

# АМПЛИТУДА АТОМНОЙ ГОФРИРОВКИ ПОВЕРХНОСТИ СКОЛА ВИСМУТА, ИЗМЕРЕННАЯ СКАНИРУЮЩИМ ТУННЕЛЬНЫМ МИКРОСКОПОМ

*А.М.Трояновский\*, В.С.Эдельман*

*Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН  
117334 Москва, Россия*

*\*Институт физики высоких давлений РАН  
142092 Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 12 июля 1994 г.

Методом сканирующей туннельной микроскопии измерены зависимости амплитуды  $A$  атомной гофрировки и изменения  $\delta Z$  зазора между образцом и сканирующим острием от напряжения на туннельном промежутке при фиксированном токе, то есть от сопротивления  $R_T$  туннельного промежутка. Установлено, что  $A$  несколько увеличивается от значения  $0,5 \pm 0,1$  до  $0,7 \pm 0,1 \text{ \AA}$  при увеличении  $R_T$  от 40 до  $\sim 200 \text{ МОм}$ , а затем уменьшается до  $\sim 0,5 \text{ \AA}$  при  $R_T \approx 1 \text{ ГОм}$ , если во время измерений не происходит изменения формы сканирующего острия, критерием чего служит совпадение зависимости  $\delta Z(R_T)$  с ожидаемой для вакуумного туннелирования при работе выхода 4,4эВ.

О наблюдении методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) поверхности металлов с атомным разрешением сообщалось в ряде работ (см., например, [1-3] и обзоры [4,5]). Однако до сих пор нет полной картины механизма формирования изображения, в первую очередь, не ясно, почему наблюдаемая амплитуда  $A$  атомной гофрировки зачастую на один-два порядка превышает ожидаемую согласно теории [5]. В работах [6,7] была вычислена перенормировка амплитуды вследствие взаимодействия атомов поверхности с атомами на конце сканирующего острия, но эти результаты довольно трудно сравнивать с экспериментом. Дело в том, что в этих работах вычислялась зависимость электронной плотности в функции расстояния образец - острие, которое непосредственно в эксперименте не измеряется и потому плохо известно. В [3] было отмечено, что большую амплитуду атомной гофрировки поверхности [001] свинца трудно объяснить в рамках подходов [6,7].

На наш взгляд, существенная причина, лежащая в основе неудовлетворительного состояния дел в рассматриваемой области, - это неполнота экспериментального материала. В известных нам работах не проводилось систематического исследования зависимости параметров СТМ изображения от такого фактора, как сопротивление  $R_T$  туннельного промежутка с одновременным измерением эффективной работы выхода  $W$ , определяемой по изменению расстояния  $\delta Z$  образец-острие при изменении  $R_T$ . В [1] при исследовании алюминия было установлено, что  $A(R_T)$  изменяется примерно как  $1/\sqrt{R_T}$  и падает от 0,8 до 0,15  $\text{ \AA}$  при увеличении  $R_T$  от 1,25 до 20  $\text{ МОм}$ . Подобная корреляция замечена для свинца в [3]. Однако и в этих работах, и во многих других отмечалось, что всегда присутствует неизвестный фактор - структура острия СТМ, которая может скачком необратимо изменяться в ходе опытов. Более того, как будет показано ниже, возможны и обратимые изменения кончика острия при изменении расстояния острие - образец, что, вообще говоря, требует осторожности при анализе результатов.

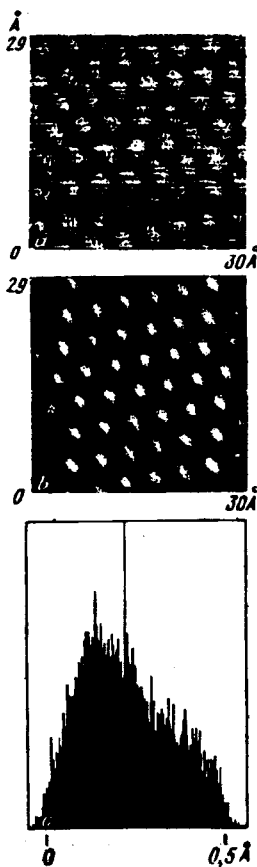


Рис.1

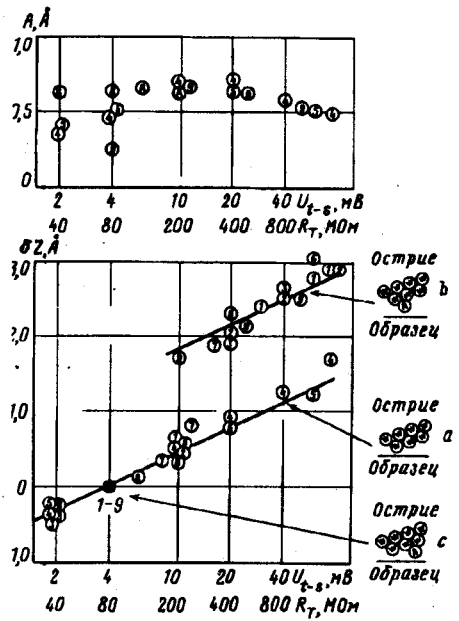


Рис.2

Рис. 1. *a* – Исходное СТМ изображение поверхности скола  $W$  и *b* – после фурье-фильтрации. Перепад уровней от темного к светлому  $0,5 \text{ \AA}$ . *c* – Гистограмма распределения уровней для изображения *b*. Туннельный ток  $0,05 \text{ нА}$ , напряжение  $U_{t-s}$ , образец – острие СТМ  $80 \text{ мВ}$ , число точек  $128 \times 128$ . Изображение *a* – одно из шести изображений, полученных при построчном сканировании с различными  $U_{t-s}$ ; им соответствуют точки 4 на рис. 2. Полное время сканирования -  $95 \text{ с}$

Рис. 2. Зависимости амплитуды атомной гофрировки  $A$  (вверху) и смещения  $\delta Z$  острия СТМ (внизу) от напряжения  $U_{t-s}$  (или сопротивления  $R$  туннельного промежутка). Числа соответствуют номерам последовательных циклов по  $U_{t-s}$ , проделанных в течение  $1 \text{ ч}$ . Смещение  $\delta Z$  отсчитывалось от значения при  $U_{t-s} = 4 \text{ мВ}$ . Справа показана гипотетическая форма кончика острия из вольфрама (*a*) и ее изменение при захвате на него адатома, который может находиться в двух близких по энергии состояниях (*b* и *c*)

Исходя из изложенного, мы провели СТМ исследование поверхности скола  $W$  по базисной плоскости при различных значениях  $R_T$ . Методика приготовления атомно чистой поверхности сколом кристалла  $W$  и конструкция СТМ описаны в [8,9]. Здесь мы акцентируем внимание только на ходе эксперимента. Для получения набора СТМ изображений при разных  $R_T$  мы использовали прием, аналогичный предложенному в [10]: при сканировании кадра в режиме постоянного туннельного тока по завершению строки (координата  $X$ ) изменялось напряжение  $U_{t-s}$ , между острием и образцом, и эта же строка сканировалась еще раз. В отличие от [10], можно было задавать не два, а

несколько значений напряжения (реально до восьми), и только после сканирования одной и той же строки при всех этих напряжениях происходил возврат к исходному значению  $U_{t-}$ , и переход на новую строку (шаг по  $Y$ ). Обычно исходное значение напряжения мы повторяли в середине цикла, что позволяло иметь два изображения при одном и том же значении  $U_{t-}$ , и сравнивая их можно было судить о воспроизводимости картины и оценить дрейф СТМ. Отметим, что проводимые в ходе описываемых экспериментов многократные измерения вольт-амперных характеристик туннельного промежутка показали, что в пределах  $U_{t-}$ ,  $\approx \pm 0,1$  В они линейны; заметная нелинейность проявляется при напряжениях более 0,2 В. Поэтому в этом диапазоне напряжений изменение  $U_{t-}$ , при неизменном токе эквивалентно изменению  $R_T$ .

По окончании сканирования кадра в памяти компьютера оказывались записанными несколько изображений, подобных представленному на рис.1а. Вычитание одного файла из другого позволяло установить усредненное по кадру смещение острия  $\delta Z$  по нормали к поверхности при изменении  $U_{t-}$ . Значения  $\delta Z[\lg(U_{t-})]$  для серии измерений, выполненных в течение одного часа, представлены на рис.2, внизу. Заметим, что описанная процедура при совпадающих значениях напряжения давала  $\delta Z < 0,05 \text{ \AA}$ .

Как видно из рис.2, есть два типа зависимости  $\delta Z[\lg(U_{t-})]$ . Для части циклов по напряжению (на рис.2 это точки, обозначенные 4, 5 и 8) все точки с точностью до погрешности измерений ложатся на прямую, наклон которой соответствует зависимости

$$\ln[R_T(Z)] = \text{const} + (2Z/\hbar)(2mW)^{1/2}, \quad (1)$$

где  $m$  – масса электрона, а значение работы выхода  $W = 4,4$  эВ – справочное значение работы выхода для Вi, практически совпадающее с  $W = 4,5$  эВ для вольфрама, из которого изготовлено острие. Для остальных циклов характер зависимости иной: при увеличении  $U_{t-}$ , в области 12–15 мВ положение острия быстро изменяется, но при дальнейшем изменении напряжения все точки ложатся на новую прямую с тем же наклоном, что и исходная. Особый случай наблюдался в переходной области напряжений (точки 7 на рис.2). На СТМ изображениях при напряжениях вблизи 12–15 мВ резко возрастал уровень шума, который приобретал телеграфный вид с длительностью нахождения в состояниях, соответствующих нижней или верхней прямой, в течение характерного времени порядка десятков миллисекунд.

Качественно наблюдающуюся зависимость можно объяснить, если предположить, что исходно кончик острия имел форму, показанную условно на рис.2а. В результате захвата на кончик лишнего атома (висмута, вольфрама или остаточного газа), он может приобрести форму вида 2b или с. Однако если энергия связи для обоих состояний близка, "лишний" атом из-за тепловых колебаний может переключаться между этими состояниями. При этом на больших расстояниях это приводит к увеличению шума (что наблюдается при  $U_{t-} > 0,1$  В), затем по мере уменьшения  $Z$  из-за ван-дер-ваальсова притяжения положение рис.2b становится энергетически более выгодным. Однако когда начинает превалировать отталкивание, атом перескакивает в позицию рис.2с. При этом для достижения прежнего значения туннельного тока обратная связь СТМ скачком изменяет положение острия.

Конечно, это не единственная возможная модель. Однако представляется несомненным, что сложная зависимость  $\delta Z(U_{t-s})$  указывает на изменение структуры острия. И наоборот, следование  $\delta Z(U_{t-s})$  зависимости (1) гарантирует, во-первых, что форма острия остается неизменной и, во-вторых, что реализуется режим вакуумного туннелирования. Поэтому анализировать зависимость амплитуды атомной гофрировки  $A$  от сопротивления туннельного промежутка корректно только при выполнении последнего условия.

Для того чтобы исключить влияние шума и дрейфа на результаты измерения  $A(U_{t-s})$ , производилось двумерное фурье-преобразование данных, содержащихся в каждом файле, и в спектре оставлялись только компоненты в окрестностях трех наиболее интенсивных компонент, отвечающих гексагональной решетке базисной плоскости  $V_i$ . Затем проводилось обратное фурье-преобразование (рис.1b) и вычислялась гистограмма уровней (рис.1c). За амплитуду гофрировки принималась ширина гистограммы на уровне 10%, то есть отбрасывались выбросы в большую и меньшую стороны. Корректность процедуры подтверждается совпадением результатов для изображений, зарегистрированных в одинаковых условиях.

Зависимость  $A(U_{t-s})$  приведена на рис. 2, вверху. Она оказалась немонотонной - вблизи тех же значений  $U_{t-s}$ , при которых наблюдалось "переключение" формы острия, наблюдается максимум  $A$ . Если предложенная модель "переключения" верна, то этот максимум свидетельствует, по-видимому, о влиянии силового взаимодействия на атомную гофрировку, так как, согласно [7], перенормировка из-за силового взаимодействия меняет знак при смене знака силы.

Как видно из рис.2, при увеличении расстояния острие-образец амплитуда гофрировки падает всего в полтора раза при возрастании  $R_T$  более чем на порядок. Поскольку мерой перекрытия волновых функций атомов поверхности и острия служит значение  $R_T$ , то нам представляется, что слабая зависимость  $A(R_T)$  свидетельствует о том, что в исследованном диапазоне значений  $R_T$  нет перенормировки амплитуды, обусловленной этим перекрытием. Отметим, что "переключение" острия может приводить к резкому изменению видимой гофрировки. Так, для системы точек 9 при увеличении напряжения от 4 до 10 мВ одновременно с переходом на верхнюю ветвь зависимости  $\delta Z(U_{t-s})$  амплитуда гофрировки выросла втрое.

Таким образом, нами установлено, что при неизменной форме острия атомная гофрировка поверхности  $V_i$  слабо зависит от сопротивления туннельного промежутка в измеренном диапазоне. Поэтому полученные нами значения можно будет сопоставлять с расчетами для свободной поверхности, если такие будут произведены.

А.Ф. Андрееву авторы благодарны за интерес к работе, И.Н. Хлюстикову - за обсуждение результатов.

Работа получила частичную поддержку по гранту М64000, предоставленному International Science Foundation и по гранту Министерства науки Российской Федерации.

- 
1. J.Winterlin, J.Wiechers, H.Brune et al., Phys. Rev. Lett. **62**, 59, (1989).
  2. L.Kuipers and J.W.M.Frenken, Phys. Rev. Lett. **70**, 3907 (1993).
  3. А.М.Трояновский, В.С.Эдельман, Письма в ЖЭТФ **57**, 429 (1993).

4. В.С.Эдельман, ПТЭ N1, 25 (1989).
5. P.K.Hansma and J.Tersoff, J. Appl. Phys. 61, R1 (1987).
6. C.J.Chen, Phys. Rev. Lett. 65, 448 (1990).
7. S.Ciraci, A.Baratoff, and I.P.Batra, Phys. Rev. B42, 7618 (1990).
8. V.S.Edelman, A.M.Trojanovskii, M.S.Khaikin et al., J. Vac. Sci. Technol. B 9(2), 618 (1991).
9. А.М.Трояновский, В.С.Эдельман, Письма в ЖЭТФ 60, 100 (1994).
10. R.M.Feenstra, J.A.Stroschio, J.Tersoff, and A.P. Fein, Phys. Rev. Lett. 58, 1192 (1987).