

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ

На правах рукопису

Грушко Володимир Ігорович

УДК 681.723

Закономірності зміни тунельного струму в системі
голка-зразок еквівалентного тунельного мікроскопа

Спеціальність: 01.04.18 "Фізика поверхні"

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ 1996

44,4
Роботу виконано в Інституті фізики
НАН України ім. В.М.

ДВ 36,842
ЛННБ України ім.В.Стефаніка



00761096 (Т)

Науковий керівник: академік НАН України,
доктор технічних наук,
Новиков Микола Васильович

Офіційні опоненти: академік НАН України,
доктор фіз.-мат. наук,
Находкін Микола Григорович

кандидат фіз.-мат. наук
Тарасенко Олександр Олексійович

Провідна організація: Інститут металофізики НАН України

Захист відбудеться 30.09.14 годин
на засіданні спеціалізованої вченої ради К 01.96.02
при Інституті фізики НАН України за адресою:
252022, м.Київ-22, пр. Науки, 46

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці
Інституту фізики НАН України

Відгуки на автореферат у двох примірниках, завірені печаткою
установи, просимо надсилати на адресу спеціалізованої вченої ради
Інституту фізики НАН України

Автореферат розіслано "30" листопада 1996 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради К 01.96.02
кандидат фіз.-мат. наук

О.В. Пржонська

Актуальність досліджень

Скануюча тунельна мікроскопія- молода, але дуже перспективна галузь науки і техніки, що набуває широкого розповсюдження як новий метод точного дослідження геометрії поверхні та впливу на її структуру на атомарному рівні.

Проведені в роботі дослідження були спрямовані насамперед на вирішення однієї з теоретичних проблем фізичної інтерпретації експериментальних результатів, одержаних за допомогою скануючої тунельної мікроскопії (СТМ)- встановлення достовірності експериментально отриманих СТМ-результатів. Вирішення цього питання пов'язане з необхідністю теоретичного опису поведінки тунельного струму у квантовомеханічній системі голка-зразок при зміні параметрів системи. Такий опис має і самостійне наукове значення.

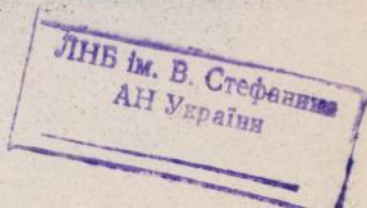
У зв'язку з широким використанням СТМ в різноманітних галузях науки і техніки (нанотехнологія, матеріалознавство, біологія та інш.), насамперед як засобу дослідження наноструктури поверхні об'єкта,- розробка методів коректної інтерпретації експериментальних результатів на основі теоретично дослідженої поведінки тунельного струму в залежності від параметрів квантовомеханічної системи голка-зразок являє собою сучасне, актуальне завдання.

Мета роботи

Вивчати закономірностей поведінки тунельного струму у квантовомеханічній системі голка-зразок скануючого тунельного мікроскопа, та розробка методу чисельної оцінки достовірності експериментально зареєстрованих СТМ-топограм.

Наукова новизна роботи

В результаті проведення досліджень закономірностей зміни тунельного струму в СТМ при зміні параметрів квантовомеханічної системи голка-зразок вперше встановлено існування за деяких умов значної залежності тунельного струму від гостроти та матеріалу голки. Це може суттєво вплинути на роботу СТМ у топографічному режимі та в режимі контрольованої модифікації поверхні, і таким чином на коректність інтерпретації експериментальних результатів. Підраховано, іщо погіршення роздільовальної здатності мікроскопа, яке пов'язане з



виявленим ефектом, становить -1 \AA , що є дуже суттєвою величиною при роботі мікроскопа в топографічному режимі з атомарним розділенням. Визначено умови проведення експерименту, що дозволяють уникнути некоректних результатів.

Вперше проведено розрахунок тунельного струму в системі тонкаплівка-вістря при роботі в контактній зоні ($1+3 \text{ \AA}$) з урахуванням "нелокальності" взаємодії голки і зразка. Мається на увазі врахування ефекту стікання поверхневих електронів зразка в зону на поверхні під голкою, звідки електрони тунелюють у вістря.

Розраховані розміри області ефективного стікання та вказані можливість впливу цього ефекту на достовірність СТМ-топограм.

Розроблено новий метод чисельної оцінки коректності експериментально отриманих СТМ-топограм, який дозволяє встановити достовірність СТМ-зображення з урахуванням параметрів сканування та матеріалів голки і зразка. Метод може бути дуже корисним при дослідженні високовипадкової атомарної структури поверхні. Застосування методу дозволяє дати рекомендації щодо проведення найбільш коректного СТМ-вимірювання.

Практична цінність роботи

Проведені дослідження дали змогу розробити та обґрунтувати методикку прогнозування достовірності результатів експерименту щодо СТМ-топографування поверхні та адієсновати фізично обґрунтований вибір параметрів сканування, матеріалів та гостроти голки СТМ з одержанням найбільш коректних експериментальних результатів.

Особистий внесок автора становлять:

- аналіз результатів дослідження залежності тунельного струму від матеріалів голки та зразка, гостроти голки та параметрів сканування;
- аналіз зв'язку поведінки тунельного струму як функції параметрів сканування, гостроти голки та зразка, при скануванні на малих тунельних відстанях, з корекційною експериментальних результатів;
- розробка моделі квантовомеханічної системи голка-тонка провідна плівка з метою розрахункової оцінки впливу ефекту взаємодії голки і зразка на тунельний струм при малих тунельних відстанях;

- розв'язання на основі розробленої моделі задачі щодо знаходження тунельного струму як функції параметрів системи голка-зразок при скануванні близько до поверхні;
- аналіз результатів дослідження коректності експериментально отриманих СТМ-топограм, та розрахування роздільної здатності мікроскопа;
 - розробка методу чисельної оцінки достовірності СТМ-топограм з урахуванням параметрів сканування та матеріалів голки і зразка.

Достовірність одержаних результатів

Достовірність наукових результатів обґрунтовується використанням сучасних методів теорії скануючої тунельної мікроскопії, а також підтвердженням окремих отриманих результатів в працях інших дослідників.

Положення, висесені на захист:

1. Виявлено існування, за певних умов, сильної залежності тунельного струму від ступеню загострення голки у квантовомеханічній системі голка-зразок СТМ на малих тунельних відстанях ($1-3 \text{ \AA}$). Встановлено, що така поведінка тунельного струму може призвести до помилок у визначенні рельєфу -1 \AA , що є істотною величиною при роботі СТМ у режимі атомарного розділення.

2. У випадку використання атомарно гострих голок, при скануванні на відстанях між голкою та зразком в декілька ангстрем, для отримання найбільш коректного СТМ-зображення доведена доцільність використання голок, виготовлених із монокристалу синтетичного напівпровідникового алмазу.

3. На основі модельного потенціалу голки у вигляді напівнескінченної "гребінки" Дірака розв'язана задача про знаходження поведінки тунельного струму у системі тонка провідна плівка-вістря при малих тунельних відстанях з урахуванням товщини плівки. Отримана залежність тунельного струму від величини тунельного зазору, яка має максимум на відстанях від поверхні -1 \AA , та зроблено висновок про те, що найдостовірніші СТМ-вимірювання атомарної структури шлівок в декілька моношарів з точки зору врахування товщини плівки повинні бути виконані на найбільш однорідних поверхнях.

4. Розроблено метод чисельного оцінювання коректності СТМ-топограм та його алгоритм на мові програмування TURBO PASCAL 7.0. Метод базується на використанні закономірностей зміни тунельного струму як функції параметрів квантовомеханічної системи голка-зразок. Коректність СТМ-топограм оцінювалась, виходячи з вимоги наявності розділення як гофрування поверхні, так і різноманітних "вертикальних" утворень (пластів, сходинок, нерівностей і т.інш.).

5. Подані загальні рекомендації щодо виконання найбільш коректних СТМ-вимірювань, а саме:

- сканування на середніх тунельних відстанях (5+6 А);
- використання при роботі в нанотехнологічному режимі голок із монокристалу синтетичного напіпровідникового алмазу;
- при вивченні атомарної структури поверхні тонких провідних плівок слід запобігати наявності тріщин та інших неоднорідних утворень в прилеглий до зонду області поверхні в декілька квадратних мікрон.

Апробація роботи

Основні положення дисертаційної роботи доповідались на наукових семінарах відділу фізичної електроніки Інституту фізики НАН України та кафедрі кріогенії і мікроелектроніки Національного університету ім. Т.Шевченка.

Результати дисертаційної роботи доповідались також на міжнародній конференції з нанотехнології NANO-II (Москва, 1993), на конференції EMRS 1994 Spring Meeting (Страсбург, Франція, 1994), на Першому Білоруському семінарі з скануючої тунельної мікроскопії (плінарна доповідь). Тези доповідей по темі дисертаційної роботи були прийняті до публікації оргкомітетами конференцій Surface treatment'95 (Мілан, Італія, 1995) та ECASIA'95 (Монтрекс, Швейцарія, 1995).

Публікації

По темі дисертації опубліковано 11 робіт, в яких викладені основні результати проведених досліджень:

1. N.Novikov, I.Androsov, V.Valuisky, V.Grushko, V.Drobizko//
Diamond tip for scanning tunneling microscope/Proceeding of
Second International Conference on Nanometer Scale Science
and Technology (NANO-II).- V2.- pp.419-428 (1994)

2. Новиков Н.В., Грушко В.И., Андросов И.М., Валуйский В.Ю., Дробязко В.В.// Обоснование целесообразности использования в сканирующем туннельном микроскопе (СТМ) игл из синтетического полупроводникового алмаза / Сверхтвердые материалы.- N1.-1996.-стр. 3-12
3. Грушко В.И.// Новый метод численной оценки достоверности СТМ-топограмм/ Техническая диагностика и неразрушающий контроль.- N2.-1996.-стр. 17-21
4. Новиков Н.В., Грушко В.И., Андросов И.М., Валуйский В.Ю., Дробязко В.В.// Проблема достоверности экспериментов по исследованию поверхности тонких проводящих покрытий методом сканирующей туннельной микроскопии/ Сверхтвердые материалы.- N2.-1996.-стр. 43-51
5. Грушко В.И., Новиков Н.В., Андросов И.М., Валуйский В.Ю., Дробязко В.В.//Исследование влияния материала и остроты иглы на величину туннельного тока в системе острие-образец сканирующего туннельного микроскопа / Деп. в ГНТБ Украины, 1994 N 2052-Уп94, 16с.
6. Грушко В.И. Новиков Н.В. Андросов И.М. Валуйский В.Ю. Вычисление туннельного тока в сканирующем туннельном микроскопе при сканировании близко к поверхности / Деп. в ГНТБ Украины, 1994 N 2053-Уп94, 13с.
7. Грушко В.И. Новиков Н.В. Андросов И.М. Валуйский В.Ю. Численная оценка корректности СТМ-топограмм / Деп. в ГНТБ Украины N 2051-Уп94, 13с.
8. V.Grushko, N.Novikov, I.Androsov, V.Valuisky// The quantitative evaluation of the correctness of STM images/ ECASIA'95.- Abstract booklet.- IM 29
9. N.Novikov, I.Androsov, V.Valuisky, V.Grushko //Diamond tip for scanning tunneling microscope/ EMRS'94.- Abstract booklet.- E-II/p11.
- 10.N.Novikov, I.Androsov, V.Valuisky, V.Grushko// Studies of semiconductor for diamond surface by scanning tunneling microscope/ EMRS'94.- Abstract booklet.- E-II/P12.
- 11.Новиков Н.В., Грушко В.И., Андросов И.М., Валуйский В.Ю., Дробязко В.В.// Проблема достоверности экспериментов по

исследованию поверхности тонких проводящих покрытий методом сканирующей туннельной микроскопии / Первый Белорусский семинар по сканирующей зондовой микроскопии, Гомель 1996.- Тез. док.- стр.22

Структура та обсяг роботи

Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, загальних висновків і додатку, викладена на 111 стор. машинописного тексту, містить 19 ілюстрацій. Бібліографія вміщує 95 джерел.

Основний зміст роботи

Вступна глава присвячена опису принципу дії СТМ, основних можливостей скануючої тунельної микроскопії, а також деяких проблем теорії скануючої тунельної микроскопії. У цій главі визначається область досліджень, які складають дисертаційну роботу.

У першій главі роботи викладено обґрунтування основних підходів до знаходження аналітичного виразу для тунельного струму. Увага до цього питання пояснюється тим, що використання функції тунельного струму від параметрів системи голка-зразок покладено в основу інших завдань дисертаційної роботи.

Теоретичному дослідженню закономірностей зміни тунельного струму при варіації параметрів системи голка-зразок та встановленню на цій основі достовірності СТМ-топограм присвячена 2-а та 3-а глави дисертаційної роботи. У 4-й главі роботи подана методика чисельної оцінки достовірності СТМ-топограм з атомарним розділенням. Подібна оцінка корисна при трактуванні СТМ-зображень поверхні, де досягається атомарне розділення.

У заключній главі наведені загальні рекомендації щодо виконання найбільш коректного СТМ-вимірювання з урахуванням методів, викладених у попередніх розділах дисертації.

Окрім названих глав, у роботі поданий додаток із математичними викладками та алгоритмом чисельного розрахунку достовірності СТМ-топограм.

Наведена бібліографія з проблематики дисертації.

Основний зміст вступної глави

Повтора десятиліття минуло з того часу, коли швейцарськими фізиками, нобелівськими лауреатами 1986г. Гердом Біннігом та Генріхом Рорером був створений скануючий тунельний мікроскоп (СТМ). Його принцип дії полягає в скануванні голкою мікроскопа поверхні досліджуваного зразка та в ресстрації тунельного струму, який обумовлений прикладеною між голкою та зразком напругою. Велике наукове і практичне значення цього нового приладу постійно підтверджується з часом. Дія СТМ основана на квантовомеханічних закономірностях і, таким чином, можливості роздільної здатності наближаються до фундаментальних фізичних можливостей. За допомогою скануючої тунельної мікроскопії набули розвитку нові методи дослідження поверхні твердих тіл, які дозволяють "побачити" нанотопографію з атомарним розділенням, що є часто неможливим навіть для кращих електронних мікроскопів.

До переваг дослідження топографії та локальної спектроскопії поверхні за допомогою СТМ можна віднести неруйнівний характер аналізу, який обумовлений відсутністю механічного контакту та низькою енергією електронів тунельного зонда, можливість роботи в широкому інтервалі температур не тільки в вакуумі, але й в звичайних атмосферних умовах, в діелектричних та провідних рідинах. Висока швидкість формування зображення поверхні з атомарним розділенням дозволяє використовувати СТМ-методи у динамічному режимі для спостереження "in situ" процесів кристалізації, адсорбції і дифузії, травління та хімічних реакцій на атомарному рівні.

Крім того, можливість контрольованого впливу на поверхню, що досліджується на атомарному рівні, відкрила широкі перспективи застосування СТМ в різноманітних операціях нанотехнології, біології та інших галузях науки і техніки, які пов'язані з поверхнями.

Основний зміст першої глави

Відомі спроби створення теорії тунельних переходів у тривимірній геометрії ґрунтуються, в цілому, на використанні гамільтоніану переходу теорії збурень. Однак, в деяких випадках знаходження величини тунельного струму є суттєво непертурбативною задачею. Зокрема, при скануванні голкою близько до поверхні ($1+3 \text{ \AA}$) взаємодія між голкою та

зразком не можна вважати слабкою. Це підтверджується експериментальними дослідженнями Гімзевського та Мьолера, які виміряли електричний опір між голкою та зразком (у контактній зоні). Вони знайшли, що опір тунельного проміжку зменшується при зменшенні тунельної відстані спочатку експоненціально, як і можна було очікувати за формулами теорії збурень. Але при дуже малих відстанях цей опір виходить на плато, пояснити наявність якого без урахування суттєвої взаємодії між голкою мікроскопа та зразком не можливо.

З цих причин в роботі використовуються непертурбативні методи, які дозволяють здійснювати аналіз закономірностей поведінки тунельного струму при будь-яких тунельних відстанях, враховуючи і контактну область.

Основний зміст другої глави

Із принципу дії СТМ можна зробити висновок, що розуміння закономірностей зміни тунельного струму має першочергове значення для трактування експериментальних результатів. Задача теоретичної інтерпретації СТМ-зображень полягає перш за все в аналізі їх достовірності, тобто у в'ясуванні ступіню відповідності реального рельєфу отриманій СТМ-топограмі.

Зрозуміло, що не зв'язана зі зміною рельєфу варіація величини тунельного струму призводить до спотворення СТМ-топограми досліджуваної поверхні. Джерелом подібної варіації може стати вібрація СТМ та випадковий контакт голки з поверхнею зразка, що призводить до деформації вістря або, наприклад, польове випаровування та міграція атомів голки, що змінює ступінь загострення закінчення. Це стає можливим внаслідок великої ($\sim 10^8$ В/см) напруженості електричного поля поблизу закінчення голки.

Щоб встановити достовірність СТМ-топограми необхідно виявити некоректні режими сканування (тобто такі режими, при яких можливе суттєве змінювання тунельного струму не зв'язане зі зміною рельєфу поверхні при скануванні). Для цього потрібно виявити від яких параметрів системи голка-зразок (у тому числі параметрів сканування) суттєво залежить величина тунельного струму.

Метою цієї глави було встановити, чи впливає суттєво зміна ступеню загострення вістря на величину тунельного струму у системі

голка-зразок СТМ і, якщо цей вплив має місце, то як він зв'язаний з матеріалом голки та режимом сканування. Подібний розгляд може виявитися особливо корисним при аналізі роботи СТМ у режимі активної взаємодії з поверхнею, як правило, при малих тунельних відстанях. Мабуть на увазі робота СТМ, наприклад, за методом польової нанодеформації, зміни фазового складу та інш. Дослідження впливу ступеню загострення голки у згаданих режимах виявляється важливим при оцінюванні достовірності топограм у ході спостереження *in situ* відповідних процесів на поверхні.

Для знаходження величини тунельного струму в системі голка-зразок СТМ і аналізу її поведінки з урахуванням природи матеріалу та гостроти голки використовувалась модель та метод Сакса і Ногусри. Метод Сакса і Ногусри не є пертурбативним і тому, як випливає із сказаного раніше, він виявляється коректним у застосуванні до малих відстаней між голкою мікроскопа та поверхнею досліджуваного зразка. Тут враховується ефект взаємного відбиття електронних хвиль від голки та поверхні зразка, і це дозволяє пояснити наявність максимуму провідності тунельного проміжку, експериментально виявленого Гімзевським та Мюлером.

Модель квантовомеханічної системи голка-зразок, яка використана Саксом і Ногусрою при розрахуванні тунельного струму така: голка СТМ моделюється напівнескінченим ланцюгом сферичних потенціальних ям заданої глибини та радіусу R , які розділені відомою відстанню a . На геометрію зразка практично ніяких обмежень не накладається. Слід підкреслити, що метод враховує випадок неплоскої поверхні (тобто сходинок, адатомів, адсорбати і т.і.). Ступінь гостроти та матеріал голки задаються радіусом ям R та постійною кристалічної ґратки a .

Повна система рівнянь, яка однозначно описує поведінку тунельного струму в системі голка-зразок, отримується в результаті сумісного розв'язку рівняння Ліппмана-Швінгера (LS) для тунельного струму і, так званої підбиральної процедури для хвильової функції.

Вихідний вираз для тунельного струму в системі голка-зразок, який використовується при аналізі, має вигляд:

$$I = \frac{4e^2}{h} U \operatorname{Im} \lambda \frac{A(\vec{r}, E_r)}{D}$$

де:

I - величина тунельного струму;

e -заряд електрона;
 U -різниця потенціалів між голкою і зразком;
 h -постійна Планка;
 Γ -коефіцієнт, пропорційний уявній частині
 коефіцієнту відбиття електронних хвиль від голки;
 ρ -локальна електронна густина станів (ЛЕГС);
 E_F -рівень Фермі зразка;
 D -ренормалізуючий ЛЕГС знаменник.

Дослідження залежності тунельного струму від природи матеріалу та гостроти голки виконувалась чисельними методами.

Як свідчить аналіз, резонансна поведінка залежності провідності тунельного проміжку від відстані між голкою та поверхнею досліджуваного зразка має додатковий сплеск та стає крутішою в області значень R і a , де виконується умова: $R/a \approx 1$. Слід зазначити, що в усій дослідженій області значень R (від 1 до 100 Å) при зміцванні R і фіксованому значенні постійної ґратки голки зміщення максимума провідності по осі відстані голка-зразок не відбувається. Однак використання голок, виготовлених з матеріалів з більшими постійними ґраток, при постійному R , призводить до зміщення максимуму провідності праворуч по осі відстані між електродами (тобто в напрямку віддалення максимуму від поверхні зразка). При цьому це зміщення з великою точністю описується законом $\Delta a = 2\Delta Z_{max}$, де Δa -зміна постійної ґратки, ΔZ_{max} -зміна положення максимуму провідності по осі тунельного проміжку.

Аналіз дозволяє встановити наявність певного зв'язку провідності тунельного проміжку σ , постійної кристалічної ґратки голки a , та радіусу заострення R остаточної. При виконанні умови: $R/a = A$, ($A \approx 1$), де A -константа, яка розраховується для кожної окремої системи голка-зразок, спостерігається мінімум провідності тунельного проміжку σ_{min} (при цьому $\sigma_{min} \approx 0$). Якщо в цьому випадку, зафіксувавши a (голки зроблені з одного матеріалу), збільшувати радіус закруглення вістря, то це призведе до збільшення провідності тунельного проміжку до його максимального значення σ_{max} ($\sigma_{max} \approx 2e^2/h$) (ділянка a на рис.1). Потім, зі збільшенням R , провідність тунельного проміжку зменшується до деякої фіксованої величини σ_{fixed} (ділянка b на рис.1), і подальша зміна R практично не впливає на провідність (ділянка c на мал.1).

Така поведінка тунельної провідності має місце для матеріалів з постійною ґратки від 1 до 7 Å. Практично усі матеріали, які використовуються при виготовленні голок, такі, як вольфрам, золото, платино-іридієві сплави, напіпровідниковий алмаз та інші, мають кристалічні ґратки, постійні яких належать до вказаного діапазону.

Слід зазначити те, що як було сказано раніше, залежність провідності тунельного проміжку від гостроти голки, що розглядається, була отримана при фіксації величині тунельного зазору Z_0 , рівній положенню максимуму провідності Z_{max} . Якщо провести розрахунки при значенні Z_0 , яке відрізняється від Z_{max} , це призведе до зменшення σ_{max} до значення σ_{orig} .

Слід підкреслити також, що для зміни тунельної провідності від мінімальної до максимальної величини в деяких випадках буває достатнім зміння гостроти голки на величину порядку 0.5 Å.

Основні обчислення проведені при тунельній напрузі 0.1 В. Збільшення тунельної напруги призводить до згладжування резонансної залежності.

При зростанні різниці між значенням постійної ґратки матеріалу голки та ступінем її загострення, залежність величини тунельного струму від радіуса закруглення закінчення голки слабшає. При скануванні досить далеко від поверхні (~5 Å) голкою з постійною кристалічної ґратки в декілька ангстрем та радіусом закруглення вістря в декілька разів більшим, зменшення радіуса закруглення на 1 Å може привести до зміни провідності тунельного проміжку на величину порядку $10^{-4} e^2/h$.

Існування обговореної вище резонансної поведінки провідності тунельного проміжку має велике значення для оцінки коректності результатів експерименту при роботі СТМ на малих тунельних відстанях з метою контрольованого впливу на досліджувану поверхню та коректності експериментально отриманих у цьому режимі СТМ-зображень, наприклад, при спостереженні "in situ" процесів термопольового запису інформації.

Виконані оцінки дозволяють стверджувати, що помилка у визначенні рельєфу по нормалі, при скануванні близько до поверхні, лежить в діапазоні 0.1+1 Å, тобто виявляється досить істотним при роботі СТМ у режимі атомарного розділення.

Для вирішення проблеми отримання найбільш коректного СТМ-зображення можна запропонувати:

1.) Використання для виготовлення голок можливо більш формостійких матеріалів. Практично ідеальним варіантом може бути використання голки із монокристалу синтетичного напіпровідникового алмазу.

2.) Сканування у режимі, при якому величина тунельного проміжку в декілька разів відрізняється від відстані між поверхнею зразка та положенням максимума провідності.

Основний зміст третьої глави

У цій главі приведено розв'язок задачі про знаходження виразу для тунельного струму в системі тонка плівка-вістря з урахуванням товщини плівки. Товщина плівки може впливати на тунельний струм завдяки ефекту стікання електронів на поверхні плівки до області локалізації вістря, звідки електрони тунелюють у голку. Ця "тунельна" область поверхні зразка обмежена радіусом каналу тунелювання, який для атомарно гострих голок становить декілька ангстрем. Область поверхні зразка, звідки електрони ефективно стікають в "тунельну" область, може виявитися значно (на декілька порядків) більше останньої, і таким чином, на тунельний струм буде впливати структура зразка не тільки в прилеглий до голки "тунельній" області, але також і в її околі, який обмежений областю ефективного стікання зарядів $V_{\text{н}}$. Це, в свою чергу, вплине на достовірність СТМ-топограм (бо а priori припускається, що СТМ-топограма утворюється виходячи із структури поверхні виключно в "тунельній" області). Отже, здається цікавим оцінити розміри ефективною області стікання. Така оцінка виконується виходячи із розгляду виразу для тунельного струму в системі голка-зразок, модель якої подана на рис.2.

Матеріали голки та зразка у поданій моделі задаються рівнями Фермі та постійною кристалічної ґратки голки, а режим сканування-шириною тунельного бар'єру та прикладеною тунельною напругою.

Метод знаходження хвильової функції тунельного електрона, використаний у цій главі, базується на формалізмі рівняння Ліппмана-Швінгера (LS). Цей підхід дозволяє уникнути труднощів, що пов'язані з

некоректністю використання теорії збурень на малих відстанях між голкою мікроскопа та зразком.

Загальний тунельний струм в системі голка-зразок СТМ остаточно виражається через нормальну густина потоку j_z за формулою:

$$I = \frac{e^3}{2\pi^2 \hbar^2} k_F m V_{\text{Ф}} V \int j_z dS, \quad (*)$$

тобто інтегруванням j_z по площині, паралельній площині поверхні зразка.

У написаній вище формулі:

e, \hbar, m - заряд електрона, постійна Планка та маса електрона

відповідно,

$V_{\text{Ф}}$ - тунельна напруга та хвильовий вектор, відповідний до енергії

Фермі зразка.

$V_{\text{Ф}}$ - область ефективного стікання.

Одержана за формулою (*) залежність провідності тунельного проміжку від відстані між голкою та зразком подана на рис.3.

Очевидна наявність резонансної поведінки тунельної провідності як функції відстані між шпильом та поверхнею в контактній області. На відміну від теорії тунелювання Сакса і Ногусри, у даному випадку положення максимуму слабо залежить від постійної кристалічної ґратки матеріалу голки. Типове значення координати максимуму по осі відстаней між голкою та зразком становить величину порядку 1 Å, при варіації постійної кристалічної ґратки від 1 до 7 Å. Як і в теорії Сакса і Ногусри, резонансний характер залежності тунельної провідності від міжелектродної відстані обумовлений відбиттям голкою електронних хвиль.

Величина $V_{\text{Ф}}$ оцінювалася виходячи із залежності провідності тунельного проміжку від його величини, у відповідності з теоріями Ферера, Сакса та Ногусри. Площа поверхні зразка $S_{\text{Ф}}$, з якої електрони ефективно стікають у локальну до вістря область S_z , звідки вони потім тунелюють в голку, оцінювалася виходячи із значення $V_{\text{Ф}}$ та товщини покриття. Встановлено, що коли при скануванні відстань між голкою та зразком становить декілька ангстрем, для плавко завтовшки в декілька моносарів виконується умова: $S_{\text{Ф}} \gg S_z$. Отже, можна зробити висновок про те, що в даному випадку величина тунельного струму та відповідно результат СТМ-вимірювання визначається не тільки структурою найближчою до голки структурою ділянки поверхні зразка, але й структурою цієї поверхні на площі $S_{\text{Ф}}$. З цієї точки зору, найбільш

коректні СТМ-вимірювання поверхневої структури тонких плівок повинні бути отримані на найбільш однорідних поверхнях. Можливо також зробити висновок, що при вимірюванні високовипадкової поверхні достовірність СТМ-вимірювання буде підвищуватися із зменшенням поля сканування.

Як впливає з розрахунків, при збільшенні на декілька порядків товщини покриття чи в декілька разів величини тунельного проміжку тунельний струм практично не залежить від товщини плівки, у цьому випадку відповідно ефект стікання електронів не впливає на формування СТМ-топограми.

Основний зміст четвертої глави

Одним із головних напрямків використання СТМ є вивчення структури поверхні на атомарному рівні. Тут першочергове значення мають питання, пов'язані із обчисленням роздільної здатності мікроскопа та аналізом коректності зображень структур, що вивчаються. Роздільну здатність мікроскопа у горизонтальному та вертикальному напрямках можливо оцінити, виходячи із відомої точності підтримування постійного значення тунельного струму. Якщо розміри структур на топограмі виявляються меншими роздільності мікроскопа у відповідних напрямках-робиться висновок про некоректне СТМ-вимірювання цих структур. Слід наголосити на те, що внаслідок певного зв'язку роздільної здатності в горизонтальному та вертикальному напрямках з точністю підтримування постійного значення тунельного струму, коректно вимірюючи структурою слід вважати таку, вертикальні та горизонтальні розміри якої можливо виміряти при існуючій точності ресстрації струму. Таким чином, періодичність та наявність певних розмірів структури в одному з напрямків не є достатньою умовою коректності вимірювання. Саме на цьому питанні загострена увага у цій главі.

Терсофом доведено, що атомарна структура поверхні зразка легше розділяється на малих відстанях голка-зразок. Як правило, на практиці відомі параметри сканування та точність підтримування постійного значення тунельного струму (назвемо її еталонною), при яких досягається атомарне роздільня в горизонтальній площині. Однак часто умови експерименту вимагають сканування достатньо далеко від поверхні (для того, щоб уникнути, наприклад, механічних ефектів взаємодії зразка та

голки, зменшити вірогідність тунелювання атомів, уникнути нагрівання зонда та інш.). Апаратна точність ресетрації постійного тунельного струму є фіксованою величиною, тому може виявитися, що при збільшенні тунельного проміжку, для розділення гофрованої поверхні наявної точності підтримування постійної величини тунельного струму буде недостатньо. Крім того, в різних ділянках поля сканування сама текстура поверхні може бути різною, отже атомарне розділення, яке має місце в одному випадку, не буде мати місця в іншому.

У цій главі наведені результати чисельної оцінки необхідної для розділення атомів уздовж горизонтальної осі точності η підтримування постійного тунельного струму. Знаючи поведінку цієї точності як функції тунельної відстані Z , можна оцінити діапазон тунельних відстаней, при яких дана атомарна структура поверхні зразка може розділитися. Чисельна оцінка виконана з використанням запропонованої Терсофом функції розділення $F(\vec{C})$ (\vec{C} -вектор зворотньої кристалічної ґратки поверхні). Виходячи із знайденої точності стеження струму була отримана залежність допустимої помилки ΔZ у визначенні рельєфу по нормалі як функція довжини хвилі поверхні. Ця залежність може бути відображена графічно у амплітудно-хвильовому просторі і суміщена з робочою зоною мікроскопа. Аналізуючи отриманий графік, можливо зробити висновок про діапазон довжин хвиль, які при заданих параметрах сканування можуть бути коректно виміряні.

Вираз для точності η підтримування постійного тунельного струму, яка забезпечує досягнення атомарного розділення, має вигляд:

$$\eta(z) = \eta_0 \frac{I_0(\vec{p})\tilde{F}(\vec{C}_s, z - z_0)}{I(\vec{p}_0)\tilde{F}(\vec{C}_0)}$$

Тут: \vec{C}_s -структурний (відповідний до постійної кристалічної ґратки поверхні) вектор.

\vec{p} -Фур'є-образ функції коректності. \vec{p}_0 - вектор параметрів сканування.

Індекс "st" позначає еталонні параметри системи голка-зразок, тобто такі параметри, при яких гарантованим є атомарне розділення (як тестові експерименти щодо наявності атомарного розділення звичайно використовують експерименти по спостереженню атомарної структури графіта та кремнію).

Величина ΔZ , яка являє собою помилку у визначенні рельєфу по нормалі, допустиму для розділення гофрування поверхні, як функція режиму сканування, матеріалу голки (що визначають величину тунельного струму I_0 та структури поверхні зразка знаходиться із співвідношень:

$$\begin{cases} I(\vec{p}, z) = I_0 \\ I(\vec{p}, z + \Delta z) = I_0 + I_0 \eta(z) \end{cases}$$

Діапазон довжин хвиль поверхні, де апаратна помилка у визначенні поверхневого рельєфу уздовж осі голки більше, ніж помилка, яка допустима для розділення поверхневої гофрування, визначається діапазоном, що вимірюється некоректно. Відповідно СТМ-зображення таких хвильових структур повинно бути визнано некоректним. Цьому діапазону відповідає область довжин хвиль ліворуч від точки С перетину залежності ΔZ як функції довжини хвилі поверхні з нижньою межею робочої зони мікроскопа (див. рис.4).

Як видно із рисунка 4, найлегше розділюється поверхнева атомарна структура з більшою постійною ґратки. Поверхнева атомарна структура доступніша для спостереження на малих тунельних відстанях. Однак на підставі виконаних розрахунків можливо стверджувати, що навіть далеко від поверхні (5+6 Å), при апаратній точності підтримування постійного тунельного струму 25%, та радіусі закруглення голки ≈ 3 Å, кристалічна комірка більш за 3 Å з гофруванням більш 0.1 Å по вертикалі, буде достовірно вимірля.

Загальні висновки:

1. На основі методу Сакса і Ногуєри поставлена та розв'язана задача про вплив природи матеріалу та гостроти голки на величину тунельного струму у квантовомеханічній системі голка-зразок СТМ. Подібний розгляд може виявитися особливо корисним при аналізі роботи СТМ на малих тунельних відстанях (1+3 Å).

2. Виявлено існування, за певних умов, сильної залежності тунельного струму від ступеню загострення голки. Встановлено, що така поведінка тунельного струму може призвести до помилки у визначенні рельєфу -1 Å, що є істотною величиною при роботі СТМ у режимі атомарного розділення.

3. У випадку використання атомарно гострих голок, при скануванні на відстанях між вістрям та зразком в декілька ангстрем, для отримання

найбільш коректного STM-зображення доведена доцільність використання голок виготовлених з монокристалу синтетичного напівпровідникового алмазу.

4. На основі модельного потенціалу голки у вигляді напівнескінченної "гребінки" Дірака вперше поставлена і розв'язана задача на знаходження тунельного струму у системі тонка плівка-вістря при малих тунельних відстанях з урахуванням "нелокальної" взаємодії голки та зразку, тобто стікання поверхневих електронів зразку до області локалізації голки. Отримана залежність тунельного струму від величини тунельного зазору, яка має максимум на відстанях від поверхні $\sim 1 \text{ \AA}$, та зроблено висновок про те, що надостовірніші STM-вимірювання поверхневої структури провідних плівок в декілька моношарів з точки зору "нелокального" ефекту повинні бути виконані на найбільш однорідних поверхнях.

6. Розроблено метод чисельного оцінювання коректності STM-топограм та його алгоритм на мові програмування TURBO PASCAL 7.0. Метод базується на використанні закономірностей зміни тунельного струму як функції параметрів квантовомеханічної системи голка-зразок. Коректність STM-топограм оцінювалась виходячи з вимоги наявності розділення як гофрування поверхні, так і різноманітних "вертикальних" утворень (пластів, сходинок, нерівностей і т.п.).

7. Подані загальні рекомендації щодо виконання найбільш коректних STM-вимірювань, а саме:

- сканування на середніх тунельних відстанях (5-6 \AA);
- використання при роботі в нанотехнологічному режимі голок із монокристалу синтетичного напівпровідникового алмазу;
- при вивченні атомарної структури поверхні тонких провідних плівок слід запобігати наявності тріщин та інших неоднорідних утворень в прилеглій до зонду області поверхні в декілька квадратних мікрон.

Грушко В.И. Закономерности изменения туннельного тока в квантово-механической системе игла-образец сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Автореферат дис. канд. физ.-мат. наук по специальности 01.04.18. "Физика поверхности". Институт физики НАН Украины, г. Киев. 1996г.

Защищаются результаты исследования поведения туннельного тока и метод количественной оценки корректности СТМ-изображений.

Установлены параметры квантово-механической системы игла-образец (материал и острота иглы), которые могут привести к некорректному измерению поверхностной структуры образца, при сканировании на небольших расстояниях между иглой и образцом.

Исходя из требования наличия разрешения как "вертикальной" структуры на поверхности (ступеньки, адатомы, и т.п.), так и складчатости поверхности, предложен метод численной оценки корректности СТМ-изображений. Метод учитывает параметры сканирования, технические характеристики микроскопа и атомарную структуру электродов.

Grushko V.I. *The regularities of the tunnel current variations in the quantum-mechanical system tip-sample of the scanning tunneling microscope (STM)*. Abstract of the thesis of Cand. Phys.-Math. Sci. in the speciality 01.04.18 "Physics of surfaces". Institute of Physics, NASU, Kiev 1996.

The results of investigations of the tunnel current behaviour and the quantitative evaluation method of the correctness of STM images are defended.

The parameters of the tip-sample quantum-mechanical system (material and sharpness of tip), that can lead to incorrect measurements of the sample surface structure while scanning with small tip-sample separations are determined.

The method for evaluation of the correctness of STM images, based on the demand of resolving both the "vertical" structure of surface (steps, adatoms, etc.) and the surface corrugations is proposed. The method makes allowance for the parameters of scanning, the instrument parameters of STM and the atomic structure of electrodes.

Ключові слова: скануюча тунельна мікроскопія (СТМ), тунельний струм, СТМ-зображення, достовірність СТМ-топограм.

Рис.1
Залежність провідності тунельного проміжку від радіусу закруглення голки.

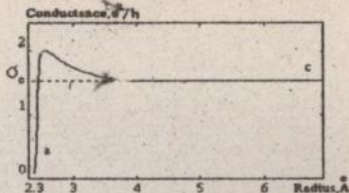


Рис.2
На рисунку: ψ -постійна кристалічної ґратки голки. Область I являє собою зразок, область II-тунельний проміжок, область III-голка. Площина S розганічує області I та II. За являє собою ширину тунельного бар'єру, V -різниця потенціалів між голкою та зразком, U -висота тунельного бар'єру. E_F -рівень Фермі зразка.

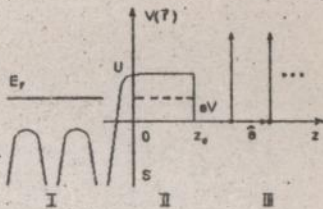


Рис.3
Залежність провідності тунельного проміжку від відстані між голкою та зразком для моделі квантово-механічної системи голка-зразок, що подана на рис.2.

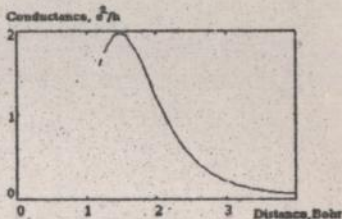
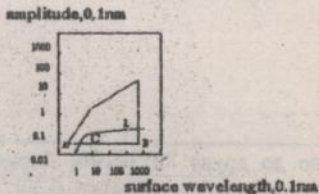


Рис.4
Допустима помилка у визначенні рельєфу уздовж осі голки як функція кильової довжини (лінія L), суавміщена з нижньою межею робочої зони СТМ (лінія АВ). Точка С-перехрещення ліній L та АВ.



Підписано до друку 25.12.96. Формат 60x84/16. Папір друкарський.
Офсетний друк. Ум. фарбо-відб. 6. Ум. друк. арк. 1, 16. Обл. вид. арк. 1, 25.
Тираж 100 прим. Замовлення № 16-1. Ціна . Вид. № 18/IV.

Видавництво ЮМЦА.

252058. Київ-58, проспект Космонавта Комарова, 1.

AB 36.842