01;05;11

ДЕЙСТВИЕ НА ПОВЕРХНОСТЬ ТВЕРДОГО ТЕЛА В ТУННЕЛЬНОМ МИКРОСКОПЕ

И.А.Дорофеев

Институт физики микроструктур РАН,
603600, Нижний Новгород, Россия
(Поступило в Редакцию 22 июня 1994 г.)

Теоретически исследуются процессы, происходящие на поверхности твердого тела, расположенного под иглой туннельного микроскопа. При подаче на туннельный промежуток напряжения в несколько вольт происходит значительное увеличение электрического поля и тока. Приводятся результаты решения задачи о пространственном распределении электрического поля в образце. В качестве образца рассматривались полупространство, а также пленка на нем конечной толщины и с иными свойствами. На основе полученного решения рассчитаны поле механических напряжений на поверхности образца и возможные деформации под действием пондеромоторных сил и в результате локального нагрева при протекании тока в туннельном промежутке. Проведена оценка температуры на поверхности материала в режимах, характерных для экспериментальных условий при локальной модификации поверхности твердого тела в сканирующем туннельном микроскопе.

Введение

К настоящему времени убедительно показано, что необходимым условием локальной модификации поверхности материала под иглой сканирующего туннельного микроскопа является повышение напряжения до 1–10^2 В на туннельном промежутке [1–3]. Обилие экспериментальных работ, демонстрирующих возможность изменения свойств поверхности в нанометровом масштабе, делает актуальным рассмотрение физических процессов, происходящих в системе игла-образец микроскопа, при подаче на туннельный промежуток импульса напряжения. В данной работе приводится решение задачи о пространственном распределении электрического поля в образце и на его поверхности, поля механических напряжений и деформаций в нем под действием пондеромоторных сил и джоулева нагрева вещества при протекании тока в туннельном промежутке. В работе использован феноменологический подход, поэтому формально полученные решения справедливы на расстояниях, бо́льших по сравнению с атомными расстояниями от туннельного контакта. Однако в режиме, типичном для модификации поверхности, при протекании автоэлектронного тока между образцом и иглой с реальным радиусом кривизны 10^2-10^3 Å характерный размер области, через которую течет ток, составляет 10^2-10^3 Å и зависит по оценкам с использованием формулы Фаулера–Нордгейма от работы выхода материала иглы. Поэтому решение феноменологической задачи дает не только оценку по порядку величины, но и точное значение в ближайшей окрестности источника тока, а при большой площади протекания тока и внутри его источника.

Постановка задачи

Рассмотрим осесимметричный случай, когда над образцом, занимающим полупространство $z > 0$, на расстоянии d_0 расположена игла заданной модельной формы. В стационарном режиме распределение тока в образце описывается уравнением $\operatorname{div}\mathbf{j} = 0$, где $\mathbf{j} = -\sigma \operatorname{grad}\varphi$ — плотность тока, σ — проводимость материала, φ — потенциал. Распределение поля найдем, решая в цилиндрической системе координат краевую задачу второго рода или задачу Неймана [4],

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 0, \quad r \in [0, \infty], \quad z \in [0, \infty],$$

$$\varphi\big|_{(r^2+z^2)^{1/2}\to\infty} < \infty, \qquad \frac{\partial\varphi}{\partial z}\Big|_{z=0} = -\frac{f(r)}{\sigma},$$

$$\varphi\big|_{(r^2+z^2)^{1/2}\to 0} < \infty, \tag{1}$$

где $f(r)$ — заданная функция, моделирующая туннельный контакт.

Рассмотрим три вида функции $f(r)$, соответствующих различным модельным формам иглы. Очевидно, что "точечной" игле будет соответствовать δ-образный источник тока на поверхности

$$f(r) = \frac{i}{2\pi r}\delta(r), \tag{2}$$

где i — ток между электродами.

Не конкретизируя формы иглы, рассмотрим также некоторый обобщенный "П"-образный источник тока с поперечным размером a

$$f(r) = \begin{cases} j_0, & r \leqslant a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{3}$$

Повышение напряжения V между электродами может привести к автоэлектронной эмиссии. В этом случае плотность тока описывается формулой Фаулера–Нордгейма, и если работу выхода μ и значение уровня Ферми μ' выражать в эВ, а напряженность поля $\mathcal{E}$ в В/см, то получим, согласно [5], величину плотности тока в А/см^2

$$j = 6.2\cdot 10^{-6}\frac{\mu'^{1/2}}{(\mu+\mu')\mu^{1/2}}\mathcal{E}^2\exp\left(-\frac{6.85\cdot 10^7\mu'^{3/2}}{\mathcal{E}}\right).$$

Представим иглу параболоидом вращения с фокальным параметром p. В этом случае радиус кривизны параболы вблизи ее острия приблизительно равен p, а расстояние от поверхности параболоида до плоской поверхности второго электрода $d = \beta r^2 + d_0$, $\beta = 1/2p$. Считая, что поле между электродами $\mathcal{E} \simeq V/d$, и пренебрегая координатной зависимостью его в предэкспоненте, получим третий модельный источник тока на поверхности полупространства

$$f(r) = j_0 \exp(-Ar^2 - B), \tag{4}$$

где

$$j_0 \simeq 6.2 \cdot 10^{-6} (\mu + \mu')^{-1} (\mu'/\mu)^{1/2} (V/d_0)^2,$$

$$A = 6.85 \cdot 10^7 \mu'^{3/2} \alpha / V,$$

$$B = 6.85 \cdot 10^7 \mu'^{3/2} d_0 / V.$$

Аналогичная зависимость получается в случае $V \ll \mu$.

Решение

Ограниченное на бесконечности и в нуле решение (1) можно найти меодом разделения переменных [4]

$$\varphi(r, z) = \int_0^\infty F(\gamma) \exp(-\gamma z) J_0(\gamma r) d\gamma, \tag{5}$$

где γ — константа разделения, J — функция Бесселя

$$F(\gamma) = \int_0^\infty \frac{f(r)}{\sigma} J_0(\gamma r) r dr. \tag{6}$$

Учитывая (2)–(4) и подставляя результат интегрирования (6) в (5), получим искомое решение

$$\varphi(r, z) = \frac{i}{2\pi\sigma (r^2 + z^2)^{1/2}}, \tag{7}$$

$$\varphi(r, z) = \frac{j_0 a}{\sigma} \int_0^\infty \exp(-\gamma z) \frac{J_0(\gamma r) J_1(\gamma a)}{\gamma} d\gamma, \tag{8}$$

$$\varphi(r, z) = \frac{j_0}{2A\sigma} \exp(-B) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4A} - \gamma z\right) J_0(\gamma r) d\gamma. \tag{9}$$

Представляет несомненный интерес решение подобной задачи, когда полупространство из материала одного сорта покрыто пленкой другого вещества толщиной h. В этом случае

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_1, & 0 \leqslant z < h, \\ \sigma_2, & h \leqslant z \end{cases}$$

и решение в пленке ищем в виде

$$\varphi(r,z) = \int_0^\infty [A_1(\gamma)\exp(-\gamma z) + B_1(\gamma)\exp(\gamma z)] J_0(\gamma r) d\gamma, \tag{10}$$

а в области $z > h$ ограниченное на бесконечности решение имеет вид

$$\varphi_2(r,z) = \int_0^\infty [A_2(\gamma)\exp(-\gamma z)] J_0(\gamma r) d\gamma. \tag{11}$$

Учитывая граничные условия, при $z = h$

$$\varphi_1|_{z=h} = \varphi_2|_{z=h}, \quad \sigma_1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial z}|_{z=h} = \sigma_2 \frac{\partial \varphi_2}{\partial z}|_{z=h}$$

получим выражения для коэффициентов A_1, B_1, A_2.

В частности, для источника типа (3)

$$A_1 = B_1 + \frac{j_0 a}{\sigma_1} J_1(\gamma a),$$

$$B_1 = \frac{j_0 a}{\gamma \sigma_1} J_1(\gamma a) \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{\chi}\right)^n \exp(-2\gamma h n),$$

$$A_2 = \frac{j_0 a}{\gamma \sigma_1} J_1(\gamma a) \left(\frac{\chi - 1}{\chi}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{\chi}\right) \exp(-2\gamma h n),$$

где $\chi = (\sigma_2 + \sigma_1)/(\sigma_2 - \sigma_1)$.

Подставляя A_1, B_1 и A_2 в (10) и (11) получим соответственно решение в пленке и в области $z > h$

$$\varphi_1(r,z) = \frac{j_0 a}{\sigma_1} \int_0^\infty \exp(-\gamma z) \frac{J_0(\gamma r) J_1(\gamma a)}{\gamma} d\gamma + \frac{j_0 a}{\sigma_1} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{\chi}\right)^n \times$$

$$\times \int_0^\infty \left\{\exp[-\gamma(z + 2hn)] + \exp[\gamma(z - 2hn)]\right\} \frac{J_0(\gamma r) J_1(\gamma a)}{\gamma} d\gamma,$$

$$\varphi_2(r,z) = \frac{j_0 a}{\sigma_1} \left(\frac{\chi - 1}{\chi}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{\chi}\right)^n \int_0^\infty \exp[-\gamma(z + 2hn)] \frac{J_0(\gamma r) J_1(\gamma a)}{\gamma} d\gamma.$$

Очевидно, что при $\sigma_1 = \sigma_2$ имеем (8). Аналогично получается решение для источника (4)

$$\varphi_1(r,z) = \frac{j_0}{2A\sigma_1} \exp(-B) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4A} - \gamma z\right) J_0(\gamma r) d\gamma + \frac{j_0}{2A\sigma_1} \exp(-B) \times$$

$$\times \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{\chi}\right)^n \int_0^\infty \left\{\exp[-\gamma(z + 2hn)] + \exp[\gamma(z + 2hn)]\right\} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4A}\right) J_0(\gamma r) d\gamma,$$

$$\varphi_2(r,z)=\frac{j_0}{2A\sigma_1}\exp(-B)\left(\frac{\chi-1}{\chi}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\chi}\right)^n\int\limits_0^{\infty}\exp\left[-\frac{\gamma^2}{4A}-\gamma(z+2hn)\right]\times$$

$$\times J_0(\gamma r)d\gamma.$$

Заметим, что задача может быть решена для любого числа слоев в многослойной структуре.

Распределение поля в образце получается путем дифференцирования выражений для $\varphi(r,z)$. Для источника типа (3)

$$\mathcal{E}_z=\frac{j_0 a}{\sigma}\int\limits_0^{\infty}\exp(-\gamma z)J_0(\gamma r)J_1(\gamma a)d\gamma,$$

$$\mathcal{E}_r=\frac{j_0 a}{\sigma}\int\limits_0^{\infty}\exp(-\gamma z)J_1(\gamma a)d\gamma.$$

На поверхности $z = 0$ получаем интегралы типа Вебера–Шафхейтлина [6]

$$\mathcal{E}_r|_{z=0}=\frac{j_0 a}{\sigma}\begin{cases}\frac{r}{2a^2}F\left(\frac{3}{2};\frac{1}{2};2;\frac{r^2}{a^2}\right), & r<a,\\ \frac{a}{2r^2}F\left(\frac{3}{2};\frac{1}{2};2;\frac{a^2}{r^2}\right), & r>a,\end{cases}$$

где F — гипергеометрический ряд, условно сходящийся на единичном круге,

$$\mathcal{E}_z|_{z=0}=\frac{j_0 a}{\sigma}\begin{cases}a^{-1}, & r<a,\\ (2a)^{-1}, & r=a,\\ 0, & r>a.\end{cases}$$

Для источника типа (4)

$$\mathcal{E}_z|_{z=0}=j_0\exp(-Ar-B)/\sigma,$$

$$\mathcal{E}_r|_{z=0}=\frac{j_0(\pi A)^{1/2}}{2\sigma}r\exp\left(-\frac{Ar^2}{2}-B\right)\left[I_0\left(\frac{Ar^2}{2}\right)-I_1\left(\frac{Ar^2}{2}\right)\right], \qquad (12)$$

где I — модифицированная функция Бесселя.

При типичной плотности тока в режиме модификации поверхности $3\cdot10^{17}$ ед. СГС и значениях удельной проводимости $\sigma=10^{14}$–10^{16} ед. СГС величина электрического поля на поверхности металла может достигать значений $\mathcal{E}=10^4$–10^7 В/см. Конечно, на локальных выступах поле еще больше.

Деформация плоской поверхности возможна, по крайней мере, по двум причинам: в результате локального нагрева поверхности и полевого пондеромоторного действия. Сначала рассмотрим полевую деформацию. Как известно [7], деформация вдоль i-го направления под действием произвольного распределения сил $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, приложенных к поверхности образца, дается интегралом

$$u_i(r,z) = \iint G_{ik}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\mathbf{z})P_k(\mathbf{r}')dS', \tag{13}$$

где $G_{ik}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\mathbf{z})$ — тензор Грина для уравнений равновесия полубесконечной среды; $\mathbf{r} = \{r,\psi\}$, $\mathbf{r}' = \{\mathbf{r}',\psi'\}$ — координаты точки наблюдения и точки приложения силы; ψ — полярный угол.

Интегрирование производится по всей поверхности действия сил. Компоненты силы $P_k(r')$ определим, используя максвеллов тензор натяжений [8],

$$T_{ik} = \frac{1}{4\pi}\left(\mathcal{E}_i\mathcal{E}_k - \frac{\mathcal{E}^2}{2}\delta_{ik}\right).$$

Учитывая, что вектор нормали к поверхности $z = 0$ параллелен оси $0z$ и $\mathcal{E}_\psi = 0$ в силу осевой симметрии задачи, для компонент $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, используя выражения (12), получим

$$P_\psi = 0,$$

$$P_r = T_{zr} = \frac{j_0^2}{4\pi\sigma^2}(\pi A)^{1/2}\exp\left(-\frac{3Ar^2}{2} - 2B\right)\left[I_0\left(\frac{Ar^2}{2}\right) - I_1\left(\frac{Ar^2}{2}\right)\right],$$

$$P_z = T_{zz} = \frac{j_0^2}{8\pi\sigma^2}\exp(-2Ar^2 - 2B)\left\{1 - \exp(Ar^2)\frac{A\pi r^2}{2}\times\right.$$

$$\left.\times\left[I_0\left(\frac{Ar^2}{2}\right) - I_1\left(\frac{Ar^2}{2}\right)\right]^2\right\} \simeq \frac{j_0^2}{8\pi\sigma^2}\exp(-2Ar - 2B). \tag{14}$$

Тензор Грина и деформация под действием сосредоточенной силы $\mathbf{F} = \{F_x, F_y, F_z\}$ в декартовой системе координат определена в [7]. В цилиндрической системе координат с учетом осевой симметрии имеем

$$u_z = G_{zk}F_k = \frac{1-\nu^2}{\pi E\rho}F_z + \frac{(1-2\nu)(1+\nu)}{2\pi E\rho}F_r,$$

где ν и E — коэффициент Пуассона и модуль Юнга, $\rho = (r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\psi' + z^2)^{1/2}$.

Поэтому для распределенной силы $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ получим, подставляя компоненты P_k в (13),

$$u_z(r,z) = u_z' + u_z'' = \frac{(1-\nu^2)}{\pi E}\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\frac{P_z(r')r'dr'd\psi'}{\rho} +$$

$$+ \frac{(1-2\nu)(1+\nu)}{2\pi E}\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\frac{P_z(r')r'dr'd\psi'}{\rho}.$$

В точке $r = 0$, $z = 0$ интегрирование дает

$$u'_z = \frac{(1-\nu^2)}{8E}(2\pi A)^{-1/2}\frac{j_0^2}{\sigma^2}\exp(-2B),$$

$$u''_z = \frac{(1-2\nu)(1+\nu)}{8E}(2\pi A)^{-1/2}\left(\frac{\sqrt{2}+4}{3\sqrt{2}+4}\right)\frac{j_0^2}{\sigma^2}\exp(-2B),$$

$$u'_z/u''_z \simeq 2.6 \tag{15}$$

при типичном значении $\nu = 0.3$.

Таким образом, смещение поверхности в основном определяется нормальным напряжением. Суммарная деформация в выбранной точке равна

$$u_z = \frac{(2\pi A)^{-1/2}}{8E}\frac{j_0^2}{\sigma^2}\exp(-2B)\Big[(1-\nu^2) + 0.7(1+\nu)(1-2\nu)\Big]$$

и при $\nu = 0.3$, $E = 10^{11}$–10^{12} дин/см^2, $\sigma = 10^{14}$–10^{16} ед. СГС, $A = 10^{11}$–10^{12} см$^{-2}$, $j_0\exp(-B) = 3\cdot 10^{17}$ ед.СГС, $u_z = 10^{-7}$–10^{-10} см.

Пренебрежение тангенциальными напряжениями позволяет использовать метод Буссинеска–Папковича–Терецава [10] для получения радиального распределения деформации плоской поверхности. В частности,

$$u_z(r,z) = \frac{1+\nu}{E}\int\limits_0^\infty [2(1-\nu)+\gamma z]f(\gamma)\exp(-\gamma z)J_0(\gamma r)d\gamma,$$

$$f(\gamma) = \int\limits_0^\infty rP_z(r)J_0(\gamma r)dr.$$

Подставляя выражение для компоненты P_z из (14), получим

$$u_z(r,0) = \frac{1-\nu^2}{8E}(2\pi A)^{-1/2}\frac{j_0^2}{\sigma^2}\exp(-Ar^2-2B)I_0(Ar^2),$$

что при $r = 0$ совпадает с результатом (15). Характерное расстояние, на котором величина деформации спадает в e раз, составляет десятки ангстрем, что может быть сравнимо с величиной самой деформации.

Аналогичные вычисления для источника типа (3) приводят к следующему выражению:

$$u_z(r,0) = \frac{(1-\nu^2)}{4\pi E}\frac{j_0^2}{\sigma^2}a\begin{cases} F\left(\frac{1}{2};-\frac{1}{2};1;\frac{r^2}{a^2}\right), & r < a,\\ \frac{a}{2r}F\left(\frac{1}{2};-\frac{1}{2};2;\frac{a^2}{r^2}\right), & r > a.\end{cases}$$

В этом случае F — абсолютно сходящиеся гипергеометрические ряды.

Нормальную компоненту механических напряжений в образце вычислим, используя формулу

$$\hat{\sigma}_z = -\int\limits_0^{\infty} \gamma(1+\gamma z) J_0(\gamma r)\exp(-\gamma z)dy.$$

Учитывая (14), в плоскости $z = 0$ получим

$$\hat{\sigma}_z = \frac{j_0^2}{8\pi\sigma^2}\exp(-2Ar^2 - 2B).$$

В точке $r = 0$ при $j_0\exp(-B) = 3\cdot 10^{17}$ ед. СГС, $\sigma = 10^{14}$–10^{16} ед. СГС имеем $\hat{\sigma}_z = 10^3$–10^8 дин/см^2, что для ряда материалов может превысить предел прочности σ_B. Так, для графита, согласно [11], $\sigma_B = 5\cdot 10^7$ дин/см^2, в то же время для вольфрама и платины $\sigma_B = 10^{10}$ и $4\cdot 10^9$ дин/см^2 соответственно.

Деформацию поверхности за счет локального теплового нагрева можно определить, вводя термоупругий потенциал θ [10], такой что $u_i = \partial\theta/\partial x_i$, при этом

$$\theta(r) = -\frac{\alpha(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)}\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{2\pi}\frac{T(\mathbf{r}')r'dr'dz'd\psi'}{[r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\psi' + (z-z')^2]^{1/2}},$$

где α — коэффициент линейного расширения, $T(\mathbf{r}')$ — отклонение температуры тела от начальной.

Простейшую оценку проведем, считая, что

$$T(\mathbf{r}) = \begin{cases} T_0, & (r^2+z^2)^{1/2} \leqslant L, \\ 0, & (r^2+z^2)^{1/2} > L, \end{cases}$$

где L — характерный размер тепловой неоднородности.

В этом случае в точке $r = 0$, $z = 0$ имеем

$$u_z(0,0) = \frac{\partial\theta}{\partial z}\bigg|_{\substack{r=0\\z=0}} = \frac{\alpha(1+\nu)}{2(1-\nu)}T_0\int\limits_0^{L}\int\limits_0^{L}\frac{r'dr'z'dz'}{(r'^2+z'^2)^{3/2}} \simeq (10^{-2}\text{–}10^{-3})L$$

для $\nu = 0.3$, $\alpha = 10^{-5}$–10^{-6} град$^{-1}$, $T_0 = 10^2$–10^3 град.

Таким образом, деформация плоской поверхности в определенных условиях может быть значительной и для ее определения необходимо использовать методы нелинейной теории упругости.

Нагрев джоулевым теплом

В общем случае необходимо решить нестационарное уравнение теплопроводности с объемными источниками джоулева тепла, возникающими в результате протекания тока. Рассмотрим возможность получения стационарного решения. Для этого решим краевую задачу стационарной теплопроводности с граничным условием, соответствующим отсутствию теплообмена на поверхности $z = 0$

$$\Delta T(r, z) + \frac{f(r, z)}{\lambda} = 0, \quad r \in [o, \infty], \quad z \in [0, \infty],$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z=0} = 0,$$

где λ — коэффициент теплопроводности; $f(r, z)$ — объемный источник тепла.

Решение этой задачи имеет вид [12]

$$T(r, z, \psi) = \frac{1}{\lambda} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \int\limits_0^{2\pi} f(r, z) G(r, z, \psi, r', z', \psi') r' dr' dz' d\psi', \tag{16}$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (4\pi\rho)^{-1} + (4\pi\hat{\rho})^{-1}$ — функция Грина этой краевой задачи, такая что $\partial G / \partial z = 0$, $\rho = [r^2 + r'^2 - 2rr' \cos\psi' + (z - z')^2]^{1/2}$, $\hat{\rho} = [r^2 + r'^2 - 2rr' \cos\psi' + (z + z')^2]^{1/2}$.

Для трех выбранных источников (2)–(4), используя выражения для компонент электрического поля и учитывая, что в нашем случае $f(r, z) = j^2(r, z)/\sigma$, получим

$$f(r, z) = i^2 / 4\pi^2 \sigma (r^2 + z^2), \tag{17}$$

$$f(r, z) = \frac{j_0^2 a^2}{\sigma} \left\{ \left[\int\limits_0^\infty \exp(-\gamma z) J_0(\gamma r) J_1(\gamma a) d\gamma \right]^2 + \right.$$

$$\left. + \left[\int\limits_0^\infty \exp(-\gamma z) J_1(\gamma r) J_1(\gamma a) d\gamma \right]^2 \right\}, \tag{18}$$

$$f(r, z) = \frac{j_0^2}{4A^2 \sigma} \exp(-2B) \left\{ \left[\int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4A} - \gamma z\right) J_0(\gamma r) \gamma d\gamma \right]^2 + \right.$$

$$\left. + \left[\int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4A} - \gamma z\right) J_0(\gamma r) \gamma d\gamma \right]^2 \right\}. \tag{19}$$

Тепловой источник вида (17) дает расходимость $T(r, z)$ в начале координат. Оценим интегралы в (18), учитывая, что из-за квадратичной зависимости объемной плотности мощности источников тепла от плотности тока и резкой зависимости плотности тока от пространственных координат основной вклад в нагрев материала дадут области, непосредственно прилегающие к источнику тока на поверхности полупространства. Используя первую теорему о среднем, получим

$$\int_0^\infty \exp(-\gamma z)J_0(\gamma r)J_1(\gamma a)d\gamma = \exp(-\xi z)\int_0^\infty J_0(\gamma r)J_1(\gamma a)d\gamma =$$

$$= \exp(-\xi z)\begin{cases} a^{-1}, & r < a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$$

где ξ — некоторое значение γ в интервале $[0,\infty]$.

Положим $\xi = 1/a$, тогда, например, в точке $r = 0 < a$, используя [9], имеем

$$\int_0^\infty \exp(-\gamma z)J_1(\gamma a)d\gamma = \frac{[(z^2+a^2)^{1/2} - z]}{a(z^2+a^2)^{1/2}}.$$

С другой стороны, по сделанной оценке тот же интеграл равен $\exp(-z/a)/a$, т. е. $[(z^2+a^2)^{1/2} - z](z^2+a^2)^{-1/2} = \exp(-z/a)$. При $z \to 0$ и $z \to \infty$ эти функции стремятся к одному и тому же значению. Кроме того, в диапазоне $z < 3a$ различие в значениях не превышает в среднем нескольких процентов. Таким образом, сделанная оценка удовлетворительна. Далее,

$$\int_0^\infty \exp(-\gamma z)J_1(\gamma r)J_1(\gamma a)d\gamma = \exp(-\xi z)\int_0^\infty J_1(\gamma r)J_1(\gamma a)d\gamma =$$

$$= \exp(-\xi z)\begin{cases} \frac{r}{2a^2}F\left(\frac{3}{2};\frac{1}{2};2;\frac{r^2}{a^2}\right), & r < a, \\ \frac{a}{2r^2}F\left(\frac{3}{2};\frac{1}{2};2;\frac{a^2}{r^2}\right), & r > a. \end{cases}$$

Для упрощения дальнейших расчетов и сходимости интеграла (16) пренебрежем слабой зависимостью от r в этом интеграле и допустим оценку сверху

$$\int_0^\infty \exp(-\gamma z)J_1(\gamma r)J_1(\gamma a)d\gamma \geqslant \exp(-z/a)\begin{cases} (2a)^{-1}, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

В результате получаем простое выражение для теплового источника

$$f(r,z) \simeq \frac{j_0^2 a^2}{\sigma}\begin{cases} \exp(-2z/a)/a^2, & r \leqslant a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{20}$$

Отметим, что аналогичный вид теплового источника использовался в [13] при оценке нагрева образца точечной иглой. В качестве характерного масштаба источника авторы приняли длину свободного пробега электрона. Как будет показано ниже, оценки по порядку величин совпадают. Используя (20) и выражение для функции Грина при интегрировании (16), получим в точке $r = 0$, $z = 0$

$$T(0,0) \simeq \frac{j_0^2 a^2}{\lambda\sigma} \left\{ 2\pi^{1/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)[H_1(2) - N_1(2)] + 1 \right\},$$

где H и N — функции Струве и Неймана, Γ — гамма-функция.

В итоге имеем

$$T(0,0) \simeq \frac{j_0^2 a^2}{\lambda\sigma} = 10^2\text{–}10^3\,\text{град.}$$

Оценка проведена для $j_0 = 3 \cdot 10^{17}$ ед.СГС, $a = 50 \cdot 10^{-8}$ см, $\sigma = 10^{14}$ ед.СГС, $\lambda = 10^5\text{–}10^7$ эрг/см · с · град. Подчеркнем, что нагрев вещества приводит к значительному снижению порога прочности [11].

Заключение

Таким образом, для типичных экспериментальных условий, при которых наблюдалась локальная модификация поверхности твердого тела в сканирующем туннельном микроскопе, нами проведен расчет распределения электрического поля в исследуемом материале, находящемся под зондирующей иглой микроскопа. В качестве образца рассматривалось полупространство с плоской границей и пленка из другого материала на нем. Используя различные модельные формы игл, каждой из которых соответствует свое распределение тока на поверхности образца, получено радиальное распределение механических напряжений и деформаций на поверхности материала под действием пондеромоторных сил и локального нагрева. Показано, что для некоторых материалов напряжения и деформации могут превысить предел прочности конкретного вещества. В связи с этим следует отметить, что в реальных экспериментальных условиях на поверхности электродов микроскопа всегда находится несколько монослоев адсорбированного вещества или отдельные микрочастицы. Характеристики механического контакта с подложкой в данном случае не определены, но представляется очевидным, что предел прочности такой системы значительно ниже, чем у материалов, обычно используемых в экспериментах. Кроме того, поскольку масштаб неоднородности электрического поля по поверхности вещества (см., например, (12)) составляет десятки ангстрем, то следует ожидать значительных сил, действующих на дипольные моменты адчастиц в условиях высоких градиентов электрического поля.

Специфика тепловой задачи в нашем случае заключается, в частности, в характере объемного источника тепла, возникающего за счет джоулевых потерь протекающего тока. Квадратичная зависимость объемной плотности мощности тепла от плотности тока $f(r,z) = j^2(r,z)/\sigma$ и достаточно резкая зависимость плотности тока от пространственных координат позволили при оценке интегралов, входящих в $f(r,z)$, ограничиться областью, непосредственно примыкающей к источнику тока на поверхности образца. Полученное выражение для плотности мощности (20) обеспечило сходимость интеграла, определяющего стационарную температуру в образце. Значение температуры зависит от свойств вещества и при типичных значениях тока может достигать на поверхности величины 10^2-10^3 град. В этих условиях увеличивают скорость твердофазные диффузионные процессы из-за аррениусовской зависимости коэффициентов диффузии от температуры. Такие процессы, происходящие в сильных электрических полях, могут приводить к локальным изменениям эмиссионных свойств поверхности, как это показано в работе [3].

Нетрудно заметить, что максимальные значения электрического поля, деформации, механических напряжений и температуры достигаются на поверхности материала, что и позволяет говорить о возможности локальной модификации твердого тела вблизи его поверхности. Из полученных формул следует, что при малых величинах туннельного тока $j \leqslant 10^{14}$ ед. СГС, соответствующих режиму сканирования, нагрев и деформация образца пренебрежимо малы, во всяком случае для осуществления необратимых изменений на его поверхности.

Очевидно, что выделение тепла и деформация имеют место также и в зондирующей игле микроскопа, расчет которых более сложен. Однако традиционное применение иглы из вольфрама с высоким порогом механической прочности и более слабой зависимостью его от температуры, чем у других материалов [11], приводит, как правило, к необратимым изменениям только поверхности исследуемого образца. При работе с иглой из золотой проволоки возможны миграция кластеров на острие иглы под действием пондеромоторных сил и даже перенос вещества с иглы на поверхность [2].

Автор благодарит Н.Н. Салащенко за обсуждение результатов данной работы.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 94-02-04537) и программой ВТСП.

Список литературы

[1] *Staufer U., Wiesendanger R., Eng L., Rosenthaler L.* et al. // J. Vac. Sci. Tech. A. 1988. Vol. 6, N 2. P. 537–539.
[2] *Владимиров Г.Г., Грязев А.А.* // Вестник СПУ. 1993. № 4. С. 24–40.
[3] *Ахсахалян А.Д., Гапонов С.В., Дорофеев И.А.* и др.// ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 4. С. 144–155.
[4] *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики М.: Наука, 1977. 735 с.
[5] *Гапонов В.И.* Электроника. Ч. I. М.: Физматгиз, 1960. 516 с.
[6] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.
[7] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965. 246 с.
[8] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 623 с.
[9] *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1963. 1100 с.
[10] *Снеддон И.Н., Берри Д.С.* // Классическая теория упругости. М.: Физматгиз, 1961. 220 с.
[11] Физические величины / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
[12] *Карташов Э.М.* // Аналитические методы в теплопроводности твердых тел. М.: Высшая школа, 1979. 480 с.
[13] *Persson B.N.J., Demuth J.E.* // Sol. St. Commun. 1986. Vol. 57. N 9. P. 769–772.