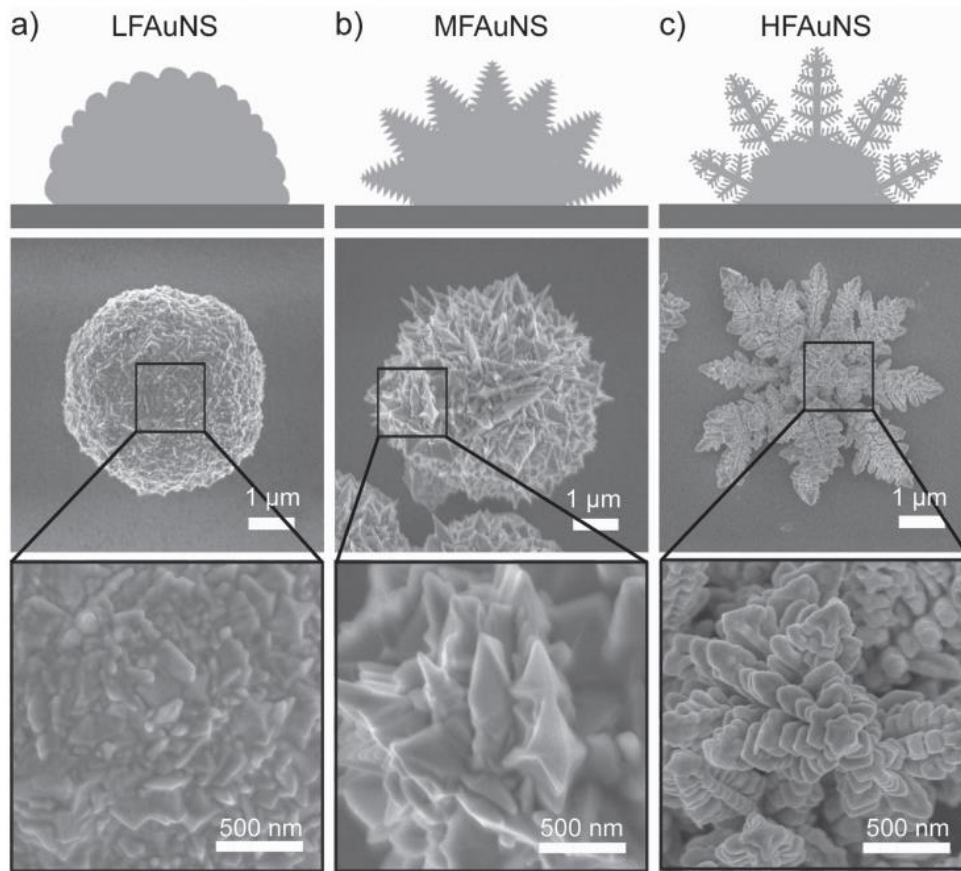
***ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΦΡΑΚΤΑΛ ΤΡΑΧΥΤΗΤΑΣ ΣΤΗΝ  
ΠΡΟΣΦΥΣΗ ΚΑΡΚΙΝΙΚΩΝ ΚΥΤΤΑΡΩΝ***

# Programmable Fractal Nanostructured Interfaces for Specific Recognition and Electrochemical Release of Cancer Cells

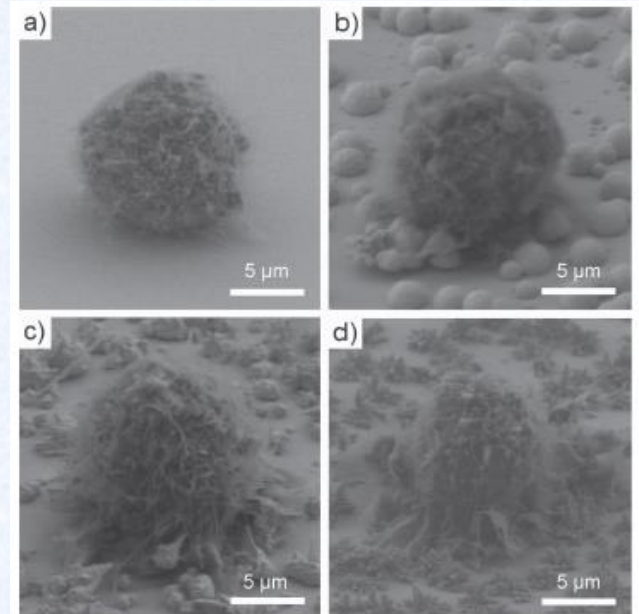
(P. Zhang et al. 2014)

Materials  
Views  
www.MaterialsViews.com

ADVANCED  
MATERIALS  
www.advmat.de



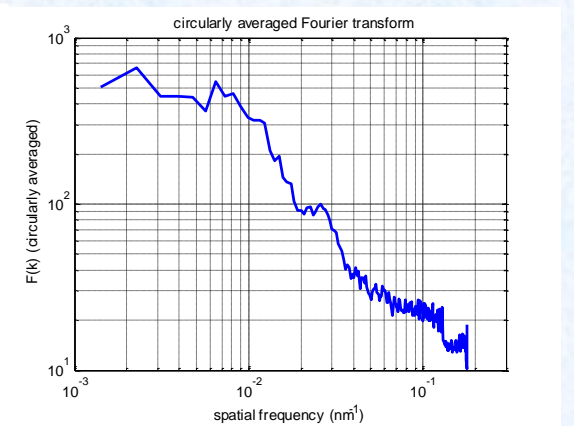
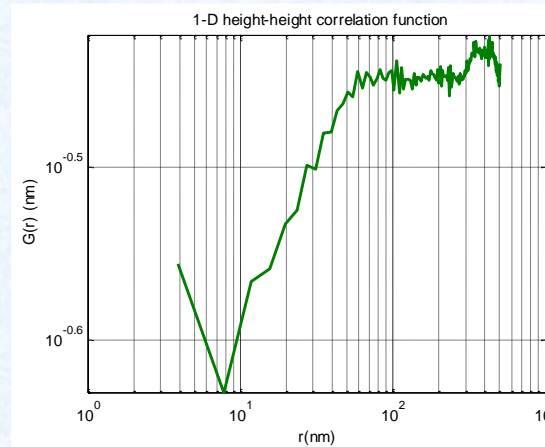
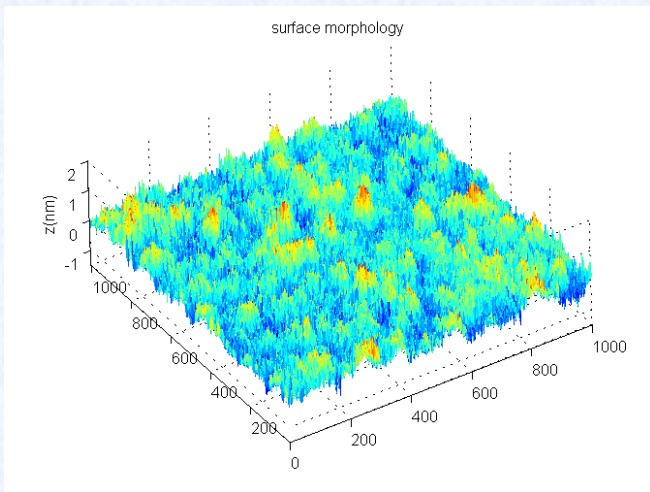
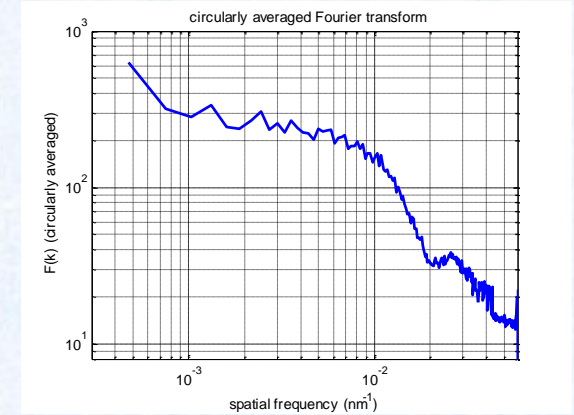
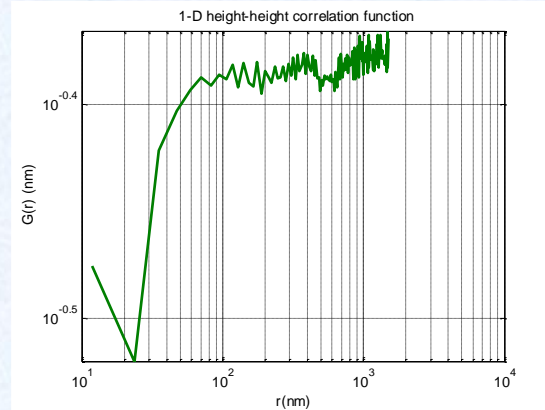
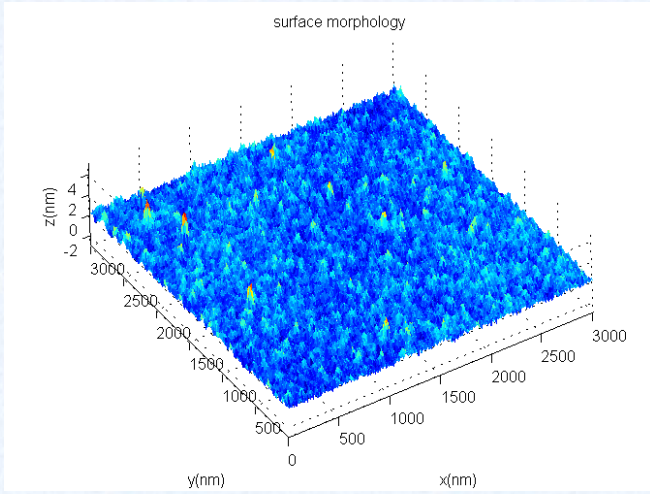
**Figure 1.** Schematic images (top), scanning electron microscopy (SEM) images (middle), and enlarged SEM images (bottom) of a) a low FAuNS (LFAuNS), b) a moderate FAuNS (MFAuNS), and c) a high FAuNS (HFAuNS). The different hierarchical structures of the FAuNSs can be clearly observed.



**Figure 3.** Characterization of the topographical interaction between MCF7 cells and anti-EpCAM-coated flat Au and FAuNS interfaces. Typical environmental SEM (ESEM) images of captured MCF7 cells on a) flat Au interfaces, b) LFAuNS interfaces, c) MFAuNS interfaces, and d) HFAuNS interfaces. The cells captured by the FAuNS interfaces exhibited more filopodia at the cell/substrate interface than the cells on flat Au. As the fractal dimensions of the FAuNS increased, the captured cells stretched out more filopodia.

*Φράκταλ γεωμετρία και εφαρμογές:*  
*3.Νανουλικά:*  
**ΠΟΛΥΜΟΡΦΟΚΛΑΣΜΑΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ**  
**ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ**

# Fractality in real surfaces

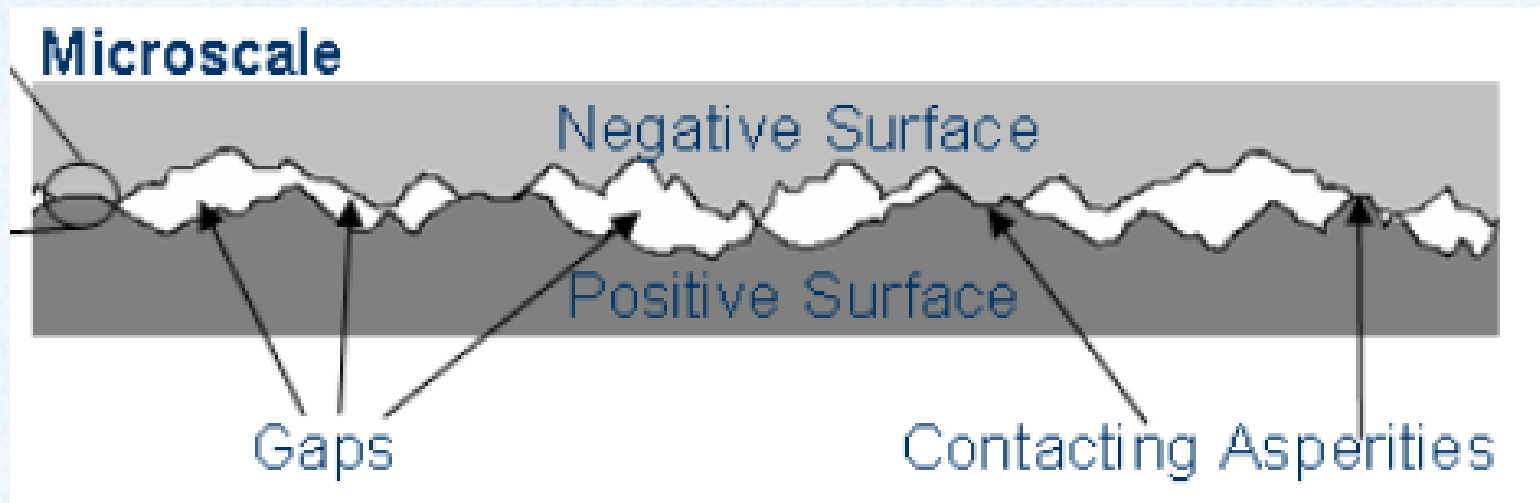


or... Fractals nowhere???

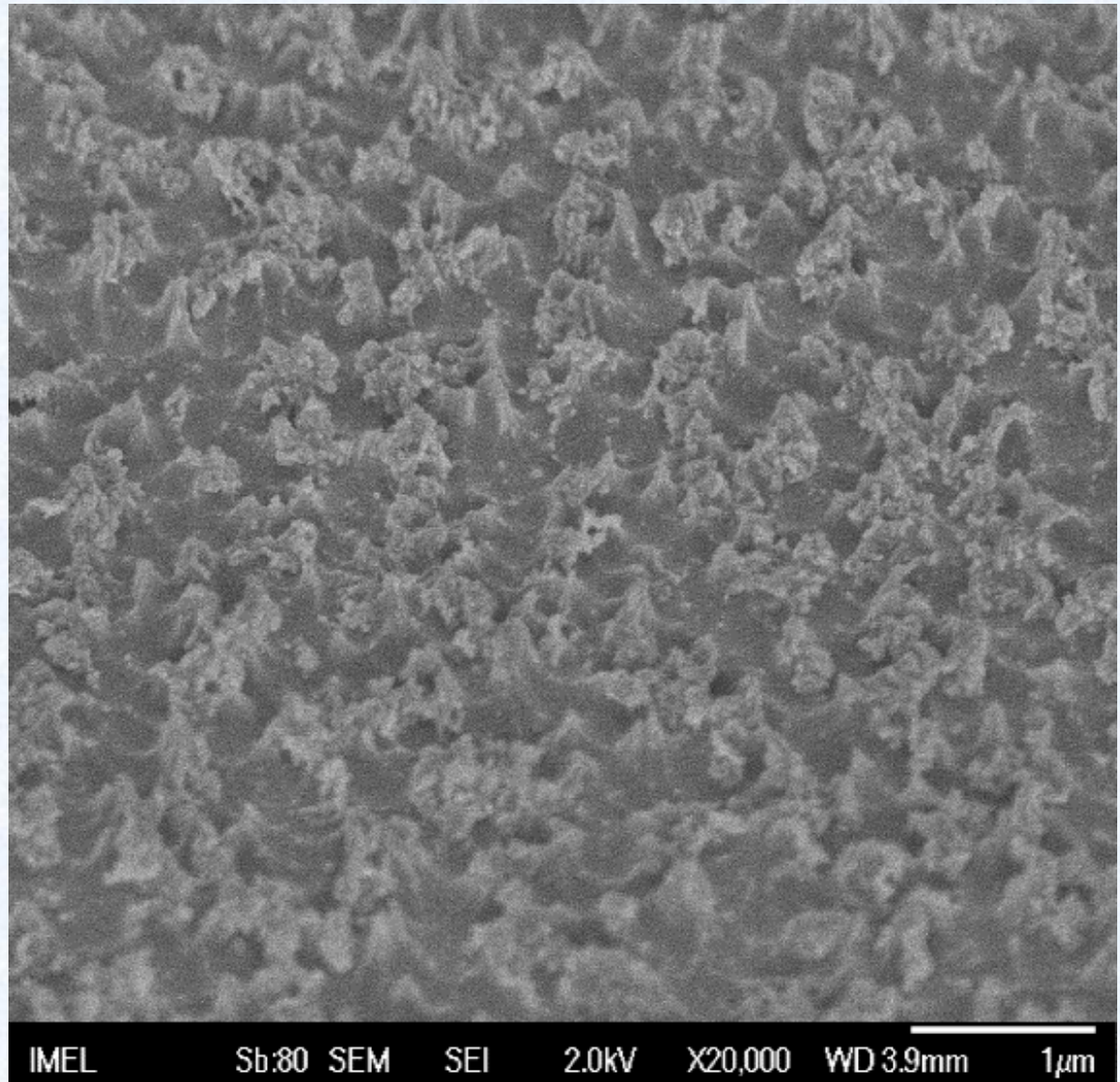
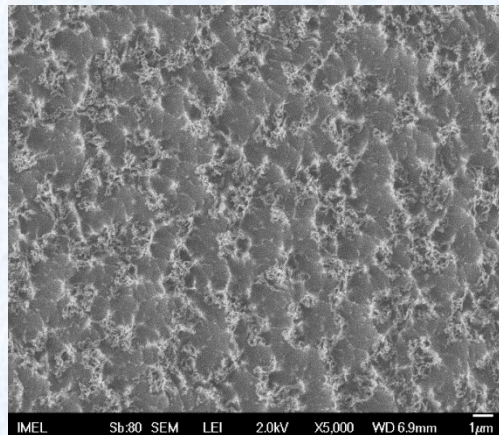
# From fractals to multifractals

Water droplet

Solid substrate



# Πολυμορφοκλασματική ανάλυση επιφανειών (μορφολογική ετερογένεια)





# Μέθοδοι Πολυμορφοκλασματικής ανάλυσης Επιφανειών

25

## Μεταβλητή κλίμακας

- a. Απόσταση σημείων
- b. Χωρική συχνότητα
- c. Πλευρά τετραγώνου  
Τμηματοποίησης

## Μέγεθος χαρακτηρισμού της επιφάνειας

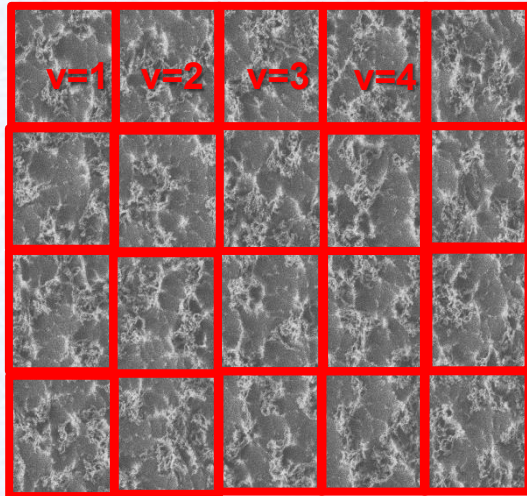
1. Ύψος – Διαφορά υψών
2. Κλίση
3. Διακυμάνσεις

- Μέθοδος καταμέτρησης κουτιών (multifractal Box counting) (c-1)
- Μέθοδος ανάλυσης διακυμάνσεων χωρίς τάση (multifractal DFA) (c-2)
- Μέθοδος συνάρτησης συσχετίσεων διαφοράς ύψους (Height Height Correlation Function) (a-3)

# ΠολυΜορφοκλασματική ανάλυση καταμέτρησης κουτιών

(Διαβαθμισμένη ανάλυση κλιμάκωσης εικόνας/επιφάνειας)

**Βήμα 1<sup>ο</sup>** : Διαμερίζουμε την εικόνα σε ίσα και μη αλληλεπικαλυπτόμενα τετράγωνα



**Βήμα 2<sup>ο</sup>**: Αθροίζουμε όλες τις τιμές φωτεινότητας εντός του τετραγώνου διαμέρισης πλευράς  $s$ , ορίζοντας έτσι την πιθανότητα:

$$P(s, v) = \frac{\sum_{i=1}^s M_{(v-1)s+i}}{\sum_{v=1}^{N_s} \sum_{i=1}^s M_{(v-1)s+i}}$$

**Βήμα 3<sup>ο</sup>**: Ορίζουμε τη συνάρτηση επιμερισμού

$$\chi(s, q) = \sum_{v=1}^{N_s} P(s, v)^q$$

**Βήμα 4<sup>ο</sup>** : Αν η σχέση της κλίμακας διαμέρισης και της συνάρτησης επιμερισμού ακολουθεί έναν νόμο δύναμης  $\chi(s, q) \sim s^{\tau(q)}$  όπου ο εκθέτης  $\tau(q)$  εξαρτάται από το  $q$  με τρόπο διάφορο του  $q-1$  τότε έχουμε πολυμορφοκλασματική συμμετρία.

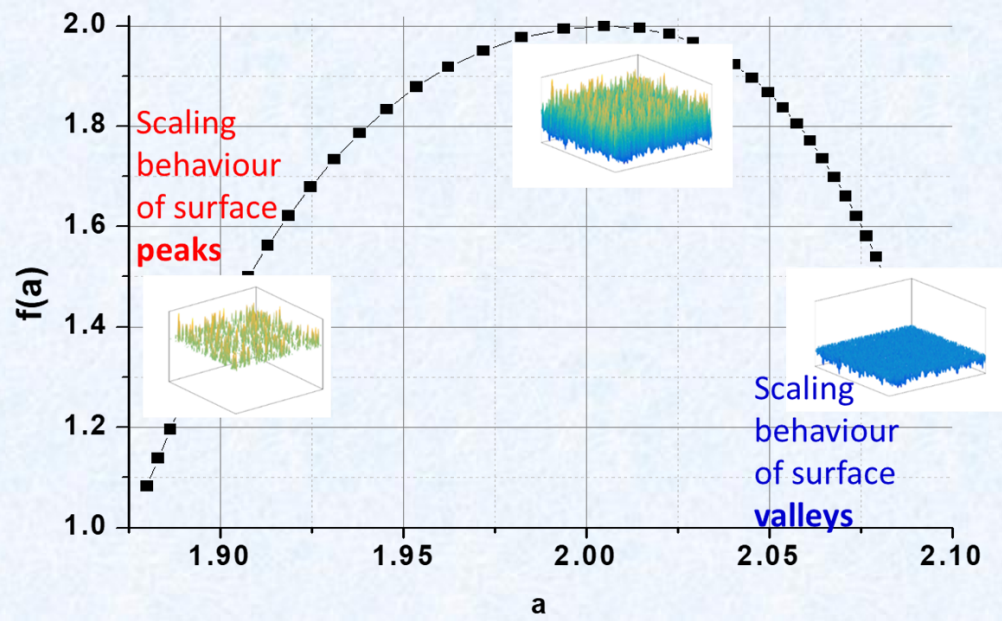
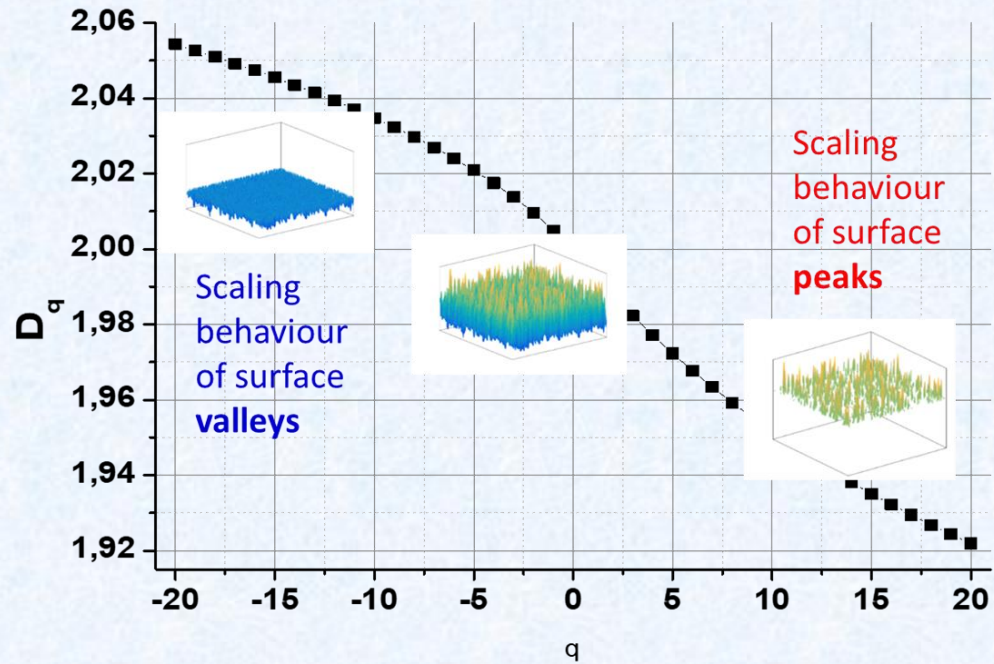
Φάσμα γενικευμένων  
φράκταλ διαστάσεων:

$$D(q) = \frac{\tau(q)}{q-1} \quad \begin{array}{l} \text{Singularity} \\ \text{Spectrum} \end{array} \quad \begin{array}{l} \alpha = d(\tau(q))/dq \\ \mathbf{f}(\alpha) = \alpha q - \tau(q) \end{array}$$

**Μεγάλο θετικό  $q$  (μικρό  $\alpha$ )** : συμπεριφορά κλιμάκωσης των υψηλών σημείων της επιφάνειας (κορυφών)

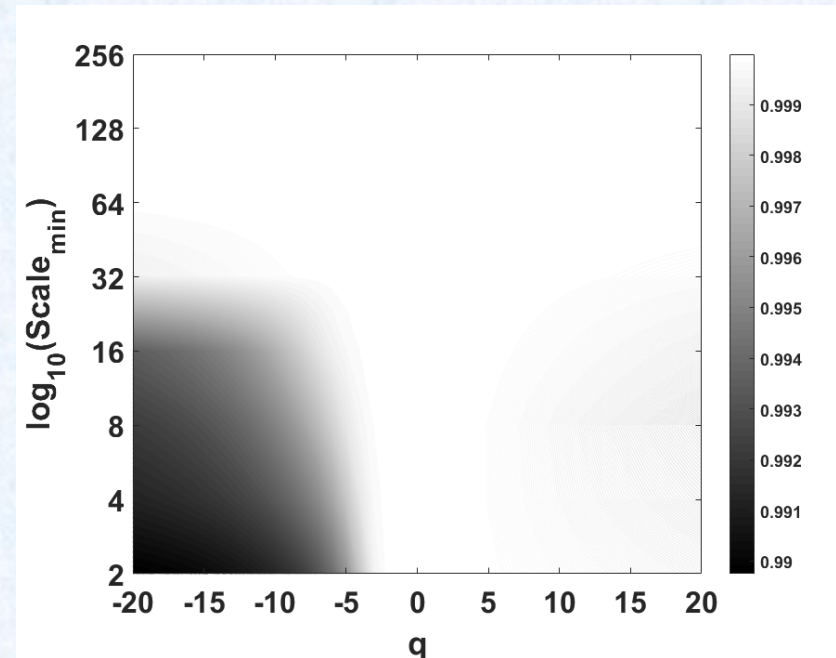
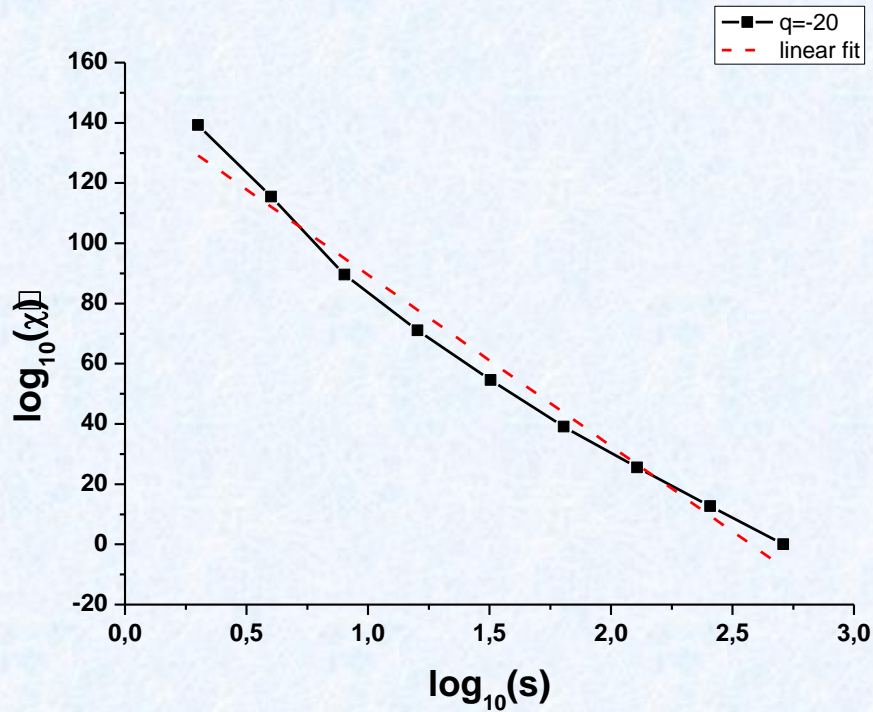
**Αρνητικά  $q$  (μεγάλο  $\alpha$ )** : συμπεριφορά κλιμάκωσης των χαμηλών περιοχών της επιφάνειας (κοιλιάδων)

# Multifractal spectra

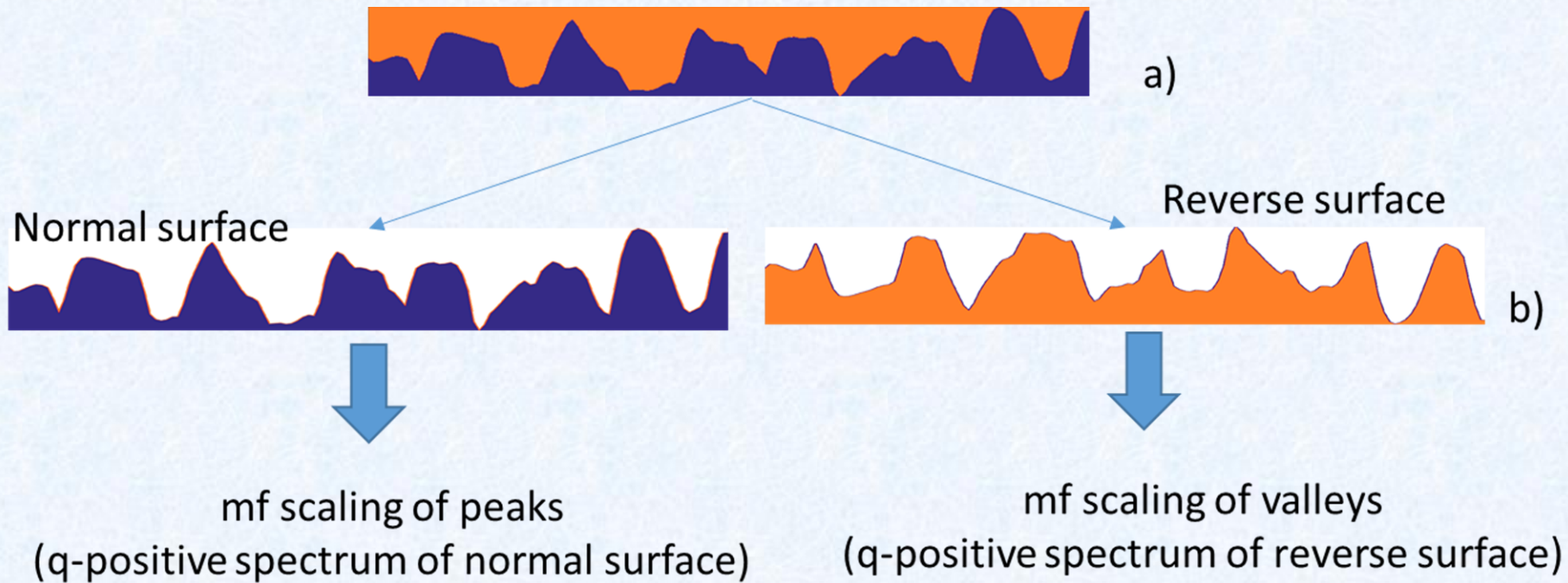


## Problem :

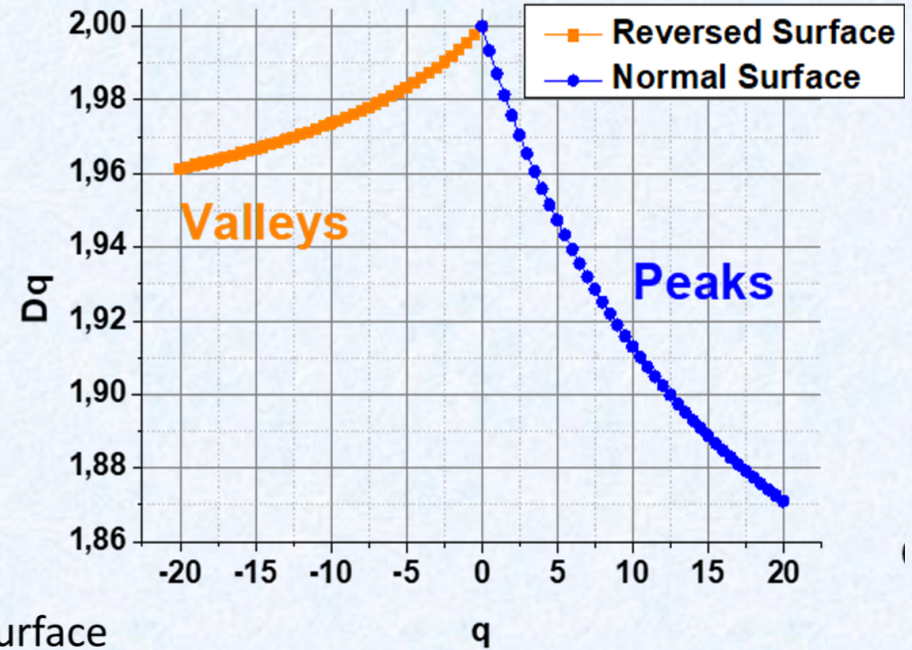
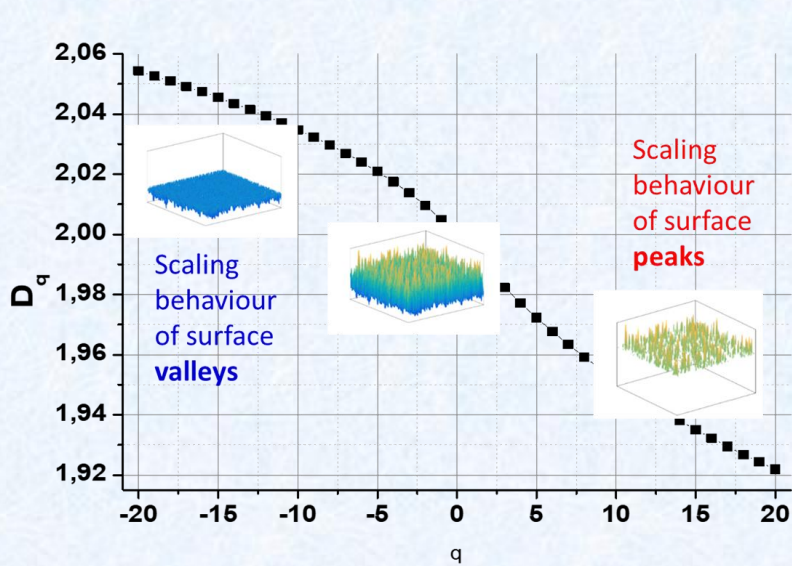
Deviations from power law at valleys: Unreliable results at  $q < 0$



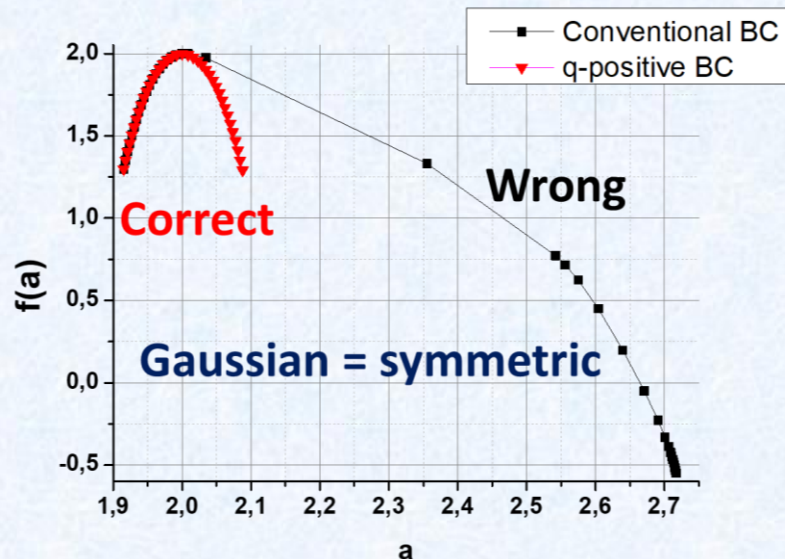
# An alternative method – Q-positive MF-BC analysis



# An alternative method – Q-positive MF-BC analysis



Validation of the method for Gaussian surface

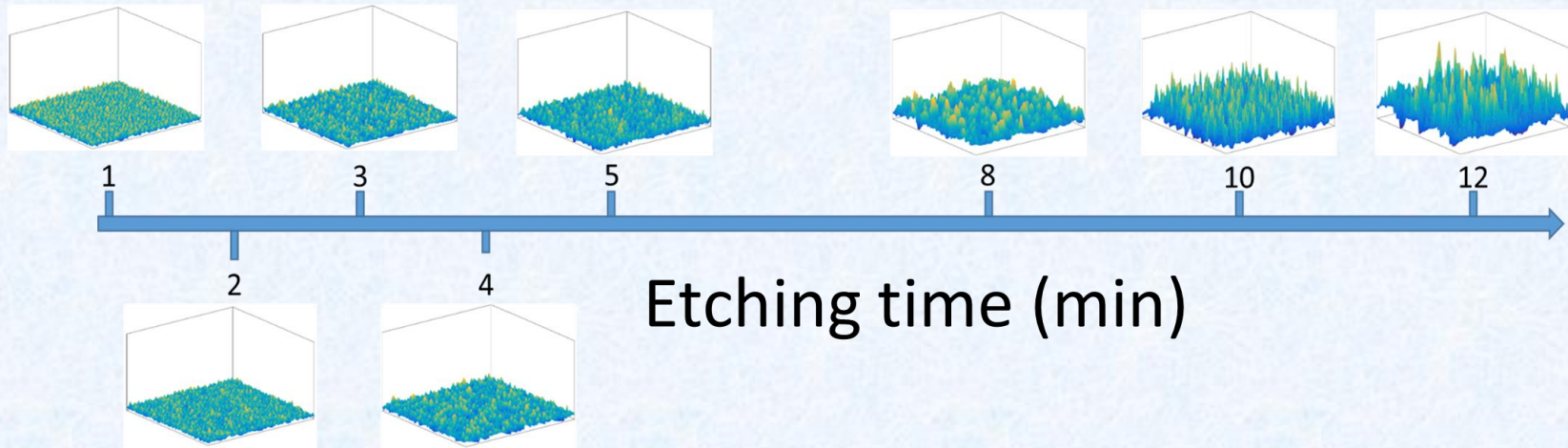


# Application in surface roughness evolution

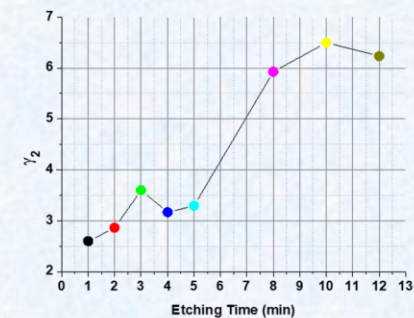
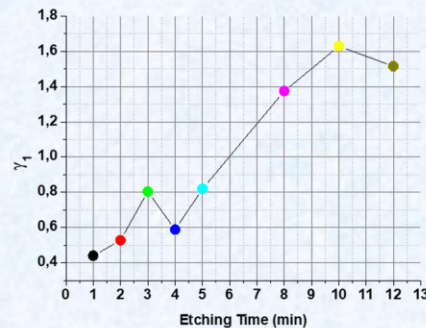
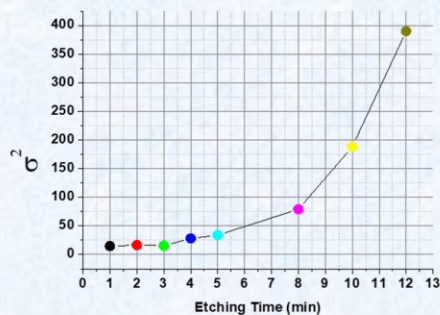
Material : PMMA (polymethyl methacrylate)

Processing : Dry etching with O<sub>2</sub> plasma vs. etching time

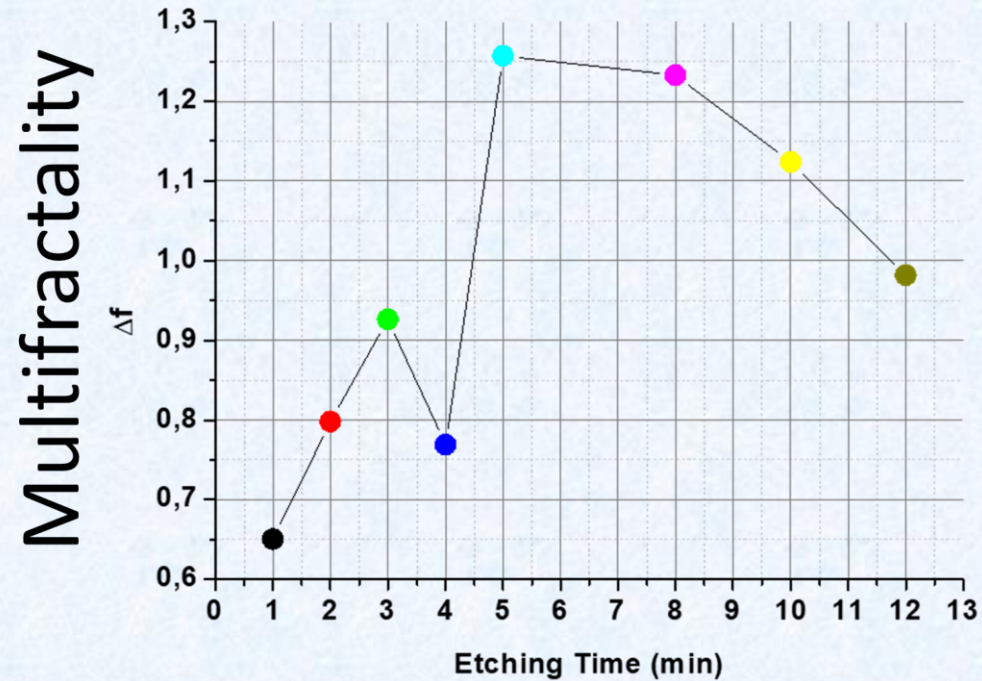
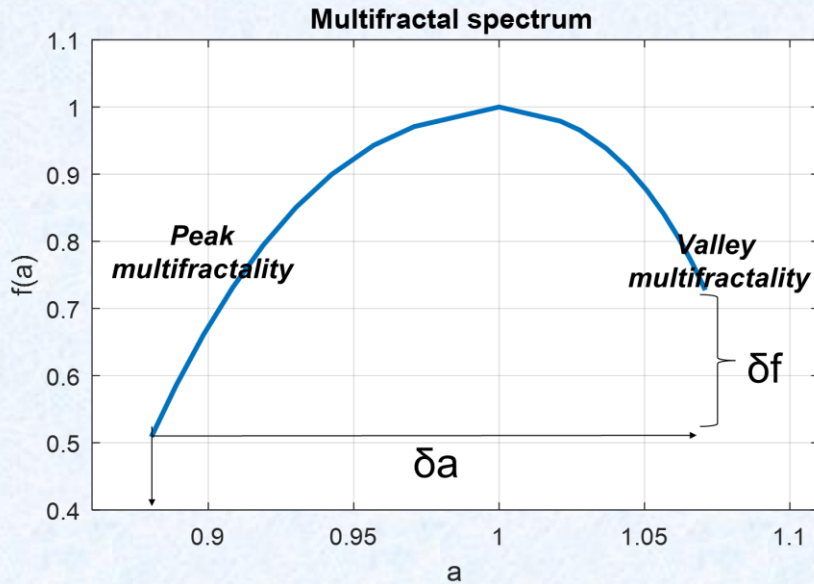
Measurement: AFM images



## Standard (moment) analysis



# Results



- ✓ Multifractality ( $\Delta f$ ) is maximized at the transition (5-8min) from smooth (periodic-like) to very rough PMMA surfaces
- ✓ Multifractality ( $\Delta f$ ) quantifies the scaling heterogeneity of surfaces
- ✓ Multifractal Roughness ( $\Delta\alpha$ ) goes up almost similarly to rms



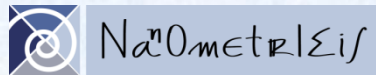


Nanocomplexity solutions  
(fractal/multifractal, entropy,  
anisotropy scaling, ...)

**Algorithms  
Software**



Applied research and industry



NANO-  
INDUSTRY

Έννοιες/ Μέθοδοι	Κατανόηση
Χωρική πολυπλοκότητα	?
Νανοτεχνολογία	?
Πολυμορφοκλασματική ανάλυση	?
Εφαρμογές στη νανοτεχνολογία	?

Entropy increases.  
Complexity first increases, then decreases.



low entropy  
low complexity

medium entropy  
high complexity

high entropy  
low complexity

Ευχαριστώ πολύ!!!!