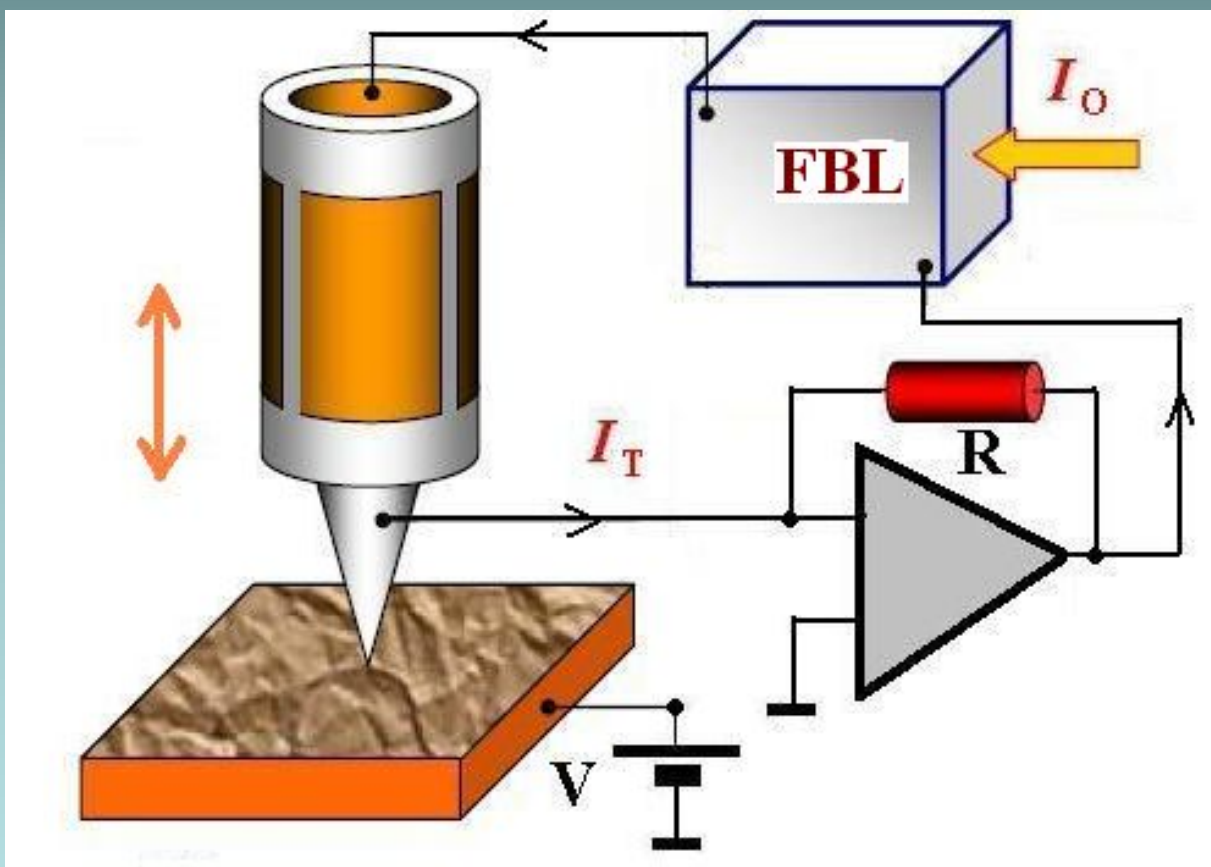
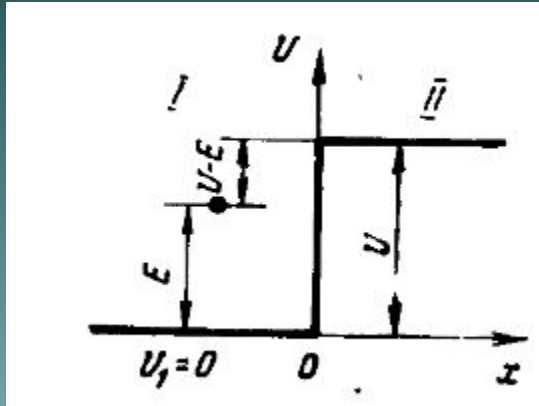


Тунельная зондовая микроскопия



Прохождение частицы через барьер – Туннельный эффект



Для области I

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi_1 = 0 \text{ или } \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2 \Psi_1 = 0,$$

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Для области II

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\Psi_2 = 0 \text{ или } \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2 \Psi_2 = 0,$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U)}.$$

Решением уравнений будет сумма гармонических функций с комплексной частью

$$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \text{ при } x < 0,$$

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \text{ при } x > 0.$$

$$D = n \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}$$

Коэффициент прозрачности барьера, n – показатель преломления для волн де Бройля

Для случая высокого барьера k_2 – мнимое число, положим его равным

$$k_2 = ik_2,$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)}$$

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad \psi_2 = A_2 e^{-kx}.$$

Решение ψ_2 не является плоской волной.

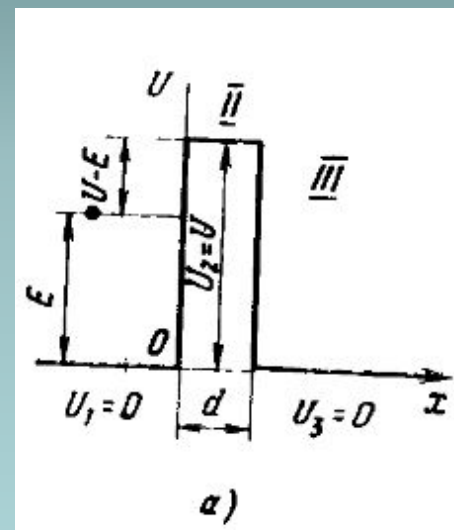
Из условий непрерывности волновой функции, при конечной толщине барьера вероятность обнаружения частицы за барьером будет:

$$w = |\psi_2|^2 = A_2^2 e^{-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}}$$

Коэффициент прозрачности в этом случае будет равен:

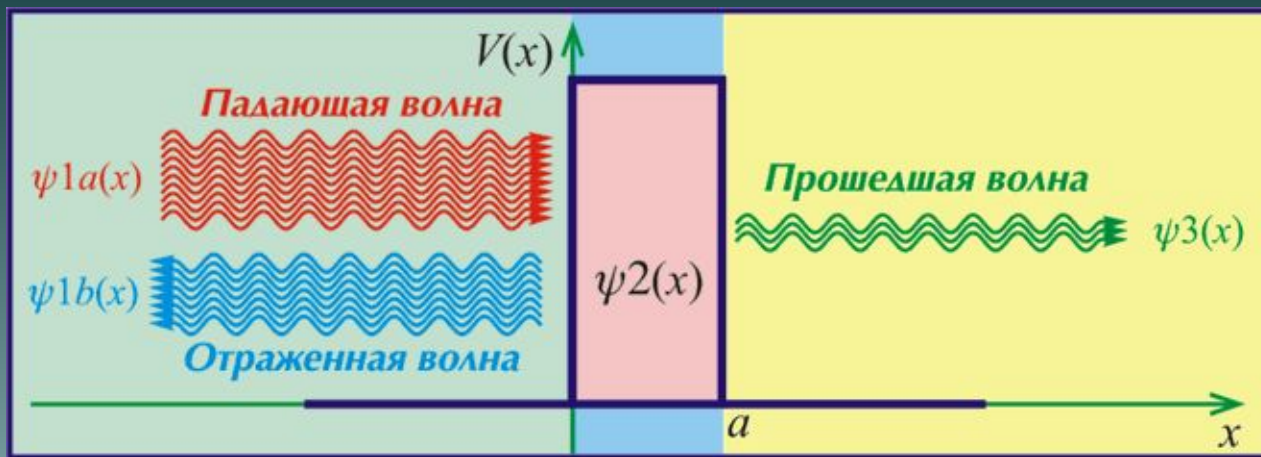
Где D_0 коэффициент пропорциональности примерно = 1

$$D = D_0 e^{-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}}$$



$d, \text{ \AA}$	1,0	1,5	2,0	5,0
D	0,1	0,03	0,008	$5,5 \cdot 10^{-7}$

В таблице приведены значения коэффициента прозрачности при высоте барьера $U-E=5$ эВ



Плотность тока через туннельный барьер при условии малости напряжения смещения ($eV < \varphi$)

$$j_t = j_0(V) e^{-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m\varphi^*} \Delta Z},$$

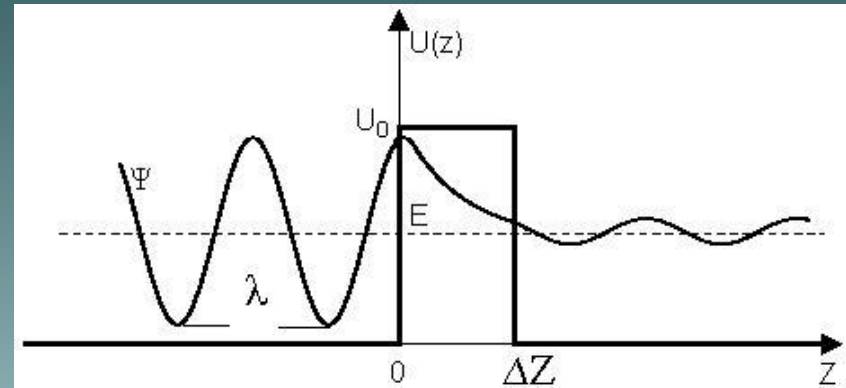
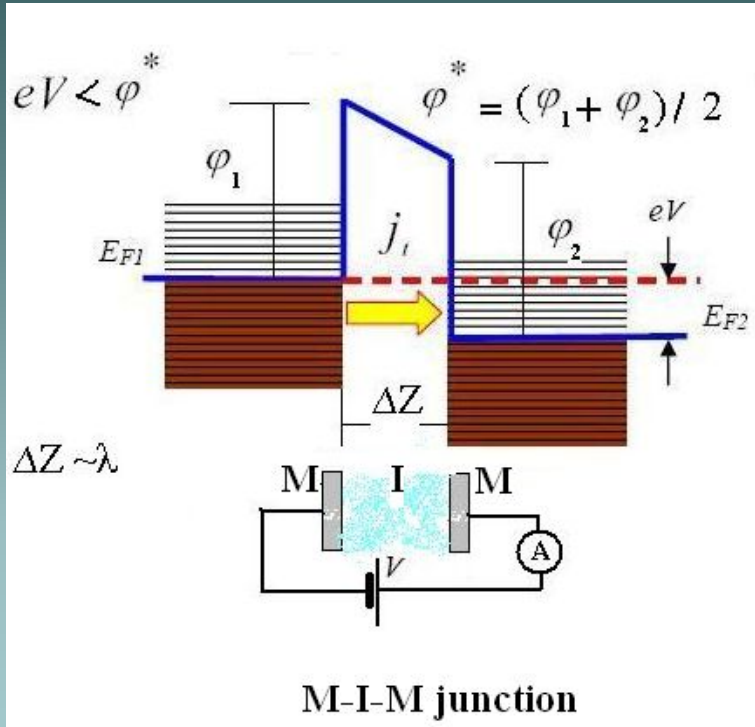
где

$$j_0 = \frac{e}{2\pi h (\Delta Z)^2},$$

При больших напряжениях смещения зависимость переходит в формулу Фаулера –Норгейма для автоэмиссии

$$J = \frac{e^3 V^2}{8\pi h \varphi^* (\Delta Z)^2} \exp\left[-\frac{8\pi \sqrt{2m} (\varphi^*)^{\frac{3}{2}} \Delta Z}{3ehV}\right].$$

Физические основы сканирующей туннельной микроскопии



$$j_t = A V e^{-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m\varphi^*} \Delta Z}$$

туннельный ток чувствителен к:

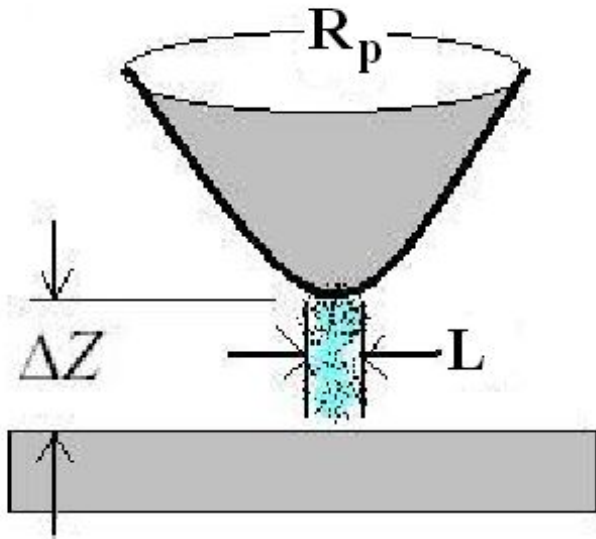
- зазору ΔZ между зондом и образцом (топография)
- локальному потенциалу V
- «локальной» работе выхода φ
- локальной плотности электронных состояний $\rho(\varepsilon)$ (спектроскопия)

Пространственное и энергетическое разрешение СТМ

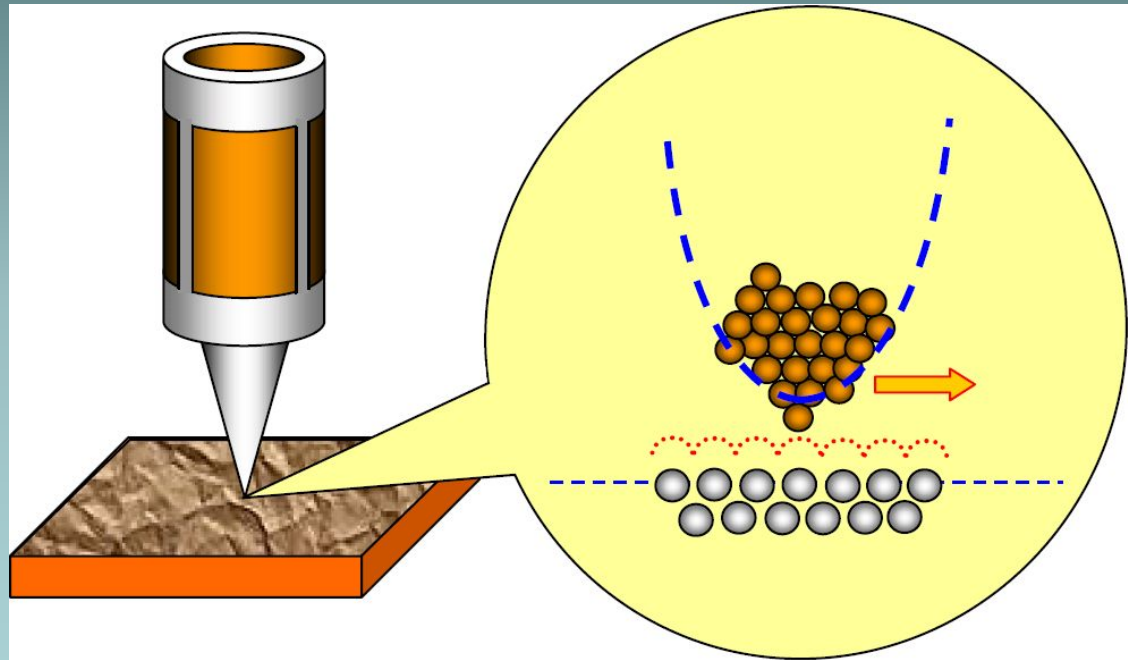
пространственное разрешение L
достигает атомного масштаба при

$$R_p \sim 1 \text{ nm} \quad \phi \sim 4 \text{ eV.}$$

энергетическое разрешение определяется размытием
уровня Ферми зонда $\sim kT$

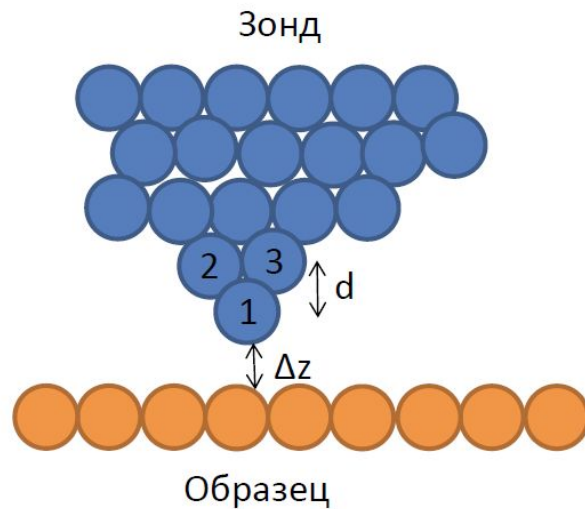


$$L = 2^{3/2} (R_p)^{1/2} / (\alpha^{1/2} \phi^{*1/4})$$
$$\alpha = 4\pi (2m)^{1/2} / h$$



Поскольку туннельный ток течет через последний атом зонда, то для гладких поверхностей подходят достаточно грубые зонда полученные простым механическим перерезанием тонкой проволоки. Для грубых поверхностей при этом можно получить эффект двойного изображения. Для атомного разрешения самым становится конфигурация внешних электронных оболочек.

Разрешение СТМ



$$j_1 \approx j_0(V)e^{-\alpha\Delta z}$$

$$j_2 \approx j_0(V)e^{-\alpha(\Delta z+d)}$$

$$\frac{j_2}{j_1} \approx e^{-\alpha d}$$

$$\alpha \approx 20\text{nm}^{-1}$$

$$d \approx 0.5\text{nm}$$

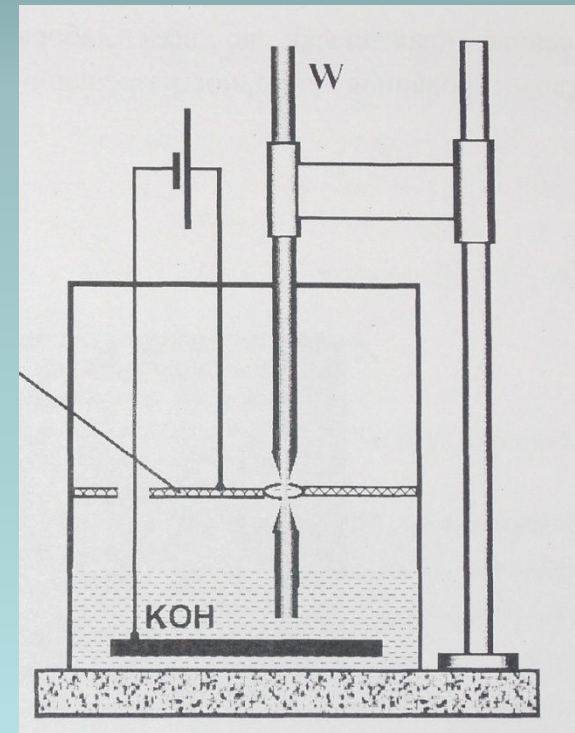
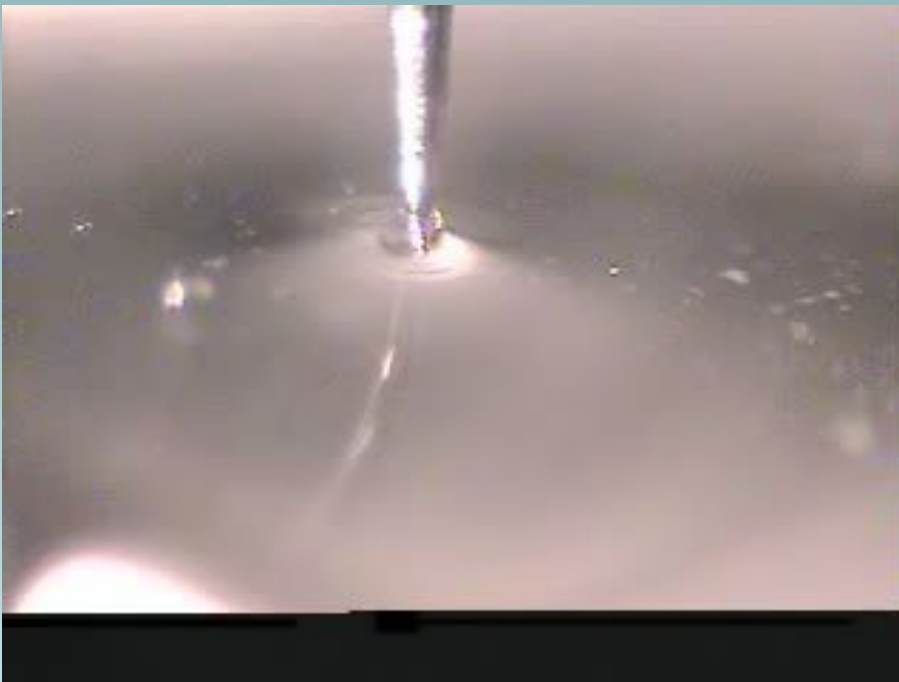
$$\frac{j_2}{j_1} \approx 5 \cdot 10^{-5}$$

Основной вклад дает туннелирование с единичного атома

Изготовление зонда из проволоки

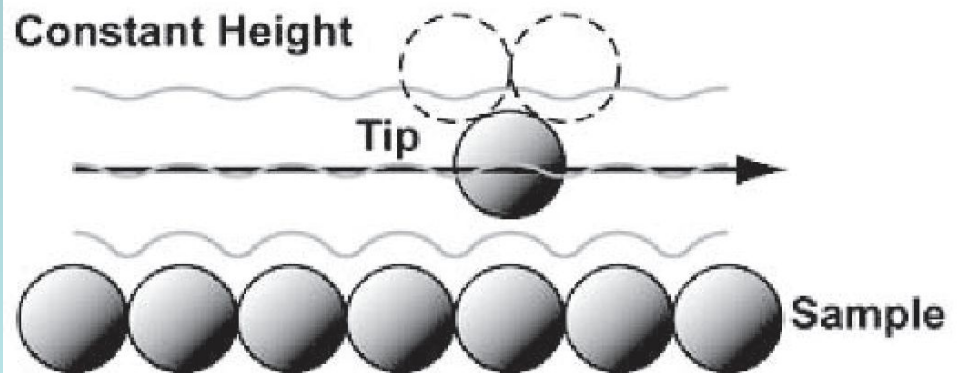
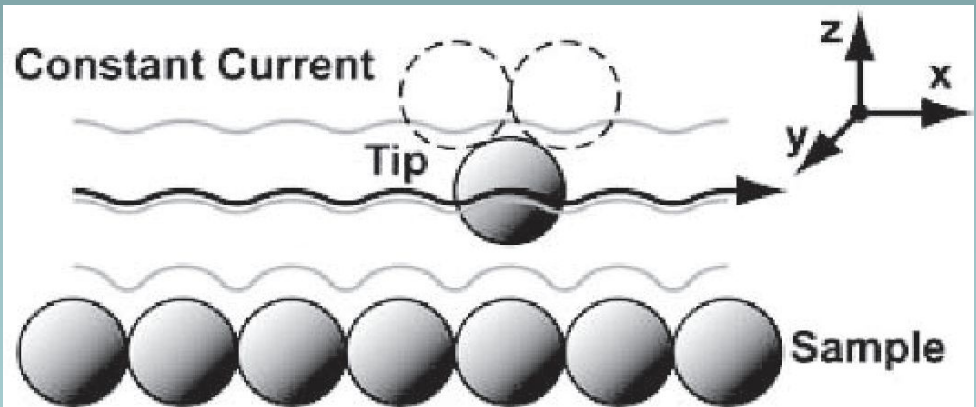
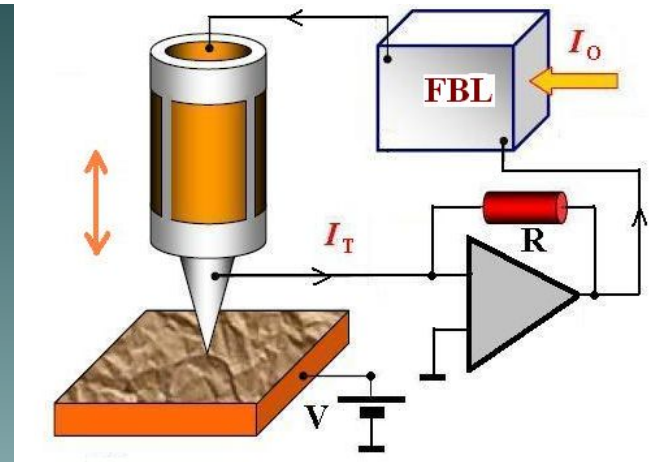
□ Изготовление СТМ зондов

- ⇒ электрохимическое травление Au, W, Pd, Ni, проволоки в щелочи
- ⇒ перерезание тонкой проволоки из Au, $Pt_{0.9}Ir_{0.1}$, $Pt_{1-x}Rh_x$ сплава
- ⇒ очистка поверхности прогревом, локальным электронным прогревом электронным пучком в высоком вакууме, автоэмиссионная подготовка
- ⇒ Создание профиля зонда



Режимы постоянного тока и постоянного зазора в СТМ

- в режиме **постоянного тока** сигнал, вырабатываемый системой обратной связи несет информацию о топографии поверхности.
- в режиме **постоянной высоты** информация о топографии поверхности содержится в туннельном токе, а система обратной связи компенсирует вибрации и термодрейфы (в этом режиме при быстром сканировании и больших перепадах рельефа можно сломать зонд).



Метод модуляции расстояния

На исполнительный элемент (Z-ось пьезосканера) подается переменное напряжение

$$U = U_0 + U_m \sin \omega t \quad \longrightarrow \quad z = z_0 + z_m \sin \omega t$$

$$j \approx j_0(V) e^{-\alpha(\Delta z_0 + \Delta z_m \sin \omega t)} = j_0(V) e^{-\alpha \Delta z_0} e^{-\alpha \Delta z_m \sin \omega t}$$

Амплитуда колебаний мала $j \approx j_0(V) e^{-\alpha \Delta z_0} (1 - \alpha \Delta z_m \sin \omega t)$

Амплитуда переменного сигнала $j(\omega) \sim e^{-\alpha \Delta z_0} \alpha \quad \frac{j(\omega)}{j(0)} \sim \alpha$

$$\alpha = \frac{2 \sqrt{2m \left(\frac{\varphi_s + \varphi_p}{2} \right)}}{\hbar}$$

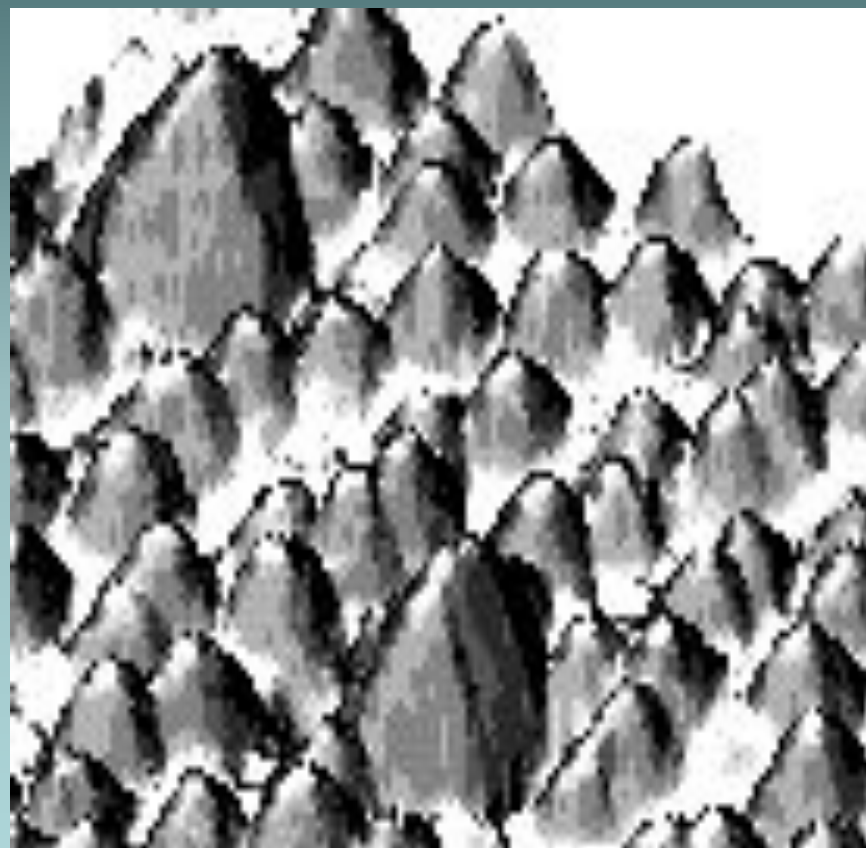
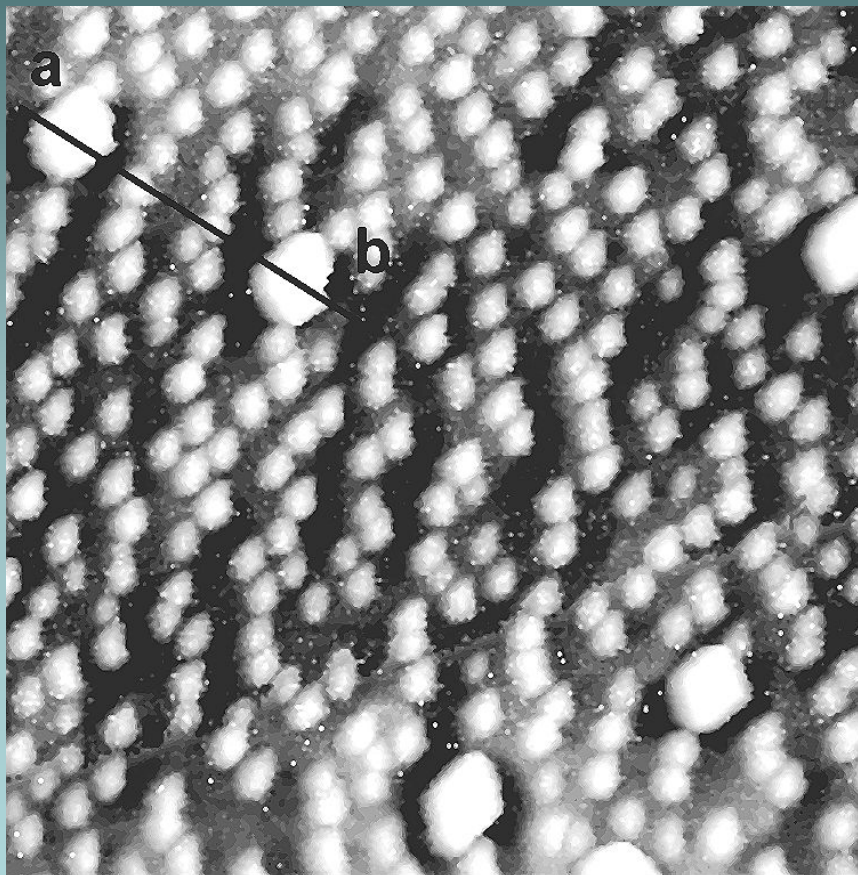
Переменный сигнал содержит информацию о локальной работе выхода

Подготовка поверхности для анализа

Для получения сверхвысокого разрешения предельно важным является подготовка поверхности. Различные материалы требуют разных методов:

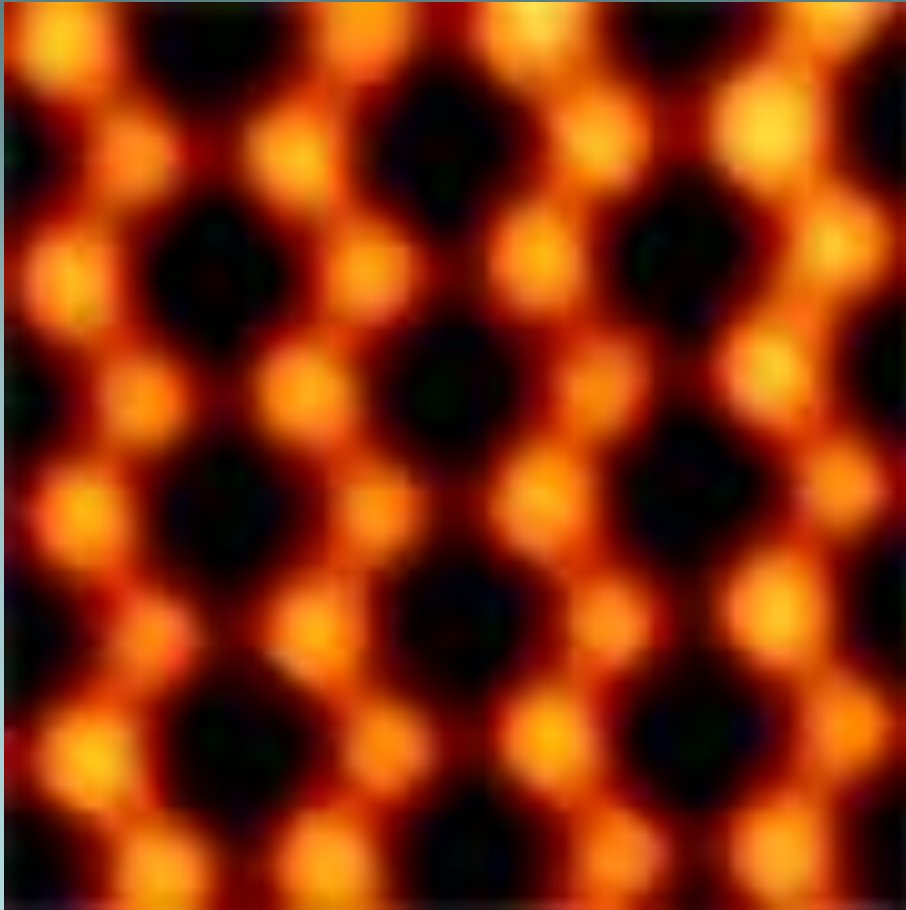
- Полировка поверхности до состояния оптического блеска и электролитическая полировка.
- Инертные полупроводниковые материалы и металлы очищаются от загрязнений кратковременным нагревом до 1200 °С в условиях сверхвысокого вакуума (температурная вспышка)
- Cu, Al, Pt, Au и некоторые полупроводники (Ge...) очищаются ионным распылением с последующим отжигом поверхности.
- III–V полупроводники (GaAs, InAs), также как и высоко-температурные сверх проводники $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, $\text{BiSr}_3\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$ лучше очищаются методом дозированного окисления поверхности с нагревом.
- Разрабатываются методы пассивирования поверхности серой (водные или спиртовые растворы $(\text{NH}_4)_2\text{S}$) с последующим прогревом для удаления легко летучих сульфидов.

**СТМ-изображения поверхности GaAs с квантовыми точками InAs
0.4 X 0.4 мкм,**



Видимый рельеф обусловлен изменением электронной плотности поверхности образца, а не изменением рельефа поверхности

Плоская топографическая карта Si (100)

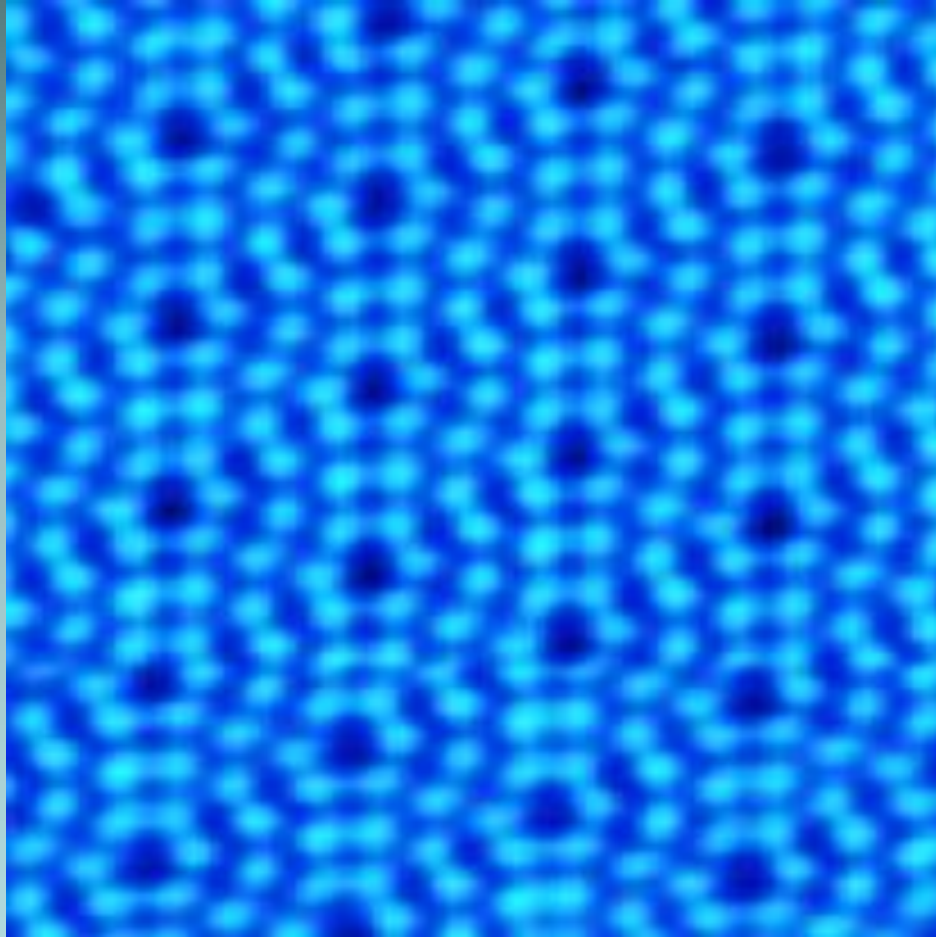


температура: 63K

Область скана 3nm x 3nm

Yokohama city Univ.

Плоская топографическая карта Si (111)



Температура : 4.2K

Напряжение смещения: 0.84V

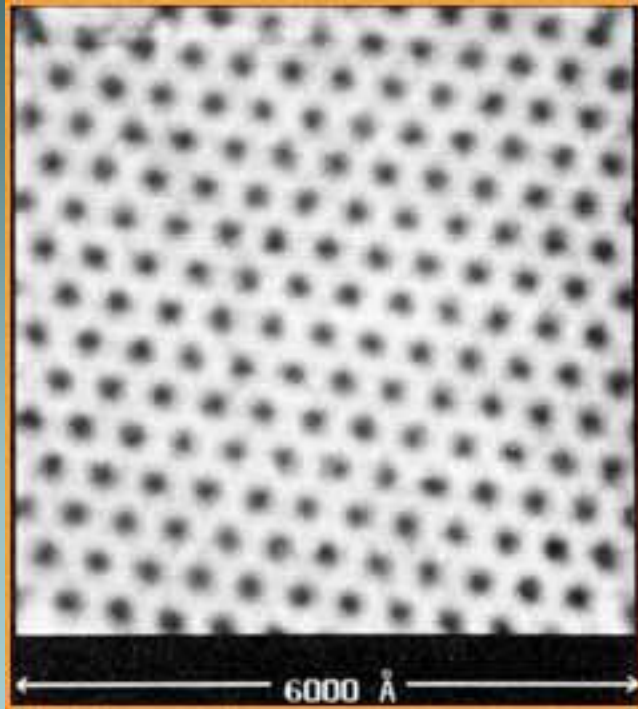
Тунельный ток: 1.04nA

скан: 10nm x 10nm

Yutaka Miyatake

Unisoku Co.,Ltd.

СТМ изображение решетки сверхпроводника NbSe₂

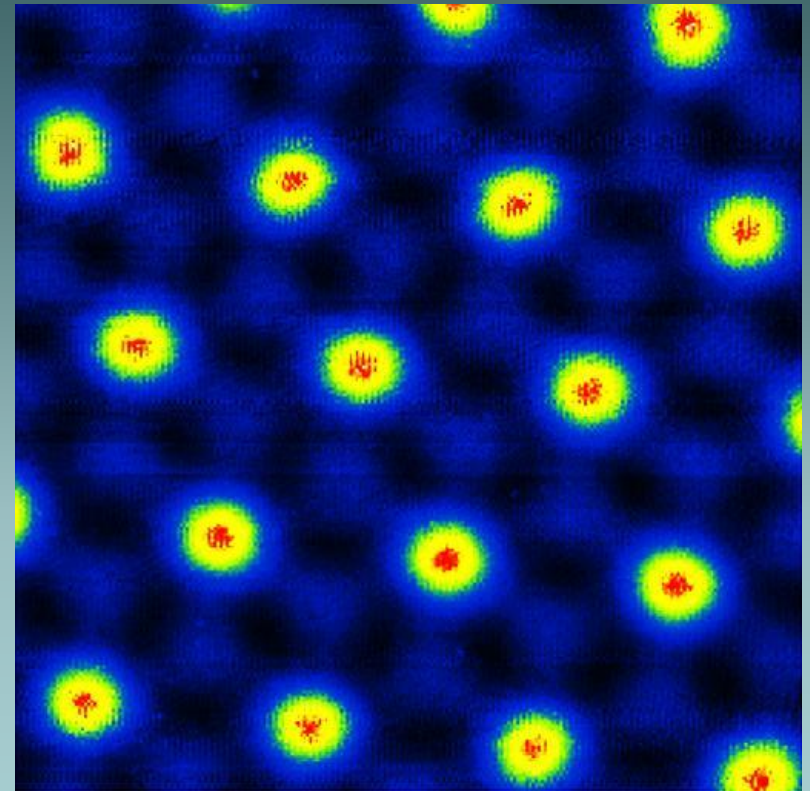


Температура: 1.8K

Размер скана: 600nm x 600nm

H. F. Hess

Bell Labs

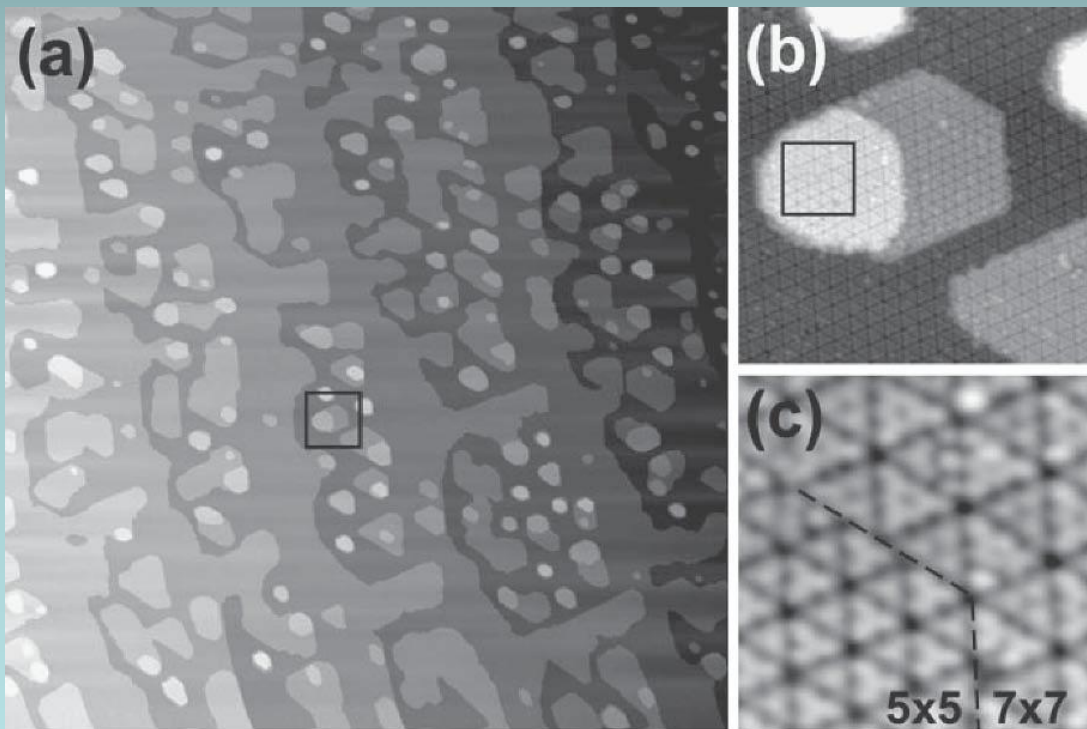
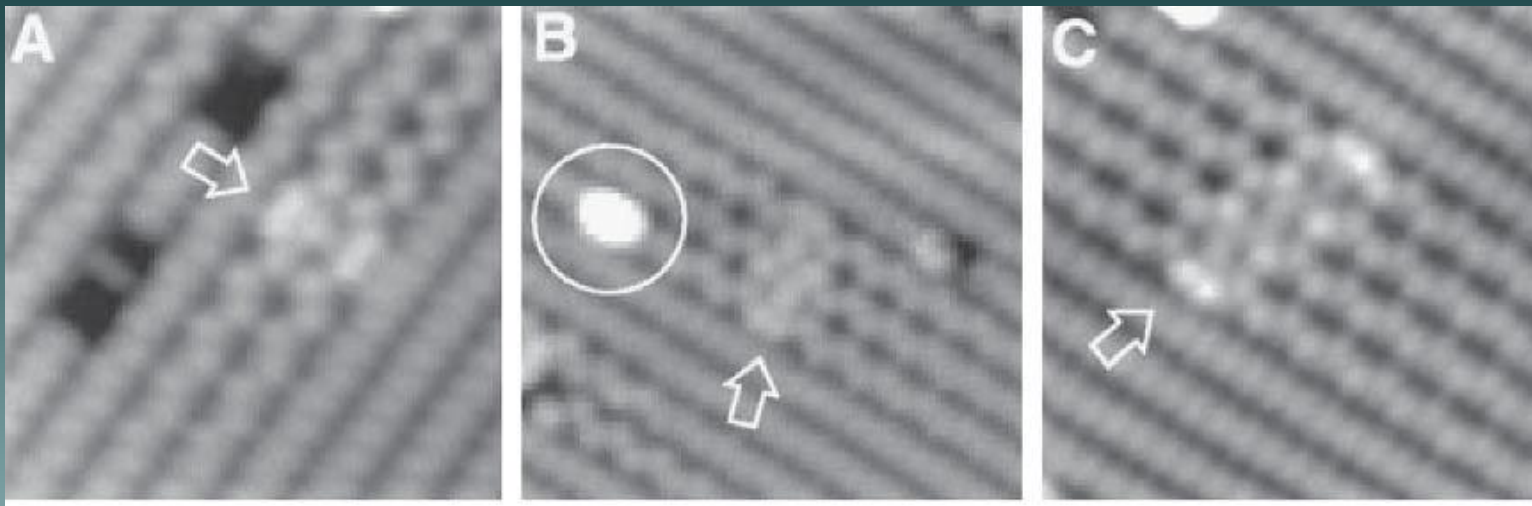


Температура : 400mK

Размер скана : 250nm x 250nm

Dr.HANAGURI

Magnetic Materials Laboratory, RIKEN



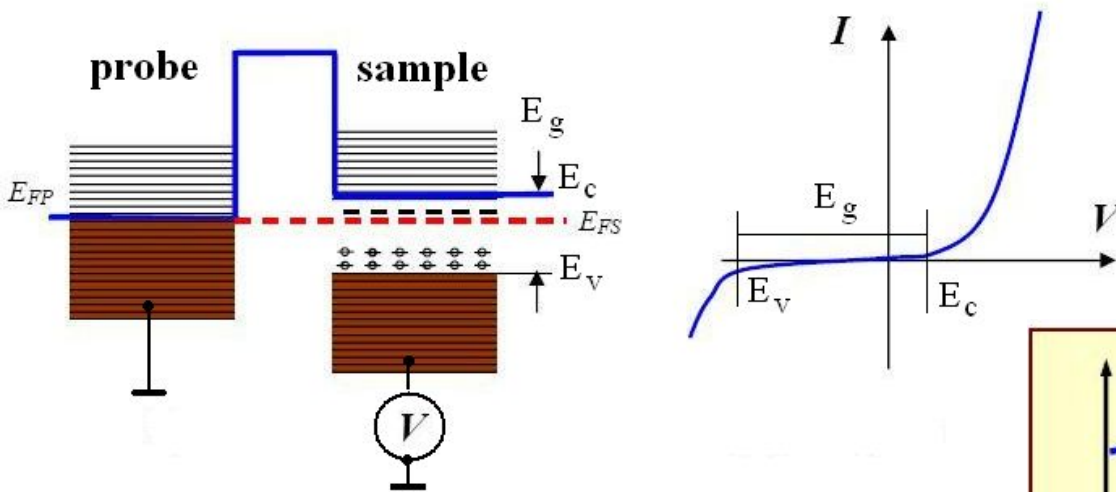
In Situ CTM изображение 0.01 монослоя Ge на Si(001) в процессе эпитаксиального выращивания пленки. Зародышевое образование островковых структур указано стрелками.

Более поздние стадии роста пленок Ge



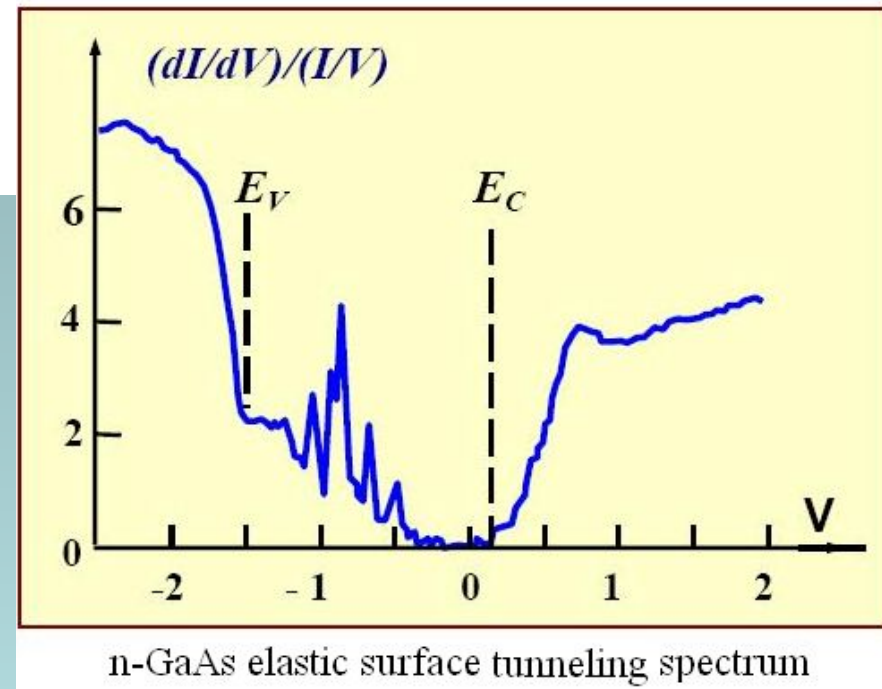
Упругая туннельная спектроскопия полупроводников

Metal-Semiconductor tunneling junction

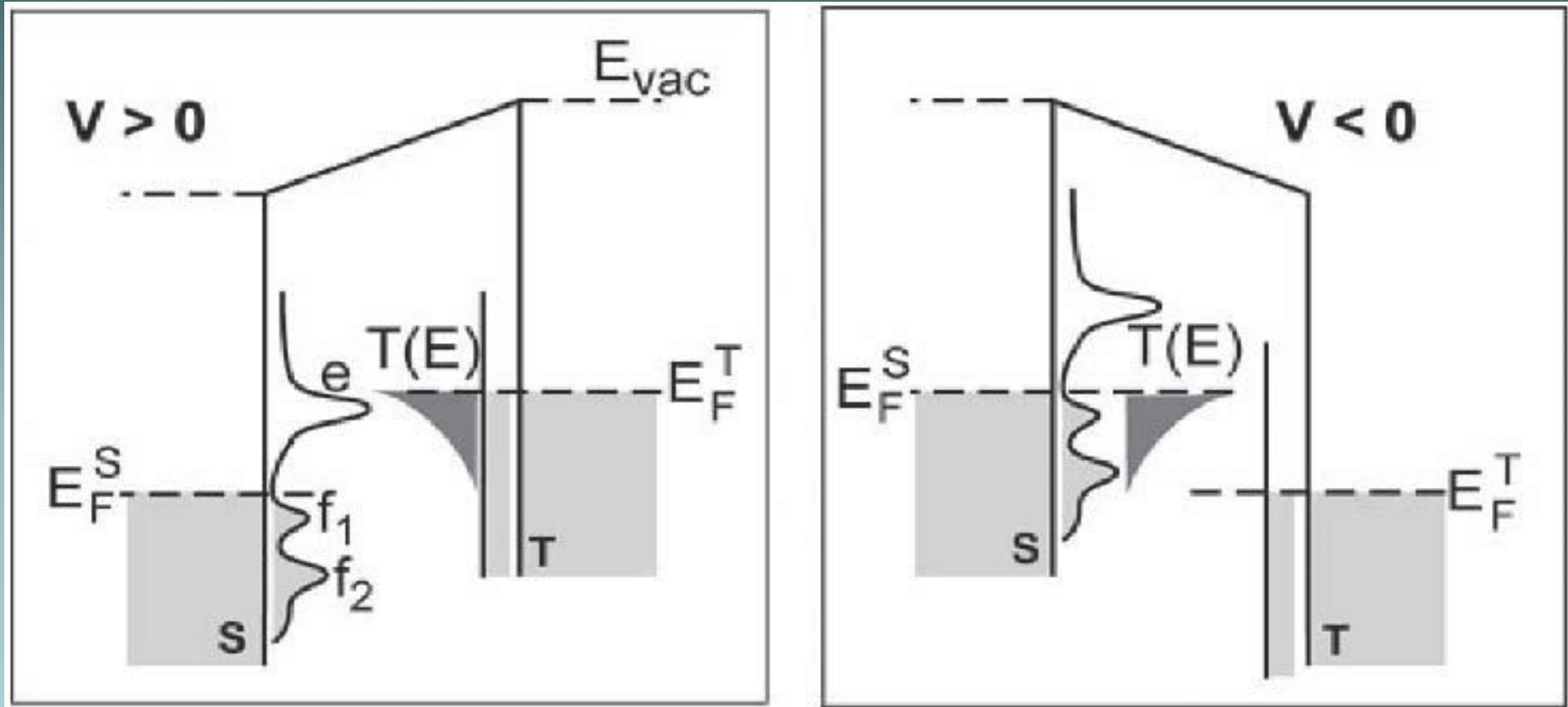


$$I(V) = C \int_{E_F}^{E_F + eV} g(E) \cdot D(E) dE,$$

- измеряются вольт-амперные характеристики $I(V)$ и их производные $dI(V)/dV$ при разорванной петле обратной связи
- возможно определение краев зоны проводимости и валентной зоны относительно уровня Ферми
- для исключения влияния туннельного зазора, значение dI/dV нормируется на проводимость контакта I/V

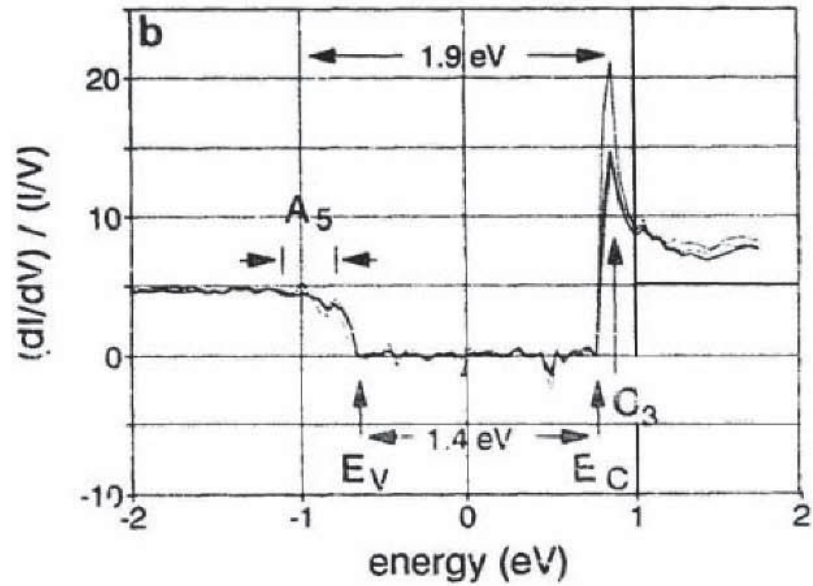
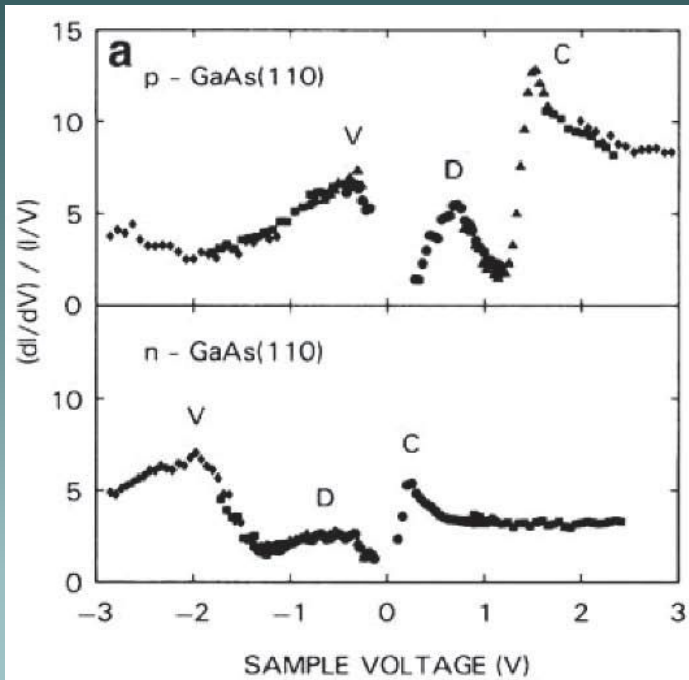


Электронная структура может существенно влиять на интерпретацию изображения

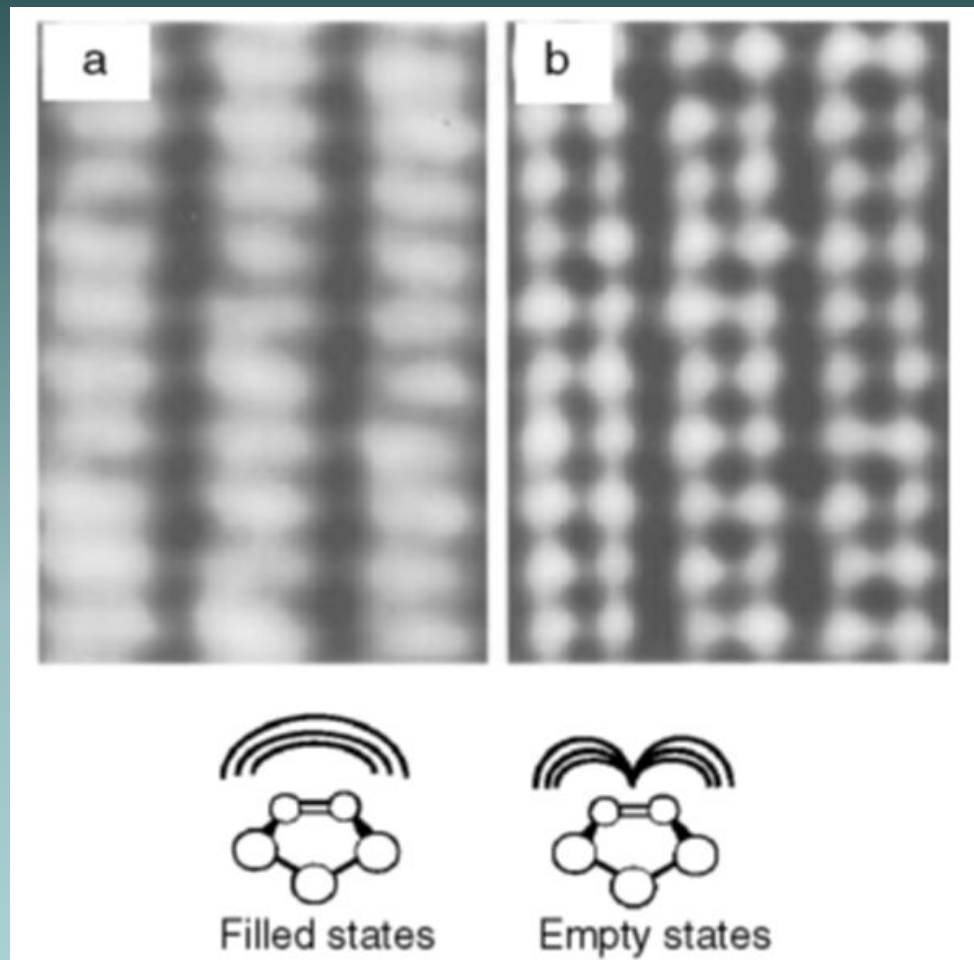


Изменение полярности позволяет изучать пустые уровни энергии полупроводников

Энергетическое разрешение определяется температурным размытием уровня Ферми.

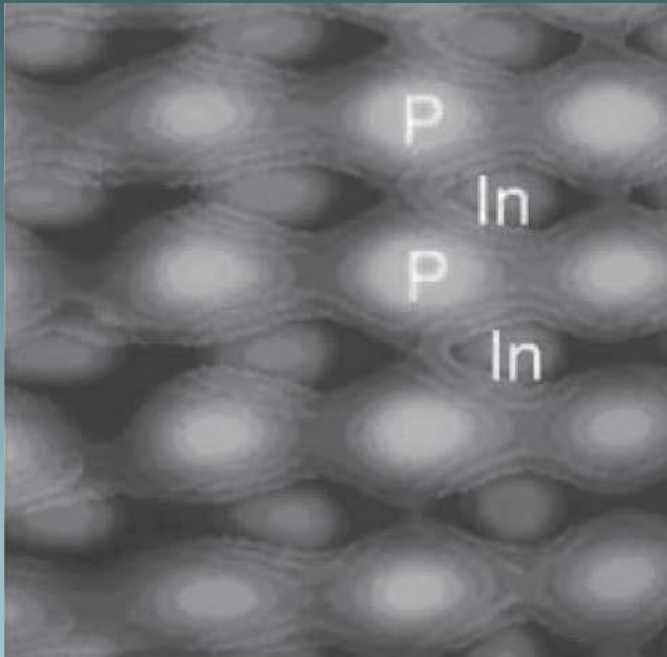


Спектр энергетической структуры для n & p допированного GaAs (слева) и нормированной структуры для InP

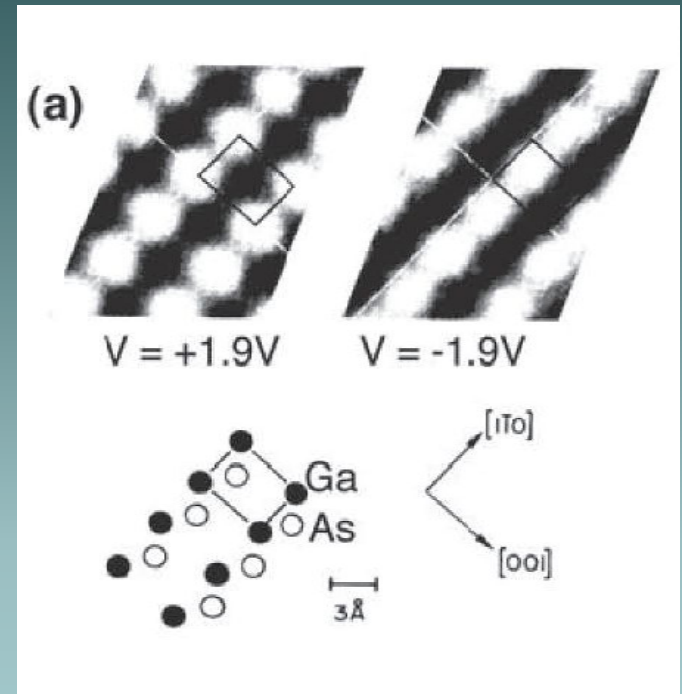


Картини заполненных а) и незаполненных в) π состояний кремния при подаче отрицательного и положительного напряжения смещения на образец

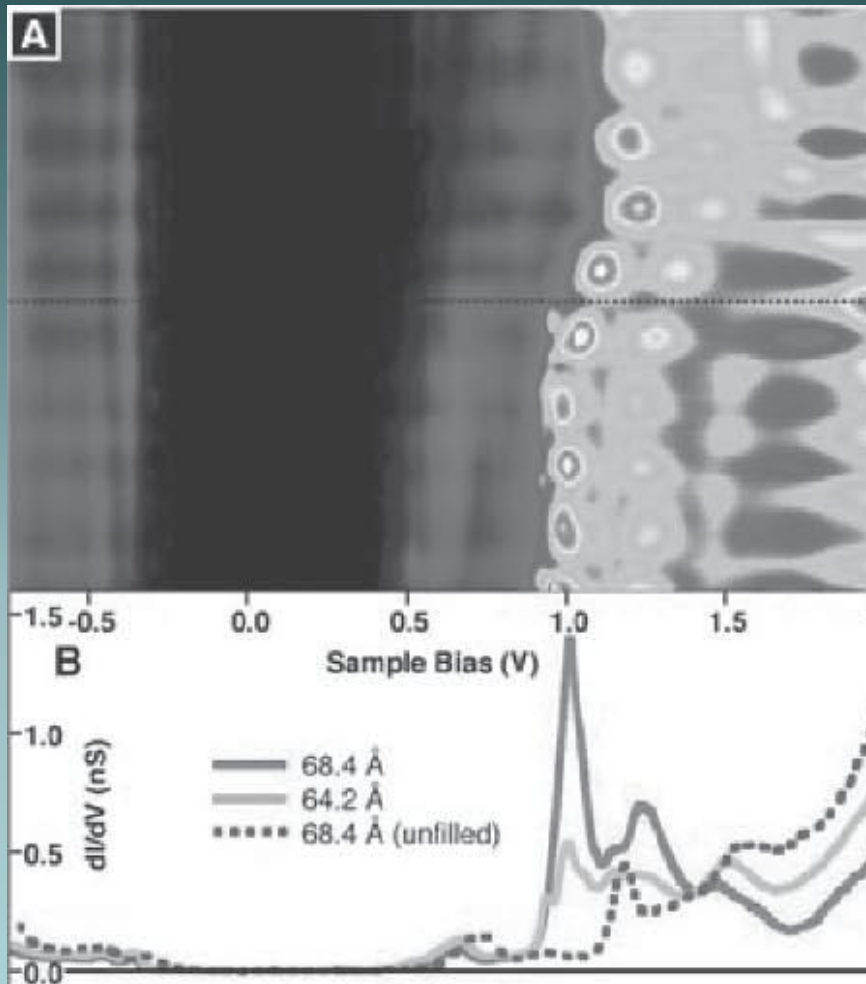
Изменение полярности может применяться для соединений типа InP для раздельной регистрации структур в полупроводниках



Совмещенное изображение сканов +/- регистрирующих либо P либо In в зависимости от полярности напряжения между зондом и поверхностью.

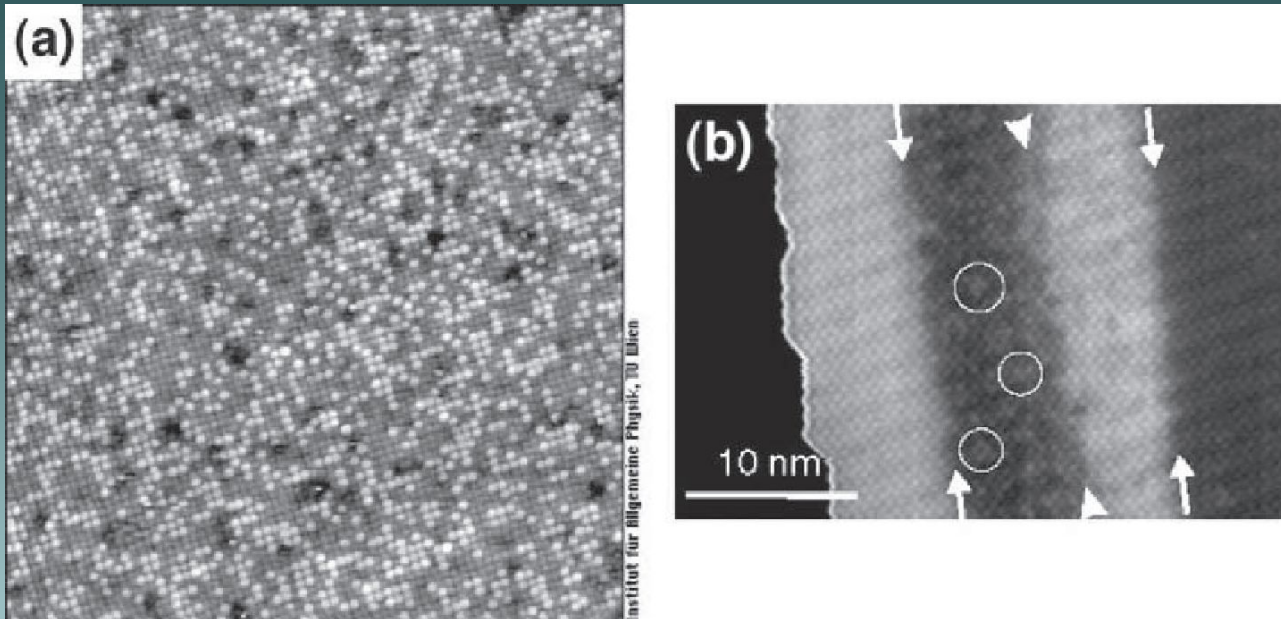


При отрицательном напряжении на образце вклад в изображение дают заполненные состояния анионов As, тогда как при положительном напряжении ток идет на свободные состояния катионов (Ga)



Пример записи карты электронной плотности вдоль углеродной нанотрубки с включениями молекул C_{60}

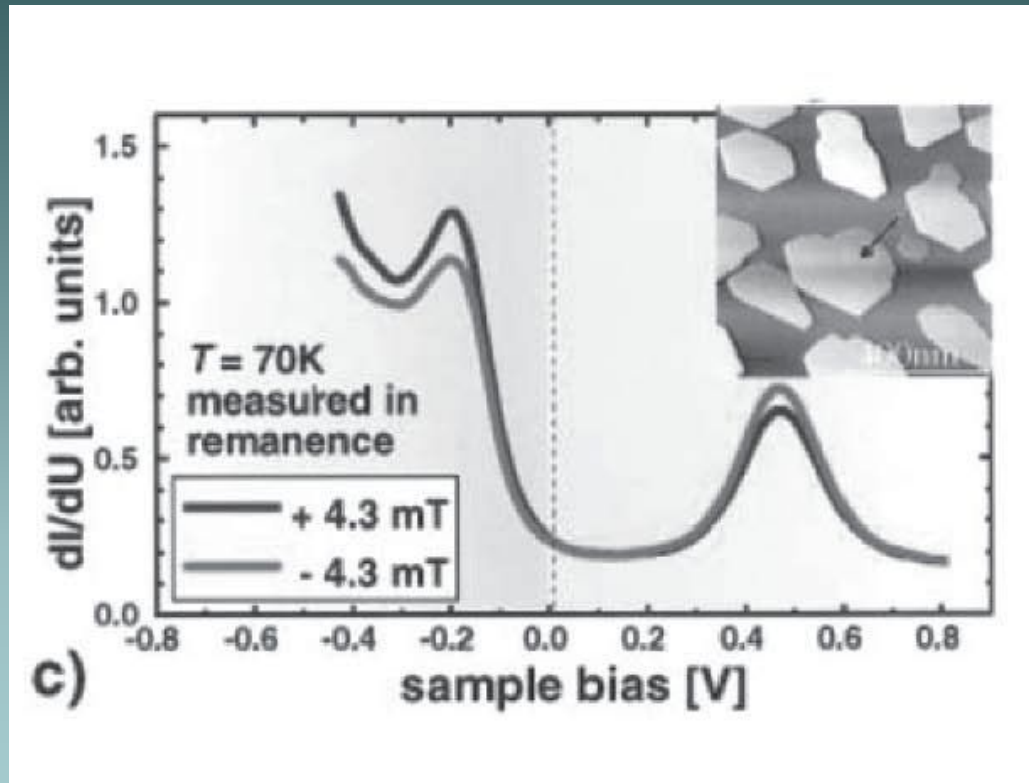
Запись первой производной от вольт-амперной кривой дает распределение электронной плотности по энергии. Снимая такие зависимости в каждой точке можно получить эквипотенциальные зависимости электронной плотности. Таким образом можно построить карту распределения особенностей электронной структуры по поверхности. Запись проводится при подаче переменного напряжения с постоянной составляющей – (модуляция) с последующим выделением соответствующей частоты синхронным детектором. Измерения проводятся попиксельно с отключением обратной связи в каждой точке. Необходима прецизионная точность z сканера и низкие температуры.



Левая картинка демонстрирует возможности получения локального контраста изображения за счет разной величины плотности заполненных состояний вблизи уровня Ферми для сплава PtRh. Темные пятна – остаточные включения С

Изображение Ge и Si
нонопроволок полученных
последовательным
субмонослойным осаждением
на покрытую Вi поверхности
Si(111) (Ge-светлый)

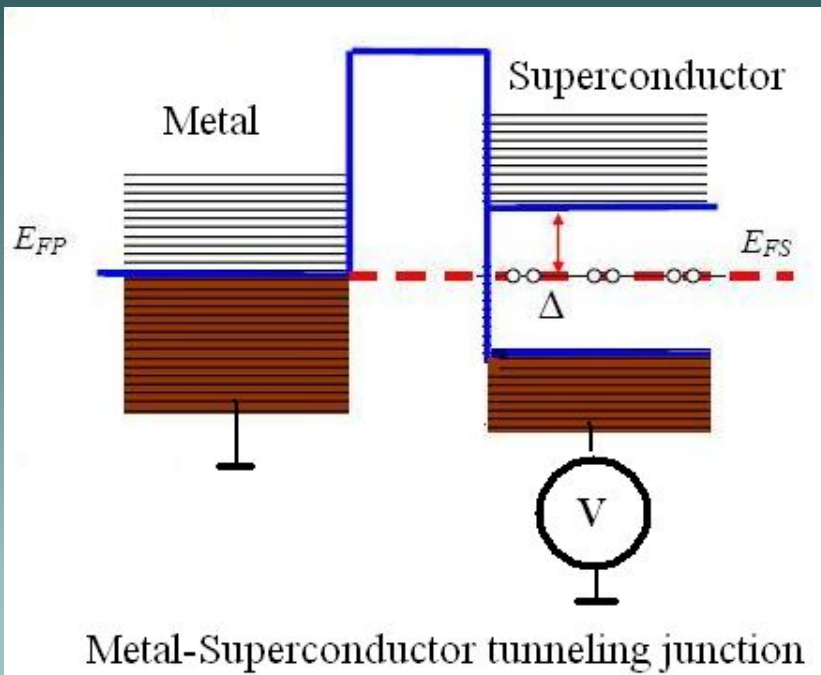
Спин-поляризованная туннельная спектроскопия



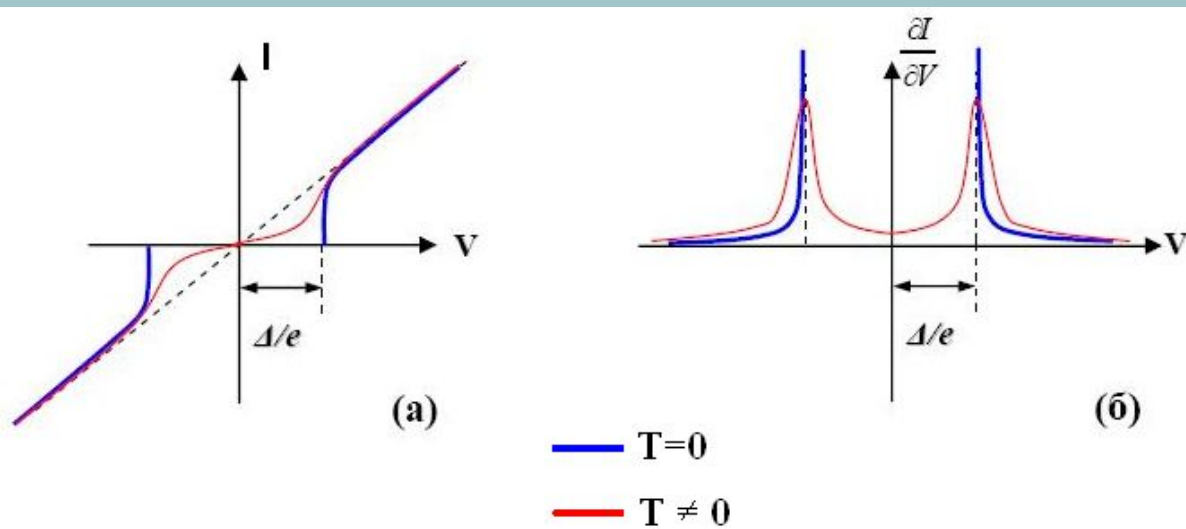
Используют специальный W зонд с покрытием из железа с последующим намагничиванием перпендикулярно направлению зонда.

Величина туннельного тока при приложении магнитного поля к образцу будет зависеть от локальной ориентации спина на заполненных энергетических состояниях. Таким образом можно получать карту распределения локальной намагниченности.

Упругая туннельная спектроскопия сверхпроводников



- измеряются вольт-амперные характеристики $I(V)$ и их производные $dI(V)/dV$ при разорванной петле обратной связи
- можно измерить энергетическую щель в плотности электронных состояний сверхпроводника и ее пространственное распределение по поверхности образца



Неупругая электронная туннельная спектроскопия

если энергия туннелирующих электронов eV

больше чем энергия $\hbar\omega$ возбуждений,

существующих в туннельном контакте, то

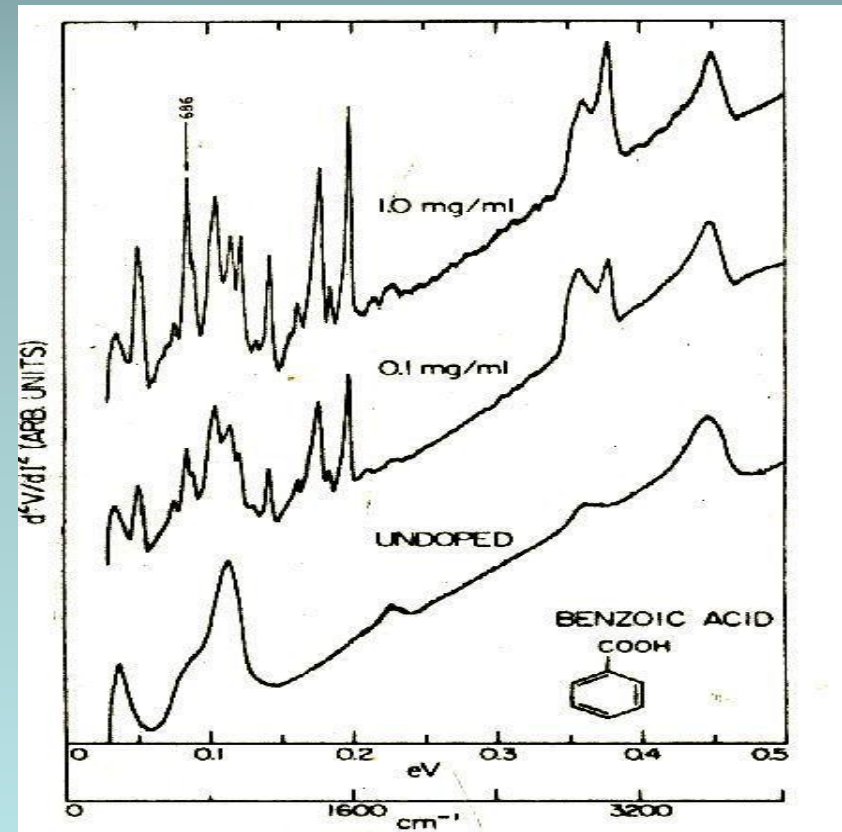
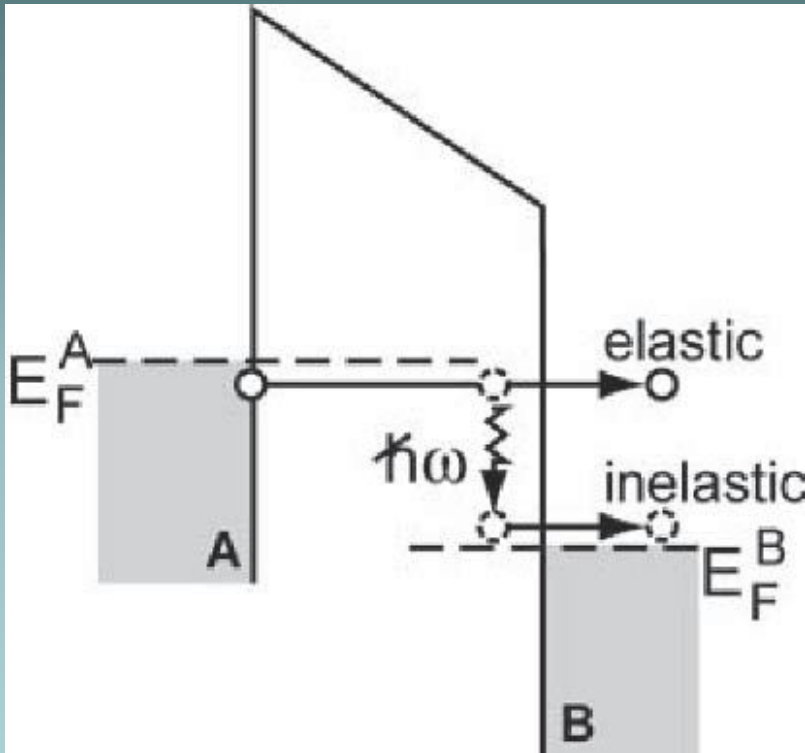
открывается дополнительный неупругий канал

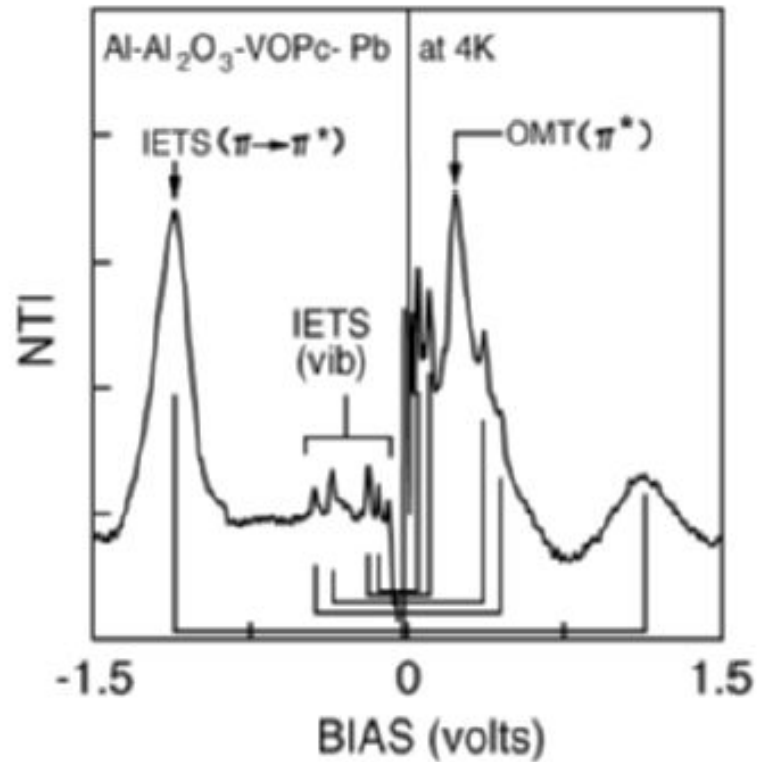
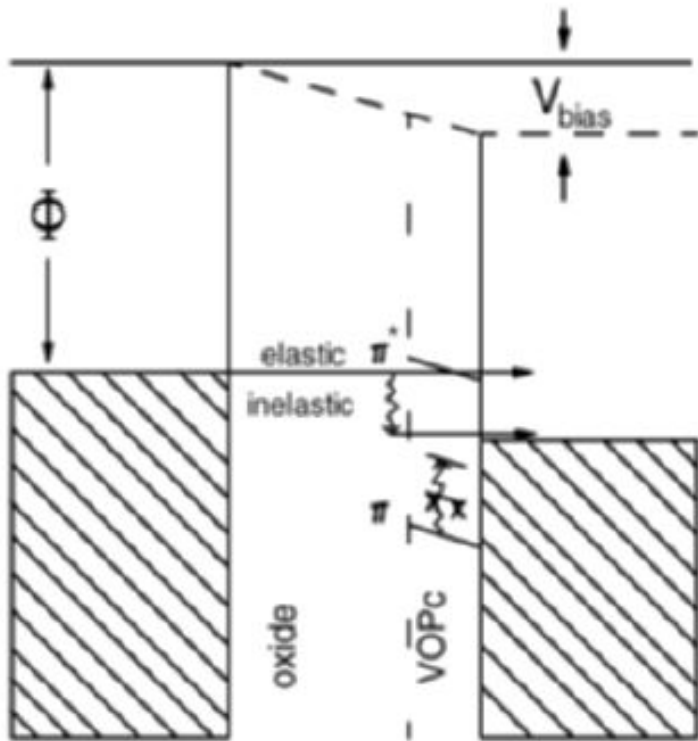
туннелирования, увеличивающий общий ток

через контакт.

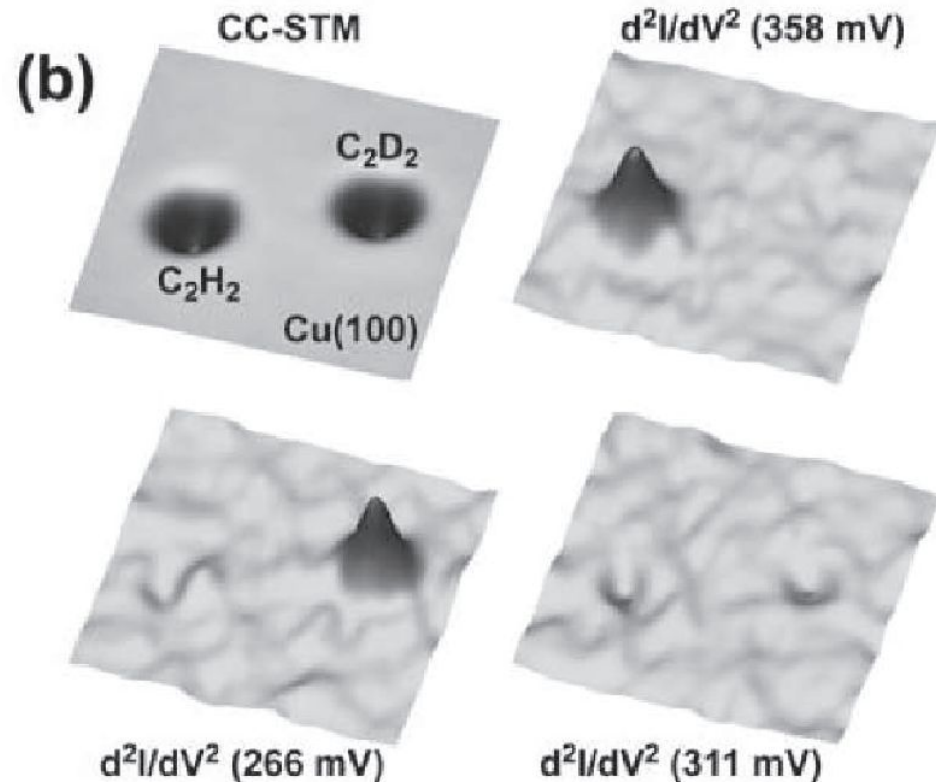
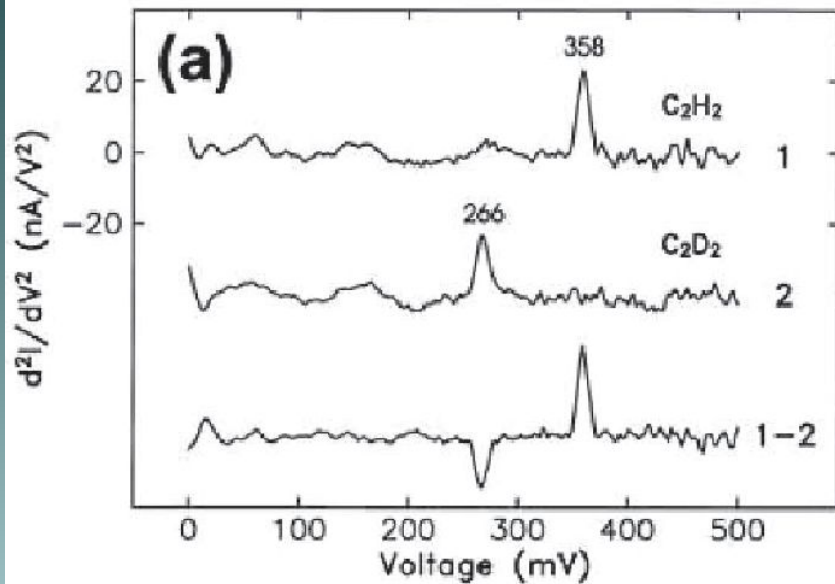
можно измерить молекулярные спектры (аналог

ИК спектров), энергию фононов, т.п.



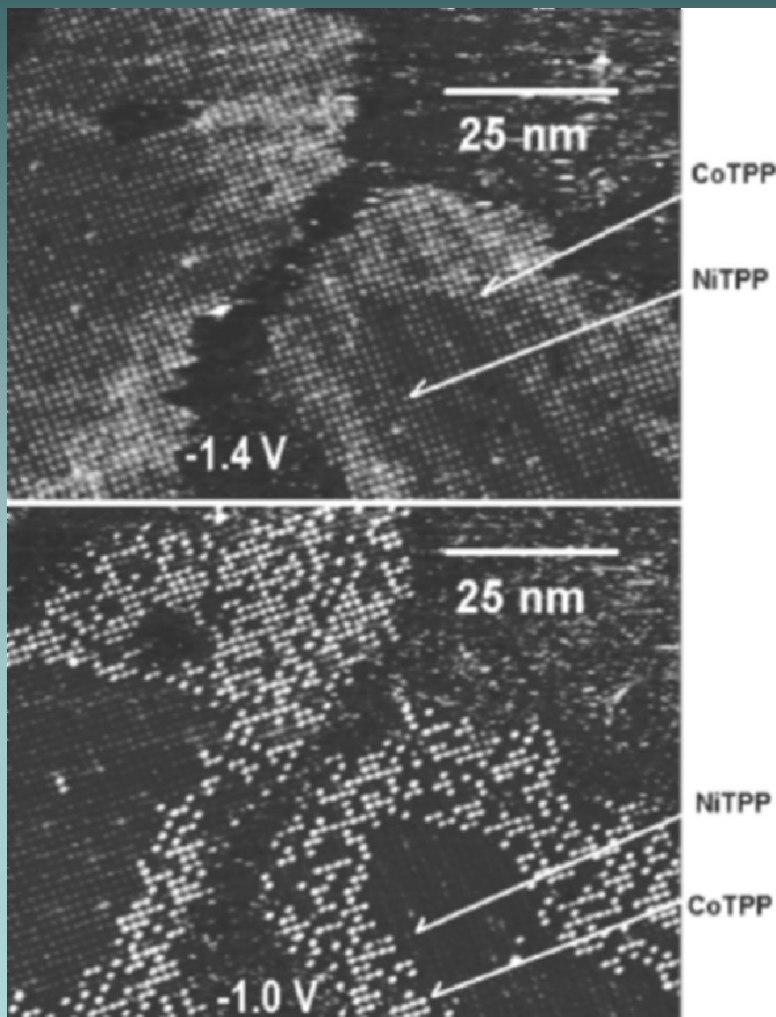


Al-Al₂O₃-VOPc-Pb -vanadyl phthalocyanine на свинцовой подложке. Неупругое тунелирование возможно при разной полярности на зонде



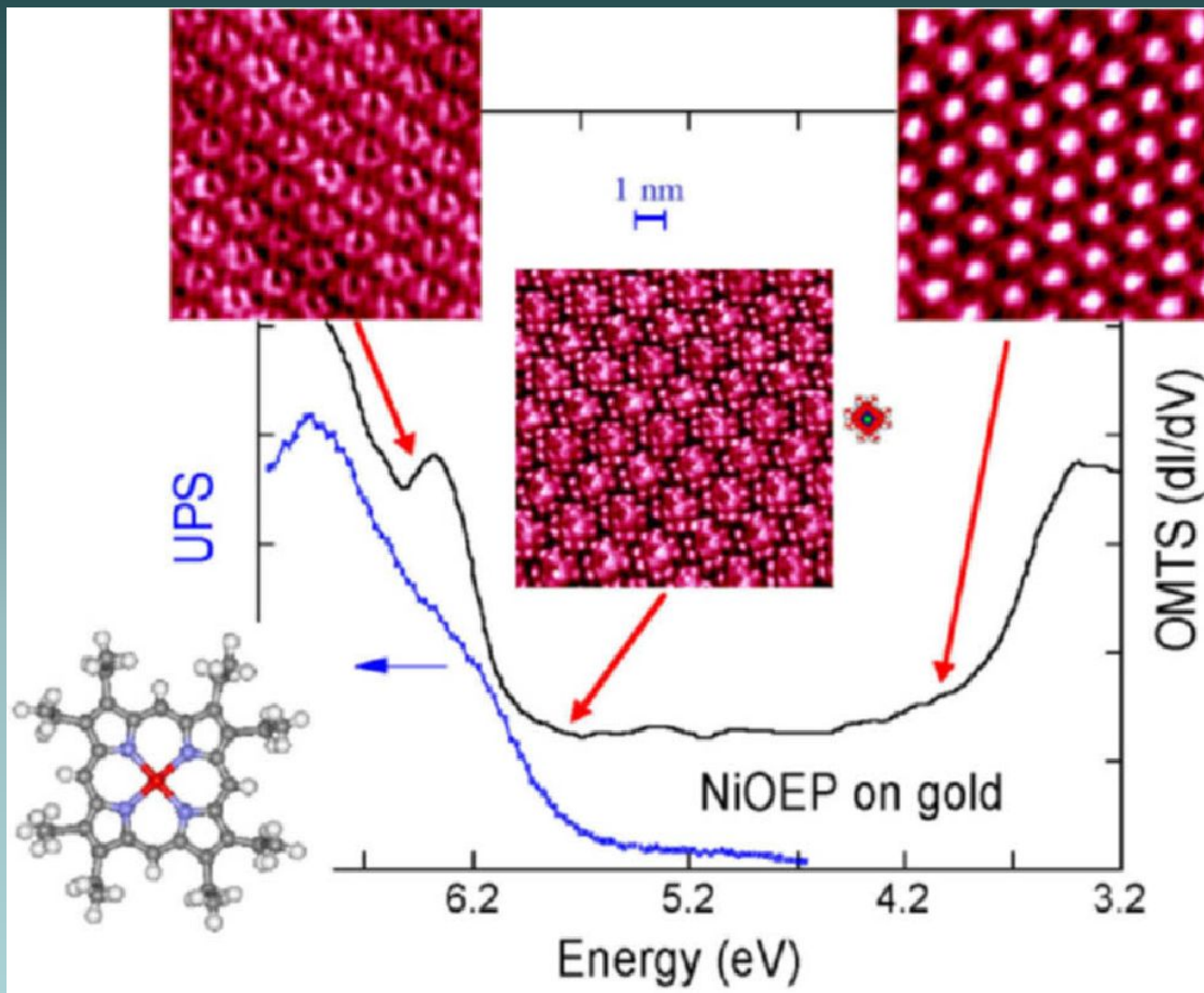
а – спектры полученные с помощью СТМ микроскопа показывают наличие возбуждения С-Н связей в молекуле C₂H₂ и С-D связей в C₂D₂ молекулах на поверхности меди

б – СТМ изображения молекул - вторых производных d^2I/dV^2 при настройке на энергии соответствующие возбуждению той или другой молекулы и при настройке на произвольную энергию.



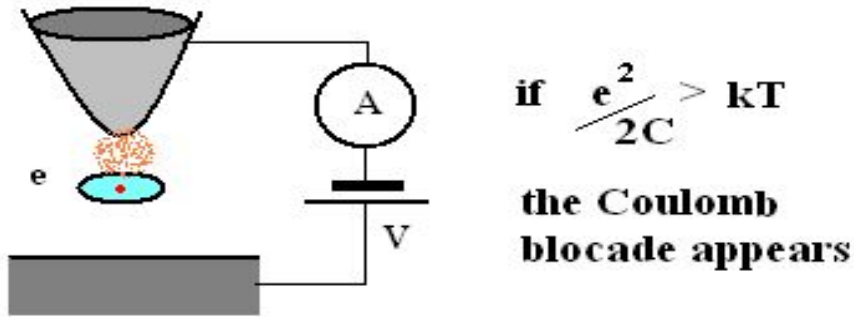
Подача определенной постоянной величины смещения, (которое соответствует особенности на зависимости $N(E)$) при сканировании позволяет определить пространственное распределение молекулы ответственной за данную особенность спектра.

На рисунке представлены результаты сканирования поверхности золота с нанесенными комплексами содержащими Ni и Co

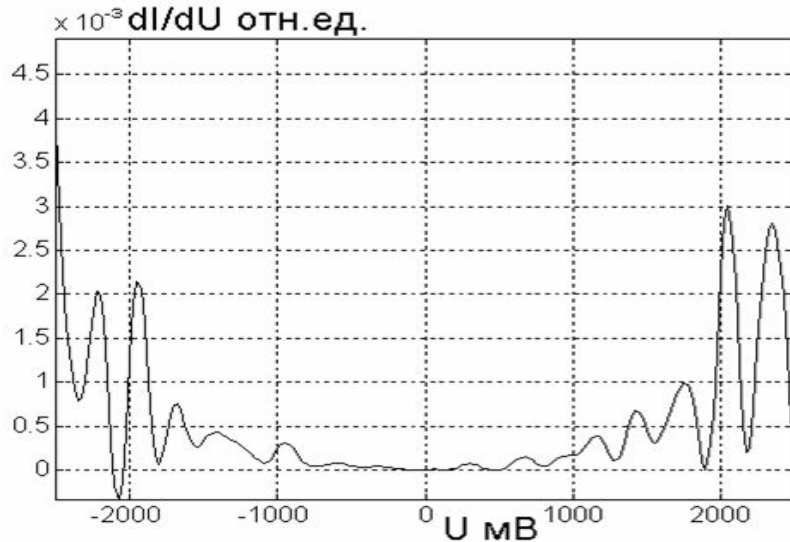
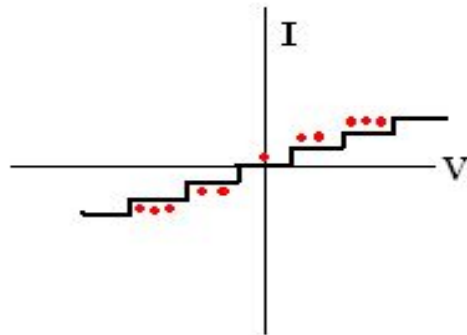


Результаты сканирования поверхности с комплексами Ni – octaethylporphyrin (NiOEP) при разном напряжении. Синим цветом на графике показан спектр края валентной зоны полученный ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопией того же образца.

Эффекты одноэлектронного туннелирования в локальных туннельных контактах



if $\frac{e^2}{2C} > kT$
the Coulomb blockade appears



- в области между зондом и образцом локализована малая проводящая частица с малой емкостью
- при низких температурах ее энергия емкостного аккумуляирования заряда может быть больше, чем тепловая энергия
- туннелирующий электрон, попав на эту частицу, создает Кулоновскую блокаду для следующих за ним электронов, туннелирование электронов прекращается до тех пор, пока внешнее напряжение не снимет блокаду
- в результате на вольт-амперной характеристике появляются ступеньки (пики на первой производной), количество ступенек коррелирует с количеством электронов, захваченных частицей.