Письма в ЖЭТФ, том 51, вып. 12, стр. 627–630 *25 июня 1990 г.*

ТУННЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ ПОЛУПРОВОДНИКА ПРИ НАЛИЧИИ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Н.С.Маслова

Рассмотрена нестационарная задача о туннелировании из локализованных в области острия СТМ поверхностных состояний полупроводника с учетом кулоновского отталкивания электронов в этих состояниях. Получена временная зависимость среднего значения туннельного тока на больших временах и оценены его относительные флуктуации. Исследованы условия экспериментального наблюдения данной зависимости и возможность туннельной спектроскопии поверхностных состояний в режиме постоянного тока.

При исследовании поверхности полупроводников (п/п) методом сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии локализованные поверхностные состояния существенно влияют на получаемое в эксперименте изображение [1-3]. Подобные состояния могут быть обусловлены локализованными на поверхности "болтающимися" связями, адсорбированными атомами и молекулами, а также различными структурными дефектами. В настоящей работе показано, что при туннельной спектроскопии поверхности п/п надо также учитывать нестационарные эффекты, связанные с опустошением поверхностных состояний, локализованных в области острия СТМ, и их заполнением за счет различных процессов рассеяния, поверхностной диффузии и т. д., особенно, если энергия этих состояний лежит в запрещенной зоне п/п.

Рассмотрим ситуацию, когда ϵ_j – энергия поверхностного состояния, локализованного в области j -го узла, лежит в середине запрещенной зоны. Если ширина запрещенной зоны $E_c - E_v \sim$ эВ (это справедливо для Si и многих других п/п), то можно считать, что $E_c - E_v \gg T$, $T \gg \Gamma_t$, $|E_{c(v)} - \epsilon_j| \gg T \gg \Gamma_t$, где T – температура, а Γ_t – уширение уровня ϵ_j, обусловленное туннелированием между образцом и острием. При токе $\sim$ 1 нА, $\Gamma_t^{-1} \sim 10^{-10}$ с, $T \sim 25 \cdot 10^{-3}$ эВ. Характерные времена релаксации электронной плотности, связанные с неупругими переходами в валентную зону и зону проводимости, для таких поверхностных состояний велики: $\gamma^{-1} \sim 10^{-2} - 10^{-4}$ с [6]. Основным механизмом заполнения таких состояний, локализованных в области острия СТМ, являются электронные переходы между соседними узлами, т. е. квантовая поверхностная диффузия. При этом оказывается существенным U – кулоновское отталкивание электронов с противоположными спинами, локализованных на одном узле [4, 5] [1)].

Будем считать, что $\epsilon_j < E_F$, $V_s < 0$ – напряжение на образце отрицательно[2)].

Для описания такой системы воспользуемся гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k b^+_{k\sigma} b_{k\sigma} + \sum_{j,\sigma} \epsilon_j a^+_{j\sigma} a_{j\sigma} + U \sum_j n_{j\sigma} n_{j-\sigma} + \\ + \sum_{jj'} t_{jj'} a^+_{j'\sigma} a_{j\sigma} + \sum_{j,k,\sigma} \delta_{ij} V_{kj} (a^+_{j\sigma} b_{k\sigma} + b^+_{k\sigma} a_{j\sigma}), \quad (1)$$

$b^+_{k\sigma}$, $a^+_{j\sigma}$ – операторы рождения электрона в состоянии (k, σ) и (j, σ) в острие и образце

[1)] Аналогично приближению, используемому для микроскопического гамильтониана в модели Андерсона и модели Хаббарда, для сильно локализованных поверхностных состояний можно пренебречь дальнодействующими взаимодействиями W_{ij} по сравнению с U – кулоновским отталкиванием электронов с противоположными спинами, локализованных на одном узле, т. к. $U \gg W_{ij}$, $U \sim e^2/a_i$, $W_{ij} \sim e^2/\epsilon R_{ij}$, где a_i – радиус волновой функции локализованного состояния, а R_{ij} – расстояние между узлами.

[2)] При $\epsilon_j > E_F$, $V_s > 0$ полученные результаты будут справедливы для дырок.

соответственно, $\epsilon_{k\sigma}$, $\epsilon_{j\sigma}$ – энергии электронов в этих состояниях, U – энергия кулоновского отталкивания, $t_{jj'}$ – амплитуда перехода между узлами j и j', которая отличается от 0 только для ближайших узлов, V_{kj} – матричный элемент туннельного перехода между состояниями (j, σ) и (k, σ). Считается, что острие расположено над i-ым узлом, $V_{kj}=0$, при $i \neq j$. Для вычисления туннельного тока воспользуемся системой кинетических уравнений для $\langle n_{j\sigma}\rangle$ и $\langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma}\rangle$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle n_{j\sigma}\rangle = \delta_{ij} \sum_k V_{kj}^2 [f_{k\sigma}\langle(1-n_{j\sigma})(1-n_{j-\sigma})\rangle - (1-f_{k\sigma})\langle n_{j\sigma} \times$$

$$\times (1-n_{j-\sigma})\rangle]\delta(\epsilon_j - \epsilon_{k\sigma}) + \sum_{\langle jj'\rangle} \int d\epsilon_j \nu_j(\epsilon_j)\nu_{j'}(\epsilon_j)\,|t_{jj'}|^2 \times$$

$$\times [\langle n_{j'\sigma}(1-n_{j'-\sigma})(1-n_{j\sigma})(1-n_{j-\sigma})\rangle - \langle n_{j\sigma}(1-n_{j-\sigma}) \times$$

$$\times (1-n_{j'\sigma})(1-n_{j'-\sigma})\rangle] + \delta_{ij} \sum_k V_{kj}^2 [f_{k\sigma}\langle(1-n_{j\sigma})n_{j-\sigma}\rangle - (1- \qquad (2)$$

$$- f_{k\sigma})\langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma}\rangle]\delta(\epsilon_j + U - \epsilon_{k\sigma}) + \sum_{\langle jj'\rangle} \int d\epsilon_j \nu_j(\epsilon_j + U)\times$$

$$\times \nu_{j'}(\epsilon_j + U)\,|t_{jj'}|^2 [\langle n_{j'\sigma} n_{j'-\sigma}(1-n_{j\sigma})\, n_{j-\sigma}\rangle - \langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \times$$

$$\times (1-n_{j'\sigma})n_{j'-\sigma}\rangle] = W_{j\sigma}(\epsilon_j) + W_{j\sigma}(\epsilon_j + U)$$

$$\frac{\partial\langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma}\rangle}{\partial t} = \sum_\sigma W_{j\sigma}(\epsilon_j + U), \qquad (2а)$$

где $f_{k\sigma}$ – фермиевская функция распределения электронов в острие, $\nu_j(\epsilon_j)$ и $\nu_{j'}(\epsilon_j)$ – плотности электронных состояний на узлах j и j'. Поскольку $U \gg T$, $|eV_s|$; $f_{k\sigma}(\epsilon_j+U) = f_t(\epsilon_j + U) = 0$. Кроме того, запрещено двукратное заполнение одного узла, т. е.

$$\langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma}\rangle = 0.$$

Из уравнения (2а) вытекают дополнительные ограничения на средние значения произведений чисел заполнения соседних узлов, с учетом которых, после суммирования по σ, из (2) следует уравнение для

$$\langle n_j\rangle = \langle n_{j\sigma}\rangle + \langle n_{j-\sigma}\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle n_j\rangle = -\delta_{ij}\Gamma_t(f_t(\epsilon_i)+1)(\langle n_j\rangle - n_0) + \Gamma_s \sum_{\langle jj'\rangle}\langle n_{j'}\rangle - \langle n_j\rangle, \qquad (3)$$

где $\Gamma_t = V_{ki}^2\, \nu_t(\epsilon_i)$, $\nu_t(\epsilon_i)$ – плотность электронных состояний в острие,

$$n_0 = \frac{2f_t(\epsilon_i)}{f_t(\epsilon_i)+1}; \qquad \Gamma_s = |t_{jj'}|^2 \frac{\Omega_{ph}}{(\epsilon_j - \epsilon_{j'})^2 + \Omega_{ph}^2}$$

Γ_s^{-1} – характерное время межузельных переходов, Ω_{ph} – однородное уширение энергетических уровней, вызванное внутриузельным взаимодействием с фононами, "фазовым шумом" [7]. Начальные условия однородны: $n_j(0) = n_1$. При этом туннельный ток определяется выражением:

$$\langle I(t)\rangle = -e\sum_{k,\sigma}\dot{n}_{k\sigma} = e\Gamma_t(f_t(\epsilon_i)+1)(\langle n_i(t)\rangle - n_0). \qquad (4)$$

Стационарное решение уравнения (3), $\langle n_j \rangle = n_0$, $\langle I_{st} \rangle = 0$.

Для определения временной зависимости $\langle I(t) \rangle$ перейдем к непрерывному пределу уравнения (3) для электронной плотности $n(r, t)$, который представляет собой двумерное уравнение диффузии при наличии стока единичного радиуса, откуда с помощью преобразования Лапласа можно найти $n(r, t)$. С учетом явного вида $n(r, t)$ при $\Gamma_s t \gg 1$ для $\langle I(t) \rangle$ справедливо выражение:

$$\langle I(t) \rangle \sim \frac{4\Gamma_s e(n_1 - n_0)}{\ln(4\Gamma_s t) + \mu(B)} \tag{5}$$

где

$B = \Gamma_t (f_t(\epsilon_i) + 1)\Gamma_s^{-1}$, а $\mu(B) \sim 1$ при $B \gg 1$

$\mu(B) \sim 2I_0(\sqrt{B})(I_1(\sqrt{B})\sqrt{B})^{-1}$, при $B \sim 1$, $\mu(B) = 4B^{-1}$

при $B \ll 1$.

Надо отметить, что на самом деле $I(t)$ – пуассоновский случайный процесс. Для туннельного микроконтакта экспериментально измеряется случайная величина $\overline{I(t)}^{\tau} = \int_t^{t+\tau} dt' I(t')$ где τ – время измерения. Из (5) следует, что при $\tau \ll t$, $\langle \overline{I(t)}^{\tau} \rangle = \langle I(t) \rangle + o(\tau/t)$. Для относительных флуктуаций тока справедливо выражение

$$\frac{\langle (\overline{I}^{\tau}(t) - \langle \overline{I(t^{\tau})} \rangle)^2 \rangle}{\langle \overline{I}^{\tau}(t) \rangle^2} = \frac{e}{\tau \langle \overline{I}^{\tau}(t) \rangle} . \tag{6}$$

Поэтому при $e\langle I(t) \rangle^{-1} \ll \tau \ll t$ относительные флуктуации малы и измеряемое значение тока $\overline{I^{\tau}}(t)$ в указанном смысле близко к $\langle I(t) \rangle$.

В зависимости от концентрации и расположения адатомов в эксперименте может реализоваться как случай $B \gg 1$, так и $B \ll 1$. Обычно время измерения тока $\tau \gtrsim 10^{-6}$ с, так что при $B \gtrsim 1$ на временах от $10^{-4} - 10^{-5}$ с до нескольких секунд возможно экспериментальное наблюдение зависимости (5) и оценка Γ_s. На больших временах могут быть существенны относительные флуктуации тока. При быстрой релаксации, $B \ll 1$, для $t \ll \Gamma_s^{-1} \exp[\frac{4}{B}]$ среднее значение туннельного тока практически постоянно: $\langle I(t) \rangle \sim \langle I(0) \rangle$ вплоть до времен порядка нескольких секунд. В отличие от случая $B \gtrsim 1$, при $B \ll 1$ возможна туннельная спектроскопия поверхностных состояний в режиме постоянного тока, хотя стационарное значение тока равно нулю.

Можно наряду с поверхностной диффузией рассмотреть и релаксацию, связанную с переходами в объемные зоны, имеющую характерное время γ^{-1}, $\gamma \ll \Gamma_s$, Γ_t. При $t \lesssim \gamma^{-1}$, зависимость $\langle I(t) \rangle$ практически не изменится. Если γ отлична от нуля, то $\langle I_{st} \rangle / \langle I(0) \rangle = \gamma / (\Gamma_t (f_t(\epsilon_i) + 1) + \gamma)$. Но при указанных выше значениях γ и Γ_t, $\langle I_{st} \rangle / \langle I(0) \rangle \sim 10^{-6}$, т. е. стационарное значение тока пренебрежимо мало.

Автор выражает глубокую благодарность Л.В.Келдышу и В.И.Панову за постоянное внимание к данной работе и И.М.Соколову за ценные замечания.

Литература

1. *Stroscio J.A. et al.* Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, 1668.
2. *Hame R.J. et al.* Surf. Sci., 1987, **181**, 346.
3. *Маслова Н.С., Панов В.И.* УФН, 1989, **157**, 185.
4. *Глазман Л.И., Матвеев К.А.* Письма в ЖЭТФ, 1988, **48**, 403.

5. *Глазман Л.И., Райх М.Э.* Письма в ЖЭТФ, 1988, **47**, 378.
6. *Koch R.H., Hamers R.J.* Surf. Sci., 1987, **181**, 333.
7. *Каган Ю., Максимов Л.А.* ЖЭТФ, 1983, **84**, 792.

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
9 апреля 1990 г.