7- 6-825 Orthura: 20 = 25 = 1 A-1 бумовлена висотого примов е то висота бартия висотов висотого пред висотов наблива Ex VIII TIME Менер вустания мін влегороди в повержнего рискимить ро 1А, то струм запинитьми в Ерда Ургания стури рухе симпо замежити вір Due Tapique exeapair oques B jacet mocri Esp roso eca sige enepris un jaciena de nepergérus po por 2= 1 /2n y dz Petricer greerobarine 72 ms - гас пристование через Подгор Mu Sast 1= 4eV; 7-4.10-16

## 2. Прозорість прямокутного тунельного бар'єру в одновимірному наближенні

В квантовой механике под туннельным эффектом подразумевается прохождение частиц сквозь потенциальный барьер, когда полная энергия частиц меньше высоты этого барьера.

Представление о туннелировании частиц возникло почти одновременно с квантовой механикой. В классической механике для описания в какой-то момент времени системы материальных точек достаточно задать значение координат и компонент импульса каждой из материальных точек. В квантовой механике даже для одной частицы одновременное определение координат и соответствующей ей компоненты импульса принципиально невозможно из-за соотношения Гейзенберга. Наиболее полное описание системы в квантовой механике дается комплексной функцией состояния системы (волновой функцией). Функция состояния  $\Psi$ , зависящая от времени и координат всех частиц системы, является решением волнового уравнения Шредингера. Физический смысл функции состояния системы определяется не

самой  $\Psi$  , а  $\left|\Psi\right|^2$  Вероятность нахождения частиц в элементарном объеме  $\mathit{dxdydz}$  есть не что иное, как  $\left|\Psi\right|^2\mathit{dxdydz}$  .

При рассмотрении падения частиц на потенциальный барьер конечной ширины квантовая механика предсказывает неизвестный в классической физике эффект – прохождение частиц сквозь потенциальный барьер, даже если полная энергия частицы меньше высоты этого барьера.

Вычислим прозрачность потенциального барьера прямоугольной формы. Рассмотрим падение пучка электронов на потенциальный барьер прямоугольной формы, при котором потенциальная энергия частиц

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{при } z < 0; \\ U_0, & \text{при } 0 \le z \le L; \\ 0, & \text{при } z > L, \end{cases}$$
(1)

а полная энергия E меньше чем  $U_0$  (рис. 1).

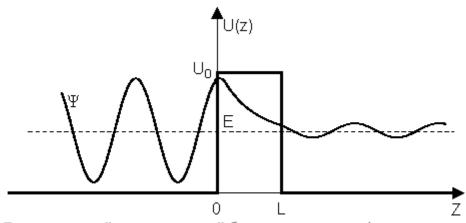


Рис. 1. Прямоугольный потенциальный барьер и волновая функция частицы  $\Psi$  . Стационарные уравнения Шредингера имеют вид:

$$\begin{cases} \ddot{\Psi} + k_1^2 \Psi = 0, & \text{при } z < 0; \\ \ddot{\Psi} - k_2^2 \Psi = 0, & \text{при } z \in [0, L]; \\ \ddot{\Psi} + k_1^2 \Psi = 0, & \text{при } z > L, \end{cases}$$
(2)

где  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ,  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$  — волновые вектора,  $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \, \text{Д} \, \text{ж} \cdot \text{с}$  — постоянная Планка. Решение волнового уравнения при z < 0 ищем в виде суммы падающей и отражённой волны  $\Psi = \exp(ik_1z) + a \exp(-ik_1z)$ , а решение при z > L — в виде прошедшей волны  $\Psi = b \exp(ik_1z)$ . Решение в области потенциального барьера 0 < z < L есть  $\Psi = c \exp(k_2z) + d \exp(-k_2z)$ . Постоянные коэффициенты a, b, c, d определяются из условия непрерывности волновой функции  $\Psi$  и  $\Psi$  в точках z = 0 и z = L.

В качестве коэффициента прозрачности барьера D естественно взять отношение плотности потока вероятности прошедших частиц к плотности потока вероятности частиц, падающих на барьер. В рассматриваемом случае, это отношение будет просто равно квадрату модуля волновой функции, оказавшейся за барьером, так как амплитуда падающей волны принята за единицу, а волновые вектора падающей и прошедшей волны совпадают

$$D = bb^* = \left( \operatorname{ch}^2(k_2 L) + \frac{1}{4} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \operatorname{sh}^2(k_2 L) \right)^{-1}$$
(3)

если  $k_2L>>1$  , то как  $\cosh\left(k_2L\right)$  так и  $\sinh\left(k_2L\right)$  можно приблизительно заменить на  $\exp\left(k_2L\right)/2$  и тогда выражение (3) примет вид

$$D(E) = D_0 \exp\left\{-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\right\}$$
(4)

$$D_0 = 4 \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \right]^{-1}$$

где

Таким образом, аналитическое вычисление коэффициента прохождения через потенциальный барьер прямоугольной формы является достаточно простой задачей. Однако, во многих квантово-механических задачах, необходимо вычислить коэффициент прохождения через барьер более сложной формы. В этом случае, общего аналитического решения вычисления коэффициента D не существует. Тем не менее, если параметры задачи удовлетворяют условиям квазиклассичности, то коэффициент прохождения через барьер может быть вычислен в общем виде.

## 3. Фактори, що впливають на тунельний струм

В основі роботи скануючого тунельного мікроскопу (СТМ) лежить процес тунелювання електронів крізь потенціальний бар'єр, утворений між двома електродами. Одним із електродів є досліджуваний зразок, іншим — металеве вістря СТМ. Внаслідок переходу зарядів з вістря на зразок або навпаки між електродами протікає електричний струм, амплітуда якого несе інформацію про різноманітні властивості поверхні зразка.

Вираз для тунельного струму, що використовується в СТМ:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_{-eV}^{0} \rho_{l}\left(E\right) \left|M_{T}\right|^{2} \rho_{r}\left(E + eV\right) dE$$

Тут  $\rho_l$  – густина електронних станів лівого електрода (вістря),  $M_T$  – матричний елемент тунелювання між незбуреними станами зонду та поверхні,  $\rho_r$  – густина електронних станів правого електрода (поверхні),  $\rho_l$  – густина електронних станів лівого електрода (вістря), V – зміщення.

Фактори, що впливають на тунельний струм.

- V– зміщення (різниця потенціалів, яку потрібно прикласти до тунельного контакту, щоб між зондом та зразком з'вився тунельний струм – рис. 41)

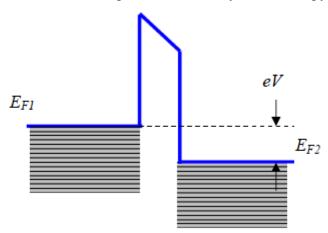


Рис. 41. Энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов.

- $M_t$  матричний елемент (в інтегралі, що визначає тунельний струм, матричний елемент також включає прозорість бар'єру)
- Густини електронних станів вістря та поверхні  $(
  ho_r, \; 
  ho_l)$  .

## 4. Основні режими роботи скануючого тунельного мікроскопу

В основі роботи скануючого тунельного мікроскопу (СТМ) лежить процес тунелювання електронів крізь потенціальний бар'єр, утворений між двома електродами. Одним із електродів є досліджуваний зразок, іншим — металеве вістря СТМ. Внаслідок переходу зарядів з вістря на зразок або навпаки між електродами протікає електричний струм, амплітуда якого несе інформацію про різноманітні властивості поверхні зразка.

#### КОРОТКОЕ ОБЪЯСНЕНИЕ:

СТМ может работать в двух следующих режимах, определяемых характером движения зонда над поверхностью: в режиме постоянной высоты или в режиме постоянного туннельного тока (рис. 2. 15). В режиме постоянной высоты расстояние от зонда до поверхности все время меняется. Цепь обратной связи используется для установки первоначальной высоты над поверхностью, а затем отключается. Изменения зазора зонд-поверхность отражаются в изменениях измеряемого туннельного тока в процессе сканирования. В связи с этим более удобен режим постоянного тока, когда цепь обратной связи поддерживает постоянное расстояние между зондом и поверхностью, а изучаемым сигналом является вертикальное смещение зонда. Такой режим работы поддерживает ширину туннельного барьера при движении вдоль поверхности на одном и том же значении.

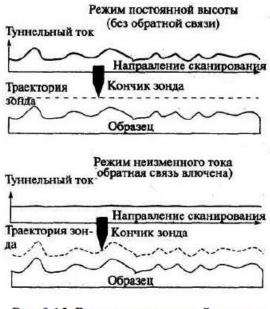


Рис. 2.15. Режимы постоянной высоты (вверху) и постоянного тока (внизу) сканирующего туннельного микроскопа [8]

## БОЛЕЕ ДЕТАЛЬНОЕ:

У СТМ тунельний струм вимірюється в електричному колі, що складається з вістря, зразка, тунельного проміжку між ними, джерела тунельної напруги та вимірювальної системи (див. рис. 2.2.1). Остання передає виміряну величину струму у систему

зворотного зв'язку, де відбувається порівняння виміряної величини струму з певним, наперед заданим, значенням тунельного струму.

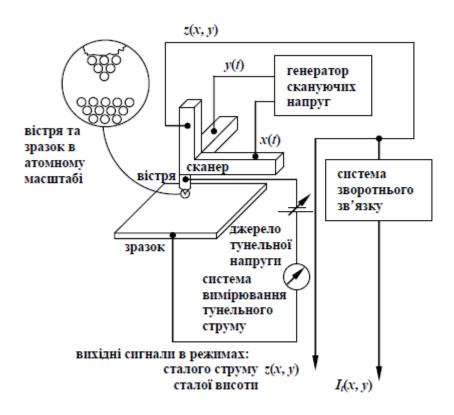


Рис. 2.2.1. Схематичне зображення основних складових частин CTM.

Найчастіше сканер виготовляється у вигляді п'єзокристалічної збірки або монокристалу і забезпечує переміщення вістря у трьох взаємно ортогональних напрямках: x, y, z. Це відбувається за рахунок п'єзоефекту при прикладанні електричних напруг до відповідних провідних обкладинок, нанесених на п'єзокристал. Нехай x та y є координатами у площині зразка (латеральними координатами), а z є координатою перпендикулярною до цієї площини. Зміна координати  $z = z_{\theta}$  вістря фактично означає зміну товщини тунельного бар'єра l.

Напруга (напруги у випадку всіх трьох координат) на п'єзоелементі, що відповідає за переміщення вздовж осі z, визначається системою зворотного зв'язку за наступним принципом. Якщо фактичний виміряний тунельний струм виявляється меншим за  $I_0$ , п'єзоелемент наближає вістря СТМ до зразка, якщо більшим — навпаки, віддаляє. Завдяки надзвичайно сильній залежності тунельного струму від ширини бар'єра l=L, такий негативний зворотній зв'язок призводить до того, що відстань L між поверхнею зразка та вершиною вістря СТМ підтримується сталою. Такий режим роботи СТМ називається *режимом сталого струму* і найчастіше використовується на практиці (рис. 43(a)).

При исследовании атомарно гладких поверхностей часто более эффективным оказывается получение СТМ изображения поверхности по методу **постоянной высоты** Z = const. В этом случае зонд перемещается над поверхностью на расстоянии нескольких ангстрем, при этом изменения туннельного тока регистрируются в качестве СТМ изображения поверхности (рис. 43 (б)). Сканирование производится либо при

отключенной ОС, либо со скоростями, превышающими скорость реакции ОС, так что ОС отрабатывает только плавные изменения рельефа поверхности. В данном способе реализуются очень высокие скорости сканирования и высокая частота получения СТМ изображений, что позволяет вести наблюдение за изменениями, происходящими на поверхности, практически в реальном времени.

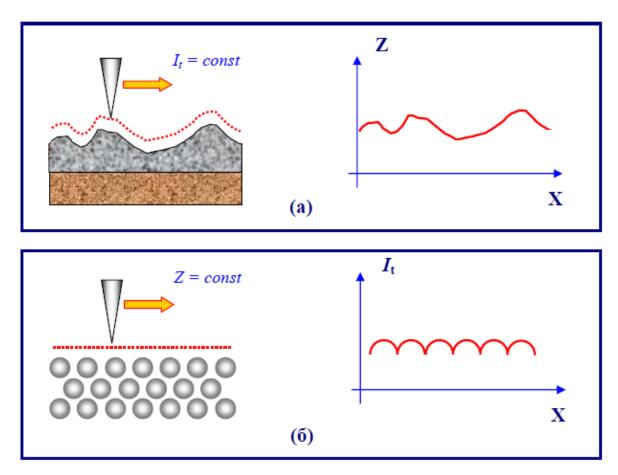


Рис. 43. Формирование СТМ изображений поверхности по методу постоянного туннельного тока (а) и постоянного среднего расстояния (б)

# 5. Принципи роботи та варіанти конструкцій сканерів скануючого тунельного мікроскопу

В основі роботи скануючого тунельного мікроскопу (СТМ) лежить процес тунелювання електронів крізь потенціальний бар'єр, утворений між двома електродами. Одним із електродів є досліджуваний зразок, іншим — металеве вістря СТМ. Внаслідок переходу зарядів з вістря на зразок або навпаки між електродами протікає електричний струм, амплітуда якого несе інформацію про різноманітні властивості поверхні зразка.

У СТМ тунельний струм вимірюється в електричному колі, що складається з вістря, зразка, тунельного проміжку між ними, джерела тунельної напруги та вимірювальної системи (див. рис. 2.2.1). Остання передає виміряну величину струму у систему зворотного зв'язку, де відбувається порівняння виміряної величини струму з певним, наперед заданим, значенням тунельного струму.

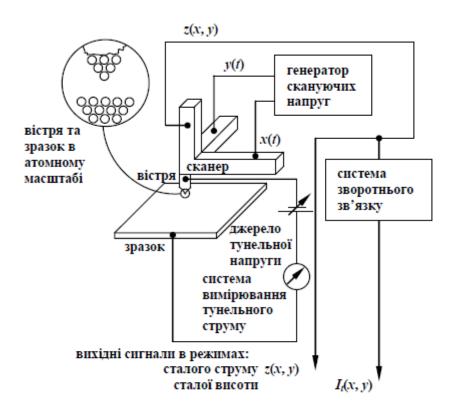


Рис. 2.2.1. Схематичне зображення основних складових частин CTM.

## Сканеры СТМ

Для работы зондовых микроскопов необходимо контролировать рабочее расстояние зонд-образец и осуществлять перемещения зонда в плоскости образца с высокой точностью (на уровне долей ангстрема). Эта задача решается с помощью специальных манипуляторов - сканирующих элементов (сканеров). Сканирующие элементы зондовых микроскопов изготавливаются из пьезоэлектриков — материалов,

обладающих пьезоэлектрическими свойствами. Пьезоэлектрики изменяют свои размеры во внешнем электрическом поле.

В сканирующей зондовой микроскопии широкое распространение получили трубчатые пьзоэлементы (рис. 3). Они позволяют получать достаточно большие перемещения объектов при относительно небольших управляющих напряжениях. Трубчатые пьезоэлементы представляют собой полые тонкостенные цилиндры, изготовленные из пьезокерамических материалов.

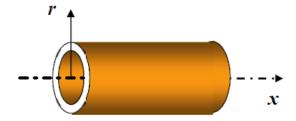


Рис. 3. Трубчатый пьезоэлемент

Под действием разности потенциалов между внутренним и внешним электродами трубка изменяет свои продольные размеры. В этом случае продольная деформация под действием радиального электрического поля может быть записана в виде:

$$u_{xx}=rac{\Delta x}{l_{0}}=d_{\perp}E_{r},$$
 где  $l_{0}$  - длина трубки в недеформированном состоянии.

Абсолютное удлинение пьезотрубки равно

$$\Delta x = d_{\perp} \frac{l_0}{h} V \,,$$

где h — толщина стенки пьезотрубки, V - разность потенциалов между внутренним и внешним электродами. Таким образом, при одном и том же напряжении V удлинение трубки будет тем больше, чем больше ее длина и чем меньше толщина ее стенки.

Соединение трех трубок в один узел (рис. 4) позволяет организовать прецизионные перемещения зонда микроскопа в трех взаимно перпендикулярных направлениях. Такой сканирующий элемент называется **триподом.** 

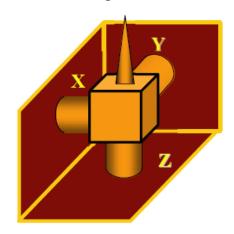


Рис. 4. Сканирующий элемент в виде трипода, собранный на трубчатых пьезоэлементах

Недостатками такого сканера являются сложность изготовления и сильная асимметрия конструкции. На сегодняшний день в сканирующей зондовой микроскопии наиболее широко используются сканеры, изготовленные на основе одного трубчатого элемента. Общий вид **трубчатого сканера** и схема расположения электродов представлены на рис. 5. Материал трубки имеет радиальное направление вектора поляризации.

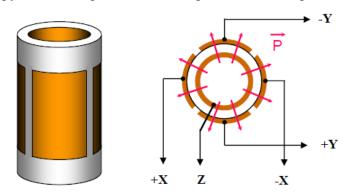


Рис. 5. Трубчатый пьезосканер

Внутренний электрод обычно сплошной. Внешний электрод сканера разделен по образующим цилиндра на четыре секции. При подаче противофазных напряжений на противоположные секции внешнего электрода (относительно внутреннего) происходит сокращение участка трубки в том месте, где направление поля совпадает с направлением поляризации, и удлинение там, где они направлены в противоположные стороны. Это приводит к изгибу трубки в соответствующем направлении. Таким образом осуществляется сканирование в плоскости X,Y. Изменение потенциала внутреннего электрода относительно всех внешних секций приводит к удлинению или сокращению трубки по оси Z. Таким образом, можно реализовать трехкоординатный сканер на базе одной пьезотрубки.

Широкое распространение получили также сканеры на основе **биморфных пьзоэлементов**. Биморф представляет собой две пластины пьезоэлектрика, склеенные между собой таким образом, что вектора поляризации в каждой из них направлены в противоположные стороны (рис. 6). Если подать напряжение на электроды биморфа, как показано на рис. 6, то одна из пластин будет расширяться, а другая сжиматься, что приведет к изгибу всего элемента. В реальных конструкциях биморфных элементов создается разность потенциалов между внутренним общим и внешними электродами так, чтобы в одном элементе поле совпадало с направлением вектора поляризации, а в другом было направлено противоположно.

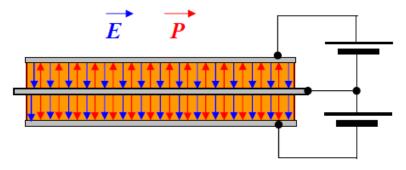


Рис. б. Устройство биморфного пьезоэлемента

Изгиб биморфа под действием электрических полей положен в основу работы биморфных пьезосканеров. Объединяя три биморфных элемента в одной конструкции, можно реализовать трипод на биморфных элементах (рис. 7).

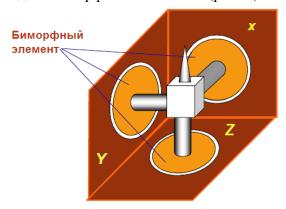


Рис. 7. Трехкоординатный сканер на трех биморфных элементах

Если внешние электроды биморфного элемента разделить на четыре сектора, то можно организовать движение зонда по оси Z и в плоскости X,Y на одном биморфном элементе (рис. 8).

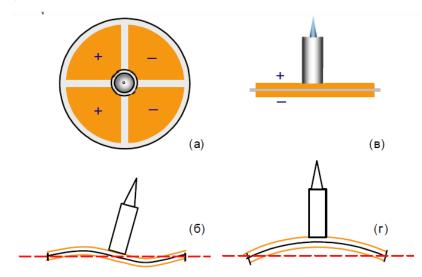


Рис. 8. Схематическое изображение работы биморфного пьезосканера

Действительно, подавая противофазные напряжения на противоположные пары секций внешних электродов, можно изгибать биморф так, что зонд будет двигаться в плоскости X,Y (рис. 8 (а, б)). А изменяя потенциал внутреннего электрода относительно всех секций внешних электродов, можно прогибать биморф, перемещая зонд в направлении Z (рис. 8 (в, г)).

#### Недостатки сканеров:

**Нелинейность керамики** (На рис. 9 в качестве примера приведена зависимость величины смещения пьезотрубки в направлении Z от величины приложенного поля. В общем случае (особенно при больших управляющих полях) пьезокерамики характеризуются нелинейной зависимостью деформации от поля (или от управляющего напряжения).

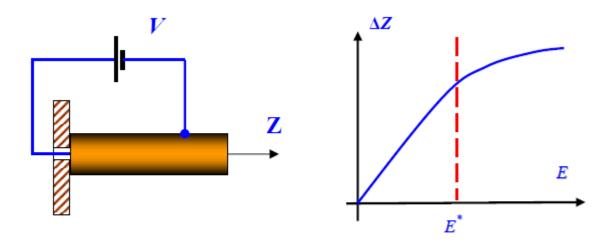


Рис. 9. Схематичное изображение зависимости смещения керамики от величины приложенного электрического поля

**Крип керамики** - запаздывание реакции на изменение величины управляющего электрического поля. На рис. 10 схематично показаны временные диаграммы изменения управляющих полей и соответствующих смещений сканера по оси Z и в плоскости X,Y.

Крип приводит к тому, что в СЗМ изображениях наблюдаются геометрические искажения, связанные с этим эффектом. Особенно сильно крип сказывается при выводе сканера в заданную точку для проведения локальных измерений и на начальных этапах процесса сканирования. Для уменьшения влияния крипа керамики применяются временные задержки в указанных процессах, позволяющие частично скомпенсировать запаздывание сканера.

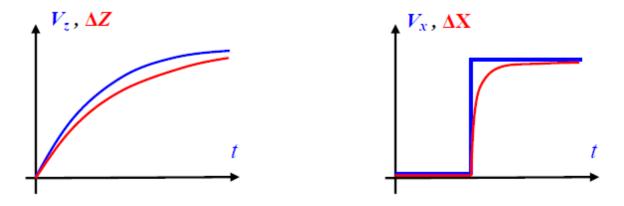


Рис. 10. Схематические временные диаграммы изменения управляющего поля на Z-электроде в цепи обратной связи и на X-электроде в процессе сканирования (показаны синим цветом). Красным цветом схематично показаны зависимости, соответствующие реакции сканера на изменение управляющих напряжений

**Гистерезис пьзокерамики** - неоднозначность зависимости удлинения от направления изменения электрического поля. Это приводит к тому, что при одних и тех же управляющих напряжениях пьезокерамика оказывается в различных точках траектории в зависимости от направления движения (рис. 11). Для исключения искажений СЗМ изображений, обусловленных гистерезисом пьезокерамики, регистрацию информации

при сканировании образцов производят только на одной из ветвей зависимости  $\Delta Z = f$  (V ).

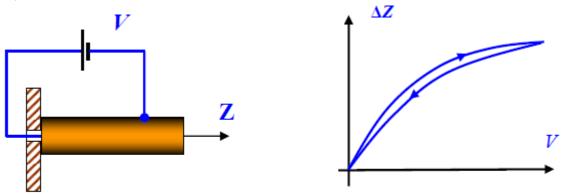


Рис. 11. Зависимость величины смещения пьезотрубки от величины и направления приложенного напряжения

# 6. Одержання інформації про вільні та зайняті стани у тунельній спектроскопії

В основі роботи скануючого тунельного мікроскопу (СТМ) лежить процес тунелювання електронів крізь потенціальний бар'єр, утворений між двома електродами. Одним із електродів є досліджуваний зразок, іншим – металеве вістря СТМ. Внаслідок переходу зарядів з вістря на зразок або навпаки між електродами протікає електричний струм, амплітуда якого несе інформацію про різноманітні властивості поверхні зразка.

У СТМ тунельний струм вимірюється в електричному колі, що складається з вістря, зразка, тунельного проміжку між ними, джерела тунельної напруги та вимірювальної системи (див. рис. 2.2.1). Остання передає виміряну величину струму у систему зворотного зв'язку, де відбувається порівняння виміряної величини струму з певним, наперед заданим, значенням тунельного струму.

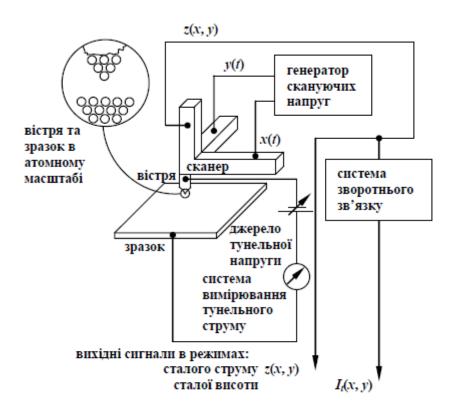


Рис. 2.2.1. Схематичне зображення основних складових частин CTM.

СТМ дает карту распределения плотности электронных состояний на поверхности образца. Изменяя знак электрического смещения, прикладываемого к зонду, можно визуализировать как занятые, так и свободные состояния на исследуемой поверхности

## Плотность электронных состояний материалов

Сканирующий туннельный микроскоп позволяет получать вольт-амперные характеристики (ВАХ) туннельного контакта зонд-поверхность в любой точке поверхности и исследовать локальные электрические свойства образца.

Характер туннельной ВАХ существенно зависит от энергетического спектра электронов в образце. На рис. 53 приведена энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов.

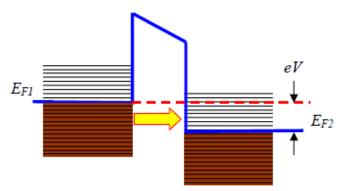


Рис. 53. Энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов

В туннельном токе участвуют, в основном, электроны с энергиями вблизи уровня Ферми. При прямом смещении (рис. 53) электроны туннелируют из заполненных состояний зоны проводимости зонда на свободные состояния зоны проводимости образца. При обратном смещении электроны туннелируют из образца в зонд. Величина туннельного тока определяется напряжением смещения, коэффициентом прозрачности барьера и плотностью состояний вблизи уровня Ферми.

В простейшем случае прямоугольного барьера при низких температурах и в предположении, что плотность состояний вблизи уровня Ферми в металле зонда практически постоянна, выражение для тока можно записать в виде

$$I(V) = B \int_{0}^{eV} \rho_{S}(E) dE$$

В этом случае зависимость туннельного тока от напряжения определяется, в основном, плотностью состояний в энергетическом спектре образца.

На ВАХ можно увидеть, что положительные значения говорят о свободных состояниях в материале, а отрицательные – о свободных.

На практике величину  $\rho_S(E)$  оценивают по величине производной туннельного тока по напряжению:

$$\rho_s(eV) \sim \frac{\partial I}{\partial V}$$

#### ВАХ контакта металл-металл

Для малых напряжений смещения зависимость туннельного тока от напряжения линейная, и проводимость туннельного контакта определяется, в основном, параметрами барьера. Типичная ВАХ, наблюдаемая для туннельного контакта металлметалл, изображена схематически на рис. 54. Как видно из рисунка, вольт-амперная характеристика туннельного контакта металл-металл нелинейна и, как правило, практически симметрична

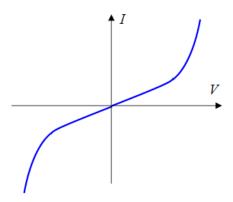


Рис. 54. Характерный вид ВАХ туннельного контакта металл-металл

## ВАХ контакта металл-полупроводник

Полупроводниковые образцы имеют более сложную структуру энергетического спектра электронов.

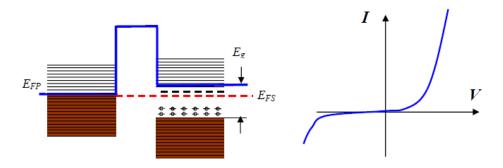


Рис. 55. Энергетическая диаграмма и характерный вид вольт-амперной характеристики туннельного контакта металл-полупроводник

Наличие запрещенной зоны и примесных уровней в спектре полупроводниковых материалов делает BAX туннельного контакта металл-полупроводник сильно нелинейной.

В данном случае, если мы возьмем производную, то в центральной части графика мы получим нулевое значение, то есть запрещенную зону (тут нулевое количество носителей заряда).

Туннельные спектры позволяют определить положения краев зоны проводимости и валентной зоны относительно уровня Ферми, а также идентифицировать спектральные пики, связанные с примесными состояниями внутри запрещенной зоны полупроводников.

## НЕОБЯЗАТЕЛЬНЫЙ МАТЕРИАЛ (в продолжение темы):

## ВАХ контакта металл-сверхпроводник

В сверхпроводящих материалах при температурах ниже критической происходит фазовый переход, сопровождающийся перестройкой энергетического спектра электронов. При низких температурах электроны образуют так называемые Куперовские пары и конденсируются на уровне, отстоящем на величину  $\Delta$  от зоны

проводимости. Энергетическая диаграмма контакта металл – сверхпроводник приведена на рис. 57.

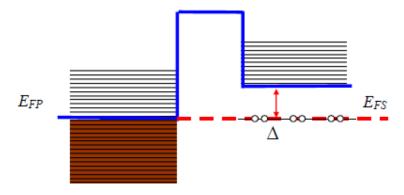


Рис. 57. Энергетическая диаграмма контакта металл – сверхпроводник

При прямом смещении туннельный ток через контакт возникает только при напряжениях  $eV > \Delta$ . Для простоты считаем барьер тонким, так что на нем не происходит падения потенциала. В этом случае электроны из зонда туннелируют на свободные состояния сверхпроводящего образца (рис. 58 (a)).

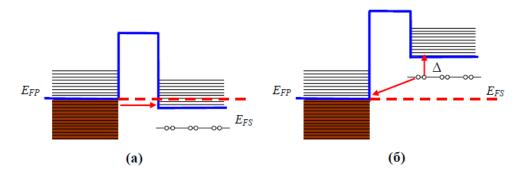


Рис. 58. Энергетическая диаграмма контакта металл – сверхпроводник при прямом и обратном смещении

При обратном смещении картина туннелирования немного сложнее. Поскольку при туннелировании энергия системы сохраняется, то процесс туннелирования в этом случае происходит следующим образом. Куперовская пара расщепляется; при этом один электрон уходит с потерей энергии на свободное состояние вблизи уровня Ферми металла, а второй, приобретая энергию  $\Delta$ , переходит на возбужденное состояние в спектре сверхпроводника. Таким образом, вольт-амперная характеристика туннельного контакта металл-сверхпроводник при температуре T=0 содержит две ветви при  $eV>\Delta$  (рис. 59 (а)). Соответствующая плотность состояний в спектре сверхпроводника приведена на рис. 59 (б).

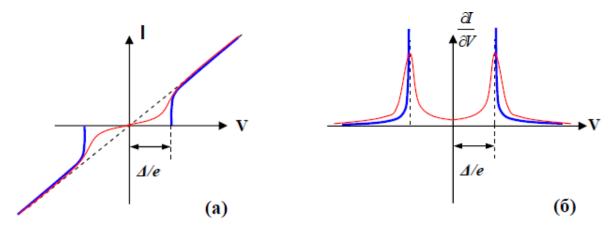


Рис. 59. Вольт-амперная характеристика контакта металл-сверхпроводнтк (а) и плотность состояний сверхпроводника (б) при T=0 (показаны синим цветом). (Красным цветом показана BAX и плотность состояний при  $T\neq 0$ )

При температурах, отличных от нуля, энергетический спектр сверхпроводника частично размывается, так что в реальных вольт-амперных характеристиках спектральные особенности сверхпроводников выражены менее четко.

Тунельні спектри відображають густину електронних станів поверхні зразка. Для напівпровідників характерним є наявність забороненої зони поблизу від рівня Фермі. Це означає, що у діапазоні енергій, який відповідає забороненій зоні, густина електронних станів близька до нуля.

Рівень Фермі у тунельній спектроскопії відповідає нульовому значенню тунельної напруги V. Зсув рівня Фермі у бік валентної зони (тобто в область додатних напруг) означає р-тип провідності, а відповідно у бік зони провідності (в область негативних напруг) — n-тип.

3 наведеного тунельного спектру (див. також рис. 4.32.1) визначаємо: ширина забороненої зони дорівнює 1,7eB, а напівпровідник має n -тип провідності.

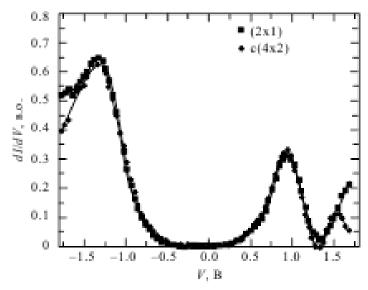


Рис. 4.31.1. Схематичне зображення тунельного спектру dI(V)/dV напівпровідникового зразка.

## 8. Непружня тунельна спектроскопія

При збільшенні абсолютної величини тунельної напруги від нуля до певного порогового значення  $\frac{\hbar \omega}{e}$ , відкривається додатковий канал тунелювання електронів між зразком та зондом. Він зумовлений коливаннями молекул на поверхні з частотою  $\omega$ . Відбувається збільшення тунельного струму у порівнянні із виключно пружною компонентою при подальшому збільшенні напруги між терміналами. Це є наслідком того, що кількість непружно тунелюючих електронів буде зростати при розширенні енергетичного інтервалу тунелювання eV, а отже і росту непружного доданку до пружної компоненти I(V).

Результатом «активізації» непружної компоненти буде наявність ледь помітного зламу на ВАХ тунельного переходу (рис. 3.2.3). Таким чином точка  $\frac{\hbar\omega}{e}$  на горизонтальній осі графіку I(V), ділить ВАХ на дві частини: з більш повільним та більш швидким зростанням струму. Отже, на графіку  $\frac{dI(V)}{dV}$  у цій точці буде спостерігатися невелика сходинка, яку досить складно ідентифікувати візуально. Для кращого представлення даних непружної тунельної спектроскопії вдаються до обчислення другої похідної від тунельного струму за напругою  $\frac{d^2I(V)}{dV^2}$ . На її графіку буде присутній пік, положення якого на осі напруг буде відповідати енергії фонону  $\hbar\omega$ , що збуджується тунелюючим електроном.

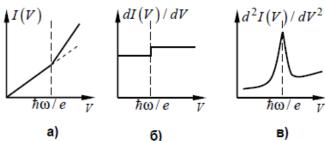


Рис. 3.2.3. Схематичне зображення непружних тунельних спектрів: a) I(V); б) dI(V)/dV; в)  $d^2I(V)/dV^2$ .

Характерною ознакою такого непружного піку буде його віддзеркалення в області тунельних напруг протилежної полярності. Це пов'язано з тим, що активізація непружного тунелювання визначається лише енергією фонона і не залежить від вигляду вольт-амперної характеристики I(V), у т.ч. від того, симетрична вона чи ні по відношенню до точки V=0. На рис. 3.2.4 показано реальні спектри непружної тунельної спектроскопії для поверхні Cu(001), вкритої атомами іншої речовини.

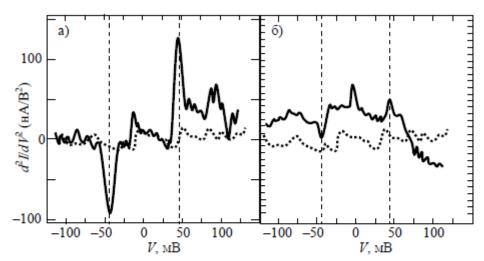


Рис. 3.2.4. Приклади графічного представлення спектрів непружної тунельної спектроскопії: штрихова лінія відповідає початковому стану поверхні зразка Cu(001), суцільна – зразку з адсорбованими чужорідними атомами або молекулами: а) органічної речовини; б) іншого металу.

Зрозуміло, що непружна тунельна спектроскопія може бути реалізована на практиці, лише за умови проведення експерименту при температурах  $T<\frac{\hbar\omega}{k_{\rm B}}$ . Адже, тільки при виконанні цієї умови активізація непружного тунелювання дійсно буде починатись при тунельній напрузі  $\frac{\hbar\omega}{e}$ . При температурах вище зазначеної відбувається розмиття різкої сходинки на розподілі Фермі–Дірака в околі  $\pm k_B T$  навколо енергії Фермі. Тоді, через наявність вільних електронних станів нижче рівня Фермі терміналу в який тунелюють електрони, активізація непружного механізму тунелювання буде відбуватися при як завгодно малих тунельних напругах. Як наслідок, буде неможливо спостерігати різкі піки на кривій  $\frac{d^2 I(V)}{dV^2}$ , що відповідають енергії фонона.