

© 1990

О ВЛИЯНИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ ПОВЕРХНОСТИ НА ИЗМЕРЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ РАБОТЫ ВЫХОДА МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

А.О. Г о л у б о к, Н.А. Т а р а с о в

Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) и связанный с ней метод локальной сканирующей туннельной спектроскопии (СТС), в частности, измерение локальной работы выхода (ЛРВ), широко применяются при исследовании топографии и электронных свойств поверхности. Кроме того, СТМ-СТС оказался эффективным неразрушающим методом изучения различных объектов, расположенных на поверхности, например, кластеров, биологических соединений и т.п. [1, 2]. Процедура измерения ЛРВ основана на использовании экспоненциальной зависимости туннельного тока I от расстояния Z между острием и поверхностью образца [3]:

$$I = A \cdot \exp(-2kZ), \quad k = (2m\phi)^{1/2}/\hbar, \quad (1)$$

где ϕ — работа выхода, m — масса электрона, величина A предполагается постоянной. Измерение ϕ осуществляется путем модуляции величины Z , I . Тогда экспериментально измеренные значения ЛРВ $\phi_{\text{ЭКС}}$ определяются из соотношений

$$k_{\text{ЭКС}} = -1/2 \cdot (dI/dZ)/I, \quad \phi_{\text{ЭКС}} = (\hbar k_{\text{ЭКС}})^2 / 2m. \quad (2)$$

Строго говоря, даже для параллельных электродов зависимость I от расстояния Z содержится и в предэкспоненциальном множителе A [4]. Это приводит к отличию величины $\phi_{\text{ЭКС}}$ от ϕ . Кроме того, при измерении ЛРВ методом СТМ вблизи границ геометрических неоднородностей существенной становится трехмерность задачи туннелирования, что может привести к изменению характера экспоненциальной зависимости от Z . Поэтому возникает необходимость проанализировать влияние геометрических неоднородностей исследуемой поверхности на данные измерения ЛРВ и данные СТС.

При вычислении туннельного тока в задаче трехмерного туннелирования будем использовать следующие приближения: 1) предполагается, что атомы на поверхности острия и образца расположены хаотически (это соответствует, например, приближениям случайных фаз или зернистой поверхности); 2) потенциальный барьер

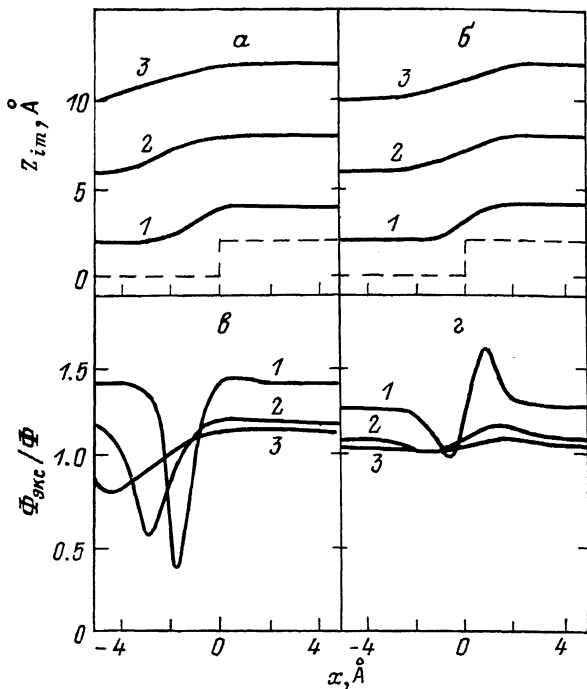


Рис. 1. Изолинии постоянного туннельного тока (а, б) и соответствующие им зависимости локальной работы выхода (в, г), вычисленные в рамках метода, предложенного в данной работе (а, в) и в работе [7] (б, г) для ступенчатой поверхности $h(x) = h_0 \theta(x)$ (показана пунктиром) при $h_0 = 2 \text{ \AA}$ и $\phi = 4 \text{ эВ}$.

в области туннелирования считаем однородным $U(\vec{r}) = \text{const}$;

3) для вычисления туннельного тока используется метод туннельного гамильтониана [5]; 4) зависимость волновой функции электронов атома в подбарьерной области будем описывать моделью сферической потенциальной ямы $\psi_{\mu}^i(\vec{r}) = C_{\mu} \exp(-k_{\mu} |\vec{r} - \vec{r}_i|) / |\vec{r} - \vec{r}_i|$, где μ - состояние электрона, а \vec{r}_i - координата атома. Отдельные из этих приближений используются при анализе разрешения СТМ, например 2, 3, 4 - в работах [6, 7], а 1, 2 - в работе [8], и при формулировке различных теоретических подходов к построению СТМ-изображения [6-9]. Однако анализ поведения ϕ_{anc} в этих и других работах проведен не был. Совместное использование приближений 1-4 позволяет получить выражение для туннельного тока, описывающего как геометрические, так и спектроскопические характеристики поверхности, причем имеется широкая область применимости рассмотренной модели при исследовании методом СТМ крупномасштабных объектов, размеры которых зна-

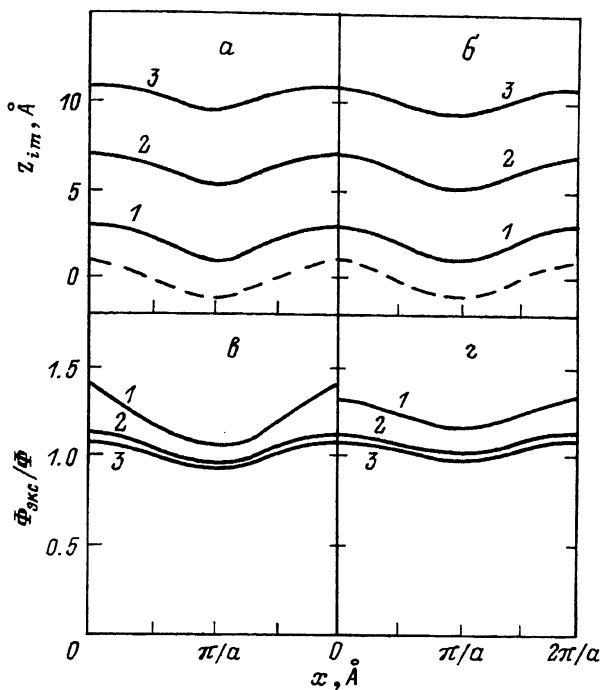


Рис. 2. То же, что рис. 1, для периодической поверхности $h(x) = h_0 \cos(\alpha x)$ при $h_0 = 1 \text{ \AA}$, $\alpha = 0.25 \text{ \AA}^{-1}$ и $\Phi = 4 \text{ эВ}$.

чительно превышают размеры атома (кластеры, наноструктуры, биологические объекты и т.п.), ограничиваясь пределом низких температур и напряжений V [2], получим

$$I = \frac{8\pi\hbar^3 e^2 V}{m} \rho_t(E_F) \rho_s(E_F) \int \frac{e^{-2k|\vec{r}_t - \vec{r}_s|}}{|\vec{r}_t - \vec{r}_s|^2} \frac{\vec{n}_s(\vec{r}_t - \vec{r}_s)}{|\vec{r}_t - \vec{r}_s|} \frac{\vec{n}_t(\vec{r}_s - \vec{r}_t)}{|\vec{r}_s - \vec{r}_t|} dS_s dS_t, \quad (3)$$

где интегрирование выполняется по поверхностям острия t и образца s , \vec{n} - вектор нормали к поверхности, а $\rho(E_F) = \sum_{\mu} |C_{\mu}|^2 \delta(E_{\mu} - E_F)$ - плотность электронных состояний при энергии равной фермиевской E_F .

Используя выражение (3), проведем вычисление СТМ-изображения Z_{im} , т.е. изолиний туннельного тока и соответствующих им значений ЛРВ Φ_{3Kc} . Для возможности сравнения с результатами других подходов ограничимся моделью сферического острия радиуса R . При расчете ЛРВ наряду с выражением (3) будем использовать приближенные аналитические выражения, полученные

в работе [7] для изолиний туннельного тока Z_{im} , поскольку основанные на них оценки разрешающей способности СТМ согласуются с результатами других подходов (см., например, [6, 8, 10]).

На рис. 1, 2 приведены зависимости $Z_{im}(x)$ и $\Phi_{ЭК}(x)$ для ступенчатой $h(x)=h_0\theta(x)$ и косинусоидальной $h(x)=h_0\cos(\alpha x)$ поверхностей при различных значениях параметра Z_0 ($Z_{im}(-\infty)=Z_0$ для ступенчатой и $Z_{im}(0)=Z_0$ - для косинусоидальной поверхностей), который для сферического острия определяется суммой его радиуса R и туннельного промежутка d ($Z_0=R+d$). Сравнивая результаты, полученные из соотношения (3) (рис. 1, а, 2, а), с результатами, основанными на подходе работы [7] (рис. 1, б, 2, б), можно отметить, что для косинусоидальной поверхности они качественно согласуются, тогда как для ступенчатой наблюдается существенное отличие: если величина размытия ступеньки и разрешающая способность СТМ одинаковы ($\Delta \sim (8Z_0/k)^{1/2}$), то при количественном учете реальных геометрических условий, т.е. при использовании (3), СТМ-изображение оказывается сдвинутым относительно истинного положения ступеньки. Это обстоятельство, в частности, может привести к тому, что, основываясь только на изучении СТМ-изображений, невозможно точно определить размеры поверхностных образований. Заметим, что без привлечения дополнительной информации сложно однозначно установить, какой из теоретических результатов правильно отражает реальную ситуацию.

Расчет поведения $\Phi_{ЭК}(x)$ позволяет сделать следующие выводы. Во-первых, имеет место резкое изменение $\Phi_{ЭК}$ вблизи границ геометрических неоднородностей, причем наблюдается закономерность, общая для различных моделей: $\Phi_{ЭК}(-\infty)=\Phi_{ЭК}(0)=\Phi_{ЭК}(+\infty)$ (см. рис. 1, в, г). Это позволяет, в отличие от СТМ-изображения топографии поверхности, точно определить границу и размеры поверхностной неоднородности, например, кластера. Заметим, что асимметрия СТМ-изображения и зависимости $\Phi_{ЭК}(x)$ относительно положения ступеньки $x=0$ (рис. 1, а, в) может быть качественно объяснена тем, что площадь поверхности образца, через которую происходит туннелирование электронов, изменяется также несимметричным образом (при $x < 0$ туннелирование осуществляется и через боковую поверхность ступеньки). Во-вторых, видно, что независимо от используемой модели искажение данных СТС геометрическими факторами существенно в области, где наблюдается изменение изолинии туннельного тока $Z_{im}(x)$. В-третьих, сопоставление теоретических зависимостей $\Phi_{ЭК}(x)$ с экспериментальными данными является более надежным критерием справедливости теоретических моделей, нежели анализ СТМ-изображений $Z_{im}(x)$.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Binnig G., Rohrer H. // Rev. Mod. Phys. 1987. V. 59. N 3. P. 615-632.

- [2] H a n s m a P.K., T e r s o f f J. // J. Appl. Phys. 1987. V. 61. N 2. P. R1-R23.
- [3] P i t a r k e J.M., E c h e n i q u e P.M., F l o r e s F. // Surf. Sci. 1989. V. 27. N 1/2. P. 267-275.
- [4] S i m m o n s J.G. // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. N 6. P. 1793-1803.
- [5] B a r d e e n J. // Phys. Rev. Lett. 1961. V. 6. N 2. P. 57-59.
- [6] J e r s o f f J., H a m a n n D.R. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 2. P. 805-813.
- [7] S a c s W., G a u t h i e r S., R o u s s e t S., K l e i n J., E s r i c k M.A. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 2. P. 961-967.
- [8] К р ы л о в М.В., С у р и с Р.А. // Поверхность. 1986. В. 10. С. 20-24.
- [9] Сумецкий М.Ю. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. В. 1. С. 87-106.
- [10] S t o l l E., B a r a t o f f A., S e l l o n i A., C a r n e v a l i P. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1984. V. 17. N 17. P. 3073-3086.

Институт аналитического
приборостроения АН СССР,
Ленинград

Поступило в Редакцию
21 февраля 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 11

12 июня 1990 г.

05.2; 07

© 1990

ОБНАРУЖЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ КОНСТАНТ ЭКСИТОН -
ФОНОННОЙ СВЯЗИ В СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИХ
GaP: N-СТРУКТУРАХ, ОБЛУЧЕННЫХ НЕЙТРОНАМИ

С.В. С в е ч н и к о в, Г.А. С у к а ч,
Н.И. С ы п к о, А.М. Я р е м к о

Исследование распределения интенсивности в двух семействах экситонов Ване-Мотта в необлученном фосфиде галлия - для экситона, локализованного на одиночном атоме азота (А-серия), и для экситона, локализованного на двух ближайших атомах азота (N₁ -серия), и оценка констант экситон-фононной связи S проведены в работе [1]. При исследовании радиационной деградации внутреннего квантового выхода отдельных полос излучения светодиодов