

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

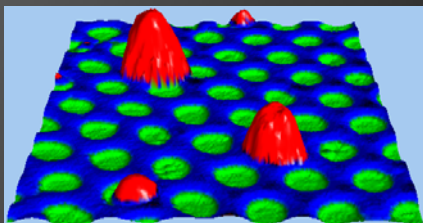
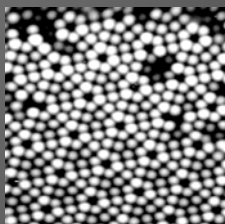
Радіофізичний факультет

А.М. ГОРЯЧКО, С.П. КУЛИК, О.В. ПРОКОПЕНКО

# ОСНОВИ СКАНУЮЧОЇ ЗОНДОВОЇ МІКРОСКОПІЇ ТА СПЕКТРОСКОПІЇ

## ЧАСТИНА 1

Навчальний посібник



Київ – 2011

**Київський національний університет імені Тараса Шевченка**

**Радіофізичний факультет**

**А.М. ГОРЯЧКО, С.П. КУЛИК, О.В. ПРОКОПЕНКО**

# **ОСНОВИ СКАНУЮЧОЇ ЗОНДОВОЇ МІКРОСКОПІЇ ТА СПЕКТРОСКОПІЇ**

## **ЧАСТИНА 1**

**Навчальний посібник**

**Київ – 2011**

УДК 535.33, 539.2  
ББК 22.344:338я73

Рецензенти:

д-р фіз.-мат. наук, проф. В. В. Ільченко  
к-т фіз.-мат. наук, проф. П. В. Мельник

*Рекомендовано до друку Вченою радою радіофізичного  
факультету Київського національного університету імені  
Тараса Шевченка (протокол № 4 від 8 листопада 2010 року)*

**Горячко А. М., Кулик С. П., Прокопенко О. В.** Основи скануючої зондової мікроскопії та спектроскопії (Частина 1): Навчальний посібник. – К.: Радіофізичний факультет Київського національного університету імені Тараса Шевченка, 2011. – 133 с.

Навчальний посібник відповідає університетській програмі курсу «Скануюча тунельна мікроскопія та спектроскопія», а також може бути корисним при вивченні курсів «Мікро- та наноелектроніка», «Фізичні основи нанотехнологій», «Методи діагностики поверхні», «Атомна фізика».

У навчальному посібнику викладено фізичні основи методів скануючої тунельної мікроскопії, атомно-силової мікроскопії та скануючої тунельної спектроскопії. Теоретичний матеріал проілюстровано результатами експериментальних досліджень та прикладами розв'язання задач. У посібнику також розглянуто питання, пов'язані з особливостями практичної роботи на сучасному експериментальному обладнанні, яке дозволяє використовувати зазначені методики досліджень.

Для студентів, що вивчають курс «Скануюча тунельна мікроскопія та спектроскопія» та інші, схожі за тематикою, курси з назвою «нанофізика та наноелектроніка», аспірантів та молодих науковців.

© Горячко А. М., Кулик С. П.,  
Прокопенко О. В., 2010 – 2011

## ЗМІСТ

Передмова .....	4
Основні позначення .....	7
<b>Розділ 1. Квантові властивості матерії .....</b>	<b>9</b>
1.1. Хвильові властивості частинок .....	10
1.2. Співвідношення невизначеностей .....	15
1.3. Хвильова функція та рівняння Шредінгера .....	18
1.4. Потенціальні ями та бар'єри. Тунельний ефект .....	21
<b>Розділ 2. Скануюча тунельна мікроскопія .....</b>	<b>31</b>
2.1. Теоретичне підґрунтя процесу одновимірного тунелювання .....	33
2.2. Основні принципи роботи СТМ .....	50
2.3. Ефекти електронних станів у скануючій тунельній мікроскопії .....	66
<b>Розділ 3. Типові задачі та запитання .....</b>	<b>84</b>
<b>Завдання для самостійної роботи .....</b>	<b>120</b>
Додаток 1. Значення деяких фундаментальних фізичних сталих .....	123
Додаток 2. Значення роботи виходу електрона для деяких металів .....	126
Додаток 3. Розв'язок системи рівнянь для задачі про проходження частинки крізь прямокутний потенціальний бар'єр .....	126
Додаток 4. Таблиця хімічних елементів Д.І. Менделєєва.....	129
<b>Список рекомендованої літератури .....</b>	<b>131</b>

*Фізик намагається зробити  
складні речі простими*

*Л. Д. Ландау*

## ПЕРЕДМОВА

Сучасна фізика – це фізика квантова. Це фізика, що вивчає об'єкти, властивості яких, закони руху та взаємоперетворень описуються мовою квантової механіки. Однак у макроскопічних системах квантові ефекти, як правило, не спостерігаються. Існує досить невелика кількість виключень з цього правила, наприклад, ефекти Джозефсона [1, 2]. В той же час у світі об'єктів атомного та субатомного масштабів квантові властивості речовини проявляються найбільш яскраво. Це, з одного боку, стимулює фізиків до вивчення цієї поки що недостатньо дослідженої області природи, а з іншого боку – вимагає від дослідників належної кваліфікації та наявності складного експериментального обладнання.

Книга, яку ви тримаєте в руках, стосується переважно тільки однієї галузі сучасної фізики – *нанофізики* – тобто фізики об'єктів нанометрового розміру ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$ ). У книзі також частково порушуються питання, важливі для створення приладів *наноелектроніки* – галузі електроніки, де вивчаються, розробляються та використовуються електронні прилади з характерними розмірами в декілька нанометрів.

Основну увагу в книзі зосереджено на вивченні експериментальних методів дослідження електронних властивостей окремих атомів та їх сукупностей на поверхнях твердих тіл, а саме – на так званій *скануючій зондовій мікроскопії та спектроскопії* таких систем.

Навчальний посібник побудовано за принципом «від простого – до складного». З початку в ньому викладається матеріал, більша частина якого знайома студентам з курсів

«Квантова механіка» та «Атомна фізика». Далі цей матеріал поступово ускладнюється і викладається на більш високому рівні, враховуючи специфіку тематики навчального посібника. Автори сподіваються, що такий підхід до викладення матеріалу дозволить студентам за необхідності самостійно опанувати навчальний матеріал, полегшити його сприйняття.

На сьогоднішній день у вітчизняній літературі обмаль навчально-методичних посібників та підручників з нанофізики та наноелектроніки. Наприклад, відомий підручник «Фізичні основи мікро- та наноелектроніки» М. Г. Находкіна, Д. І. Шекі [3] охоплює широке коло питань, пов'язаних з наноелектронікою, але практично не торкається питань експериментальної нанофізики, методик експериментальних досліджень поверхонь твердих тіл. Це створює певний «потенціальний бар'єр» на шляху обдарованої молоді, що прагне працювати в галузі нанофізики та наноелектроніки. Автори сподіваються, що даний навчальний посібник зможе хоча б частково компенсувати брак відповідної навчально-методичної літератури.

Посібник складено на основі матеріалів, що викладаються у лекційному курсі «Тунельна мікроскопія та спектроскопія» (С. П. Кулик), розглядаються на семінарських заняттях з курсу «Атомна фізика» (О. В. Прокопенко) та використовуються під час лабораторних робіт з курсів «Лабораторія з мікро- та наноелектроніки», «Прикладна фізика» (А. М. Горячко), які проводяться авторами на радіофізичному факультеті Київського національного університету імені Тараса Шевченка протягом багатьох років.

Перша частина навчального посібника включає в себе три розділи та додатки. У перших двох розділах викладаються короткі теоретичні відомості, наводяться методичні вказівки та поради до розв'язування типових задач та до проведення реальних експериментальних досліджень. В останньому третьому розділі навчального посібника наведено розв'язки типових задач, що стосуються тематики посібника, а також характерні актуальні запитання разом з

відповідями. Посібник також містить завдання для самостійної роботи студентів.

Навчальний посібник розраховано на студентів, що вивчають курс «Скануюча тунельна мікроскопія та спектроскопія» та інші, схожі за тематикою, курси з напрямку «нанофізика та наноелектроніка», аспірантів та молодих науковців. Він також може бути корисним при вивченні курсів «Мікро- та наноелектроніка», «Фізичні основи нанотехнологій», «Методи діагностики поверхні» та «Атомна фізика».

Автори щиро вдячні співробітникам кафедри нанофізики та наноелектроніки радіофізичного факультету Афанасьєвій Т. В. за люб'язно надані ілюстративні матеріали, які ввійшли до навчального посібника, Ніколайчик А. Е. та Прокопенко Л. Є. за допомогу в оформленні книги. Автори вважають своїм приємним обов'язком висловити подяку рецензентам навчального посібника – професорам Василю Васильовичу Ільченку та Павлу Вікентійовичу Мельнику за уважне та об'єктивне рецензування, а також академіку НАН України Миколі Григоровичу Находкіну та завідувачу кафедри нанофізики та наноелектроніки Ігорю Пилиповичу Ковалю за їх підтримку під час роботи над книгою. Нарешті, автори були б раді почути критичні зауваження та побажання читачів, врахування яких, без сумніву, дозволить створити нову покращену версію навчального посібника.

## Література

1. Мелков Г. А. Кріогенна електроніка: Навчальний посібник. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2003. – 87 с.
2. Довгий Я. Чарівне явище надпровідність. – Львів: Євро-світ, 2000. – 440 с.
3. Находкін М. Г., Шека Д. І. Фізичні основи мікро- та наноелектроніки: Підручник. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2005. – 431 с.

## ОСНОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ

$a$	– стала кристалічної ґратки
$c$	– швидкість світла у вакуумі
$d$	– відстань між кристалічними площинами
$D$	– прозорість потенціального бар'єра
$e \approx 2,72$	– основа натуральних логарифмів
$e$	– елементарний електричний заряд
$E$	– енергія
$\vec{E}$	– напруженість електричного поля
$E_F$	– енергія Фермі
$G$	– ширина забороненої зони
$h$	– стала Планка
$\hbar$	– зведена стала Планка, $\hbar = h / 2\pi$
$\hat{H}$	– оператор Гамільтона
$i = \sqrt{-1}$	– уявна одиниця
$I$	– електричний струм
$\vec{j}$	– густина струму
$J$	– інтенсивність
$\vec{k}$	– хвильовий вектор
$\vec{k}_B$	– хвильовий вектор хвилі де Бройля
$k_B$	– стала Больцмана
$K$	– кінетична енергія
$l$	– ширина потенціальної ями, потенціального бар'єра
$L$	– відстань між вістрям скануючого тунельного мікроскопа (СТМ) та зразком
$m$	– маса
$m_0$	– нерелятивістська маса частинки
$m_e$	– нерелятивістська маса електрона
$M$	– матричний елемент
$\vec{p}$	– імпульс
$P$	– ймовірність
$q$	– електричний заряд



$t$	– час
$T$	– температура
$U$	– потенціальна енергія
$v$	– швидкість
$v_{gp}$	– групова швидкість
$v_{\phi}$	– фазова швидкість
$V$	– електрична напруга
$\mathcal{V}$	– об'єм
$W$	– робота виходу електрона з речовини
$z_e$	– координата вістря СТМ вздовж нормалі до поверхні зразка
$z_n$	– висота точки поверхні зразка
$Z$	– номер хімічного елемента у таблиці Менделєєва
$\eta$	– показник заломлення
$\varphi$	– кут
$\Phi$	– електричний потенціал
$\lambda$	– довжина хвилі
$\lambda_B$	– довжина хвилі де Бройля
$\nu$	– частота
$\xi$	– глибина проникнення частинки у потенціальний бар'єр
$\theta$	– кут
$\rho$	– густина електронних станів
$\sigma$	– переріз розсіювання
$\Psi$	– хвильова функція
$\omega$	– циклічна частота
АСМ	– атомний силовий мікроскоп, атомно-силова мікроскопія
СТМ	– скануючий тунельний мікроскоп, скануюча тунельна мікроскопія

# Розділ 1.

## Квантові властивості матерії

---

Минуло майже сто років з того часу як на початку ХХ сторіччя працями Нільса Бора, Луї де Бройля, Макса Планка та Альберта Ейнштейна було закладено основи *квантової механіки*. В подальшому ідеї цих великих учених були розвинені та обґрунтовані їх не менш видатними та талановитими послідовниками – Максом Борном, Вальтером Гейзенбергом, Полем Діраком та Ернестом Шредінгером, що призвело до створення *квантової механіки* та до кардинальної зміни уявлень про оточуючий людину світ.

Виявилось, що наукова картина світу, яка існувала до створення квантової механіки, не є універсальною і не відображає *квантові властивості* матерії. Ці властивості полягають, перш за все, в тому, що матерія одночасно проявляє себе в двох, з точки зору класичної фізики, несумісних формах – у вигляді сукупності частинок – корпускул та у вигляді хвиль. Фізичні величини, неперервні у класичній фізиці, наприклад, енергія та момент імпульсу, у квантовій фізиці змінюються дискретним чином – квантуються. Нарешті, існує скінченна похибка опису поведінки квантової системи. В той час, як у класичній механіці всі фізичні процеси є детермінованими за умови, що всі параметри системи відомі у певний момент часу, у квантовій механіці такий підхід є принципово неможливим, оскільки параметри квантової системи в будь-який момент часу визначені лише з певною скінченною точністю.

Квантові властивості матерії найбільш яскраво проявляються у випадку дослідження фізичних систем дуже малих розмірів – порядку розмірів атомів чи менших за них, або систем, енергії яких малі і сумірні з принциповою невизначеністю енергії системи.

Зондові методи діагностики поверхні ґрунтуються на аналізі відгуку поверхні на дію зовнішнього впливу (части-

нок та полів). Цей аналіз можна проводити лише застосовуючи закони квантової механіки, що вимагає ознайомлення з квантовими властивостями матерії.

## 1.1. ХВИЛЬОВІ ВЛАСТИВОСТІ ЧАСТИНОК

У 1923 році французький фізик Луї де Бройль запропонував оригінальну гіпотезу, що будь-яке рухоме матеріальне тіло може бути ототожнене з хвильовим процесом, що характеризується довжиною хвилі

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (1.1.1)$$

де  $p$  – імпульс тіла. Такі хвилі отримали назву *хвиль де Бройля*.

За своєю природою хвилі де Бройля принципово відрізняються від будь-яких інших хвиль, відомих з класичної фізики. Хвиля де Бройля деякого матеріального тіла визначає ймовірнісний аспект існування цього тіла. Згідно сучасних уявлень інтенсивність (квадрат амплітуди) хвилі де Бройля у певній точці простору у певний момент часу визначає ймовірність знаходження відповідного матеріального тіла у вказаній точці простору – часу. Такі уявлення знаходяться у принциповому протиріччі з основами класичної фізики, згідно яких усі фізичні процеси є детермінованими.

Вираз (1.1.1) пов'язує між собою корпускулярну характеристику матеріального об'єкта – його імпульс  $p$  з хвильовою характеристикою – довжиною хвилі де Бройля  $\lambda_B$ . Якщо врахувати зв'язок між довжиною хвилі  $\lambda_B$ , її частотою  $\nu_B$ , циклічною частотою  $\omega_B$  та швидкістю  $v_B$ :

$$\omega_B = 2\pi\nu_B = 2\pi\frac{v_B}{\lambda_B}, \quad (1.1.2)$$

енергію об'єкта  $E$ , його імпульс  $p$  та масу  $m$  (загалом кажучи, релятивістську) можна виразити наступним чином:

$$E = h\nu_B = \hbar\omega_B = mc^2, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}_B = m\vec{v}_B, \quad m = \frac{\hbar\omega_B}{c^2}, \quad (1.1.3)$$

де  $\vec{k}_B$  – хвильовий вектор хвилі де Бройля, напрямком якого збігається з напрямком руху матеріального тіла, а модуль – хвильове число – визначається як  $|\vec{k}_B| = k_B = \frac{2\pi}{\lambda_B} = \frac{\omega_B}{v_B}$ .

Записані вирази не залежать від природи матеріального об'єкта. Це дає змогу зробити важливий висновок – усі матеріальні об'єкти мають як корпускулярні, так і хвильові властивості і, залежно від ситуації, проявляють себе або як хвиля, або як локалізований об'єкт (корпускула).

Подібно до хвиль будь-якої природи хвилі де Бройля характеризуються *груповою*  $v_{gp}$  та *фазовою*  $v_\phi$  *швидкостями*:

$$v_{gp} = \frac{\partial\omega_B}{\partial k_B}, \quad v_\phi = \frac{\omega_B}{k_B}. \quad (1.1.4)$$

Підкреслимо, що записані вирази мають загальний характер і не залежать від природи хвилі. Якщо врахувати формули (1.1.3), ці швидкості можна виразити через енергію  $E$  та імпульс  $p$  матеріального тіла:

$$v_{gp} = \frac{\partial\omega_B}{\partial k_B} = \frac{\partial E}{\partial p}, \quad v_\phi = \frac{\omega_B}{k_B} = \frac{E}{p}. \quad (1.1.5)$$

Хвиля де Бройля, незважаючи на свою абстрактну, ймовірнісну природу, є цілком реальним фізичним об'єктом. Експериментально досліджуючи поведінку квантової системи, можна виміряти довжину цієї хвилі  $\lambda_B$ , що є прямим підтвердженням її існування.

Для експериментів з хвилями де Бройля найчастіше використовуються заряджені частинки. Як відомо, енергія заряджених частинок із зарядом  $q$  змінюється на величину  $\Delta E = qV$  при проходженні частинками різниці потенціалів  $V$ . Це, в свою чергу, згідно відомих виразів [1–3]

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \text{ або } p = \frac{1}{c} \sqrt{K(K + 2m_0 c^2)}, \quad (1.1.6)$$

де  $E$  – повна енергія частинок,  $K$  та  $m_0$  – їх кінетична енергія та нерелятивістська маса, призводить до зміни їх імпульсу  $p$ , а значить і до зміни їх довжини хвилі де Бройля. Підбираючи величину напруги  $V$ , можна легко керувати довжиною хвилі де Бройля таких частинок.

У більшості експериментів енергія  $\Delta E$ , яку набувають заряджені частинки в електричному полі, є малою порівняно з їх енергією спокою  $m_0 c^2$ . Для таких частинок довжина хвилі де Бройля обернено пропорційна до  $\sqrt{V}$ :

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m_0 q V}}. \quad (1.1.7)$$

Формула (1.1.7) дозволяє легко обчислити довжину хвилі де Бройля будь-якої нерелятивістської зарядженої частинки. Наприклад, довжина хвилі де Бройля нерелятивістських електронів, що прискорюються різницею потенціалів  $V$ , згідно (1.1.7), може бути обчислена за формулою:

$$\lambda_B = \frac{1,225}{\sqrt{V}} \cdot 10^{-9} [\text{м}] = \frac{1,225}{\sqrt{V}} [\text{нм}] = \frac{12,25}{\sqrt{V}} [\text{\AA}], \quad (1.1.8)$$

де величина  $V$  задається у вольтах.

Враховуючи незалежність хвиль де Бройля від природи матеріального об'єкта, формулу, подібну до (1.1.8), можна записати і для будь-яких інших, не обов'язково заряджених частинок. Зокрема для фотонів – квантів світла, довжина хвилі де Бройля може бути розрахована за формулою:

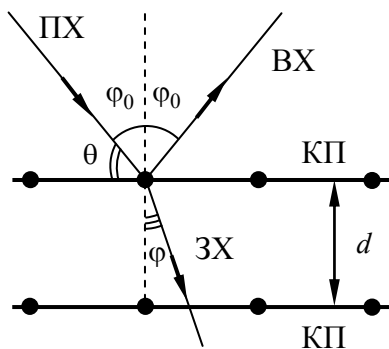
$$\lambda_B = \frac{1,234}{E} \cdot 10^{-6} [\text{м}] = \frac{1234}{E} [\text{нм}] = \frac{12340}{E} [\text{\AA}], \quad (1.1.9)$$

де енергія фотона  $E$  задається у електрон-вольтах.

Довжина хвилі де Бройля  $\lambda_B$  є важливою характеристикою квантового об'єкта. Коли такий об'єкт потрапляє у систему з характерним розміром  $l \sim \lambda_B$ , його поведінка помітно змінюється, що може бути використано на практиці для

дослідження властивостей об'єкта, створення різноманітних квантових пристроїв тощо. З класичної фізики відомо, що при розмірах системи порядку довжини хвилі ( $l \sim \lambda_B$ ), утворюється стояча хвиля, вузли та пучності якої не змінюють свого положення з часом. Пучностям стоячої хвилі де Бройля відповідають максимуми ймовірності знаходження квантового об'єкта, а вузлам – навпаки, мінімуми цієї ймовірності. Це означає, що у середньому протягом достатньо великого проміжку часу квантовий об'єкт знаходиться лише у тих частинах системи, яким відповідають пучності стоячої хвилі де Бройля. Це призводить до суттєвої зміни поведінки квантового об'єкта та, можливо, властивостей системи в цілому. В такому випадку кажуть, що спостерігається *квантовий розмірний ефект*.

Важливою властивістю хвиль де Бройля є те, що для них спостерігаються такі явища як дифракція, інтерференція, заломлення хвиль тощо, характерні для хвиль довільної природи. Найбільш просто впевнитись в існуванні цих явищ для хвиль де Бройля при дослідженні розсіяння заряджених частинок монокрystalічним твердим тілом (рис. 1.1.1). Для цього тверде тіло опромінюють потоком моноенергетичних частинок із зарядом  $q$ , прискорених різницею потенціалів  $V$ , і вимірюють розподіл розсіяних частинок за енергіями та за кутами розсі-



**Рис. 1.1.1.** Відбиття та заломлення хвиль де Бройля на поверхні монокристалічного твердого тіла. Промінь ПХ відповідає падаючій хвилі де Бройля, ВХ – відбитій хвилі, ЗХ – заломленій хвилі. КП – кристалічна площина, розташування атомів на якій схематично відмічено точками.  $\varphi_0$  – кут падіння хвилі де Бройля,  $\theta$  – ковзний кут.

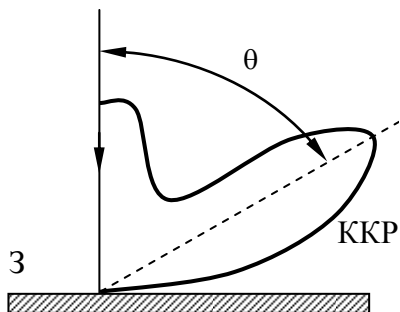


Рис. 1.1.2. Крива кутового розподілу (KKP) електронів, розсіяних зразком 3 (показано лише частину кривої). Кут розсіяння  $\theta$  визначає напрямок на перший інтерференційний максимум хвиль де Бройля. У досліджах Девіссона і Джермера кут  $\theta$  дорівнював  $50^\circ$  для електронів, прискорених різницею потенціалів  $V = 54$  В.

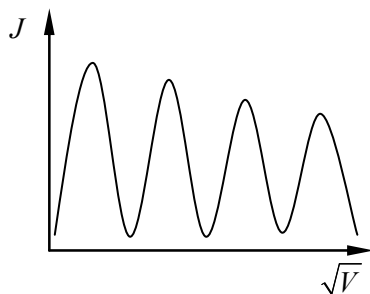


Рис. 1.1.3. Графік залежності інтенсивності потоку  $J$  розсіяних електронів при фіксованому куті спостереження  $\theta = \text{const}$  від  $\sqrt{V}$ , де  $V$  – різниця потенціалів, що прискорює електрони. Рівновіддаленість максимумів інтенсивності означає, що дифракція хвиль де Бройля на кристалічній ґратці відповідає умові Вульфа–Брегга.

яння. Вперше такі дослідження проведено у 1927 році Девіссоном і Джермером. Результати цих досліджень схематично представлено на рис. 1.1.2, 1.1.3.

Якщо вважати частинки нерелятивістськими, то до проникнення у тверде тіло їх довжина хвилі де Бройля може бути розрахована за формулою (1.1.8). У кристалічній ґратці на частинки додатково діє внутрішнє кристалічне поле, що призводить до зміни енергії частинки на величину  $qV_{\text{вн}}$ , де  $V_{\text{вн}}$  – внутрішній потенціал кристалічної ґратки. Відповідно, змінюється й довжина хвилі де Бройля, тобто відбувається заломлення хвилі. Показник заломлення твердого тіла  $\eta = \eta(V)$  у цьому випадку визначається як відношення фазових швидкостей хвилі де Бройля у вакуумі  $v_{\text{ф,вак}}$  та у

кристалічній ґратці  $v_{\phi,кр.зр.}$  :

$$\eta(V) = \frac{v_{\phi,вак.}}{v_{\phi,кр.зр.}} = \frac{\sin \varphi_0}{\sin \varphi} = \sqrt{1 + \frac{V_{вн}}{V}}, \quad (1.1.10)$$

де  $\varphi_0$  – кут падіння частинок на поверхню твердого тіла,  $\varphi$  – кут заломлення (див. рис. 1.2.1).

Впорядковане розташування атомів та іонів у кристалічній ґратці утворює тривимірну дифракційну ґратку, на якій може відбуватись дифракція частинок з відповідними довжинами хвиль де Бройля. Для опису такої дифракції, з урахуванням ефектів заломлення хвиль у кристалічній ґратці, використовується відома формула Вульфа–Брегга:

$$2d\sqrt{\eta^2 - \sin^2 \varphi_0} = n\lambda_B, \quad (1.1.11)$$

де  $d$  – відстань між кристалічними площинами,  $n$  – порядок інтерференційного максимуму,  $\lambda_B$  – довжина хвилі де Бройля у вакуумі. Якщо замість кута падіння  $\varphi_0$  ввести ковзний кут  $\theta$  (див. рис. 1.1.1), формула (1.1.11) набуде вигляду:

$$2d\sqrt{\eta^2 - \cos^2 \theta} = n\lambda_B. \quad (1.1.12)$$

Згідно (1.1.10), із збільшенням різниці потенціалів  $V$  показник заломлення  $\eta(V)$  починає асимптотично наближатись до одиниці. Тому, наприклад, для рентгенівських фотонів або ультрарелятивістських електронів формула Вульфа–Брегга спрощується:

$$2d \sin \theta = 2d \cos \varphi_0 = n\lambda_B. \quad (1.1.13)$$

## 1.2. СПІВВІДНОШЕННЯ НЕВИЗНАЧЕНОСТЕЙ

Ідея корпускулярно-хвильового дуалізму, що лежить в основі сучасної квантової фізики, передбачає принципову невизначеність стану квантової системи у будь-якій точці простору – часу (навіть суть поняття стану стає доволі умовною). Дійсно, з одного боку, будь-яка квантова систе-



ма має певні розміри і тому локалізована у просторі, а з іншого боку, хвиля де Бройля такої системи одночасно існує в усіх точках простору і, відповідно, є нелокалізованим об'єктом. Інтенсивність хвилі де Бройля визначає ймовірність знаходження квантової системи у певній точці простору у певний момент часу. Отже, з деякою, у загальному випадку, ненульовою ймовірністю квантова система може знаходитись у будь-якій точці простору у будь-який момент часу.

В атомній фізиці та квантовій механіці використовуються два типи співвідношення невизначеностей. Перший тип – це співвідношення між невизначеністю проекції імпульсу і невизначеністю відповідної координати:

$$\overline{\Delta p_x^2} \cdot \overline{\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad , \quad \overline{\Delta p_z^2} \cdot \overline{\Delta z^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (1.2.1)$$

де  $\Delta p_x = \sqrt{\overline{\Delta p_x^2}} = \sqrt{\overline{(p_x - \bar{p}_x)^2}}$  і  $\Delta x = \sqrt{\overline{\Delta x^2}} = \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2}}$  – квантово-механічні невизначеності проекції імпульсу і координати вздовж довільної осі  $x$ . Аналогічно вводяться величини  $\Delta p_y = \sqrt{\overline{\Delta p_y^2}}$  і  $\Delta y = \sqrt{\overline{\Delta y^2}}$ ;  $\Delta p_z = \sqrt{\overline{\Delta p_z^2}}$  і  $\Delta z = \sqrt{\overline{\Delta z^2}}$ . У наведених формулах риска над величинами означає квантово-механічне усереднення. Згідно (1.2.1), мірою відхилення імпульсів та координат від середніх значень є середньоквадратичні величини:  $\overline{\Delta p_x^2}$ ,  $\overline{\Delta x^2}$ ,  $\overline{\Delta p_y^2}$ ,  $\overline{\Delta y^2}$ ,  $\overline{\Delta p_z^2}$ ,  $\overline{\Delta z^2}$ .

Оскільки співвідношення (1.2.1) визначають лише нижню межу відхилення імпульсів та координат, а також з огляду на те, що іноді незручно працювати з квадратичними величинами, вирази (1.2.1) часто записують у більш простому вигляді:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \geq \hbar, \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \geq \hbar. \quad (1.2.2)$$

Відзначимо також, що в (1.2.1)–(1.2.2) входить зведена стала Планка  $\hbar = h/2\pi$ , а не стала Планка  $h$ . Якщо для (1.2.1) це є математично обґрунтованим [1], то у співвідношеннях (1.2.2) це зроблено лише для зручності. Без жо-

дних обмежень у *наближених* співвідношеннях (1.2.2)  $\hbar$  можна замінити на  $h$ , оскільки ці співвідношення, як правило, використовуються лише для розв'язання задач на якісному рівні, коли коефіцієнт  $2\pi$  несуттєво впливає на кінцевий результат.

Співвідношення невизначеностей другого типу пов'язує між собою можливе відхилення енергії  $\Delta E$  з проміжком часу  $\Delta t$ , за який можна спостерігати це відхилення:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (1.2.3)$$

Це співвідношення (яке для зручності подано у спрощеному вигляді) визначає проміжок часу  $\Delta t$ , необхідний для того, щоб зафіксувати порушення закону збереження енергії на величину  $\Delta E$ . Слід підкреслити, що це визначення ніяким чином не суперечить класичній фізиці, оскільки закон збереження енергії вводиться лише для середніх величин, усереднених за достатньо великим періодом часу  $\Delta T \gg \Delta t$ .

Щоб проілюструвати фізичний зміст співвідношення (1.2.3), розглянемо наступний уявний експеримент. Нехай деяка частинка перебуває в нестационарному (збудженому) квантовому стані, ймовірність перебування в якому змінюється з часом  $t$ , оскільки частинка прагне повернутись до стаціонарного стану з мінімальною енергією. Тоді інтервал часу  $\Delta t$ , протягом якого ця ймовірність є суттєвою, буде «ефективним» часом життя частинки у нестационарному стані. Для проміжків часу  $\Delta t > \Delta \tau$  ймовірність перебування частинки у нестационарному стані надто мала, а тому можна вважати, що частинка повернулася до стаціонарного стану. Таким чином, співвідношення (1.2.3) пов'язує між собою енергію збудження частинки  $\Delta E$  з проміжком часу  $\Delta t$ , протягом якого може бути встановлено факт, що частинка знаходиться у відповідному збудженому стані. Очевидно, що це відбудеться за умови  $\Delta t < \Delta \tau = \hbar / \Delta E$ .

Зручним прикладом реальної системи, де спостерігається такий процес, може бути атом, який знаходиться у збудженому стані. У цьому стані енергія атома визначається з точністю до величини  $\Delta E = \hbar / \Delta \tau$ , де  $\Delta \tau$  – час, протя-

гом якого відбувається вимірювання енергії атома. Таке розмиття енергетичних рівнів призводить до того, що спектральні лінії, які випромінюються збудженим атомом, не є строго монохроматичними, а характеризуються певною скінченною шириною.

### 1.3. ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ ТА РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА

Завдяки співвідношенням невизначеності ніколи не можна сказати напевно у якому стані у даний момент часу знаходиться квантова система, яке її положення у просторі, яке її рівняння руху, яка її енергія, імпульс та інші залежні від них характеристики. Тому у квантовій фізиці безглуздо намагатись визначити стан, у якому опиниться квантова система в деякій довільний момент часу у деякій точці простору. Але цілком коректною є задача визначення ймовірності знаходження квантової системи в цьому стані. Використовуючи значення ймовірності знаходження системи у різних квантових станах за певними правилами (про це див. далі), можна розрахувати середні значення фізичних величин, що характеризують квантову систему. Ці середні значення фізичних величин дуже важливі для практики, оскільки саме вони можуть бути безпосередньо виміряні в експерименті.

У квантовій фізиці будь-який стан будь-якої квантової системи характеризується комплексною *хвильовою функцією* (*пси-функцією*)  $\Psi(\vec{r}, t)$ , яка дозволяє визначити ймовірність знаходження системи у даному стані. Хоча сама хвильова функція є комплексною величиною і не має чіткого фізичного змісту, квадрат її модуля  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t)$  є густиною ймовірності знаходження системи у певному стані у точці з радіус-вектором  $\vec{r}$  у момент часу  $t$  (зірочка означає комплексно-спряжену величину). По суті величина  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  визначає інтенсив-

ність хвилі де Бройля квантової системи. Отже,  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\mathcal{V}$  є ймовірністю того, що система у момент часу  $t$  перебуває в об'ємі  $d\mathcal{V}$  біля точки з радіус-вектором  $\vec{r}$  і має стан, що описується хвильовою функцією  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Інтегруючи вираз  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\mathcal{V}$ , можна визначити ймовірність  $P$  знаходження квантової системи у макроскопічному об'ємі  $\mathcal{V}$  у момент часу  $t$  у квантовому стані з хвильовою функцією  $\Psi(\vec{r}, t)$ :

$$P = \int_{\mathcal{V}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\mathcal{V}. \quad (1.3.1)$$

Хвильова функція не є строго детермінованою величиною. Вона визначена з точністю до довільного сталого множника. Це однак не суперечить законам фізики, оскільки, як вже зазначалось, пси-функція не має чіткого фізичного змісту і не є величиною, яка може бути визначена експериментальним чином. Тим не менш, враховуючи, що квадрат модуля цієї функції визначає ймовірність знаходження системи у певному квантовому стані, хвильову функцію прийнято нормувати. Умова нормування хвильової функції має вигляд:

$$\int_{\mathcal{V}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\mathcal{V} = 1, \quad (1.3.2)$$

де об'єм  $\mathcal{V}$  – це весь простір або його частина, де хвильова функція не дорівнює нулю. Фізичний зміст цієї умови полягає у тому, що квантова система достовірно знаходиться десь усередині простору, де  $\Psi(\vec{r}, t) \neq 0$ .

Хвильова функція  $\Psi(\vec{r}, t)$  квантової системи є розв'язком часового або нестационарного рівняння Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.3.3)$$

де  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}, t)$  – оператор Гамільтона (гамільтоніан) системи з масою  $m$ ,  $U(\vec{r}, t)$  – потенціальна енергія системи,  $\Delta$  – оператор Лапласа.

Якщо квадрат модуля хвильової функції  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  та гамільтоніан системи  $\hat{H}$  не залежать від часу  $t$ , можна вважати, що система перебуває у стаціонарному стані з хвильовою функцією

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad (1.3.4)$$

де  $\Psi(\vec{r})$  – координатна частина хвильової функції стаціонарного стану з повною енергією  $E$ . Підстановкою (1.3.4) до (1.3.3) часове рівняння Шредінгера зводиться до *стаціонарного рівняння Шредінгера*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (1.3.5)$$

Хвильова функція має бути неперервною, однозначною і скінченною. У багатьох випадках розв'язок рівнянь (1.3.3), (1.3.5), що задовольняє цим умовам, існує лише за певних значень енергії системи  $E$ . Ці значення називають квантованими значеннями енергії або квантованими *рівнями енергії* системи  $E_n$ , де  $n$  – номер рівня.

Хвильова функція використовується не тільки для знаходження ймовірності перебування системи у певному квантовому стані, але й для визначення фізичних величин, що характеризують стан системи. Для цього застосовуються оператори фізичних величин.

*Оператор фізичної величини*  $\hat{X}$  визначає власні значення деякої фізичної величини  $X$  для системи, що знаходиться у квантовому стані з хвильовою функцією  $\Psi(\vec{r}, t)$ :

$$\hat{X}\Psi(\vec{r}, t) = X\Psi(\vec{r}, t). \quad (1.3.6)$$

Наприклад, оператори імпульсу  $\hat{p}_x$  та кінетичної енергії  $\hat{K}$

для випадку руху частинки з масою  $m$  вздовж осі  $x$  визначаються наступним чином:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (1.3.7)$$

Середнє значення  $\langle X \rangle$  фізичної величини  $X$ , що характеризує квантову систему, яка знаходиться у стані з хвильовою функцією  $\Psi(\vec{r}, t)$ , може бути знайдене за правилом:

$$\langle X \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}, t) X \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{X} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r}. \quad (1.3.8)$$

Під час руху системи у змінних у просторі потенціальних полях  $U(\vec{r}) \neq \text{const}$  важливо знати, які фізичні величини при цьому зберігаються (не змінюються). Визначити такі величини можна за допомогою перевірки *комутаційних співвідношень*. Якщо виконується співвідношення

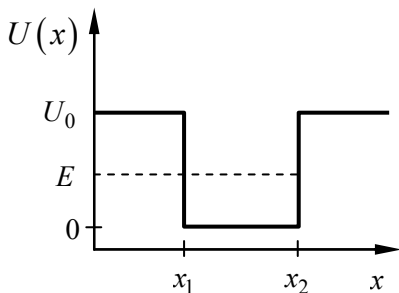
$$\hat{H}\hat{X} - \hat{X}\hat{H} = 0, \quad (1.3.9)$$

де  $\hat{X}$  – оператор деякої фізичної величини  $X$ , а  $\hat{H}$  – оператор Гамільтона (гамільтоніан) системи, то фізична величина  $X$  не змінюється у часі. Якщо ж співвідношення (1.3.9) не виконується – відповідна фізична величина не зберігається.

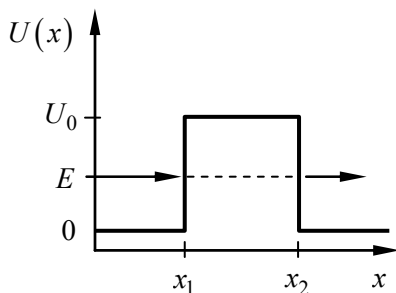
#### 1.4. ПОТЕНЦІАЛЬНІ ЯМИ ТА БАР'ЄРИ. ТУНЕЛЬНИЙ ЕФЕКТ

Наявність хвильових властивостей у частинок призводить до їх, на перший погляд, дивовижної, з точки зору класичної фізики поведінки, яка найбільш яскраво проявляється, коли частинка потрапляє у так звану потенціальну яму (рис. 1.4.1) або рухається в області, де існує потенціальний бар'єр (рис. 1.4.2).

Енергія частинки  $E$  в потенціальній ямі менша за глибину  $U_0$  цієї ями. Згідно уявлень класичної фізики частинка не може вийти за межі такої ями і повинна знаходитись



**Рис. 1.4.1.** Графік залежності потенціальної енергії  $U(x)$  від координати  $x$  для одновимірної прямокутної потенціальної ями глибиною  $U_0$  та шириною  $l = x_2 - x_1$ ; координати  $x_1$  та  $x_2$  визначають межі потенціальної ями;  $E$  – енергія частинки, яка знаходиться у потенціальній ямі.



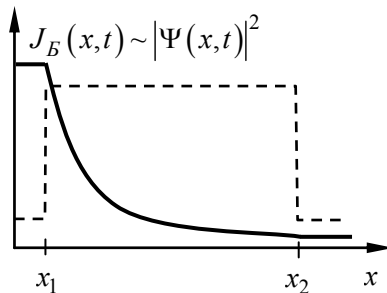
**Рис. 1.4.2.** Графік залежності потенціальної енергії  $U(x)$  від координати  $x$  для одновимірного прямокутного потенціального бар'єра висотою  $U_0$ ; координати  $x_1$  та  $x_2$  визначають точки, де частинка з енергією  $E$  входить у область бар'єра шириною  $l = x_2 - x_1$ . Ефективна висота бар'єра становить  $U_0 - E$ .

у ній як завгодно довго. Поведінка частинки всередині потенціальної ями суттєво відрізняється від поведінки вільної частинки, оскільки довжина хвилі де Бройля частинки  $\lambda_B$  є величиною сумірною з шириною потенціальної ями  $l = x_2 - x_1$  (див. рис. 1.4.1). Це призводить до того, що для частинок, які потрапили до потенціальної ями спостерігається квантовий розмірний ефект.

Другим парадоксальним явищем, яке неможливе з точки зору класичної фізики, є *тунельний ефект*, який полягає у проходженні частинкою з енергією  $E$  потенціального бар'єра з висотою  $U_0 > E$ . При проходженні частинкою такого бар'єра, очевидно, порушується закон збереження енергії. Чи може таке бути? Звичайно, може, бо співвідношення невизначеностей (1.2.3) не тільки не заперечує цьо-

го, а ще й постулює це як одну з фундаментальних властивостей матерії – часу. Згідно (1.2.3), частинка може подолати потенціальний бар'єр з висотою  $\Delta E$ , якщо встигне за час  $\Delta t \geq \hbar / \Delta E$  пройти цей бар'єр наскрізь. Тунельний ефект можна пояснити і дещо іншим чином. Хвиля де Бройля частинки може проникнути до області, де існує потенціальний бар'єр. Інтенсивність цієї хвилі є густиною ймовірності знаходження частинки у будь-який момент часу у будь-якій точці простору, в тому числі і у будь-якій точці, що належить області, де існує потенціальний бар'єр. При проникненні хвилі де Бройля до області потенціального бар'єра, її інтенсивність швидко зменшується. Але якщо потенціальний бар'єр є достатньо вузьким, і інтенсивність хвилі де Бройля на дальній границі бар'єра є не дуже малою величиною (при  $x = x_2$  на рис. 1.4.3), можна вважати, що хвиля де Бройля частинки пройшла крізь потенціальний бар'єр, а значить крізь цей бар'єр пройшла і сама частинка.

Тепер, коли основні фізичні явища, що відбуваються з частинками у потенціальних ямах та при проходженні ними потенціальних бар'єрів з'ясовані на якісному рівні, розгля-



**Рис. 1.4.3.** Залежність інтенсивності  $J_B(x, t)$  хвилі де Бройля частинки з хвильовою функцією  $\Psi(x, t)$  від координати  $x$  при проходженні частинкою прямокутного потенціального бар'єра шириною  $l = x_2 - x_1$  (форма бар'єра схематично показана пунктирною лінією).



немо особливості розв'язання відповідних квантово-механічних задач та наведемо основні формули, які використовуються при цьому розв'язку.

При розгляді одновимірного руху частинки в потенціальному полі  $U(x)$  (саме такий простий випадок будемо розглядати далі), вважається, що цей рух описується стаціонарним рівнянням Шредінгера (1.3.5), яке у випадку одновимірної квантової задачі має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\Psi(x)+U(x)\Psi(x)=E\Psi(x), \quad (1.4.1)$$

де  $\Psi(x)$  – координатна частина хвильової функції частинки,  $m$  – маса частинки, що рухається,  $E$  – повна енергія частинки,  $\Delta_x$  – одновимірний оператор Лапласа,  $x$  – довільна координата.

У прямокутній декартовій системі координат  $\Delta_x = d^2/dx^2$ . У інших системах ортогональних координат одновимірний оператор Лапласа записується за допомогою більш складних формул, які у явному вигляді містять так звані коефіцієнти Ламе. Коефіцієнтами Ламе (метричними коефіцієнтами) називаються величини  $h_\xi = \frac{ds_\xi}{d\xi}$ ,

$h_\eta = \frac{ds_\eta}{d\eta}$ ,  $h_\zeta = \frac{ds_\zeta}{d\zeta}$  в криволінійних ортогональних координатах  $(\xi, \eta, \zeta)$ , де  $ds_{\xi, \eta, \zeta}$  – елементи довжини вздовж координат  $\xi, \eta, \zeta$  відповідно. Для прямокутної декартової системи координат  $h_x = h_y = h_z = 1$ , для циліндричної системи координат  $h_r = h_z = 1$ ,  $h_\phi = r$ , для сферичної системи координат  $h_r = 1$ ,  $h_\theta = r$ ,  $h_\phi = r \sin \theta$  [4]. Для зручності наведемо явний вигляд одновимірного оператора Лапласа у прямокутній, циліндричній та сферичній системах координат.

Прямокутна декартова система координат  $(x, y, z)$ :

$$\Delta_x = \frac{d^2}{dx^2}, \quad \Delta_y = \frac{d^2}{dy^2}, \quad \Delta_z = \frac{d^2}{dz^2}. \quad (1.4.2)$$

Циліндрична система координат  $(r, \varphi, z)$ :

$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}, \quad \Delta_\varphi = \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2}, \quad \Delta_z = \frac{d^2}{dz^2}. \quad (1.4.3)$$

Сферична система координат  $(r, \theta, \varphi)$ :

$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}, \quad \Delta_\theta = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right), \quad \Delta_\varphi = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2}. \quad (1.4.4)$$

При одновимірному русі частинки ймовірність  $dP$  того, що частинка буде перебувати в малому інтервалі координат  $dx$  поблизу точки  $x = x_0$ , а її стан буде описуватись хвильовою функцією  $\Psi(x)$ , може бути записана у вигляді:

$$dP(x_0) = |\Psi(x_0)|^2 h_x dx, \quad (1.4.5)$$

де  $x$  вважається довільною координатою.

На координатну частину хвильової функції  $\Psi(x)$ , що відповідає дискретному спектру значень повної енергії  $E_n$ , накладається умова нормування:

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 h_x dx = 1, \quad (1.4.6)$$

де  $x_1$  та  $x_2$  – координати, що відповідають границям області, в якій рухається частинка.

До найважливіших задач, що пов'язані з одновимірним рухом частинок, належать задачі про рух частинки в потенціальній ямі та задачі про проходження частинки крізь потенціальний бар'єр (задачі на тунельний ефект). При розв'язуванні таких задач необхідно врахувати наступні особливості розв'язків рівняння (1.4.1):

- рівні енергії частинки можуть бути виродженими, якщо різним хвильовим функціям, що описують стан частин-

ки, відповідає одне значення енергії;

- якщо потенціальна енергія частинки стрибкоподібно змінюється при  $x = x_0$ , то на цій границі хвильова функція та її похідна повинні задовольняти умовам [1, 2]:

$$\psi(x_0 - 0) = \psi(x_0 + 0), \quad \frac{d\psi(x_0 - 0)}{dx} = \frac{d\psi(x_0 + 0)}{dx}; \quad (1.4.7)$$

- якщо в точці  $x = x_0$  потенціальна енергія має дельтоподібний вигляд  $U(x) = A\delta(x - x_0)$ , де  $A = \text{const}$ ,  $\delta(x - x_0)$  – дельта-функція, то умови «зшивання» хвильової функції набувають вигляду [1, 2]:

$$\psi(x_0 - 0) = \psi(x_0 + 0),$$

$$\frac{d\psi(x_0 + 0)}{dx} - \frac{d\psi(x_0 - 0)}{dx} = \frac{2mA}{\hbar^2} \psi(x_0). \quad (1.4.8)$$

При розгляді задач на потенціальні бар'єри широко користуються поняттям густини струму (або потоку) ймовірності в стані з хвильовою функцією  $\Psi(x)$  (виведення цієї формули див. у [3]):

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi), \quad (1.4.9)$$

де  $\Psi \equiv \Psi(x)$ ,  $\Psi^* \equiv \Psi^*(x)$ .

За допомогою (1.4.9) коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра  $D$  та коефіцієнт відбиття від нього  $R$  можна записати у вигляді:

$$D = \frac{|j_D|}{|j_0|}, \quad R = 1 - D = \frac{|j_R|}{|j_0|}, \quad (1.4.10)$$

де  $j_0$  – початковий потік ймовірності для частинок, які рухаються до області бар'єра,  $j_R$  – потік ймовірності для відбитих бар'єром частинок,  $j_D$  – потік ймовірності для частинок, які пройшли крізь потенціальний бар'єр.

Під час руху частинки крізь потенціальний бар'єр складної форми  $U(x)$  іноді виявляється незручним знаходження

точного розв'язку квантово-механічної задачі, що передбачає визначення хвильової функції  $\Psi(x)$  з рівняння (1.4.1) та використання формул (1.4.7)–(1.4.8). У цьому випадку зручно скористатись наближеним виразом для коефіцієнта прозорості  $D$  потенціального бар'єра:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}, \quad (1.4.11)$$

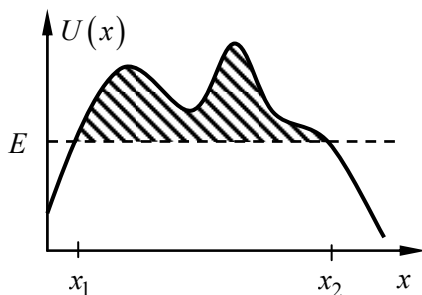
де  $D_0$  – амплітудне значення прозорості бар'єра,  $m$  – маса частинки, що тунелює крізь бар'єр,  $x_1$  – координата точки входження частинки до області потенціального бар'єра,  $x_2$  – координата точки виходу частинки з області бар'єра. Координати  $x_1, x_2$  (координати точок повороту) знаходяться з умови  $E = U(x_{1,2})$ , де  $E$  – енергія частинки.

Формула (1.4.11) отримана припускаючи, що потенціальний бар'єр складної форми  $U(x)$  можна достатньо точно апроксимувати сукупністю багатьох прямокутних потенціальних бар'єрів різної висоти та дуже малої ширини. У цьому випадку, якщо позначити прозорість  $i$ -го дуже вузького прямокутного потенціального бар'єра як  $D_i$ , прозорість потенціального бар'єра складної форми може бути записана як  $D = \prod_i D_i$ , що, в решті решт, призводить до формули

(1.4.11) (більш детально це питання розглянуто у підрозділі 2.1).

Згідно виразу (1.4.11) прозорість потенціального бар'єра довільної форми  $U(x)$  може мати графічну інтерпретацію. Прозорість  $D$  такого бар'єра оцінюється як

$D = D_0 \exp(-2\sqrt{2mS}/\hbar)$ , де  $S = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - E} dx$  – площа області у координатах  $\{x; \sqrt{U(x) - E}\}$ , що обмежена коорди-



**Рис. 1.4.4.** Графік залежності потенціальної енергії  $U(x)$  від координати  $x$  для потенціального бар'єра складної форми.  $E$  – енергія частинки масою  $m$ , що налітає на бар'єр. Площа заштрихованої області  $S'$  наближено характеризує прозорість потенціального бар'єра  $D$  (чим  $S'$  більше – тим  $D$  менше).

натними лініями  $x = x_1$ ,  $x = x_2$ <sup>1</sup> та кривими  $\sqrt{U(x) - E} = 0$ ,  $\sqrt{U(x) - E} > 0$ . Очевидно, що чим більшою є площа «підбар'єрної» області  $S$ , тим меншою є прозорість бар'єра  $D$ .

Однак, у багатьох випадках зручніше працювати не з трансцендентною функцією  $\sqrt{U(x) - E}$ , яка входить у вираз для  $S$ , а з більш простою функцією  $U(x) - E$ . Якщо за аналогією до величини  $S$  формально ввести площу під

кривою  $U(x) - E$  як  $S' = \int_{x_1}^{x_2} [U(x) - E] dx$  (рис. 1.4.4), можна

наближено характеризувати прозорість потенціального бар'єра  $D$  не точним виразом  $S$ , а наближеним, але більш простим виразом  $S'$ . Зрозуміло, що чим площа  $S'$  більше – тим прозорість потенціального бар'єра  $D$  менша, тобто введене раніше співвідношення між  $S$  та  $D$  справджується.

<sup>1</sup> Координати  $x_{1,2}$  визначаються з умови  $U(x_{1,2}) = E$ .

ся на якісному рівні і для величин  $S'$  та  $D$ .

Для потенціальних бар'єрів прямокутної форми з висотою  $U_0$  та шириною  $l$  коефіцієнт прозорості визначається за формулою:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}. \quad (1.4.12)$$

Видно, що із збільшенням ширини бар'єра або із збільшенням його ефективної висоти  $U_0 - E$  прозорість бар'єра дуже різко спадає за експоненціальним законом. Це означає, що тунельний ефект може чітко спостерігатись лише у бар'єрах з достатньо малою ефективною висотою та шириною.

Згідно (1.4.12) характерну глибину проникнення частинки в область бар'єра  $\xi$  можна знайти з умови

$$\frac{2\xi}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} = 1, \text{ звідки:}$$

$$\xi = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (1.4.13)$$

Якщо припустити, що ефективна висота бар'єра складає  $U_0 - E = 1$  еВ з (1.4.13) одержимо, що, наприклад, тунелювання електронів буде найбільш ефективне за умови, що ширина прямокутного потенціального бар'єра буде меншою за  $\xi = 0,61$  нм. Тобто дослідження відповідних тунельних явищ можливе лише для нанооб'єктів з характерними розмірами (шириною бар'єра) у кілька нанометрів.

## Література

1. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. – М.: Гл. ред. физ.-мат. лит. изд-ва «Наука», 1983. – 664 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка: Підручник. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2004. – 784 с.
3. Харченко Н. П., Прокопенко О. В., Карлаш Г. Ю. Атомна

- фізика в задачах. – К.: Академдрук, 2007. – 336 с.
4. Анго А. Математика для електро- и радиоинженеров. – М.: Наука, 1967. – 780 с.

## Розділ 2.

# Скануюча тунельна мікроскопія

---

Методи скануючої мікроскопії відіграють надзвичайно важливу роль у багатьох галузях сучасних наукових досліджень. На сьогоднішній день найбільше використовуються методи *скануючої тунельної мікроскопії* та *атомно-силової мікроскопії*. Відповідно, прилади, що реалізують ці методи, мають назви *скануючий тунельний мікроскоп* (СТМ, scanning tunnelling microscope, STM) та *атомно-силовий мікроскоп* – АСМ (atomic force microscope, AFM).

У цьому розділі викладено фізичні принципи роботи СТМ. Відповідну інформацію про АСМ викладено у другій частині навчального посібника.

Скануючий тунельний мікроскоп створено співробітниками швейцарського відділення американської фірми International Business Machines (IBM) у 1981 році [1–3], за що його винахідники Герд Бінніг та Генріх Роєр (Gerd Binnig, Heinrich Rohrer) були нагороджені Нобелівською премією з фізики у 1986 році.

Таку високу винагороду присуджено за унікальні можливості створеного приладу. Унікальним є те, що СТМ дозволяє одержувати зображення досліджуваної поверхні у реальному<sup>1</sup> просторі з такою високою роздільною здатністю, що стає можливим спостереження окремих атомів, а, отже, і атомарної будови речовини. Це досягається шляхом ви-

---

<sup>1</sup> Мається на увазі тривимірний простір координат, положення точки в якому визначає топографію, геометрію поверхні зразка. Таке представлення має принципову перевагу перед представленням топографії поверхні у інших просторах, наприклад, у просторі хвильових чисел або в оберненому просторі, оскільки дозволяє отримати інформацію про рельєф поверхні зразка безпосередньо як результат вимірів, без необхідності спеціальної обробки експериментальних даних.



мірювання тунельного струму між провідним зразком та зондом, що має вигляд надзвичайно загостреного металічного електрода – *вістря СТМ* (в ідеалі на кінці вістря знаходиться лише один єдиний атом). Вимірювальний зонд переміщується над поверхнею зразка, скануючи її, при цьому зміни тунельного струму використовуються для визначення топографії поверхні. Саме через це такий прилад одержав назву *скануючий* тунельний мікроскоп.

Спочатку СТМ застосовувався виключно для дослідження поверхонь зразків, що мають електричну провідність, адже протікання тунельного струму вимагає відводу електричних зарядів від зразка або, навпаки, підводу до системи «зразок – вістря СТМ» електричних зарядів. Першим визначним успіхом даної методики було встановлення атомарної структури реконструйованої поверхні кремнію Si (111) – 7×7 [4]. Це фактично було першою демонстрацією величезного потенціалу СТМ у галузі фізики та хімії поверхні. Надалі з'явилась значна кількість дослідницьких робіт із застосуванням СТМ для розв'язання різноманітних фундаментальних та прикладних задач цієї галузі.

Зараз можна стверджувати, що з кожним роком область застосування СТМ поступово розширюється, однак, дослідження поверхонь металів, напівпровідників та надпровідників, а також процесів на цих поверхнях, все ж таки залишається основним напрямом застосування СТМ у сучасних фізичних дослідженнях.

Останнім часом, у зв'язку з поступовим переходом технології від мікроелектроніки до наноелектроніки, виник новий актуальний напрям застосування СТМ. У рамках цього напрямку СТМ вже використовується не як прилад «спостереження», а як інструмент «нанотехнологічного процесу», який дозволяє проводити модифікацію поверхні на атомному рівні. Найважливішим результатом у цій галузі є створення нового методу виготовлення наноструктур за допомогою СТМ – так званого методу *нанолітографії*.

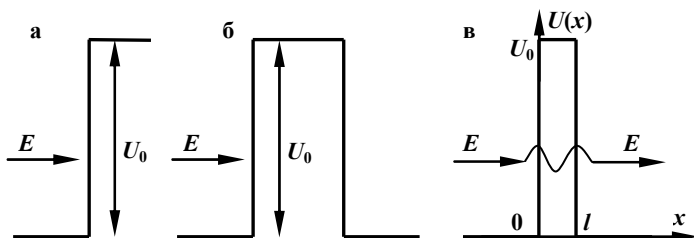
## 2.1. ТЕОРЕТИЧНЕ ПІДґРУНТЯ ПРОЦЕСУ ОДНОВИ-МІРНОГО ТУНЕЛЮВАННЯ

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.

Під тунелюванням розуміється проходження частинок крізь потенціальний бар'єр, тобто крізь область простору, де кінетична енергія частинки  $K$  є меншою за її потенціальну енергію  $U$  (див. підрозділ 1.4). З точки зору класичної фізики, процес тунелювання є неможливим і його якісне та кількісне пояснення може бути здійснено лише на основі формалізму квантової механіки.

Реальний процес тунелювання електронів у СТМ є суттєво тривимірним процесом, що, власне, і дозволяє досягати надзвичайно високої роздільної здатності при одержанні мікроскопічних зображень поверхні досліджуваного зразка. На жаль строгий математичний підхід до розгляду такого процесу є надзвичайно складним. У той же час є можливість проаналізувати найсуттєвіші аспекти процесу тунелювання на прикладі простої одновимірної моделі, яка частково вже розглядалась у підрозділі 1.4.

Як відомо, для того щоб електрон міг вийти із твердого тіла у вакуум, йому необхідно надати, як мінімум, таку енергію, яка дорівнює роботі виходу електрона  $W$ . Остання є характеристикою даного твердого тіла та його поверхні. Фактично для виходу у вакуум електрон мусить подолати сходику на залежності потенціальної енергії від координати, що у грубому наближенні зображено на рис. 2.1.1а. Якщо у твердому тілі електрон має повну енергію  $E$ , а висота потенціальної сходику дорівнює  $U_0$ , то з класичної точки зору електрону необхідно надати додаткову енергію  $U_0 - E$ , тільки тоді він зможе вийти у вакуум.



**Рис. 2.1.1.** Схематичне зображення енергетичних діаграм для різних квантово-механічних процесів: а) електрон з повною енергією  $E$  налітає на потенціальну сходинку висотою  $U_0$ ; б) дві однакові потенціальні сходинки на певній відстані одна від одної формують потенціальний бар'єр для проходження електронів; в) внаслідок квантово-механічного ефекту тунелювання електрон проходить крізь достатньо тонкий потенціальний бар'єр шириною  $l$ .

Уявімо собі ситуацію, коли два однакових твердих тіла розташовані на певній відстані одне від одного, що схематично ілюструється енергетичною діаграмою, показаною на рис. 2.1.1б. Якщо відстань між тілами досить велика, то електронам у них як і раніше буде необхідна додаткова енергія  $U_0 - E$ , щоб перейти з одного тіла у друге або навпаки. Фактично дві потенціальні сходинки, як показано на рис. 2.1.1б, утворюють потенціальний бар'єр, який є, згідно законів класичної фізики, непрозорим для електрона з енергією  $E$  меншою за  $U_0$ .

Тепер розглянемо випадок, коли поверхні двох твердих тіл розташовані настільки близько одна від одної, що утворений потенціальний бар'єр є досить тонким. Якщо ширина бар'єра є співрозмірною з довжиною хвилі де Бройля електрона, який налітає, то стає можливим (має досить високу ймовірність) процес тунелювання електрона крізь бар'єр (рис. 2.1.1в).

У найпростішій ситуації енергія електрона у процесі тунелювання не змінюється, тобто має місце ізоенергетичний процес. Такий процес прийнято називати *пружним* або *ізоенергетичним тунелюванням* (саме таке тунелювання

будемо розглядати далі).

Згідно законів квантової механіки, тунелювання відбувається лише з певною ймовірністю, тобто електрон, який налітає на бар'єр, може або тунелювати (тобто пройти) крізь бар'єр, або пружно відбитися від нього. Ймовірність тунелювання характеризується прозорістю бар'єра, яка є величиною, що безпосередньо впливає на величину тунельного струму і містить інформацію про численні властивості потенціального бар'єра, а значить і досліджуваної поверхні твердого тіла. Прозорість бар'єра  $D$  показує яка кількість електронів пройде крізь нього відносно повної кількості електронів, які налітають на потенціальний бар'єр (див. формулу (1.4.10)).

Розглянемо задачу про тунелювання електрона крізь потенціальний бар'єр, який зображено на рис. 2.1.1в. Наша мета – аналітично розрахувати коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра  $D$  (див. також задачу 3.9).

Для спрощення задачу будемо вважати одновимірною, просторову координату позначимо через  $x$ . Початок координат сумістимо з лівою границею бар'єра, товщиною і висотою якого є  $l$  та  $U_0$ , відповідно, як показано на рис. 2.1.1в.

Невідома прозорість  $D$  є відношенням електронних потоків ймовірності, що рухаються у позитивному напрямку осі  $x$  ліворуч та праворуч від бар'єра (тобто до та після проходження потенціального бар'єра потоком електронів) – див. (1.4.10). Як відомо, потік ймовірності  $j = |\vec{j}|$  виражається через хвильову функцію  $\Psi$  квантово-механічною формулою (1.4.9), яка у даному одновимірному випадку має вигляд:

$$j = \frac{i\hbar}{2m_e} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right), \quad (2.1.1)$$

де  $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$  кг – маса електрона,  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – зведена стала Планка,  $i = \sqrt{-1}$  – уявна одиниця. Під  $\Psi^*$  у (2.1.1) розуміється комплексно спряжена хвильова функ-

ція.

Таким чином, задача визначення прозорості потенціального бар'єра зводиться до знаходження хвильової функції електрона.

Відзначимо, що сформульована задача буде розв'язуватись у спрощеному вигляді, у рамках так званого одноелектронного наближення. Це означає, що будемо нехтувати взаємодією електронів між собою і, відповідно, будемо шукати хвильову функцію лише для одного електрона. За допомогою такої функції будуть визначатись потоки по різні боки від потенціального бар'єра, а за їх відношенням буде знайдено прозорість бар'єра.

У такому наближенні для розрахунку правильної інтенсивності потоку слід нормувати одноелектронну хвильову функцію на об'єм відповідного твердого тіла та на електронну густину в ньому. Таке нормування досягається множенням хвильової функції на відповідним чином розраховану сталу величину.

Через надзвичайно малий проміжок часу, який витрачає на тунелювання електрон, для визначення тунельного струму можна скористатись хвильовими функціями, що відповідають стаціонарним станам електрона. Ці функції описують існуючі в рівновазі та незмінні у часі потоки електронів, що налітають на бар'єр, відбиваються від нього та тунелюють крізь нього. Такі хвильові функції повинні бути розв'язками одновимірною стаціонарного рівняння Шредінгера (1.4.1):

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + (E - U) \Psi(x) = 0, \quad (2.1.2)$$

де  $E$  – власне значення енергії електронного стану, а  $U \equiv U(x)$  – потенціальна енергія електрона, яка у загальному випадку є функцією координати  $x$ .

Якщо  $U$  є сталою величиною, то рівняння (2.1.2) є лінійним однорідним диференціальним рівнянням другого порядку зі сталими коефіцієнтами. У теорії диференціальних рівнянь доведено, що його розв'язками є експоненціа-

льні функції вигляду  $Ae^{i\tilde{\kappa}x}$ . Безпосередня підстановка експоненціальної функції  $\Psi(x) = Ae^{i\tilde{\kappa}x}$  у (2.1.2) дозволяє одержати вираз для хвильового числа  $\tilde{\kappa}$ :

$$\tilde{\kappa} = \pm \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}. \quad (2.1.3)$$

Слід зауважити, що функції  $\Psi(x)$  у (2.1.2) – лише просторово залежні частини повних хвильових функцій  $\Psi(x,t)$ , які є розв'язками нестационарного рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U\Psi(x,t). \quad (2.1.4)$$

Якщо обрати часову залежність хвильових функцій у вигляді  $e^{-i\omega t}$ , то підстановка повної хвильової функції  $\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i\tilde{\kappa}x - i\omega t}$  у (2.1.4) приводить до рівняння (2.1.2) для  $\Psi(x)$  за умови, що  $\omega$  задовольняє співвідношенню  $E = \hbar\omega$ . При цьому у виразі (2.1.3) знаки «+» та «-» відносяться до хвиль, які поширюються відповідно у позитивному та негативному напрямках відносно осі  $x$ . Таким чином, згідно формалізму квантової механіки, розв'язки рівняння (2.1.2) є нічим іншим, як плоскими хвилями з хвильовим числом  $\tilde{\kappa}$  та амплітудою  $A$ , причому остання, загалом кажучи, є комплексним числом  $A = |A|e^{i\phi}$ , де  $\phi$  – початкова фаза хвилі.

Для задачі, енергетичну діаграму для якої зображено на рис. 2.1.1в, є три області простору, в яких потенціальна енергія має стале значення:

Область 1:  $x < 0$ ,  $U = 0$ ;

Область 2:  $0 < x < l$ ;  $U = U_0$ ;

Область 3:  $x > l$ ,  $U = 0$ .

Підставляючи загальний вигляд розв'язків  $\Psi(x) = Ae^{i\tilde{\kappa}x}$  у рівняння (2.1.2) і пам'ятаючи, що величини  $E$  та  $U_0$  є

додатними, причому  $E < U_0$ , знаходимо можливі значення хвильових чисел у областях 1, 2 та 3:

$$\begin{aligned} k_1 &= \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \pm \alpha, \\ k_2 &= \pm \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{i\hbar} = \pm i\beta, \\ k_3 &= \pm \alpha. \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Як бачимо, в кожній області простору можливі два розв'язки у вигляді експоненціальних функцій з показниками протилежного знаку. Згідно теорії диференціальних рівнянь, розв'язками будуть також і лінійні комбінації таких експоненціальних функцій.

На даному етапі можна без втрати загальності зробити два важливих уточнення. По-перше, амплітуду  $A_1$  електронної хвилі, що падає ліворуч на бар'єр, можна покласти такою, що дорівнює одиниці:  $A_1 = 1$ . По-друге, амплітуду  $B_3$  хвилі, що падає на бар'єр праворуч можна вважати нульовою, тобто розглядати ситуацію, коли в області 3 є відсутнім електронний потік у негативному напрямку осі  $x$ :  $B_3 = 0$ .

У такій ситуації електронний потік, що падає на бар'єр ліворуч, частково проникає в область бар'єра, а частково відбивається від нього. Це дає можливість записати розв'язок в області 1 у вигляді лінійної комбінації експоненціальних функцій з показниками протилежного знаку. На правій межі потенціального бар'єра також відбувається часткове відбивання електронного потоку у глибину області 2 та часткове проходження цього потоку в область 3. Це дозволяє записати розв'язок рівняння Шредінгера в області бар'єра як лінійну комбінацію експоненціальних функцій з протилежними показниками і як лише одну експоненціальну функцію з позитивним показником в області 3.

Відповідно до вище викладеного можна записати хвильові функції в усіх трьох областях у наступному вигляді:

$$\Psi_1(x) = e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \quad (A_1 = 1),$$

$$\begin{aligned}\Psi_2(x) &= A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \\ \Psi_3(x) &= A_3 e^{i\alpha x}, \quad (B_3 = 0),\end{aligned}\quad (2.1.6)$$

де  $B_1, A_2, B_2, A_3$  – сталі величини.

Знаючи явний вигляд хвильових функцій, можна за допомогою (2.1.1) записати електронні потоки, що падають на бар'єр  $j_{1\rightarrow}$  (область 1) та проходять крізь нього  $j_{3\rightarrow}$  (область 3):

$$\begin{aligned}j_{1\rightarrow} &= \frac{i\hbar}{2m_e} \left( e^{i\alpha x} \frac{\partial e^{-i\alpha x}}{\partial x} - e^{-i\alpha x} \frac{\partial e^{i\alpha x}}{\partial x} \right) = \frac{\alpha\hbar}{m_e}, \\ j_{3\rightarrow} &= \frac{i\hbar}{2m_e} \left( A_3 e^{i\alpha x} \frac{\partial A_3^* e^{-i\alpha x}}{\partial x} - A_3^* e^{-i\alpha x} \frac{\partial A_3 e^{i\alpha x}}{\partial x} \right) = |A_3|^2 \frac{\alpha\hbar}{m_e}.\end{aligned}\quad (2.1.7)$$

Як було сказано раніше, прозорість тунельного бар'єра  $D$  є відношенням потоку, що тунелював крізь бар'єр, до потоку, що падає:

$$D = \frac{j_{3\rightarrow}}{j_{1\rightarrow}} = |A_3|^2. \quad (2.1.8)$$

Отже, для знаходження прозорості  $D$  за даної постановки задачі достатньо знайти в явному вигляді вираз для  $|A_3|^2$ . Це можна зробити за допомогою граничних умов, що накладаються на хвильові функції у місцях розриву потенціалу.

З квантової механіки відомо, що хвильові функції та їхні похідні повинні бути неперервними – див. (1.4.7), (1.4.8). Таким чином, повинні виконуватися наступні граничні умови:

$$\begin{aligned}\Psi_1(0) &= \Psi_2(0), \quad \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0), \\ \Psi_2(l) &= \Psi_3(l), \quad \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l).\end{aligned}\quad (2.1.9)$$

Підставляючи явний вигляд хвильових функцій (2.1.6) у (2.1.9), одержуємо систему рівнянь для коефіцієнтів  $B_1, A_2, B_2, A_3$ :



$$\begin{aligned}
1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\
i\alpha - i\alpha B_1 &= \beta A_2 - \beta B_2, \\
A_2 e^{\beta l} + B_2 e^{-\beta l} &= A_3 e^{i\alpha l}, \\
\beta A_2 e^{\beta l} - \beta B_2 e^{-\beta l} &= i\alpha A_3 e^{i\alpha l}.
\end{aligned} \tag{2.1.10}$$

Дана система може бути легко розв'язана відносно  $A_3$ , шляхом послідовного виключення невідомих. Відповідні алгебраїчні перетворення, однак, досить довгі, тому вони детально викладені у додатку 3. Наведемо лише кінцевий результат:

$$A_3 = \frac{4i \frac{\beta}{\alpha} e^{-i\alpha l}}{\left(\frac{\beta}{\alpha} - i\right)^2 e^{-\beta l} - \left(\frac{\beta}{\alpha} + i\right)^2 e^{\beta l}}. \tag{2.1.11}$$

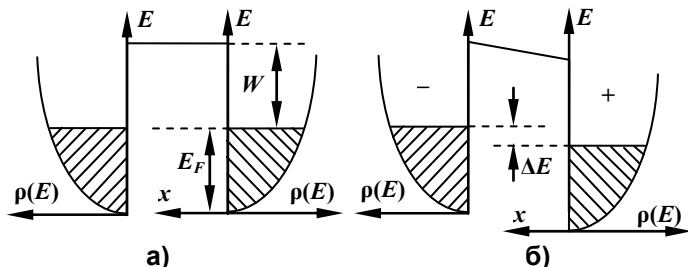
Вираз (2.1.11) для  $A_3$  є точним аналітичним розв'язком системи рівнянь (2.1.10), проте для подальшого використання його доцільно спростити, виходячи з порядку фізичних величин, які туди входять.

Спочатку розглянемо задачу про тунелювання електронів між двома ідентичними металами, з яких виготовлено два електроди – зразок та вістря СТМ. На рис. 2.1.2а схематично зображено зонні діаграми таких металів згідно моделі вільних електронів у випадку, коли електроди знаходяться при однаковому потенціалі (до системи зразок – вістря СТМ не прикладена зовнішня напруга).

На рис. 2.1.2а по вертикальній осі відкладено енергію, у той час як горизонтальна вісь, направлена у бік тунельного бар'єра, є координатною віссю. У напрямку від бар'єра відкладено густину електронних станів  $\rho(E)$ .

Зображена діаграма відповідає абсолютному нулю температури: всі стани нижче енергії Фермі є зайнятими (позначено штриховкою), всі стани вище енергії Фермі є вільними.

Прозорість тунельного бар'єра на рис. 2.1.2а може бути знайдена за допомогою (2.1.8) із коефіцієнтом  $A_3$ , що за-



**Рис. 2.1.2. Схематичне зображення зонної діаграми системи з двох однакових металевих електродів: а) тунельний бар'єр між двома однаковими металами з урівноваженими електронними системами;  $E_F$  – енергія Фермі,  $W$  – робота виходу електрона з металу; б) випадок, коли між металами прикладена напруга  $V$ . Пружне тунелювання стає можливим в енергетичному інтервалі  $\Delta E = eV$  із зайнятих станів ліворуч від бар'єра у вільні стани праворуч від бар'єра.**

дається формулою (2.1.11). Проте у такій ситуації пружне тунелювання електронів буде неможливим, оскільки всі стани з однаковою енергією по різні сторони бар'єра є одночасно зайнятими або одночасно вільними.

Тунельний струм може протікати лише за умови прикладання напруги  $V$  між електродами, що призведе до зміщення зонних діаграм одна відносно іншої за шкалою енергій (рис. 2.1.2б). При цьому виникає енергетична щільність  $\Delta E = eV$  ( $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл – елементарний електричний заряд), в якій зайнятим станам лівого електрода відповідають ізоенергетичні вільні стани правого електрода. Між цими станами (зліва праворуч) можуть тунелювати електрони.

Якщо прикладена напруга  $V$  не дуже велика, то прямокутна форма тунельного бар'єра спотворюється не дуже сильно, а, отже, можна використовувати (2.1.11) для знаходження коефіцієнта  $A_3$  та прозорості тунельного бар'єра  $D$ , котрій пропорційна величина тунельного струму. За такої ситуації розглянемо порядок величини  $\beta$  – див. (2.1.5). Якщо прикладена напруга невелика, то тунелювати будуть

електрони з енергією, яка приблизно дорівнює енергії Фермі, отже, у (2.1.5) покладемо  $E = E_F$ ,  $U_0 - E = W$ . Взявши досить типове значення роботи виходу електрона  $W = 5$  еВ, а також відстані між зразком та вістрям СТМ  $L = 1$  нм (вважаємо, що ширина потенціального бар'єра  $l = L$ ), можна визначити порядок величини  $\beta L$ , що входить під знак експоненціальної функції у (2.1.11):  $\beta L \approx 12$ . У результаті в знаменнику (2.1.11) можна повністю знехтувати  $e^{-\beta L}$  порівняно з  $e^{\beta L}$ , оскільки модулі множників, що стоять перед експоненціальними функціями, є однаковими. У результаті одержуємо наступні спрощені вирази для  $A_3$  і, відповідно, для  $D$ :

$$A_3 = \frac{-4i \frac{\beta}{\alpha} e^{-i\alpha L}}{\left(\frac{\beta}{\alpha} - i\right)^2 e^{-\beta L}}. \quad (2.1.12)$$

$$D = |A_3|^2 = D_0 e^{-2\beta L}, \quad D_0 = \frac{16\alpha^2 \beta^2}{(\alpha^2 + \beta^2)^2}. \quad (2.1.13)$$

Бачимо, що прозорість тунельного бар'єра  $D$ , а, отже, і тунельний струм, є функціями величин  $\alpha$  та  $\beta$ , тобто функціями енергії тунелюючого електрона. Ця залежність складається з експоненціальної функції  $e^{-2\beta L}$  та множника  $D_0$ , що стоїть перед нею. Знайдемо порядки величин цих двох складових, для чого візьмемо типове значення енергії Фермі  $E_F = 5$  еВ, що дає, згідно даного припущення,  $E = E_F = 5$  еВ. Як і раніше будемо вважати роботу виходу  $W = 5$  еВ, тоді у (2.1.5) одержимо  $U_0 - E = W = 5$  еВ. Такі енергетичні характеристики тунелюючих електронів та тунельного бар'єра шириною  $L = 1$  нм дають:  $D_0 = 4$ ,  $e^{-2\beta L} = 3,8 \cdot 10^{-11}$ . Збільшення енергії електрона на 3 еВ порівняно з попереднім випадком (типова верхня межа у СТМ експериментах) дає наступні значення:  $E = 8$  еВ,

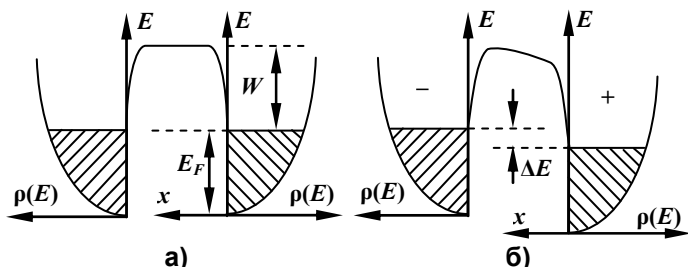
$U_0 - E = 2 \text{ еВ}$ ,  $D_0 = 2,56$ ,  $e^{-2\beta L} = 2,4 \cdot 10^{-7}$ . Цей простий модельний розрахунок наочно демонструє, що множник  $D_0$ , який стоїть перед експоненціальною функцією у (2.1.13) характеризує надзвичайно слабку залежність прозорості тунельного бар'єра  $D$  від енергії (порівняно з експоненціальною функцією у тому ж самому виразі для  $D$ ). Нехтування такою слабкою залежністю вносить дуже малу похибку і, у той же час, значно спрощує вираз для прозорості бар'єра. Виходячи з цього, можна покласти прозорість прямокутного тунельного бар'єра пропорційною до експоненти:

$$D \sim e^{-2\beta L}. \quad (2.1.14)$$

Прямокутний тунельний бар'єр є лише певним наближенням до реальності. Насправді, форма бар'єра завжди відрізняється від прямокутної через причини, наведені нижче.

З курсу загальної фізики відомо, що електрон, який знаходиться на відстані  $x$  від поверхні металу, притягується до нього із силою дзеркального відображення, що дорівнює  $e^2/4x^2$ , де  $x$  є більшим за сталу кристалічної ґратки. В зв'язку з цим при перетині геометричної поверхні металу і віддаленні від нього, електрон продовжує відчувати потенціальний бар'єр, який він долає при виході з твердого тіла. Це, в свою чергу, свідчить про те, що бар'єр не є прямокутним (різким), а натомість зображується плавною потенціальною кривою, яка досягає свого насичення на рівні вакууму при нескінченному віддаленні від поверхні. Відповідно до цього, форму тунельного бар'єра між двома однаковими металами показано на рис. 2.1.3 за відсутності та наявності невеликої зовнішньої різниці потенціалів.

Подальші відхилення форми бар'єра від прямокутної виникають у результаті прикладення більш високої зовнішньої напруги  $V = \Delta E / e$  (рис. 2.1.4а), а також у випадку тунелювання електронів між різнорідними металами, які мають різні роботи виходу. В останньому випадку форма бар'єра не є симетричною навіть за відсутності прикладеної



**Рис. 2.1.3. Схематичне зображення реалістичної енергетичної діаграми для тунельного бар'єра між двома однаковими металами: а) форма бар'єра за відсутності зовнішньої різниці потенціалів; б) форма бар'єра у випадку зовнішньої різниці потенціалів  $V$ , прикладеної між металами.**

напруги, як показано на рис. 2.1.4б. Крім того, прикладання досить високих напруг може бути принципово необхідне для самої можливості протікання тунельного струму. Так, на рис. 2.1.4в зображено тунельний бар'єр між металом та напівпровідником з власним типом провідності (тобто за відсутності легуючих домішок). У такого напівпровідника (що обговорюється в численних курсах з фізики напівпровідників) рівень Фермі знаходиться приблизно посередині забороненої зони, яка відділяє валентну зону від зони провідності і має енергетичну ширину  $G$ . При абсолютному нулі температури валентна зона повністю заповнена електронами (що позначено штриховкою на рис. 2.1.4в), у той час як всі енергетичні рівні зони провідності є незайнятими. У стані рівноваги рівні Фермі напівпровідника і металу співпадають, тому яка завгодно мала різниця потенціалів не може призвести до протікання тунельного струму – у забороненій зоні взагалі не існує жодних електронних станів – ні зайнятих, ні вільних. Тунельний струм з'являється, починаючи з моменту, коли рівень Фермі металу розташовується напроти нижнього краю зони провідності або ж верхнього краю валентної зони напівпровідника. Останній випадок зображено на рис. 2.1.4г, де видно, що електрони валентної зони напівпровідника будуть тунелювати у вільні стани металу за тунельної напруги  $V > G/2e$ . Звичайно,

що за таких ж напруг зворотної полярності буде можливе тунелювання електронів металу у вільні стани зони провідності напівпровідника. В обох випадках форма тунельного бар'єра буде суттєво не прямокутною.

Виходячи з вище сказаного, необхідно узагальнити ви-

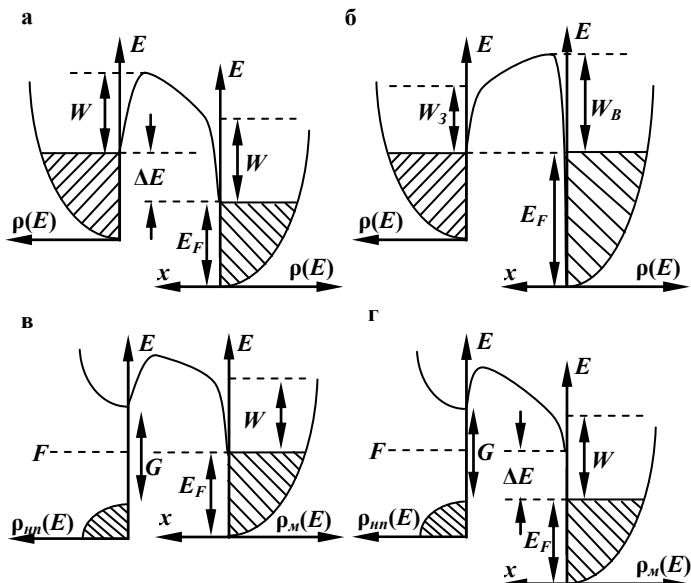


Рис. 2.1.4. Схематичне зображення енергетичної діаграми для тунельного бар'єра зі значним відхиленням форми від прямокутної: а) випадок двох однакових металів та достатньо великої зовнішньої різниці потенціалів  $V = \Delta E / e$ ; б) випадок двох різнорідних металів у рівновазі при нульовій зовнішній різниці потенціалів;  $W_3$  та  $W_B$  – роботи виходу відповідно зразка та вістря СТМ; в) випадок металу та власного напівпровідника, рівень Фермі  $F$  якого знаходиться точно посередині забороненої зони шириною  $G$ ; г) тунельний бар'єр між металом та власним напівпровідником при мінімальній різниці потенціалів  $V = \Delta E / e = G / 2e$ , необхідній для протікання тунельного струму.  $\rho(E)$  – густина електронних станів (ГЕС),  $\rho_M(E)$  – ГЕС для металу,  $\rho_{nn}(E)$  – ГЕС для напівпровідника.

раз (2.1.14) для прозорості прямокутного тунельного бар'єра на випадок бар'єра довільної форми, що описується певною залежністю потенціальної енергії від координати  $U(x)$ . Для цього розіб'ємо бар'єр довільної форми на велику кількість дуже вузьких елементарних прямокутних бар'єрів, котрі послідовно розташовані один за одним. Покладемо шукану прозорість бар'єра складної форми  $U(x)$  такою, що дорівнює добутку прозоростей усіх елементарних прямокутних бар'єрів. Прозорість  $i$ -го елементарного бар'єра  $D_i$ , що розташований у точці з координатою  $x_i$  та має ширину  $dx_i = dx$  для  $\forall i$ , виходячи з (2.1.14), матиме наступний вигляд:

$$D_i \sim \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_e [U(x_i) - E]} dx \right\}. \quad (2.1.15)$$

Тоді прозорість  $D$  бар'єра довільної форми буде дорівнювати:

$$D \sim \prod_i D_i = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_e [U(x) - E]} dx \right\}, \quad (2.1.16)$$

причому інтегрування здійснюється між точками  $x_1$  та  $x_2$ , в яких потенціальна енергія  $U(x_{1,2})$  дорівнює енергії електрона  $E$ , іншими словами – по класично забороненій області простору. Отже, повна прозорість потенціального бар'єра є просто інтегральною мірою площі, описаною кривою потенціальної енергії над прямою, яка відповідає енергії електрона на енергетичній діаграмі.

Цікаво тепер дослідити до чого призводить урахування множника  $D_0$ , що стоїть перед експоненціальною функцією у виразі для прозорості бар'єра (2.1.13). Прозорість  $i$ -го елементарного бар'єра  $D_i$ , згідно (2.1.13), дорівнює:

$$D_i = |A_3|^2 = \frac{\frac{32\alpha^2 m_e}{\hbar^2} [U(x_i) - E]}{\left[ \alpha^2 + \frac{2m_e}{\hbar^2} [U(x_i) - E] \right]^2} \times \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_e [U(x_i) - E]} dx \right\}. \quad (2.1.17)$$

При обчисленні добутку величин  $D_i$ , що відповідають різним елементарним бар'єрам, зручно записати множник, що стоїть перед експоненціальною функцією у (2.1.17), як експоненту від логарифмічної величини, тобто представити  $D_i$  у вигляді:

$$D_i = \exp \{ \ln \gamma(x_i) \} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_e [U(x_i) - E]} dx \right\}. \quad (2.1.18)$$

Тут введено позначення:

$$\gamma(x_i) = \frac{\frac{32\alpha^2 m_e}{\hbar^2} [U(x_i) - E]}{\left[ \alpha^2 + \frac{2m_e}{\hbar^2} [U(x_i) - E] \right]^2}. \quad (2.1.19)$$

Це дає змогу замінити операцію множення при обчисленні величини  $D = \prod_i D_i$  на інтегрування:

$$D = \exp \left\{ \int_{x_1}^{x_2} \ln \gamma(x) dx \right\} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}. \quad (2.1.20)$$

Окремо слід розглянути питання про збіжність інтеграла

$\int_{x_1}^{x_2} \ln \gamma(x) dx$ , який є аргументом першої експоненціальної

функції у (2.1.20). Як зрозуміло з явного вигляду функції  $\gamma(x)$  – див. (2.1.19), вона дорівнює нулю у точках  $x_1$  та  $x_2$ . Таким чином, підінтегральний вираз має логарифмічну особливість на границях класично забороненої області. Проте сам інтеграл повинен збігатися, це впливає з фізи-



чних міркувань, оскільки прозорість будь-якого потенціального бар'єра може лише набувати значення від нуля до одиниці. Математично це є наслідком «слабкості» функції  $\gamma(x)$ , що показано вище при обговоренні характерного впливу величин  $D_0$  та  $e^{-\beta l}$  на величину прозорості тунельного бар'єра  $D$ . Раніше мова йшла про залежність цих множників від енергетичної величини  $U_0 - E$  (випадок прямокутного потенціального бар'єра), однак у випадку потенціального бар'єра довільної форми це відповідає залежності зазначених множників від координати, оскільки потенціальна енергія  $U(x)$  вже є функцією координати  $x$ . Таким чином і без того «слабка» функція  $\gamma(x)$  послаблюється ще більше внаслідок логарифмування, а значить, підінтегральний вираз прямує до нескінченності у точках  $x_1$  та  $x_2$  надзвичайно повільно. Це і забезпечує збіжність першого інтегралу у виразі для прозорості (2.1.20).

Будемо тепер вважати, що вигляд функції  $U(x)$  відомий, і, отже, прозорість тунельного бар'єра також відома. Як впливає з (2.1.20), вона є функцією енергії електрона  $E$ , тому, щоб підкреслити цю обставину, будемо позначати її як  $D(E)$ . Обчислимо величину тунельного струму за допомогою простої моделі вільних електронів для випадку двох довільних плоскопаралельних металічних електродів. Цей струм дорівнює кількості електронів  $n_e$ , що падають на бар'єр за одиницю часу, помножених на ймовірність тунелювання (прозорість бар'єра) та величину елементарного електричного заряду:

$$j(E) = en_e D(E). \quad (2.1.21)$$

Записаний таким чином струм  $j(E)$  по суті є тунельним струмом для моноенергетичних електронів з енергією  $E$ , віднесеним до одиниці площі, з якої відбувається тунелювання електронів. Для одержання величини повного тунельного струму між двома металевими електродами необхідно обчислити інтеграл від виразу (2.1.21) за всіма мож-

ливими значеннями енергії електронів  $E$  (це буде проілюстровано далі).

Як відомо, швидкість нерелятивістського електрона з енергією  $K = E = p^2 / 2m_e$  дорівнює  $v = p / m_e = \sqrt{2E / m_e}$ , де  $p$  – імпульс електрона. Якщо ця швидкість має напрямок перпендикулярний до площини потенціального бар'єра, то за одиницю часу електрон зіткнеться з бар'єром  $\sqrt{2E / m_e} / 2L_m$  раз, де  $L_m$  – геометричний розмір металевого електрода у даному напрямку (електрон рухається всередині металу, відбиваючись від його поверхні). Виходячи з квантового співвідношення невизначеностей, один електронний стан займає об'єм фазового простору  $\Delta p \Delta x \sim 2\pi\hbar$ , або  $\Delta E \Delta x \sqrt{m_e / 2E} \sim 2\pi\hbar$ , причому  $\Delta x = L_m$ . Отже, один електронний стан з хвильовим вектором  $\vec{k} = \vec{p} / \hbar$ , перпендикулярним до площини потенціального бар'єра, характеризується діапазоном енергій  $\Delta E \approx (dE / dp) \Delta p = (2\pi\hbar / L_m) \sqrt{2E / m_e}$ . У разі прикладання довільної напруги  $V$  між металевими електродами визначимо повний тунельний струм  $j$  через інтеграл від струму  $j(E)$  в області енергій шириною  $eV$ . Кількість електронів  $n_e$  з енергіями в інтервалі  $dE$  та перпендикулярною до площини бар'єра швидкістю дорівнює  $4dE / E$ . Множник 4 з'являється тому, що рівноважний внесок у тунельний струм роблять електронні стани з хвильовими векторами  $\vec{k}$  та  $-\vec{k}$ , а також з протилежно орієнтованими спінами. Таким чином, повний тунельний струм дорівнює

$$j = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-eV}^0 D(E) dE, \quad (2.1.22)$$

причому за початок відліку енергії взято рівень Фермі того електрода, з якого тунелюють електрони.

Відмітимо, що даний розрахунок проведено у рамках одновимірної моделі, яка досить добре відповідає реаль-

ним тривимірним електродам, які повністю однорідні за двома координатами. Отже, зрозуміло, що вираз (2.1.22) дає повний тунельний струм на одиницю площі тунельного проміжку, тобто фактично *густину тунельного струму*.

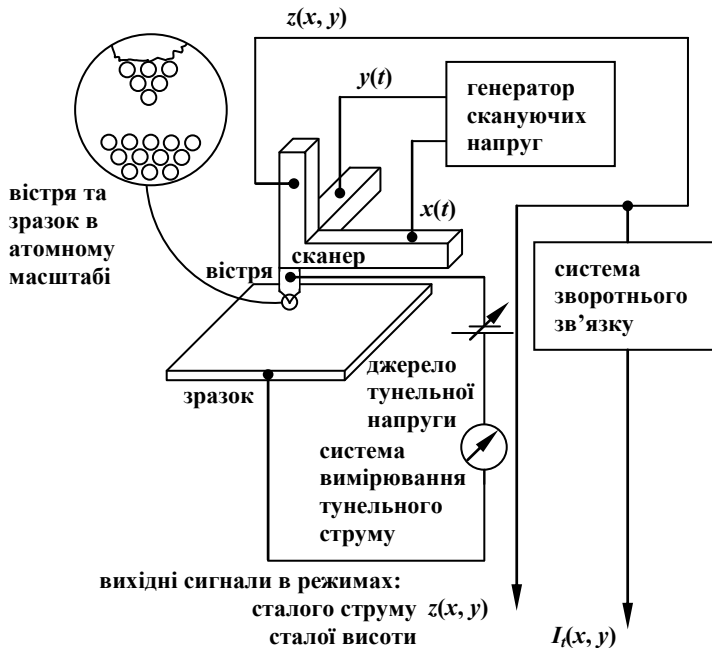
Таким чином, у даному розділі навчального посібника було обчислено густину тунельного струму між двома металевими електродами за умови прикладення між ними певної напруги. При цьому були використані дуже суттєві спрощення реальної фізичної задачі. А саме: розрахунки проводилися у рамках одновимірної моделі, а також використовувалось наближення вільних електронів у металі.

Насправді процес тунелювання значно складніший – задача (тобто конфігурація електродів та залежність потенціалу від координати) є тривимірною. Крім того, загалом кажучи, при розгляді процесів тунелювання у СТМ наближення вільних електронів слід замінити більш реалістичними уявленнями про енергетичну структуру твердого тіла (не тільки металу, але й напівпровідника, діелектрика, надпровідника). Ці питання будуть розглядатись у наступних розділах книги. Проте, відмітимо, що вже наведеного вище спрощеного опису процесу тунелювання достатньо для розуміння основних принципів, на яких засновано роботу СТМ.

## **2.2. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ РОБОТИ СТМ**

Розглянемо найважливіші елементи конструкції СТМ та аспекти постановки СТМ експериментів.

Як було зазначено вище (у розд. 2.1), тунелювання електронів відбувається між двома провідними електродами суттєво різної геометричної форми. Один з них має форму вістря з якомога меншим радіусом заокруглення. Цей електрод виконує функцію зонду, що забезпечує надзвичайно локальне проходження тунельного струму. Інший електрод є досліджуваним зразком достатньо плоскої геометрії, зображення поверхні якого необхідно отримати. Схематично постановку СТМ експерименту зображено на рис. 2.2.1.



**Рис. 2.2.1. Схематичне зображення основних складових частин СТМ.**

При детальному розгляді тунельного проміжку (області тунельного бар'єра) в атомному масштабі видно, що вістря (в ідеалі) є атомно гострим (тобто на кінчику вістря знаходиться лише один єдиний атом – див. рис. 2.2.1). Це означає, що в області атома, котрий знаходиться на вершині вістря, товщина тунельного бар'єра є найменшою. Згідно (2.1.14), прозорість бар'єра, а отже, згідно (2.1.22), і величина тунельного струму, спадають експоненціальним чином при збільшенні товщини тунельного бар'єра  $l = L$ . Таким чином, можна зробити висновок, що переважна частина тунельного струму буде протікати крізь найбільш виступаючий атом вістря.

Для кількісної оцінки цього ефекту знайдемо відношення

прозоростей двох прямокутних потенціальних бар'єрів<sup>1</sup>, товщини яких відрізняються на величину сталої кристалічної ґратки  $a$ , наприклад,  $a = 0,4$  нм. Отже, згідно (2.1.14), треба розрахувати відношення  $D_1 / D_2 = e^{-2\beta(l+a)} / e^{-2\beta l}$ . Як і раніше будемо вважати роботу виходу  $W = 5$  еВ, також припустимо, що електрони тунелюють з рівня Фермі. Тоді  $D_1 / D_2 = 6,4 \cdot 10^{-5}$ . Дана оцінка є звичайно дуже наближеною і може змінюватися залежно від форми бар'єра, але порядок отриманої величини переконливо свідчить про надзвичайно високу локалізацію тунельного струму між поверхнею зразка та вістрям СТМ. В ідеальному випадку площа локалізації визначається поперечним розміром лише одного атома.

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 вимірювану величину струму у систему зворотного зв'язку, де відбувається порівняння виміряної величини струму з певним, наперед заданим, значенням тунельного струму  $I_0$ . Відповідно до результатів цього порівняння система зворотного зв'язку генерує сигнал, який подається на пристрій прецизійного переміщення вістря, який називається *сканером*.

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 обкладок, 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  $z = z_0$  вістря фактично означає зміну товщини тунельного бар'єра  $l$ .

---

<sup>1</sup> Для спрощення будемо користуватись цією моделлю потенціального бар'єра.

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.

Зображення досліджуваної поверхні одержується у результаті процесу сканування вістря поверхні зразка. При цьому траєкторія вістря у латеральних координатах  $(x, y)$  формує растр заданої ділянки поверхні, послідовно скануючи лінію за лінією на кшталт руху електронного променя в електронно-променевої трубці. Типову залежність координат  $(x_\theta, y_\theta)$  вістря від часу впродовж сканування зображено на рис. 2.2.2.

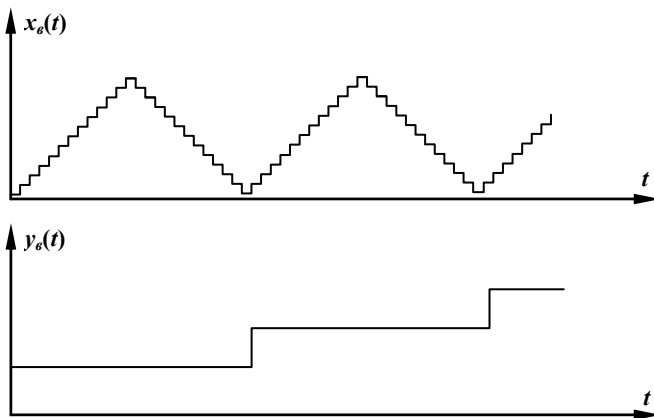


Рис. 2.2.2. Графічне зображення типової залежності координат вістря СТМ  $x_\theta, y_\theta$  від часу  $t$  при скануванні растру ділянки поверхні зразка.

Переміщення вістря вздовж координат  $x, y$  забезпечується відповідними п'єзоелементами, що керуються генератором скануючих напруг (див. рис. 2.2.1). Координата  $z_e$  вістря визначається системою зворотного зв'язку за вищенаведеним принципом. У наближенні лінійного п'єзоефекту координати вістря  $(x_e, y_e, z_e)$  є пропорційними до відповідних миттєвих значень напруг, прикладених до п'єзоелементів. У результаті, зафіксувавши траєкторію руху вістря  $z_e = z_e(x_e, y_e)$ , шляхом вимірювання напруг, прикладених до відповідних п'єзоелементів, можна одержати інформацію про топографію поверхні досліджуваного зразка.

Крім того, введемо функцію  $z = g(x, y)$ , що визначає геометрію вістря. Цю функцію будемо визначати таким чином, щоб вершина вістря завжди співпадала з точкою  $z = 0$  (див. рис. 2.2.3а).

З'ясуємо взаємозв'язок між топографією поверхні зразка та траєкторією вістря заданої геометрії, якщо СТМ працює у режимі сталого струму. Нехай вертикальна координата  $z_e$  поверхні вістря та висота  $z_n$  поверхні досліджуваного зразка є певними функціями латеральних координат: відповідно  $z_e(x_e, y_e)$  та  $z_n(x_n, y_n)$ , що схематично зображено

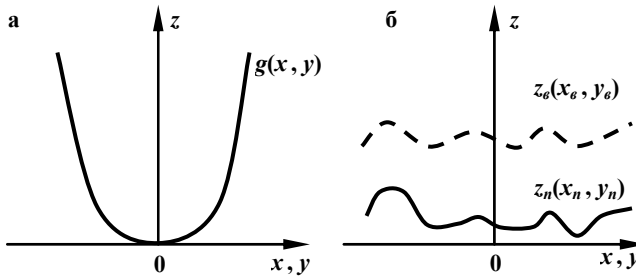


Рис. 2.2.3. Графічне зображення залежності вертикальної координати, що відображає геометрію вістря (а) та висоти поверхні досліджуваного зразка (б) від відповідних латеральних координат. Штрихова лінія в (б) є прикладом траєкторії реального вістря СТМ, який працює у режимі сталого струму.

на рис. 2.2.3. Під координатами вістря  $(x_\theta, y_\theta, z_\theta)$  розуміється положення його вершини (тобто тієї точки, що має координату  $z = 0$  на рис. 2.2.3а).

У рамках одновимірної моделі, описаної у попередньому підрозділі, тунельний струм буде визначатись інтегралом від густини струму (2.1.22) по всій площині тунельного контакту, причому товщина тунельного бар'єра (а, отже, і його прозорість) тепер є також функцією латеральних координат  $x, y$ :

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-eV}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} D(E, x, y) dE dx dy. \quad (2.2.1)$$

Встановлення зв'язку між  $z_\theta(x_\theta, y_\theta)$  та  $z_n(x_n, y_n)$  в аналітичному вигляді є можливим лише у найпростішому наближенні прямокутного тунельного бар'єра та при тунелюванні з енергетичного рівня поблизу від рівня Фермі (випадок малих тунельних напруг). У цьому випадку для  $D(E, x, y)$  використовується вираз (2.1.14), а інтеграл по енергіям у (2.2.1) можна замінити на множник, що залежить від напруги  $V$ , прикладеної до тунельного проміжку. Якщо вістря знаходиться у точці  $(x_\theta, y_\theta)$ , тунельний струм, що вимірюється у цій точці, можна записати наступним чином:

$$I(x_\theta, y_\theta) = \frac{eV}{\pi\hbar} \frac{16\alpha^2\beta^2}{(\alpha^2 + \beta^2)^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta[z_\theta(x_\theta, y_\theta) + g(x, y) - z_n(x_\theta + x, y_\theta + y)]} dx dy. \quad (2.2.2)$$

Позначимо сталу величину перед інтегралом у (2.2.2) через густину струму  $j_0$  та винесемо множник  $e^{-2\beta z_\theta(x_\theta, y_\theta)}$  за знак інтеграла:

$$I(x_\theta, y_\theta) = j_0 e^{-2\beta z_\theta(x_\theta, y_\theta)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta[g(x, y) - z_n(x_\theta + x, y_\theta + y)]} dx dy. \quad (2.2.3)$$



У режимі сталого струму система зворотного зв'язку підтримує величину  $I(x_g, y_g) = I_0 = \text{const}$ , отже одержуємо наступний вираз для траєкторії вістря:

$$z_g(x_g, y_g) = \frac{1}{2\beta} \ln \left[ \frac{j_0}{I_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta[g(x,y) - z_n(x_g+x, y_g+y)]} dx dy \right]. \quad (2.2.4)$$

З методичної точки зору цікаво розглянути нереалізований на практиці випадок ідеально гострого вістря, тобто такого вістря, форма якого описується дельта-функцією:  $g(x, y) = 1/\delta(x, y)$ . При підстановці такого виразу у (2.2.4) бачимо, що показник експоненціальної функції є малим лише у нескінченно малому околі точки  $x=0$ ,  $y=0$ , де функція  $g(x, y) = 0$ . В усіх інших точках площини  $x-y$   $g(x, y) \rightarrow \infty$  і показник експоненціальної функції також прямує до нескінченності із знаком мінус (за рахунок множника  $-2\beta$ ). У результаті інтеграл у (2.2.4) буде суттєво відмінним від нуля лише у нескінченно малому околі точки  $x=0$ ,  $y=0$ . Отже, операцію інтегрування у (2.2.4) можна замінити на обчислення підінтегрального виразу в точці  $x=y=0$ , який буде мати такий вигляд:  $S_0 e^{2\beta z_n(x_g, y_g)}$ , де  $S_0$  – деяка величина, що має розмірність площі. Таким чином,

$$z_g(x_g, y_g) = \frac{1}{2\beta} \ln \left[ \frac{I}{I_0} e^{2\beta z_n(x_g, y_g)} \right] = \frac{1}{2\beta} \ln \left( \frac{I}{I_0} \right) + z_n(x_g, y_g), \quad (2.2.5)$$

де  $I = j_0 S_0$ .

З наведеного аналізу видно, що у режимі сталого струму (хоча тут доречніше говорити про сталу густину струму) траєкторія ідеально гострого вістря у точності відтворює топографію поверхні, тобто вертикальні координати вістря та поверхні відрізняються лише на сталу величину  $(2\beta)^{-1} \ln(I/I_0)$ .

У реальності кожне вістря має певні скінченні розміри, отже, суттєвий внесок у тунельний струм буде робити певний окіл точки, в якому номінально знаходиться вершина

вістря. Зрозуміло, що наслідком цього буде певне згладжування контурів поверхні на одержуваному зображенні (як приклад – див. штрихову криву на рис. 2.2.3б).

Безпосередній вигляд траєкторії руху вістря можна розрахувати у кожному конкретному випадку за допомогою (2.2.4). Проте, якщо тунелювання відбувається не лише біля рівня Фермі, а у більш широкому діапазоні енергій – не можна замінювати у (2.2.1) інтегрування по енергіям помноженням на  $|eV|$ . У такій ситуації не можна винести множник  $e^{-2\beta z_\theta(x_\theta, y_\theta)}$  за знак інтеграла, а отже, неможливо одержати аналітичний вираз для  $z_\theta(x_\theta, y_\theta)$ .

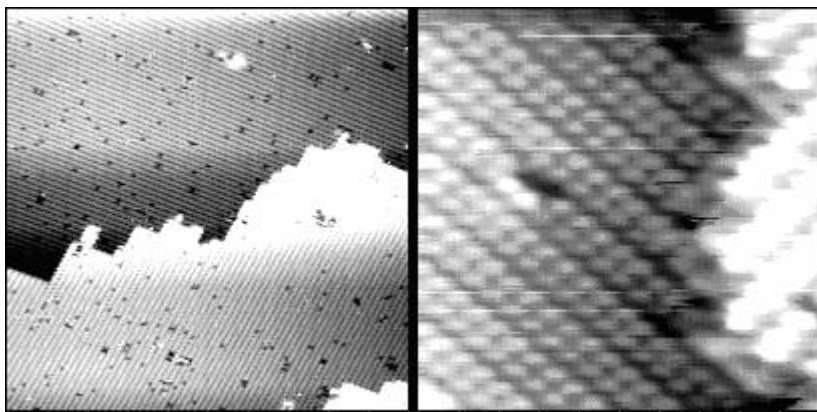
Таке ж сама проблема виникає при врахуванні реальної (не прямокутної) форми тунельного бар'єра – прозорість  $D$  тоді, згідно (2.1.16), є інтегралом, в якому вертикальна координата  $z_\theta(x_\theta, y_\theta)$  взагалі не фігурує, а лише певним чином впливає на вигляд кривої  $U(x)$  та на положення точок  $x_1$  та  $x_2$ . Отже, у загальному випадку, функцію  $z_\theta(x_\theta, y_\theta)$  можна визначити лише розв'язуючи рівняння (2.2.1) ітераційними числовими методами (за умови наявності моделі потенціальної кривої тунельного бар'єра).

Важливим питанням є питання про те, наскільки детальне зображення поверхні можна одержати у СТМ експерименті. У випадку, якщо на кінчику вістря розташований лише один атом, що виступає приблизно на одну сталу ґратки (як схематично зображено на рис. 2.2.1), можна очікувати чутливість такого вістря до атомарних неоднорідностей рельєфу поверхні. Прикладом таких неоднорідностей можуть бути сходинки, що розділяють атомно гладкі тераси на поверхні певного кристала, окремі атоми, що адсорбовані на таких терасах, або ж поверхневі вакансії кристалічної структури. Як було показано раніше, переважна частина тунельного струму локалізована у площі поперечного перерізу лише одного вершинного атома вістря, отже при проходженні останнього над такими неоднорідностями струм буде різко змінюватись – зростати або спадати. Система зворотного зв'язку буде компенсувати зміни тунель-

ного струму, і траєкторія вістря відтворюватиме контури неоднорідностей, що існують на поверхні зразка.

Як приклад розглянемо СТМ зображення однієї з найчастіше досліджуваних поверхонь монокристала кремнію, а саме – грані (001). Кремнієві пластини Si(001) надзвичайно широко використовуються у мікроелектроніці для виробництва різноманітних електронних пристроїв, отже їх дослідження має не тільки фундаментальне, але й важливе прикладне значення. На рис. 2.2.4 наведено два СТМ зображення різних ділянок цієї поверхні в атомарно чистому та кристалічно впорядкованому стані. Зображення утворені методом трансформації координати  $z_n$  кожної точки рельєфу поверхні у певний відтінок сірого кольору. При цьому більш наближені до читача ділянки поверхні відображаються більш світлими відтінками і, навпаки, більш віддалені – темнішими відтінками.

Ліворуч, на рис. 2.2.4, зображено ділянку поверхні Si(001) –  $2 \times 1$  розміром  $62 \times 62 \text{ нм}^2$ , через яку проходить мо-

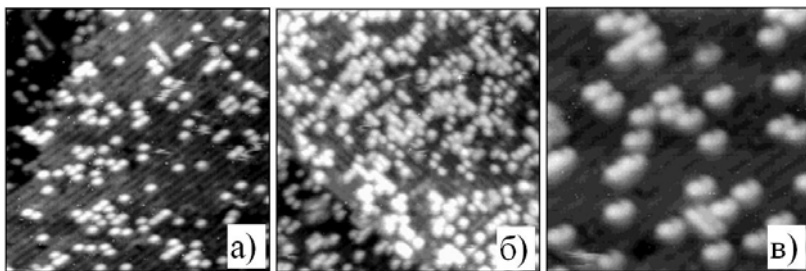


**Рис. 2.2.4.** СТМ зображення різних ділянок поверхні Si(001) –  $2 \times 1$ . Ліворуч: розмір області сканування поверхні зразка (розмір зображення)  $62 \times 62 \text{ нм}^2$ , тунельна напруга на зразку  $V = -1,5 \text{ В}$ , тунельний струм  $I = 56 \text{ пА}$ . Праворуч: розмір області сканування поверхні зразка  $8 \times 8 \text{ нм}^2$ , тунельна напруга на зразку  $V = 1,5 \text{ В}$ , тунельний струм  $I = 140 \text{ пА}$ .

ноатомна сходинка, що розділяє дві сусідні тераси (у правому нижньому куті цієї ділянки поверхні видно фрагменти ще однієї сходинки). Висота сходинки, тобто відстань між двома сусідніми атомними площинами в орієнтації Si(001) становить 0,136 нм. Тераси є атомно гладкими і мають, в основному, смугасту структуру. На фоні цієї структури проглядають чорні плями, які є дефектами, а саме – вакансіями у кристалічній структурі поверхні. Кристалічна структура поверхні також має безпосереднє відношення до смугастої структури терас, що видно на зображенні ділянки поверхні розміром  $8 \times 8 \text{ нм}^2$ , наведеному праворуч на рис. 2.2.4. На цьому зображенні чітко видно кожен окремий поверхневий атом кремнію, кожна смуга у поперечному напрямку містить два атоми кремнію. Атомні пари, з яких складаються смуги, називаються димерами, відповідно самі смуги – димерними рядами. Відстань між двома сусідніми димерними рядами складає 0,768 нм, а відстань між двома сусідніми димерами в одному ряду у два рази менша, тобто 0,384 нм.

Якщо подумки розсікти ідеальний монокристал кремнію на дві частини вздовж площини (001), то на будь-якій з утворених поверхонь атоми поверхневого шару утворюватимуть квадратну ґратку з періодом 0,384 нм. У той же час на реальній поверхні (див. рис. 2.2.4), одержаній тривалим прогрівом відшліфованого монокристала у надвисокому вакуумі, елементарна комірка має прямокутну форму, її розміри  $0,768 \times 0,384 \text{ нм}^2$ . Цей феномен називається *реконструкцією поверхні* і полягає у зміщенні атомів кількох приповерхневих шарів зі своїх положень в ідеальній тривимірній кристалічній ґратці.

У найпростішому випадку реконструкція позначається кратностями (у двох напрямках уздовж базисних векторів трансляції) періодичності поверхневої ґратки відносно до періодичності розташування атомів на даній кристалографічній площині в об'ємі ідеального монокристала. На прикладі поверхні кремнію, що розглядається, вона позначається як Si(001) –  $2 \times 1$ , оскільки періодичність перпендикулярна до димерних рядів вдвічі перевищує об'ємну, а



**Рис. 2.2.5.** СТМ зображення субмоношарових вісмутових покриттів на поверхні Si(001) – 2×1: а) розмір зображення 27×27 нм<sup>2</sup>, покриття вісмуту 0,06 МШ, тунельна напруга на зразку  $V = -1$  В, тунельний струм  $I = 96$  пА; б) розмір зображення 27×27 нм<sup>2</sup>, покриття вісмуту 0,15 МШ, тунельна напруга на зразку  $V = -1,3$  В, тунельний струм  $I = 96$  пА; в) розмір зображення 13,5×13,5 нм<sup>2</sup>, покриття вісмуту 0,06 МШ, тунельна напруга на зразку  $V = -1$  В, тунельний струм  $I = 96$  пА.

вздовж рядів співпадає з нею. Рушійною силою реконструкції є мінімізація вільної енергії поверхні твердого тіла, що детально обговорюється в курсах з фізики поверхні.

Далі розглянемо приклади адсорбату на поверхні Si(001), а саме субмоношарового покриття вісмуту (рис. 2.2.5), одержаного термічним випаровуванням вісмуту на поверхню Si(001) – 2×1 у надвисокому вакуумі.

При цьому за одиницю товщини покриття береться 1 *моношар* (1 МШ), що дорівнює кількості атомів матеріалу підкладки (у даному випадку кремнію) в одній атомній площині даної кристалографічної орієнтації на одиницю площі поверхні. У випадку Si(001) 1 МШ =  $6,8 \cdot 10^{14}$  атомів/см<sup>2</sup>.

На рис. 2.2.5а наведено СТМ зображення покриття Ві товщиною 0,06 МШ. На фоні структури димерних рядів, що розглядалася вище, видно яскраві світлі плями адсорбату. На рис. 2.2.5б зображено поверхню з більшим покриттям вісмутом (рівним 0,15 МШ), відповідно кількість світлих плям тут значно більша. Безпосередній підрахунок кількос-

ті плям на одиницю площі в обох випадках дає кількість вдвічі меншу, ніж кількість атомів, що відповідає кожному покриттю. Це приводить до висновку, що плями, які спостерігаються, є не окремими атомами Bi, а вісмутовими димерами на поверхні кремнію. Більш детальне зображення на рис. 2.2.5в остаточно підтверджує припущення про вісмутіві димери – на цьому зображенні у межах кожної плями-димера чітко розрізняються два атомні максимуми.

Приклади STM зображень, що наведені вище, переконують, що STM – це прилад, який може досягати атомної роздільної здатності. Це робить можливим спостереження атомної структури поверхні твердих тіл. Найпростіша модель тунельного струму, узагальнена рівнянням (2.2.1), породжує найпростішу інтерпретацію STM зображень, яку називатимемо топографічною. Згідно неї такі особливості поверхні як атомарні сходинки, адсорбовані на терасі атоми, поверхневі вакансії тощо стають помітними внаслідок дуже сильної залежності тунельного струму від товщини тунельного проміжку, а також надзвичайно високої латеральної локалізації тунельного струму. Факт спостереження атомарної структури кристалічної ґратки на атомарно гладкій терасі говорить про те, що у рамках цієї інтерпретації не можна уявляти ідеальну поверхню кристала як ідеально плоску стінку потенціальної ями. Натомість, ця стінка є рифленою з періодичністю поверхневої кристалічної ґратки: має випуклості у місцях розташування атомів поверхні та впадини між ними. Саме це дає можливість одержувати зображення типу наведеного на рис. 2.2.4.

Вище було наведено приклади визначних можливостей STM методики з виявлення деталей будови поверхні на атомарному рівні. Проте, постає питання, чи завжди ці можливості вдається реалізувати повністю. Наведемо лише два приклади, які демонструють, що це не так.

Розглянемо на рис. 2.2.6а STM зображення поверхні монокристала карбіду кремнію модифікації 4H-SiC(0001). Не вдаючись у деталі реконструкції поверхні, що у даному випадку є доволі складною і остаточно не вивченою задачею, відзначимо, що зображена ділянка містить три ато-

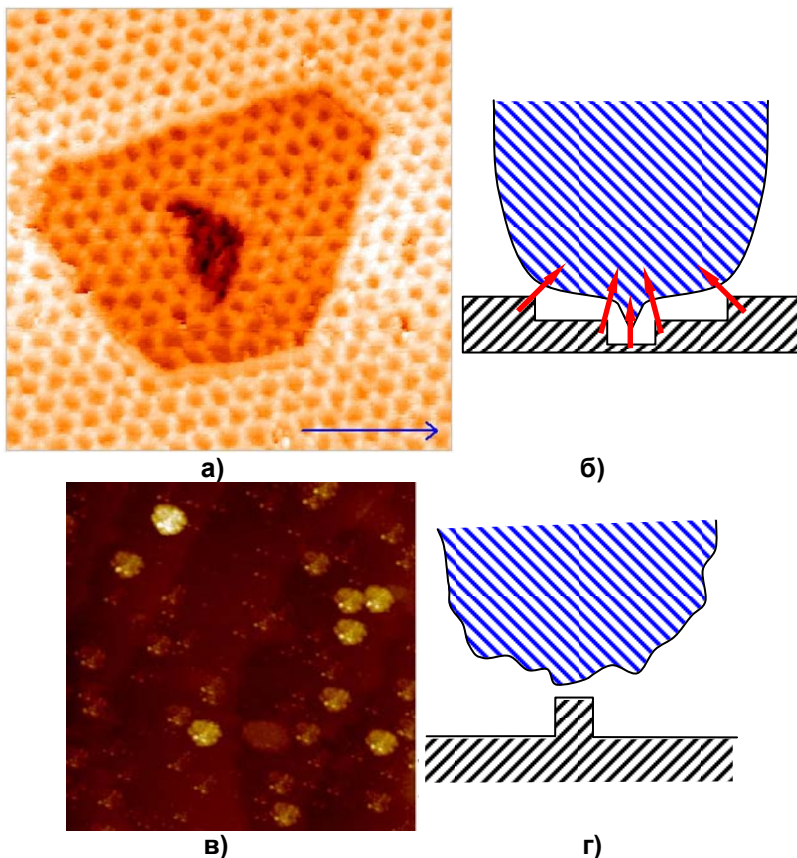


Рис. 2.2.6. Деякі приклади прояву неідеальності реальних СТМ експериментів: а) СТМ зображення атомарно чистої та впорядкованої поверхні 4H-SiC(0001). Стрілка у нижній частині зображення є маркером довжиною 10 нм; б) модель геометричних форм вістря та поверхні для випадку (а), що вказує на протікання тунельного струму (схематично вказано стрілками) між схилами вістря та елементами поверхні, котрі не відповідають положенню вершини вістря у латеральній площині; в) СТМ зображення з розмірами  $83 \times 83 \text{ нм}^2$  наночастинок золота на поверхні Ru(0001) з моноатомним покриттям нітридом бору, одержане за допомогою вістря низької аспекти; г) модель геометричних форм вістря та поверхні для випадку (в).

марно-гладкі тераси. Найглибше залягання має тераса у

центрі ділянки, яка, у свою чергу, оточена менш глибокою терасою. Нарешті найменш глибокою, а, отже, і «найближчою до читача» є тераса на периферії ділянки. Видно, що зображення атомарної структури є найбільш чітким на периферійній ділянці, значно менш чітким на ділянці наступній по глибині залягання, і нарешті зображення центральної найглибшої тераси є повністю відсутнім на фоні шумів. На рис. 2.2.6б схематично наведено модель поверхні зразка та вістря, що дає уявлення про причини погіршення зображення на внутрішніх терасах. Згідно цієї моделі вершина вістря не може достатньо проникнути у заглиблення рельєфу, оскільки значно раніше відбувається тунелювання між оточуючими більш високо розташованими елементами поверхні та частинами вістря на його бічних схилах. У результаті СТМ зображення є складною конволюцією геометричних форм вістря та поверхні (див. (2.2.4)) і не відображає атомарну структуру занадто заглиблених ділянок.

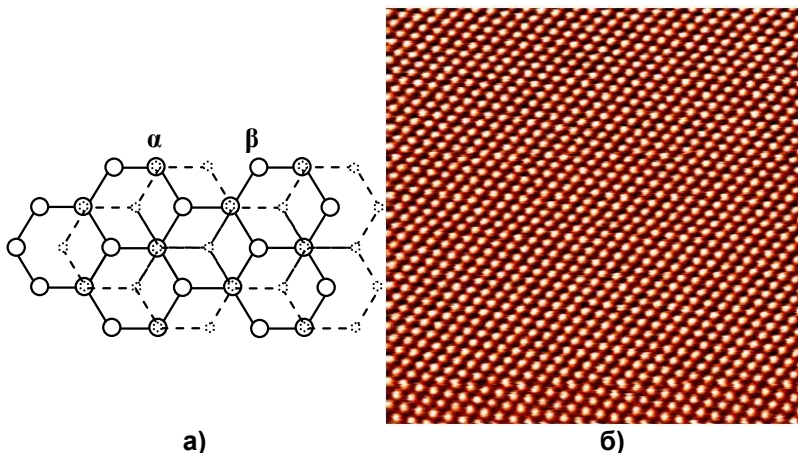
Вище наведений приклад є наочною демонстрацією існування такої важливої характеристики вістря як *аспектність*. По суті вона є певною характеристикою геометрії вістря у мезоскопічному масштабі. В принципі можна користуватись різними визначеннями аспектності, але всі вони так чи інакше будуть показувати наскільки заглиблені особливості поверхні можуть бути досліджені відповідним вістря. Найпростішим прикладом може бути кут розкриття у випадку конусоподібного вістря. З іншого боку, для особливо популярних останнім часом зондів у вигляді циліндричних вуглецевих нанотрубок під аспектністю слід розуміти відношення довжини нанотрубки до її діаметру.

Інший цікавий випадок зображено на рис. 2.2.6в, де продемонстровано дефект СТМ зображення наноострівців золота на поверхні монокристала Ru(0001). Перед нанесенням золота поверхня була покрита моноатомним шаром нітриду бору з метою усунення сильного металічного зв'язку між адсорбатом та підкладкою. Це призвело до термічно стимульованого підвищення рухливості атомів золота на поверхні і утворення нанорозмірних острівців діаметром близько 5 нм та висотою порядку 1 нм. На зобра-



женні (рис. 2.2.6в) спостерігається значна кількість золотих острівців, проте всі вони мають дуже подібну (хоча виражену в більшій або меншій мірі) геометричну форму. Це є нічим іншим як ефектом вістря недостатньої аспектності – остання є відношенням «довжини» вістря до його «діаметра» (більш точно – відношення відстані від вершини вістря до певного його поперечного перерізу та діаметра вістря у цьому перерізі). Ідеальне вістря з нескінченною аспектністю (див. (2.2.5)) передавало б точну форму зображуваних об'єктів. Проте реальне вістря скінченної аспектності не може достовірно передавати форму занадто виступаючих над площиною золотих острівців. У випадку, якщо острівці самі по собі мають вищу аспектність, ніж вістря (іншими словами є гострішими за вістря), то у результаті одержуємо зображення самого вістря, а не поверхні! Саме такий випадок і зображено на рис. 2.2.6в, що наочно демонструється схематичною моделлю, зображеною на рис. 2.2.6г.

На жаль проста топографічна інтерпретація СТМ даних спрацьовує не завжди. Для прикладу наведемо зображення поверхні монокристала графіту (рис. 2.2.7б). Як відомо, графіт складається з паралельних графенних площин, у межах яких атоми вуглецю розташовані у вершинах правильних шестикутників. У структурі графіту сусідні графенні площини зміщені одна відносно одної на вектор, що співпадає зі стороною такого шестикутника, причому кожна друга площина має ідентичне латеральне положення. Атоми виведеної на поверхню кристала площини не є еквівалентними між собою – вони можуть займати положення двох видів:  $\alpha$  (точно над вершиною елементарного шестикутника сусідньої графенної площини) та  $\beta$  (точно над центром шестикутника), що зображено на рис. 2.2.7а. Через відмінне найближче оточення кількість електронних станів (як вільних, так і зайнятих) відрізняється в околах  $\alpha$  та  $\beta$  положень. Внаслідок цього лише атоми вуглецю, які знаходяться у  $\beta$  положеннях, проявляються як максимуми яскравості на СТМ зображенні, в той час, як атоми у  $\alpha$  положеннях залишаються невидимими. Таким чином, СТМ



**Рис. 2.2.7.** Приклад прояву невідповідності кристалічної структури поверхні твердого тіла STM зображенню цієї поверхні: а) модель кристалічної структури графіту, де суцільними лініями позначені атоми та елементарні комірки першого (поверхневого), пунктирними – другого (приповерхневого) атомних шарів; б) STM зображення  $8 \times 8 \text{ нм}^2$  поверхні високо орієнтованого піролітичного графіту; напруга на зразку  $V = 0,04 \text{ В}$ , тунельний струм  $I = 4,5 \text{ нА}$ .

зображення поверхні графіту (див. рис. 2.2.7б) виглядає як виключно набір атомів у вузлах гексагональної ґратки, без будь-якого натяку на існування шестигранних кілець, в яких є зв'язаними атоми вуглецю.

Вище наведений приклад наочно демонструє, що при інтерпретації STM зображень не можна обмежуватися лише топографічними характеристиками досліджуваної поверхні – необхідно брати до уваги також і її локальні електронні властивості. Це здійснюється шляхом модифікації виразу для тунельного струму, так щоб останній враховував не тільки геометричну форму і взаємне положення поверхні та вістря, але і розподіл у них електронів за енергіями. Такий більш повний підхід буде продемонстровано у наступному підрозділі книги.

### 2.3. ЕФЕКТИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У СКАНУЮЧІЙ ТУНЕЛЬНІЙ МІКРОСКОПІЇ

У попередніх підрозділах використано вираз для тунельного струму між двома електродами, одержаний у наближенні плоских хвиль. Тобто, вважалось, що хвильові функції електронів по різні боки від тунельного бар'єра та в області самого бар'єра мають загальний вигляд  $\Psi(x) = Ae^{\pm i\kappa x}$ , де  $A$  та  $\kappa$  – деякі сталі величини. У дійсності ж хвильові функції електронів мають більш складний вигляд, хоча й можуть бути досить наближеними до плоских хвиль у випадку простих металів. Відповідно, слід знайти загальний вираз для тунельного струму між двома довільними електродами. У даному розділі для досягнення цієї мети буде використано добре відому в квантовій механіці теорію збурень.

Розглянемо задачу із повним гамільтоніаном  $\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_p$ , що складається з двох частин:  $\hat{H}_s$  – гамільтоніан, що описує електронні стани у твердому тілі, тобто у двох електродах, між якими тунелюють електрони,  $\hat{H}_p$  – потенціальна енергія збурення, внаслідок якої тунелювання стає можливим. За своєю суттю  $\hat{H}_p$  є потенціалом електричного поля, що виникає внаслідок прикладання напруги між електродами.

Будемо вважати, що електричний потенціал всередині кожного електрода залишається сталим і змінюється як певна функція координат у межах тунельного проміжку (наприклад, для двох плоских паралельних електродів ця залежність є, звичайно, лінійною). Для застосування теорії збурень буде зручно представити  $\hat{H}_p$  як три просторово розділені частини:  $\hat{H}_p = eV_i$  в об'ємі першого електрода з індексом  $i$  (звідки тунелюють електрони),  $\hat{H}_p = eV_f$  в об'ємі другого електрода з індексом  $f$  (куди тунелюють елек-

трони), та  $\hat{H}_p = -e\Phi(x, y, z)$  у просторі між електродами.  $V_i$  та  $V_f$  є сталими електричними потенціалами в середині електродів, а  $\Phi(x, y, z)$  – залежний від координат електричний потенціал у тунельному проміжку. Зрозуміло, що тунельна напруга  $V = V_f - V_i$ , а також, що значення функції  $\Phi(x, y, z)$  лежать в інтервалі  $[V_i, V_f]$ .

Хвильові функції незбуреної задачі позначатимемо через  $\Psi_{sE}$  – вони нумеруються двома індексами:  $s = \{i, f\}$  (позначає, до якого електрода належить електронний стан) та  $E$  (індексує електронні стани за енергією, яка, як відомо, є квазінеперервною у твердих тілах). Функції  $\Psi_{sE}$  є хвильовими функціями колективізованих електронів (тобто тих, що можуть перебувати в усьому об'ємі електродів), які задовольняють стаціонарному рівнянню Шредінгера з гамільтоніаном  $\hat{H}_s$ :  $\hat{H}_s \Psi_{sE} = E \Psi_{sE}$ . При цьому  $\hat{H}_s$  є звичайним гамільтоніаном з теорії твердого тіла – він містить квантово-механічний оператор кінетичної енергії електрона, потенціальну енергію електростатичної взаємодії з іонними остовами твердого тіла та усереднену квантово-механічну енергію взаємодії з усіма іншими колективізованими електронами. Зауважимо, що додавання двох частин, що належать до  $H_p$ , а саме  $eV_i$  та  $eV_f$ , до  $H_s$  у відповідних ділянках простору не змінить вигляду  $\Psi_{sE}$ . Така модифікація гамільтоніана означає лише зсув всіх енергетичних рівнів у певному електроді на одну й ту саму величину за шкалою енергій. Таким чином, будемо вважати гамільтоніаном незбуреної задачі  $\hat{H}_s + eV_j$ , де  $j = i$  у  $i$ -му електроді та  $j = f$  у  $f$ -му електроді, причому власними функціями цієї задачі є  $\Psi_{sE}$ . Фізично це відповідає ситуації, коли два електрода з різними потенціалами є нескінченно віддаленими один від одного, тобто електричне поле між ними дорівнює нулю, і тунелювання є неможливим.

Вище було розглянуто стаціонарну незбурену задачу,

проте обчислення тунельного струму необхідно проводити враховуючи кількість квантових переходів електронів зі станів  $i$  у стани  $f$  за одиницю часу. Це, у свою чергу, може бути зроблено шляхом визначення часової залежності відповідних хвильових функцій за наявності збурення, яким будемо вважати  $-e\Phi(x, y, z)$ . Як зазначалось на початку першого розділу, повна хвильова функція є добутком її просторової частини (котра є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера) та осцилюючого в часі експоненціального множника. Вона задовольняє нестаціонарному рівнянню Шредінгера. Таким чином, повні хвильові функції незбуреної задачі мають вигляд:  $\Psi_{sE}(t) = \Psi_{sE} \exp(-i E_i t / \hbar)$ .

Якщо збурення відсутнє, то хвильова функція електрона у певному початковому  $i$ -му стані тотожно дорівнює  $\Psi_{sE_i} \exp(-i E_i t / \hbar)$ . За наявності збурення (внаслідок якого стають можливими переходи між квантовими станами), хвильова функція цього електрона вже буде суперпозицією хвильових функцій даного початкового та усіх можливих кінцевих станів. У загальному випадку ця суперпозиція має вигляд:

$$\Psi = C_i(t) \Psi_{iE_i} \exp\left(-i \frac{E_i}{\hbar} t\right) + \sum_f C_f(t) \Psi_{fE_f} \exp\left(-i \frac{E_f}{\hbar} t\right). \quad (2.3.1)$$

Вагові множники  $C$  у (2.3.1) є невідомими величинами, які дозволять визначити величину тунельного струму, оскільки, наприклад,  $|C_f(t)|^2$  є імовірністю, що у момент часу  $t$  електрон буде знаходитися у кінцевому стані  $f$ . Повна хвильова функція  $\Psi$  задовольняє нестаціонарному рівнянню Шредінгера збуреної задачі:

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [\hat{H}_s + eV_j] \Psi - e\Phi(x, y, z) \Psi. \quad (2.3.2)$$

Підставляючи (2.3.1) у (2.3.2), одержимо рівняння для коефіцієнтів  $C$ :

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{\partial [C_i(t) \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t)]}{\partial t} + \\
& + i\hbar \frac{\partial [\Sigma_f C_f(t) \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t)]}{\partial t} = \\
& = [\hat{H}_s + eV_j] C_i(t) \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t) + \quad (2.3.3) \\
& + [\hat{H}_s + eV_j] \Sigma_f C_f(t) \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t) - \\
& - e\Phi(x, y, z) C_i(t) \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t) - \\
& - e\Phi(x, y, z) \Sigma_f C_f(t) \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t),
\end{aligned}$$

де введено позначення  $\omega_{i,f} = E_{i,f} / \hbar$ .

Розкриємо диференціювання за часом добутку функцій у лівій частині рівняння:

$$\begin{aligned}
& i\hbar C_i(t) \frac{\partial \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t)}{\partial t} + \\
& + i\hbar \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t) \frac{\partial C_i(t)}{\partial t} + \\
& + i\hbar \Sigma_f C_f(t) \frac{\partial \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t)}{\partial t} + \\
& + i\hbar \Sigma_f \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t) \frac{\partial C_f(t)}{\partial t} = \quad (2.3.4) \\
& = [\hat{H}_s + eV_j] C_i(t) \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t) + \\
& + [\hat{H}_s + eV_j] \Sigma_f C_f(t) \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t) - \\
& - e\Phi(x, y, z) C_i(t) \Psi_{iE_i} \exp(-i\omega_i t) - \\
& - e\Phi(x, y, z) \Sigma_f C_f(t) \Psi_{fE_f} \exp(-i\omega_f t).
\end{aligned}$$

Хвильові функції окремо початкового і окремо кінцевого станів є розв'язками незбуреного рівняння Шредінгера, і, враховуючи, що оператор  $\hat{H}_s + eV_j$  не залежить від часу,

можемо спростити вираз (2.3.4):

$$\begin{aligned}
 & i\hbar\Psi_{iE_i}\exp(-i\omega_i t)\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} + \\
 & + i\hbar\Sigma_f\Psi_{fE_f}\exp(-i\omega_f t)\frac{\partial C_f(t)}{\partial t} = \\
 & = -e\Phi(x,y,z)C_i(t)\Psi_{iE_i}\exp(-i\omega_i t) - \\
 & - e\Phi(x,y,z)\Sigma_f C_f(t)\Psi_{fE_f}\exp(-i\omega_f t).
 \end{aligned} \tag{2.3.5}$$

Помножимо (2.3.5) на одну з комплексно спряжених хвильових функцій кінцевого стану, позначимо її індексом  $ff$  та візьмемо інтеграл від отриманого виразу по всьому простору координат (межі інтегрування опускаємо):

$$\begin{aligned}
 & i\hbar\frac{\partial C_i(t)}{\partial t}\exp(-i\omega_{i,ff}t)\iiint\Psi_{ffE_{ff}}^*\Psi_{iE_i}dxdydz + \\
 & + i\hbar\Sigma_f\frac{\partial C_f(t)}{\partial t}\exp(-i\omega_{f,ff}t)\iiint\Psi_{ffE_{ff}}^*\Psi_{fE_f}dxdydz = \\
 & = C_i(t)\exp(-i\omega_{i,ff}t)\times \\
 & \times\iiint\Psi_{ffE_{ff}}^*[-e\Phi(x,y,z)]\Psi_{iE_i}dxdydz + \\
 & + \Sigma_f C_f(t)e\Phi(x,y,z)\exp(-i\omega_{f,ff}t)\times \\
 & \times\iiint\Psi_{ffE_{ff}}^*[-e\Phi(x,y,z)]\Psi_{fE_f}dxdydz
 \end{aligned} \tag{2.3.6}$$

де  $\omega_{i,ff} = (E_i - E_{ff})/\hbar$ ,  $\omega_{f,ff} = (E_f - E_{ff})/\hbar$ .

Враховуючи, що хвильові функції кінцевих станів формують ортонормовану систему, залишаємо у сумі в лівій частині (2.3.6) лише той доданок, в якому під інтегралом обидві функції мають індекс  $ff$ . Цей інтеграл дорівнює одиниці, всі ж інші інтеграли дорівнюють нулю.

У лівій частині рівняння залишається ще доданок зі згорткою хвильових функцій початкового і кінцевого станів. Відомо, що електронні хвильові функції у твердому тілі не «обриваються» різко на його поверхні, а натомість досить швидко спадають до нуля при віддаленні від неї. Таким чи-

ном, інтеграл згортки буде ненульовим, проте внаслідок малої амплітуди хвильових функцій за геометричною межею відповідного електрода, значно меншим за одиницю. Отже, можна знехтувати доданком, який містить інтеграл з хвильовими функціями початкового та кінцевого станів порівняно з тим, що містить тотожно рівний одиниці інтеграл від функцій одного й того ж кінцевого стану. В результаті запишемо рівняння зі спрощеною лівою частиною:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_{ff}(t)}{\partial t} = & C_i(t) \exp(-i\omega_{i,ff}t) \times \\ & \times \iiint \Psi_{ffE_{ff}}^* [-e\Phi(x, y, z)] \Psi_{iE_i} dx dy dz + \\ & + \Sigma_f C_f(t) \exp(-i\omega_{f,ff}t) \times \\ & \times \iiint \Psi_{ffE_{ff}}^* [-e\Phi(x, y, z)] \Psi_{fE_f} dx dy dz. \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

Для розв'язку одержаного диференціального рівняння відносно  $C_i(t)$  та  $C_f(t)$  скористаємось методом послідовних наближень, який полягає у тому, що похідні функцій, які невідомі, у певному наближенні визначаються самими функціями у попередньому наближенні.

Нехай збурення, тобто електричне поле між електродами, вмикається у момент часу  $t=0$ . Це означає, що при  $t \leq 0$  електрон знаходився у початковому стані  $i$ , тобто  $C_i(t)=1$ ,  $C_f(t)=0$ , для всіх  $f$ . При ввімкненні поля ( $t > 0$ ) існує лише мала ймовірність переходу (тунелювання) електрона у кінцевий стан. При цьому вже  $C_i(t) \neq 1$ ;  $C_f(t) \neq 0$ , проте у нульовому наближенні  $C_i^{(0)}(t)=1$ ;  $C_f^{(0)}(t)=0$ , що й підставляємо у праву частину рівняння для знаходження функцій вже першого наближення у лівій частині:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_{ff}(t)}{\partial t} = & \exp(-i\omega_{i,ff}t) \times \\ & \times \iiint \Psi_{ffE_{ff}}^* [-e\Phi(x, y, z)] \Psi_{iE_i} dx dy dz. \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Обчислимо інтеграл від даного диференціального рів-



няння за часом від 0 до  $\Delta t$ . Пам'ятаючи, що  $C_f(0)=0$  то-  
тожно у будь-якому наближенні для всіх  $f$ , одержуємо:

$$\begin{aligned} i\hbar C_{ff}(\Delta t) &= \int_0^{\Delta t} \exp(-i\omega_{i,ff}t) dt \times \\ &\times \iiint \Psi_{ffE_{ff}}^* [-e\Phi(x,y,z)] \Psi_{iE_i} dx dy dz = \\ &= i\omega_{i,ff}^{-1} [\exp(-i\omega_{i,ff}\Delta t) - 1] \times \\ &\times \iiint \Psi_{ffE_{ff}}^* [-e\Phi(x,y,z)] \Psi_{iE_i} dx dy dz. \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

Нарешті, вводячи позначення (не забуваючи, що інте-  
гування здійснюється у всьому просторі) матричного еле-  
мента тунелювання:

$$M_T = \iiint \Psi_{ffE_{ff}}^* [-e\Phi(x,y,z)] \Psi_{iE_i} dx dy dz, \quad (2.3.10)$$

одержуємо зручний вираз для коефіцієнта розкладу у су-  
перпозиції хвильових функцій:

$$C_{ff}(\Delta t) = \frac{1}{E_i - E_{ff}} \left[ \exp\left(-i\frac{E_i - E_{ff}}{\hbar}\Delta t\right) - 1 \right] M_T. \quad (2.3.11)$$

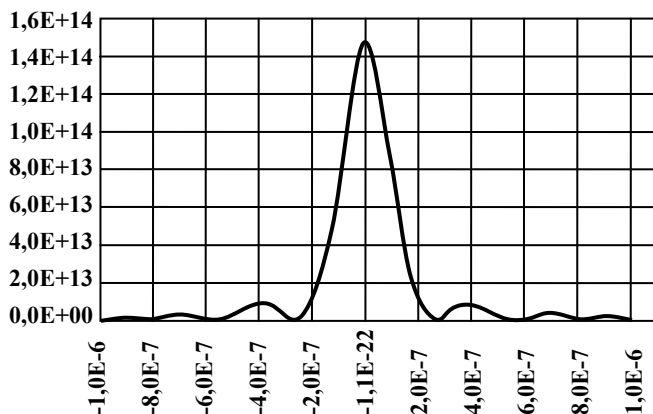
Як відомо, для випадку суперпозиції хвильових функцій  
ймовірність перебування частинки у стані, що описується  
однією з хвильових функцій розвинення, є квадрат модуля  
коефіцієнта біля цієї функції. Отже, імовірність того, що у  
момент часу  $\Delta t$  електрон перебуває у стані  $ff$  дорівнює:

$$\begin{aligned} |C_{ff}(\Delta t)|^2 &= (E_i - E_{ff})^{-2} [\exp(-i\omega_{i,ff}\Delta t) - 1] \times \\ &\times [\exp(i\omega_{i,ff}\Delta t) - 1] |M_T|^2 = \\ &= (E_i - E_{ff})^{-2} \left[ \exp\left(-i\omega_{i,ff}\frac{\Delta t}{2}\right) - \exp\left(i\omega_{i,ff}\frac{\Delta t}{2}\right) \right] \times \\ &\times \left[ \exp\left(i\omega_{i,ff}\frac{\Delta t}{2}\right) - \exp\left(-i\omega_{i,ff}\frac{\Delta t}{2}\right) \right] |M_T|^2 = \\ &= 4(E_i - E_{ff})^{-2} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[ \exp\left(i\omega_{i,ff} \frac{\Delta t}{2}\right) - \exp\left(-i\omega_{i,ff} \frac{\Delta t}{2}\right) \right] (2i)^{-1} \times \\
& \times \left[ \exp\left(i\omega_{i,ff} \frac{\Delta t}{2}\right) - \exp\left(-i\omega_{i,ff} \frac{\Delta t}{2}\right) \right] (2i)^{-1} |M_T|^2 = \quad (2.3.12) \\
& = 4(E_i - E_{ff})^{-2} \sin^2 \left\{ (E_i - E_{ff}) \frac{\Delta t}{2\hbar} \right\} |M_T|^2.
\end{aligned}$$

Функція  $(E_i - E_{ff})^{-2} \sin^2 \left\{ (E_i - E_{ff}) \Delta t / 2\hbar \right\}$  має осцилюючий характер і в той же час дуже швидко згасає зі збільшенням різниці між  $E_i$  та  $E_{ff}$  (рис. 2.3.1). Суттєво відмінними від нуля є значення цієї функції в межах головного максимуму, тобто в області аргументів синусу від  $-\pi$  до  $\pi$ . Щоб з'ясувати, якому інтервалу енергій це відповідає, слід спочатку визначити характерний час  $\Delta t$  даної задачі.

Як було описано у підрозділі 2.1, час між двома послідовними зіткненнями електрона з тунельним бар'єром буде



**Рис. 2.3.1.** Графік функції  $(E_i - E_{ff})^{-2} \sin^2 \left\{ (E_i - E_{ff}) \Delta t / 2\hbar \right\}$  від аргументу  $(E_i - E_{ff})$ , заданого в електрон-вольтах, для випадку  $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-8}$  с.

порядку  $2L(2E/m_e)^{-1/2}$ . Оскільки процес тунелювання розглядається як наслідок слабкого збурення, це означає, що електрону необхідно багато разів зіткнутися з бар'єром перш, ніж він протунелює крізь цей бар'єр. Таким чином, величина  $\Delta t = 2L(2E/m_e)^{-1/2}$  є досить непоганим характерним часом для визначення кількості переходів (тунелювань) за одиницю часу, виходячи з виразу для  $|C_{ff}(\Delta t)|^2$ .

Прийmemo як і раніше характерну кінетичну енергію електрона такою, що дорівнює  $K = E = 5$  еВ, та характерний лінійний розмір твердого тіла  $10^{-2}$  м. Тоді  $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-8}$  с і  $(E_i - E_{ff})\Delta t/2\hbar = \pm\pi$ , коли

$E_i - E_{ff} = \pm 2,75 \cdot 10^{-7}$  еВ. Більш довгі проміжки часу лише

звзять цей енергетичний інтервал. З вищенаведеного видно наскільки мало має відрізнятися  $E_i$  від  $E_{ff}$  (порівняно з характерними енергіями типового тунельного експерименту), щоб  $|C_{ff}(\Delta t)|^2$  помітно відрізнялось від нуля. Це гово-

рить про те, що функцію  $(E_i - E_{ff})^{-2} \sin^2\{(E_i - E_{ff})\Delta t/2\hbar\}$  можна з дуже високою точністю (звичайно, у рамках задачі, що розглядається) апроксимувати дельта функцією помножену на константу нормування. З вищої математики

відоме значення наступного інтеграла:  $\int_{-\infty}^{\infty} \zeta^{-2} \sin^2 \zeta d\zeta = \pi$ .

Покладаючи  $\zeta = (E_i - E_{ff})\Delta t/2\hbar$ , одержимо:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (E_i - E_{ff})^{-2} \sin^2\{(E_i - E_{ff})\Delta t/2\hbar\} d(E_i - E_{ff}) = \pi\Delta t/2\hbar.$$

Виходячи з властивостей дельта функції, це означає, що:

$$(E_i - E_{ff})^{-2} \sin^2 \left\{ (E_i - E_{ff}) \Delta t / 2\hbar \right\} = \pi \Delta t (2\hbar)^{-1} \delta(E_i - E_{ff}), \quad (2.3.13)$$

і отже:

$$|C_{ff}(\Delta t)|^2 = \frac{2\pi\Delta t}{\hbar} \delta(E_i - E_{ff}) |M_T|^2. \quad (2.3.14)$$

Нагадаємо ще раз, одержаний вираз (2.3.14) – це ймовірність перебування електрона у стані  $i$  до нульового моменту часу, у момент часу  $\Delta t$  електрон перейде (протунелює) у стан  $ff$ . Оскільки ця ймовірність лінійно залежить від часу дії збурення  $\Delta t$ , можна говорити про ймовірність переходу між початковим та кінцевим станами (по різні сторони тунельного бар'єра, якщо електрон тунелює зліва праворуч, то відповідно позначатимемо початковий та кінцеві стани індексами  $l$  та  $r$ ), яка дорівнює за одиницю часу:

$$dP_{lr} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_T|^2 \delta(E_l - E_r). \quad (2.3.15)$$

Через квантово-механічне співвідношення невизначеностей  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$  електрон, що тунелює протягом скінченного інтервалу часу, може потрапити не в один конкретний кінцевий стан, а у цілий інтервал кінцевих станів у певному енергетичному околі навколо  $E_r$ . Вважаємо, що електрон зі стану  $l$  незалежно робить спроби протунелювати в усі можливі кінцеві стани (тобто незайняті стани, що дають ненульовий вираз  $dP_{lr}$ ). Тоді сумарну ймовірність тунелювання отримаємо простим додаванням ймовірностей такого процесу для кожного конкретного кінцевого стану. Якщо спектр електронних станів є неперервним (а у твердих тілах він є квазінеперервним), то операцію додавання можна замінити на інтегуванням за всіма кінцевими станами  $\zeta_r$ :

$$dP_{lr} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{\zeta_r} |M_T|^2 \delta(E_l - E_r) d\zeta_r. \quad (2.3.16)$$

При цьому, завдяки наявності дельта-функції у (2.3.16), межі інтегування можна покласти нескінченними. В пода-

льшому буде зручно подати кількість кінцевих станів  $\zeta_r$  через густину електронних станів (на одиничний інтервал енергії та в одиничному об'ємі) у правому електроді  $\rho_r(E)$  помножену на диференціал енергії  $dE$ . Тоді:

$$dP_{lr} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} |M_T|^2 \delta(E_l - E) \rho_r(E) dE = \frac{2\pi}{\hbar} |M_T|^2 \rho_r(E_l). \quad (2.3.17)$$

При обчисленні тунельного струму слід врахувати, що тунелювання можливе лише у незайняті стани, густина яких визначається густиною всіх наявних станів, помноженою на ймовірність того, що вони не заповнені (функція розподілу Фермі – Дірака  $f_F(E)$ , що віднімається від одиниці). Таким чином тунельний струм, що походить виключно із початкового стану  $E_l$ , дорівнює:

$$dI_l = \frac{2\pi e}{\hbar} |M_T|^2 \rho_r(E_l) \{1 - f_F(E_l)\}. \quad (2.3.18)$$

Для обчислення повного тунельного струму слід просувати внески від усіх початкових станів. Знову ж, їх кількість зручно подати через густину  $\rho_l(E)$ , помножену на функцію розподілу Фермі – Дірака  $f_F(E)$ , що дасть саме кількість тунелюючих електронів. Як і раніше, через квазі-неперервність енергетичного спектра у твердих тілах, додавання по початковим станам замінюється інтегруванням, у результаті чого одержимо вираз для тунельного струму між двома електродомі при скінченній напрузі  $V$  між ними:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_l(E) f |M_T|^2 \rho_r(E) \{1 - f_F(E)\} dE. \quad (2.3.19)$$

Функція розподілу Фермі має наступну залежність від енергії  $E$ :

$$f_{Flr}(E) = \frac{1}{\left[ 1 + \exp\left( \frac{E}{k_B T} - \frac{E_{Flr}}{k_B T} \right) \right]}, \quad (2.3.20)$$

де  $T$  – температура електронного газу,  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К

– стала Больцмана,  $E_{Flr}$  – енергія Фермі в електроді  $l$  або  $r$ .

Будемо, для визначеності, вважати, що позитивна напруга  $V$  прикладена до правого електрода, тоді електронні гази в обох електродах вже не є рівноважними відносно один до одного. Це означає, що рівень енергії Фермі у правому електроді розташований на величину  $eV$  нижче, ніж у лівому електроді (див. наприклад енергетичні діаграми на рис. 2.1.4а,г).

Інтегрування у (2.3.19) слід здійснювати від дна найвищої енергетичної зони, котра лише частково заповнена електронами, і до рівня вакууму (обидва відносяться до лівого електрода), таким чином охоплюються усі стани, з яких можуть тунелювати електрони за ненульової температури. Дно зони, частково заповненої електронами, є початком відліку енергії як аргументу густини електронних станів та функції розподілу Фермі – Дірака як у лівому, так і в правому електродах. Числове інтегрування здійснюється від 0 до величини роботи виходу лівого електрода  $E_{Fl} + W_l$ , при цьому слід врахувати, що через прикладену напругу та можливу різницю енергій Фермі, дно енергетичної зони правого електрода розташоване нижче на величину  $eV - E_{Fl} + E_{Fr}$ , ніж у лівому електроді:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_0^{E_{Fl} + W_l} \rho_l(E) f_l(E) |M_T|^2 \rho_r(E + eV - E_{Fl} + E_{Fr}) \times \\ \times \{1 - f_{Fr}(E + eV - E_{Fl} + E_{Fr})\} dE. \quad (2.3.21)$$

Це і є остаточний вираз для тунельного струму за ненульової температури та скінченній напрузі  $V$ , прикладеній між двома електродами, розділеними тунельним бар'єром.

Зрозуміло, що прийняте вище позначення електродів (лівий і правий, або  $l$  та  $r$ ) є лише геометричною умовністю. Фізичне значення має те, що індексом  $l$  позначається електрод, з якого тунелюють електрони, тобто до якого під'єднано негативний полюс джерела напруги. Використо-

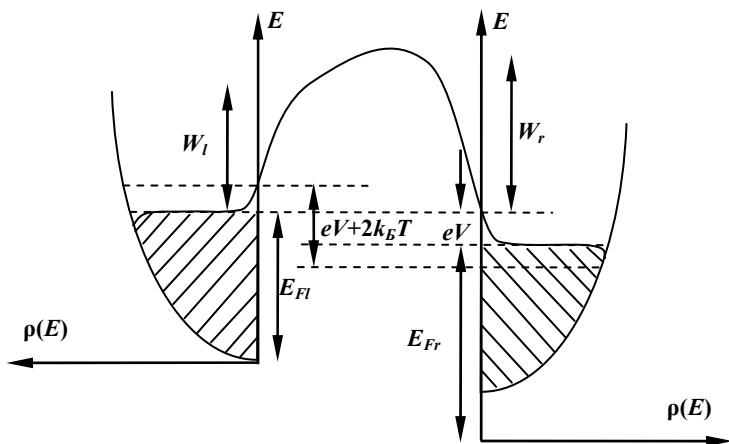
вуючи це позначення, перепишемо ще раз вираз для матричного елемента:

$$M_T = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{rE_r}^* [-e\Phi(x, y, z)] \Psi_{lE_l} dx dy dz . \quad (2.3.22)$$

Тут індексація хвильової функції кінцевого стану здійснюється за тим же правилом, що і у виразі для тунельного струму (2.1.22), а саме: якщо  $E_l = E$ , то  $E_r = E + eV - E_{Fl} + E_{Fr}$ . Це відображає той факт, що енергія у кожному конкретному електроді відраховується від дна енергетичної зони, частково заповненої електронами, а, отже, і хвильові функції (які у даному випадку нумеруються за значенням енергії) також відраховуються від дна зони електрода, якому вони належать. У той же час тунелювання можливе лише між електронними станами з однаковою енергією на якійсь єдиній для обох електродів енергетичній шкалі (ізоенергетичний процес) – це і приводить до вищезгаданого правила індексації хвильових функцій, що входять до матричного елемента тунелювання.

Розглянемо, наприклад, тунельний бар'єр, який за нульової напруги між електродами зображено на рис. 2.1.4б. Згідно з прийнятою домовленістю, тунелювання відбувається зліва праворуч, отже зобразимо даний бар'єр у випадку прикладання негативної напруги  $V$  між лівим та правим електродами (рис. 2.3.2).

Для кімнатних температур, за яких проводиться типовий СТМ експеримент, функція розподілу Фермі – Дірака не сильно відрізняється від сходинкової функції. Тому основний внесок у тунельний струм будуть давати електронні стани в інтервалі шириною  $eV$  між рівнями Фермі обох електродів та окіл  $\pm k_B T$  навколо зазначеного інтервалу – позначений як  $eV + 2k_B T$  на рис. 2.3.2 ( $k_B T$  – характерне енергетичне розмиття межі між зайнятими та вільними станами за температури  $T$ ). Для одержання досить точного виразу для тунельного струму інтегрування по енергії слід проводити у зазначеному інтервалі енергій  $eV + 2k_B T$  – від



**Рис. 2.3.2.** Схематичне зображення енергетичної діаграми тунельного бар'єра між двома металевими електродами за ненульової температури  $T$  та прикладеної напруги  $V$ .  $E_{Fl}$  та  $W_l$  – енергія Фермі та робота виходу лівого ( $l$ ) електрода,  $E_{Fr}$  та  $W_r$  – енергія Фермі та робота виходу правого ( $r$ ) електрода.

$eV - k_B T$  до  $eV + k_B T$ . Проте у більшості випадків температурні ефекти розподілу Фермі – Дірака настільки малі, що енергетичний зсув  $\pm k_B T$  не відіграє суттєвої ролі. У цьому разі інтегрування здійснюється виключно по інтервалу енергій  $eV$  між рівнями Фермі, величина якого визначається прикладеною напругою.

Відзначимо, що самі функції розподілу Фермі – Дірака «випадають» із виразу для тунельного струму, а густини станів є функціями енергій з початком відліку на рівнях Фермі відповідних електродів. Тоді (2.3.21) перетворюється на (2.3.23) – саме цей вираз досить часто можна зустріти в літературі, присвяченій СТМ:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_{-eV}^0 \rho_l(E) |M_T|^2 \rho_r(E + eV) dE. \quad (2.3.23)$$

При цьому у виразі для матричного елемента (2.3.22)



хвильові функції кожного електрода також тепер нумеруються за енергією з початком відліку на рівні Фермі відповідного електрода. Це має перевагу в наочності – позитивні енергії відповідають вільним станам, а негативні – зайнятим:

$$M_T = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{rE+eV}^* [-e\Phi(x, y, z)] \Psi_{lE} dx dy dz. \quad (2.3.24)$$

Вирази (2.3.21) та (2.3.22), а за достатньо низьких температур і (2.3.23) та (2.3.24), є основою для повної квантово-механічної інтерпретації СТМ зображень за умови достатньої слабкості взаємодії вістря та зразка – такої взаємодії, що не змінює хвильових функцій електронних станів електродів. У разі ж, якщо через близькість вістря та зразка в області контакту хвильові функції електродів та рівноважні атомні координати змінюються, теорію збурень, очевидно, застосовувати неможна, а слід використовувати більш повний квантово-механічний підхід, який буде обговорено у наступних розділах книги.

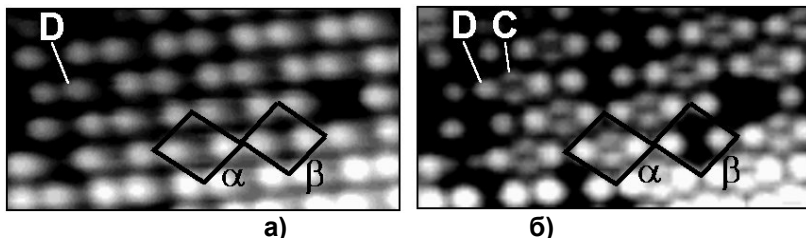
Вираз для матричного елемента (2.3.22) є ключем для розуміння роздільної здатності СТМ на атомному рівні. Справді, ненульові значення тунельного струму (2.3.21) можуть одержуватись лише за ненульових значень (2.3.22), що, у свою чергу, досягається геометричним перекриттям електронних хвильових функцій обох електродів (вістря та зразка) – тобто наявністю ненульових значень цих функцій в одних і тих самих областях простору.

Як відомо, в твердому тілі хвильові функції в основному сконцентровані в його об'ємі і експоненціальним чином спадають при виході за його геометричну межу. Якщо один з електродів (зразок) має плоску поверхню, а інший (вістря) має сильно загострену форму з єдиним атомом на вершині, то суттєвий вклад у (2.3.22) буде робити лише область простору між вершинним атомом вістря та атомами поверхні зразка, розташованими безпосередньо під ним. При цьому помітний тунельний струм буде протікати між вістрям та зразком лише у разі дуже малих відстаней між ними – порядку міжатомних відстаней у твердих тілах. Якщо

електроди зміщуються один відносно одного у площині  $XY$ , тобто у площині поверхні зразка (сканування), то значення матричного елемента (2.3.22) і відповідно тунельного струму (2.3.21) будуть змінюватись як функції координат  $x, y$ . Це є наслідком модуляції значень хвильових функцій у твердому тілі з періодичністю кристалічної ґратки.

При роботі у режимі сталого струму вістря мусить бути розташованим на різній висоті по осі  $z$  у різних місцях елементарної комірки кристалічної структури поверхні зразка, що і буде давати атомний контраст на зображенні.

Відзначимо також іншу цікаву особливість виразу для тунельного струму (2.3.22), який містить густини початкових та кінцевих станів  $\rho_l(E)$  та  $\rho_r(E)$ . За змістом введення останніх формул (2.3.17), (2.3.19) це є густини станів, які беруть участь у тунелюванні, тому фактично у даній конкретній ситуації вони є дуже локальними характеристиками вістря (безпосередньо на його вершині) та зразка (у безпосередній близькості від вершини вістря). Оскільки густина станів вістря є незмінною в експерименті, то це означає, що контраст на СТМ зображенні пов'язаний не тільки з геометрією розташування атомів зразка, але також і з розподілом густини електронних станів у площині його поверхні. Це призводить до відсутності прямої відповідності між СТМ зображенням та реальною атомною структурою поверхні. Як приклад ефектів електронних станів розглянемо СТМ зображення поверхні  $\text{Si}(001)\text{-c}(4\times4)$ . Дана поверхня реконструйована так, що її період у двох ортогональних напрямках у 4 рази більший, ніж на ідеальній об'ємно термінованій грані  $\text{Si}(001)$ . На рис. 2.3.3 подано два зображення однієї ділянки поверхні, одержані при тунельній напрузі на зразку 1,0 В (ліворуч) та 1,5 В (праворуч). За напруги 1,0 В спостерігаються лише поверхневі атоми, умовно позначені через D на рис. 2.3.3а. Товстою чорною лінією на рисунку окреслено дві елементарні комірки, умовно позначені  $\alpha$  та  $\beta$ , причому у кожній елементарній комірці міститься два атома типу D. За напруги 1,5 В на СТМ зображенні



**Рис. 2.3.3. СТМ зображення однієї ділянки поверхні Si(001) – c(4×4) розміром  $7,1 \times 3,4 \text{ нм}^2$  при різних напругах  $V$ : а)  $V = 1,0 \text{ В}$ ; б)  $V = 1,5 \text{ В}$ .**

з'являються додаткові атоми, позначені через С на рис. 2.3.3б. Останні завжди присутні у кількості одна пара на елементарну комірку типу  $\alpha$ , у той час як в елементарних комірках типу  $\beta$  вони зовсім відсутні. З цього випливає, що на атомах типу С дуже мала (практично відсутня) густина вільних станів у межах 1 еВ біля рівня Фермі, проте вона стає помітною у діапазоні енергій від 1 еВ до 1,5 еВ. Даний приклад наочно демонструє, що висновки щодо атомної структури поверхневого шару зразка можна робити лише на основі повного набору СТМ зображень, одержаних за різноманітних напруг на зразку (як позитивних, так і негативних). Детальніше це питання буде розглядатися далі у розділі, присвяченому скануючій тунельній спектроскопії.

## Література

1. Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E. Surface studies by scanning tunneling microscopy // Physical Review Letters. – 1982. – Vol. 49, № 1. – P. 57-61.
2. Binnig G., Rohrer H. Scanning tunneling microscopy – from birth to adolescence // Reviews of Modern Physics. – 1987. – Vol. 59, № 3. – P. 615-625.
3. Бинниг Г., Рорер Г. Сканирующая тунельная микроскопия – от рождения к юности // Успехи физических наук. – 1988. – Т. 154, № 2. – С. 261-278.
4. Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E.  $7 \times 7$

reconstruction on Si (111) resolved in real space //  
Physical Review Letters. – 1983. – Vol. 50, № 2. – P. 120-  
123.

## Розділ 3.

### Типові задачі та запитання

---

**Задача 3.1.** Знайти релятивістський вираз для довжини хвилі де Бройля електрона  $\lambda_e$  та протона  $\lambda_p$ , що пройшли різницю потенціалів  $V$ .

**Розв'язок.** Кінетична енергія, яку набуває частинка із зарядом  $q$  при проходженні різниці потенціалів  $V$  дорівнює:

$$K = qV. \quad (3.1.1)$$

Зв'язок між кінетичною енергією та імпульсом релятивістської частинки визначається формулою

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{K(K + 2m_0c^2)}, \text{ звідки, беручи до уваги (3.1.1), знахо-}$$

димо вираз для імпульсу  $p$  частинки:

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{qV(qV + 2m_0c^2)} = \sqrt{2m_0qV} \sqrt{1 + \frac{qV}{2m_0c^2}}, \quad (3.1.2)$$

де  $m_0$  – нерелятивістська маса частинки,  $c$  – швидкість світла у вакуумі.

Вираз для довжини хвилі де Бройля частинки має вигляд:

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0qV} \left(1 + \frac{qV}{2m_0c^2}\right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.1.3)$$

Другий множник у цій формулі визначає релятивістську поправку до довжини хвилі де Бройля. Якщо виконується умова  $qV \ll m_0c^2$ , формула (3.1.3) спрощується:

$$\lambda_B \approx \frac{h}{\sqrt{2m_0qV} \left(1 - \frac{qV}{4m_0c^2}\right)}. \quad (3.1.4)$$

Для електронів умова  $qV \ll m_0c^2$  виконується при

$V \leq 100$  кВ, а для протонів – при  $V \leq 200$  МВ.

Виразивши різницю потенціалів  $V$  у вольтах, отримаємо наступні значення для  $\lambda_B$ :

$$\begin{aligned}\lambda_e &= \sqrt{\frac{1,5}{V}} \left(1 + 0,978 \cdot 10^{-6} \cdot V\right)^{-\frac{1}{2}}, \\ \lambda_p &= 10^{-2} \sqrt{\frac{8,2}{V}} \left(1 + 0,533 \cdot 10^{-9} \cdot V\right)^{-\frac{1}{2}},\end{aligned}\quad (3.1.5)$$

де довжини хвиль вимірюються у нанометрах.

**Задача 3.2.** Вивести формулу Вульфа-Брегга (1.1.11) з урахуванням заломлення електронних хвиль у кристалі та знайти з її допомогою внутрішній потенціал  $V_{вн}$  монокристала срібла, якщо пучок електронів, прискорених різницею потенціалів  $V = 85$  В, утворює максимум другого порядку при дзеркальному відбиванні від кристалічних площин з  $d = 204$  пм під ковзним кутом  $\theta = 30^\circ$  (рис. 3.2.1).

**Розв'язок.** Формула Вульфа-Брегга без урахування заломлення електронного пучка в кристалі має вигляд:

$$2d \sin \theta = n\lambda_B, \quad (3.2.1)$$

де  $\lambda_B$  – довжина хвилі де Бройля електронів;  $n = 1, 2, \dots$

Показник заломлення  $\eta$  для пучка електронів у кристалі визначається як:

$$\eta = \sqrt{1 + \frac{V_{вн}}{V}}, \quad (3.2.2)$$

де  $V_{вн}$  – внутрішній потенціал кристала. Для того, щоб виконувалась умова максимуму при інтерференції відбитого та заломленого пучка електронів (промені 1 та 2 на рис. 3.2.1), необхідно, щоб різниця ходу між ними складала ціле число дов-

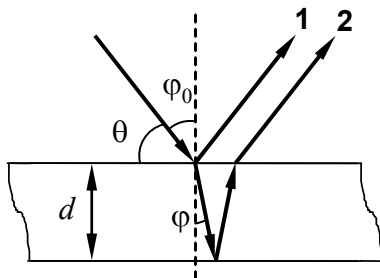


Рис. 3.2.1. Заломлення електронного пучка у кристалі.

жин хвиль де Бройля:

$$2d\eta \cos \varphi = n\lambda_B, \quad (3.2.3)$$

де  $d$  – відстань між кристалічними площинами. Враховуючи закон заломлення хвиль, з якого випливає

$$\cos \varphi = \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = \frac{1}{\eta} \sqrt{\eta^2 - \sin^2 \varphi_0},$$

вираз (3.2.3) перепишемо у вигляді:

$$2d\sqrt{\eta^2 - \sin^2 \varphi_0} = n\lambda_B. \quad (3.2.4)$$

Якщо замість кута падіння  $\varphi_0$  ввести ковзний кут

$$\theta = \frac{\pi}{2} - \varphi_0, \text{ одержимо остаточну формулу:}$$

$$2d\sqrt{\eta^2 - \cos^2 \theta} = n\lambda_B. \quad (3.2.5)$$

При  $\eta = 1$  вона перетворюється на умову (3.2.1).

Запишемо вираз для довжини хвилі де Бройля нерелятивістських електронів:

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \quad (3.2.6)$$

і підставимо його та вираз для показника заломлення (3.2.2) у формулу (3.2.5):

$$2d\sqrt{1 + \frac{V_{\text{вн}}}{V} - \cos^2 \theta} = n \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}}.$$

З одержаного рівняння можна визначити внутрішній потенціал кристала:

$$V_{\text{вн}} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2d^2 e m_e} - V \sin^2 \theta. \quad (3.2.7)$$

Підставивши значення з умови задачі, отримаємо для внутрішнього потенціалу монокристала срібла:

$$V_{\text{вн}} = \frac{2\pi^2 (1,0546)^2 \cdot 10^{-68}}{204^2 \cdot 10^{-24} \cdot 0,911 \cdot 10^{-30} \cdot 1,602 \cdot 10^{-19}} - 85 \cdot \frac{1}{4} = 14,75 \text{ В.}$$

**Задача 3.3.** Оцінити радіуси атома  $r_a$  та ядра атома  $r_\pi$ , вважаючи, що швидкості електронів і нуклонів, що знаходяться в найнижчому енергетичному стані, визначаються енергією зв'язку  $\Delta E$ . При розрахунках вважати, що енергія зв'язку електрона в атомі  $\Delta E_e \sim 10$  еВ, енергія зв'язку нуклона в ядрі  $\Delta E_n \sim 8$  МеВ.

**Розв'язок.** Електрон в атомі та нейтрон в ядрі знаходяться в зв'язаному стані, отже їх кінетичні енергії  $E_{Ke}$  та  $E_{Kn}$  повинні бути меншими за енергії зв'язку  $\Delta E_e$  та  $\Delta E_n$ , які, в свою чергу, значно менші за енергії спокою цих частинок. Тому можна вважати, що рух електрона в атомі та нуклона в ядрі описується законам нерелятивістської механіки. Враховуючи це, покладемо

$$E_{Ke} = \frac{m_e v_e^2}{2} \sim \Delta E_e, \quad E_{Kn} = \frac{m_n v_n^2}{2} \sim \Delta E_n, \quad (3.3.1)$$

де  $v_e \sim \sqrt{\frac{2\Delta E_e}{m_e}}$  та  $v_n \sim \sqrt{\frac{2\Delta E_n}{m_n}}$  – відповідно, швидкості електрона та нуклона.

Застосуємо тепер співвідношення невизначеностей (1.2.2), вважаючи, що невизначеність координати для електрона дорівнює  $r_a$ , а для нуклона –  $r_\pi$ :

$$\Delta p_e r_a \sim \hbar, \quad \Delta p_n r_\pi \sim \hbar. \quad (3.3.2)$$

Оскільки за умовою задачі електрон та нуклон знаходяться в найнижчому енергетичному стані, зручно скористатись наближенням:

$$\Delta p_e \sim p_e = m_e v_e, \quad \Delta p_n \sim p_n = m_n v_n. \quad (3.3.3)$$

З урахуванням (3.3.1)–(3.3.3) зробимо оцінки для радіусів атома  $r_a$  та ядра атома  $r_\pi$ :

$$r_a \sim \frac{\hbar}{\Delta p_e} \sim \frac{\hbar}{m_e v_e} \sim \frac{\hbar}{m_e \sqrt{2\Delta E_e}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e \Delta E_e}},$$

$$r_\pi \sim \frac{\hbar}{\Delta p_n} \sim \frac{\hbar}{m_n v_n} \sim \frac{\hbar}{m_n \sqrt{2\Delta E_n}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_n \Delta E_n}}. \quad (3.3.4)$$



Підставляючи у вирази (3.3.4) числові значення з умови задачі, одержимо:

$$r_a \sim \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \sim 0,5 \text{ \AA},$$

$$r_{\text{я}} \sim \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 8 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \sim 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}.$$

**Задача 3.4.** Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімальну енергію лінійного гармонічного осцилятора.

**Розв'язок.** За аналогією з класичною механікою, повну енергію  $E$  лінійного гармонічного осцилятора представимо у вигляді суми кінетичної та потенціальної енергій:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (3.4.1)$$

де  $p$  – імпульс, що визначає кінетичну енергію осцилятора – частинки з масою  $m$ , яка коливається з коловою частотою  $\omega$ , відхиляючись від положення рівноваги на відстань  $x$ .

Якщо осцилятором є мікрочастинка, що виконує гармонічні коливання, то необхідно врахувати, що невизначеності координати  $\Delta x$  та імпульсу  $\Delta p_x$  цієї частинки пов'язані співвідношенням (1.2.2). З урахуванням цього повна енергія осцилятора в найнижчому енергетичному стані запишеться у вигляді:

$$E = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2}. \quad (3.4.2)$$

Мінімум енергії осцилятора буде досягатися за такого значення невизначеності координати  $\Delta x_{\min}$ , яке задовольняє умові

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{m(\Delta x_{\min})^3} + m\omega^2 \Delta x_{\min} = 0, \quad (3.4.3)$$

звідки

$$\Delta x_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (3.4.4)$$

При цьому значенні невизначеності координати  $\Delta x = \Delta x_{\min}$  мінімальна енергія осцилятора буде дорівнювати:

$$E_{\min} = E(\Delta x_{\min}) = \hbar\omega. \quad (3.4.5)$$

Зауважимо, що це значення енергії вдвічі перевищує точне значення мінімальної енергії квантового гармонічного осцилятора, яке дорівнює  $\hbar\omega / 2$ . Щоб отримати точний вираз для мінімальної енергії осцилятора, необхідно використати точні співвідношення невизначеностей (1.2.1):

$$\overline{(\Delta p_x)^2} \cdot \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.4.6)$$

Дійсно, в цьому випадку, за аналогією з тим, що було викладено раніше,

$$E = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2}. \quad (3.4.7)$$

З умови мінімуму енергії

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x_{\min})^3} + m\omega^2 \Delta x_{\min} = 0 \quad (3.4.8)$$

знаходимо невизначеність координати:

$$\Delta x_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad (3.4.9)$$

звідки відразу ж одержуємо вираз для мінімальної енергії квантового гармонічного осцилятора:

$$E_{\min} = E(\Delta x_{\min}) = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (3.4.10)$$

**Задача 3.5.** Хвильова функція частинки, що знаходиться в області  $0 \leq x \leq l$  (у потенціальній ямі шириною  $l$  з абсолютно непрозорими стінками), має вигляд

$\Psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ , де  $l = \text{const}$ ;  $n \in \mathbb{Z}$ . Визначити коефіцієнт нормування  $A_n$  хвильової функції та знайти ймовірність знаходження частинки в області  $\frac{l}{3} \leq x \leq \frac{2l}{3}$ , якщо вона перебуває на другому збудженому рівні.

**Розв'язок.** Знайдемо спочатку коефіцієнт нормування  $A_n$  з умови нормування (1.3.2):

$$\int_0^l |\Psi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = 1, \quad (3.5.1)$$

звідки випливає, що  $A_n = A = \sqrt{\frac{2}{l}}$ .

За умовою задачі, частинка перебуває в другому збудженому стані. Оскільки квантове число  $n=1$  відповідає основному стану частинки, то другому збудженому стану буде відповідати квантове число  $n=3$  і, отже, хвильова функція частинки в цьому стані буде мати вигляд:

$$\Psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{3\pi}{l}x\right). \quad (3.5.2)$$

Ймовірність  $P$  знаходження частинки в області  $\frac{l}{3} \leq x \leq \frac{2l}{3}$  запишемо за аналогією з (3.5.1) як

$$P = \int_{l/3}^{2l/3} |\Psi_3(x)|^2 dx. \quad (3.5.3)$$

Підставляючи в цю формулу явний вираз для  $\Psi_3(x)$ , одержимо:

$$P = \frac{2}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \sin^2\left(\frac{3\pi}{l}x\right) dx = \frac{1}{l} \int_{l/3}^{2l/3} dx - \frac{1}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \cos\left(\frac{6\pi}{l}x\right) dx = \frac{1}{3}.$$

**Задача 3.6.** Знайти середню відстань від електрона до ядра атома водню, що знаходиться в стаціонарному стані з

хвильовою функцією  $\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ , де  $a_0$  – радіус

першої борівської орбіти.

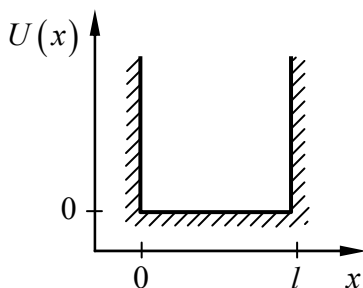
**Розв'язок.** Відповідно до (1.3.8), середня відстань від електрона до ядра атома водню  $\langle r \rangle$  визначається виразом:

$$\langle r \rangle = \int_{\mathcal{V}} \Psi^*(r) r \Psi(r) d\mathcal{V} = 4\pi \int_0^{\infty} \Psi^*(r) r^3 \Psi(r) dr, \quad (3.6.1)$$

де враховано, що у сферичній системі координат  $d\mathcal{V} = 4\pi r^2 dr$ . Підставляючи у цей вираз  $\Psi(r)$ , одержимо:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^{\infty} r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr = 4 \int_0^{\infty} \left(\frac{r}{a_0}\right)^3 \exp\left(-2\frac{r}{a_0}\right) dr = \\ &= 4a_0 \int_0^{\infty} x^3 \exp(-2x) dx = 4a_0 \frac{3!}{2^4} = \frac{3}{2} a_0. \end{aligned} \quad (3.6.2)$$

**Задача 3.7.** На основі уявлень про хвильові властивості частинок оцінити енергію частинки з масою  $m$  в одновимірній нескінченній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками шириною  $l$  (рис. 3.7.1). Порівняти отриманий результат з точним виразом, який випливає з розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера.



**Рис. 3.7.1.** Одновимірна нескінченна прямокутна потенціальна яма з абсолютно непрозорими стінками шириною  $l$ .

**Розв'язок.** Потенціальна енергія  $U(x)$  частинки в одновимірній нескінченній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками шириною  $l$  має вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l \\ \infty, & x < 0, x > l \end{cases} \quad (3.7.1)$$

Розглядаючи дану задачу, можна вважати, що частинка рухається вздовж осі  $x$ . Дійсно, якщо б вона рухалась вздовж осі, що перпендикулярна осі  $x$ , то її потенціальна енергія  $U(x)$  була б незмінною, і можна було б вважати, що  $U = 0$ , тобто вважати, що частинка є вільною, що суперечить умові задачі.

Оскільки частинка знаходиться в потенціальній ямі, тобто у зв'язаному стані, її повна енергія  $E < 0$ . Частинка не може залишити потенціальну яму за скінченний час  $t$ , оскільки яма нескінченно глибока, а це означає, що стан частинки можна вважати стаціонарним. Таким чином, необхідно розглянути лише рух частинки вздовж осі  $x$  (під час руху частинки під довільним напрямком до осі  $x$ , за допомогою аналогічних міркувань, приходимо до цього ж висновку).

Спочатку оцінимо енергію частинки  $E$ , виходячи з уявлень про її хвильові властивості. Будемо розглядати частинку в потенціальній ямі як квантовий об'єкт, що характеризується хвильовою функцією  $\Psi(x)$  та довжиною хвилі де Бройля (1.1.1).

Під час свого руху частинка може наближатися до абсолютно непрозорих стінок потенціальної ями, за межі яких вона вийти не може. Тому, коли вона потрапляє на стінку потенціальної ями, то відразу ж відбивається від неї за законом абсолютно пружного удару.

Якщо тепер розглянути хвилю де Бройля, що ототожнюється з частинкою, то при падінні її на стінку потенціальної ями, вона також буде відбиватися, утворюючи відбиту хвилю. Оскільки умови відбиття для хвиль де Бройля на обох стінках ями однакові, то відбита та падаюча хвилі де Брой-

ля будуть мати однакову амплітуду (немає загасання), і буде утворюватись стояча хвиля де Бройля.

Припустимо, що хвиля де Бройля (і відповідно, частинка) відбиваються від лівої стінки потенціальної ями при  $x=0$  (див. рис. 3.7.1). Тоді для того, щоб система набула початкового стану, хвиля де Бройля (і відповідно частинка) повинна пройти відстань  $2l$ . Під час такого руху фаза хвильової функції  $\varphi$  має змінюватись на  $\Delta\varphi = 2\pi n$ , де  $n$  – ціле число, інакше падаюча та відбита хвилі де Бройля будуть гасити одна одну. Відповідно, довжина хвилі де Бройля при такому русі буде  $\lambda_B = 2l / n$ . Отже, враховуючи вираз (1.2.1) для довжини хвилі де Бройля, маємо:

$$\lambda_B = \frac{2l}{n} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (3.7.2)$$

звідки легко знайти вираз для імпульсу частинки:

$$p = n \frac{\pi\hbar}{l}. \quad (3.7.3)$$

Оскільки потенціальна енергія всередині ями  $U=0$ , то повна енергія  $E$  частинки, яку будемо вважати нерелятивістською, дорівнює кінетичній енергії частинки  $K = p^2 / 2m$  і, отже, враховуючи (3.7.3):

$$E \equiv E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}. \quad (3.7.4)$$

Визначимо тепер енергію системи за допомогою рівняння Шредінгера (1.3.5). Для області всередині ями ( $0 \leq x \leq l$ ) стаціонарне рівняння Шредінгера записується у вигляді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x). \quad (3.7.5)$$

Загальний розв'язок цього рівняння відомий:

$$\Psi(x) = A \sin(\kappa x) + B \cos(\kappa x), \quad (3.7.6)$$

де введено позначення  $\kappa = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .

Оскільки частинка не може вийти за межі ями, то хви-

льова функція частинки в областях  $x < 0$  та  $x > l$  повинна дорівнювати нулю:  $\Psi(x < 0) = \Psi(x > l) = 0$ , звідки, з урахуванням (3.7.6), випливає, що  $B = 0$ ,  $k_l l = \pi n$ . Тоді, враховуючи вираз для коефіцієнта  $k_l$ , маємо:

$$E \equiv E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}, \quad (3.7.7)$$

тобто той же самий вираз (3.7.4), що випливає з хвильових властивостей частинки.

**Задача 3.8.** Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірній потенціальній ямі шириною  $l$  і глибиною  $U_0$  (див. рис.

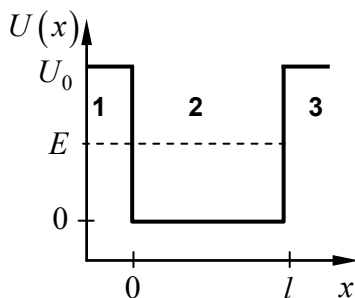
3.8.1), так що  $U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0, x > l \\ 0, & 0 < x < l \end{cases}$ . Знайти рівні енергії

частинки при  $E < U_0$  та їх кількість в ямі залежно від  $l$  та  $U_0$ .

**Розв'язок.** Розіб'ємо систему на три області: 1)  $x < 0$ ; 2)  $0 \leq x \leq l$ ; 3)  $x > l$  (див. рис. 3.8.1). В кожній з областей розв'яжемо рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_j(x)}{dx^2} + U_j(x) \Psi_j(x) = E \Psi_j(x), \quad (3.8.1)$$

вважаючи, що  $U_1(x) = U_3(x) = U_0$ ,  $U_2(x) = 0$ ; індексом  $j$  по-



**Рис. 3.8.1.** Одновимірна прямокутна потенціальна яма скінченної ширини  $l$  та глибини  $U_0$ .

значаються величини, що відносяться до  $j$ -ї області;  
 $j = 1, 2, 3$ .

Загальний розв'язок рівняння Шредінгера (3.8.1) в усіх областях має вигляд:

$$\Psi_j(x) = A_j \exp(i\kappa_j x) + B_j \exp(-i\kappa_j x), \quad (3.8.2)$$

де  $\kappa_j^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_j)$ ;  $A_j, B_j$  – довільні сталі.

В областях 1 та 3 знаходження частинки малоімовірне, оскільки  $E < U_0$ . Тому, виходячи з (3.8.2),  $\kappa_1^2 = \kappa_3^2 < 0$ , тобто розв'язок рівняння Шредінгера в цих областях має вигляд згасаючої функції. Його зручно представити у вигляді:

$$\Psi_1(x) = A \exp\{\alpha x\}, \quad \Psi_3(x) = D \exp\{-\alpha(x-l)\}, \quad (3.8.3)$$

де  $\alpha^2 = -\kappa_1^2 = -\kappa_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$ ,  $A, D$  – довільні сталі. Фізичний зміст (3.8.3) полягає в тому, що при  $E < U_0$  частинка може вийти за межі ями, тобто проникнути у «заборонену» область лише на деяку глибину  $\xi \sim \frac{1}{\alpha}$ .

В області 2 розв'язком рівняння Шредінгера є

$$\Psi_2(x) = B \sin(\kappa x) + C \cos(\kappa x), \quad (3.8.4)$$

де  $\kappa^2 \equiv \kappa_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E > 0$ ,  $B, C$  – довільні сталі. При записі (3.8.4) була використана альтернативна форма запису розв'язку, порівняно з (3.8.2), оскільки у другій області розв'язок має осцилюючий характер.

На границях областей повинні виконуватись умови неперервності (1.4.7) хвильових функцій  $\Psi_j(x)$  та їх похідних

$$\frac{d\Psi_j(x)}{dx}.$$

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow A = C,$$



$$\begin{aligned}\frac{d\Psi_1}{dx}(0) &= \frac{d\Psi_2}{dx}(0) \Rightarrow \alpha A = \kappa B, \\ \Psi_2(l) &= \Psi_3(l) \Rightarrow B \sin(\kappa l) + C \cos(\kappa l) = D, \\ \frac{d\Psi_2}{dx}(l) &= \frac{d\Psi_3}{dx}(l) \Rightarrow \kappa B \cos(\kappa l) - \kappa C \sin(\kappa l) = -\alpha D. \quad (3.8.5)\end{aligned}$$

Поділимо четверте рівняння (3.8.5) на третє. Одержимо рівняння

$$\frac{\kappa B \cos(\kappa l) - \kappa C \sin(\kappa l)}{B \sin(\kappa l) + C \cos(\kappa l)} = -\alpha,$$

яке з урахуванням перших двох рівнянь (3.8.5) набуде вигляду:

$$\frac{\alpha A \cos(\kappa l) - \kappa A \sin(\kappa l)}{(\alpha / \kappa) A \sin(\kappa l) + A \cos(\kappa l)} = -\alpha \Rightarrow \operatorname{tg}(\kappa l) = \frac{2\alpha \kappa}{\kappa^2 - \alpha^2}. \quad (3.8.6)$$

З (3.8.6) випливає, що

$$\kappa_n l = n\pi + \operatorname{arctg}\left(\frac{2\alpha_n \kappa_n}{\kappa_n^2 - \alpha_n^2}\right) = n\pi - 2 \arcsin\left(\frac{\hbar \kappa_n}{\sqrt{2mU_0}}\right), \quad (3.8.7)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Корені  $\kappa_n$  цього трансцендентного рівняння визначають енергію частинки у потенціальній ямі:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m}. \quad (3.8.8)$$

Максимальне значення  $\kappa_n^{\max}$  буде досягатись тоді, коли аргумент функції арксинус у (3.8.7) буде прямувати до одиниці. Отже,

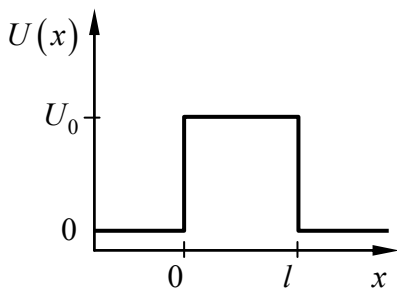
$$\frac{\hbar \kappa_n^{\max}}{\sqrt{2mU_0}} = 1 \Rightarrow \kappa_n^{\max} = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}. \quad (3.8.9)$$

Підставляючи значення  $\kappa_n^{\max}$  з (3.8.9) у (3.8.7), отримаємо максимальну кількість можливих рівнів  $n^{\max}$  у потенціальній ямі:

$$n^{\max} \leq 1 + \frac{l}{\pi \hbar} \sqrt{2mU_0}. \quad (3.8.10)$$

З (3.8.10) випливає цікавий результат: у будь-якій одновимірній потенціальній ямі кінцевої ширини та глибини присутній хоча б один стан, енергія якого менша за глибину ями. В той же час, наявність вищих енергетичних рівнів зовсім не гарантовано.

**Задача 3.9.** Знайти вираз для коефіцієнта відбивання та коефіцієнта прозорості прямокутного потенціального бар'єра з висотою  $U_0$  та шириною  $l$  (рис. 3.9.1). Розглянути випадки, коли  $E > U_0$ ,  $E < U_0$ .



**Рис. 3.9.1.** Залежність потенціальної енергії  $U(x)$  від координати  $x$  для одновимірного прямокутного потенціального бар'єра висотою  $U_0$  та шириною  $l$ .

**Розв'язок.** Введемо три області: 1)  $x < 0$ ; 2)  $0 \leq x \leq l$ ; 3)  $x > l$  (див. рис. 3.9.1). В кожній з областей розв'яжемо рівняння Шредінгера (1.3.5), вважаючи, що  $U_1(x) = U_3(x) = 0$ ,  $U_2(x) = U_0$ ; індексом  $j$  позначаються величини, що відносяться до  $j$ -ї області;  $j = 1, 2, 3$ . Рівняння (1.3.5) у даній задачі еквівалентно трьом рівнянням для кожної з областей:

$$\frac{d^2 \Psi_j(x)}{dx^2} + \kappa_j^2 \Psi_j(x) = 0, \quad j = 1, 2, 3, \quad (3.9.1)$$

де  $\kappa_1^2 = \kappa_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ,  $\kappa_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) = \kappa_1^2 \eta^2$ ; параметр

$\eta = \sqrt{1 - U_0 / E}$  можна назвати «показником заломлення» потенціального бар'єра, що впливає з порівняння виразу для  $\eta$  з (1.1.10).

Розв'язки рівнянь (3.9.1) представимо у вигляді:

$$\Psi_j(x) = A_j e^{i\kappa_j x} + B_j e^{-i\kappa_j x}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (3.9.2)$$

де  $A_j, B_j$  – довільні сталі. Щоб хвильові функції (3.9.2) вірно описували рух частинки, вони повинні задовольняти граничним умовам:

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) &= \Psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ \frac{d\Psi_1}{dx}(0) &= \frac{d\Psi_2}{dx}(0) \Rightarrow A_1 - B_1 = \eta(A_2 - B_2), \\ \Psi_2(l) &= \Psi_3(l) \Rightarrow A_2 e^{i\kappa\eta l} + B_2 e^{-i\kappa\eta l} = A_3 e^{i\kappa l} + B_3 e^{-i\kappa l}, \\ \frac{d\Psi_2}{dx}(l) &= \frac{d\Psi_3}{dx}(l) \Rightarrow \eta(A_2 e^{i\kappa\eta l} - B_2 e^{-i\kappa\eta l}) = A_3 e^{i\kappa l} - B_3 e^{-i\kappa l}. \end{aligned} \quad (3.9.3)$$

Отже, граничні умови зводяться до чотирьох рівнянь, в які входять шість невідомих сталих  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$ . Розглянемо, як зменшити кількість невідомих у (3.9.3).

Якщо частинка рухається у напрямку  $+x$ , то в третій області вона буде рухатись у тому ж напрямку (буде існувати тільки хвиля де Бройля частинки, що пройшла крізь бар'єр), і, відповідно,  $B_3 = 0$ .

Розв'язки рівнянь (3.9.3) визначені з точністю до постійного множника, тому без жодних обмежень можна покласти у (3.9.3)  $A_1 = 1$ , тим самим нормуючи всі сталі. Остаточ-но одержимо:

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ 1 - B_1 &= \eta(A_2 - B_2), \\ A_2 e^{i\kappa\eta l} + B_2 e^{-i\kappa\eta l} &= A_3 e^{i\kappa l}, \\ \eta(A_2 e^{i\kappa\eta l} - B_2 e^{-i\kappa\eta l}) &= A_3 e^{i\kappa l}. \end{aligned} \quad (3.9.4)$$

З цієї системи лінійних алгебраїчних рівнянь знаходимо

вирази для  $B_1, A_2, B_2, A_3$ :

$$\begin{aligned}
 B_1 &= \frac{(1-\eta^2)(e^{-i\kappa\eta l} - e^{i\kappa\eta l})}{(1+\eta)^2 e^{-i\kappa\eta l} - (1-\eta)^2 e^{i\kappa\eta l}}, \\
 A_2 &= \frac{2(1+\eta)e^{-i\kappa\eta l}}{(1+\eta)^2 e^{-i\kappa\eta l} - (1-\eta)^2 e^{i\kappa\eta l}}, \\
 B_2 &= \frac{2(\eta-1)e^{i\kappa\eta l}}{(1+\eta)^2 e^{-i\kappa\eta l} - (1-\eta)^2 e^{i\kappa\eta l}}, \\
 A_3 &= \frac{4\eta e^{-i\kappa l}}{(1+\eta)^2 e^{-i\kappa\eta l} - (1-\eta)^2 e^{i\kappa\eta l}}. \quad (3.9.5)
 \end{aligned}$$

Розглянемо спочатку випадок, коли  $E > U_0$ . В цьому випадку «показник заломлення»  $\eta$  є дійсним числом ( $0 < \eta < 1$ ). З урахуванням цього інтенсивність відбитої хвилі

$$|B_1|^2 = \frac{4(1-\eta^2)^2 \sin^2(\kappa\eta l)}{(1+\eta)^4 + (1-\eta)^4 - 2(1-\eta^2)^2 \cos(2\kappa\eta l)}, \quad (3.9.6)$$

а інтенсивність хвилі, що пройшла

$$|A_3|^2 = \frac{16\eta^2}{(1+\eta)^4 + (1-\eta)^4 - 2(1-\eta^2)^2 \cos(2\kappa\eta l)}. \quad (3.9.7)$$

Густину потоку частинок у падаючій хвилі  $j_0$ , у відбитій хвилі  $j_R$  та у хвилі, що пройшла,  $j_D$  знайдемо з (1.4.9) та (3.9.6)–(3.9.7):

$$j_0 = \frac{\hbar\kappa}{m}|A_1|^2 = \frac{\hbar\kappa}{m}, \quad j_R = -\frac{\hbar\kappa}{m}|B_1|^2, \quad j_D = \frac{\hbar\kappa}{m}|A_3|^2. \quad (3.9.8)$$

Коефіцієнти відбиття  $R$  від потенціального бар'єра та його коефіцієнт прозорості  $D$  розрахуємо за формулою (1.4.10):

$$R = \frac{|j_R|}{j_0} = \frac{4(1-\eta^2)^2 \sin^2(\kappa\eta l)}{(1+\eta)^4 + (1-\eta)^4 - 2(1-\eta^2)^2 \cos(2\kappa\eta l)},$$

$$D = \frac{j_D}{j_0} = \frac{16\eta^2}{(1+\eta)^4 + (1-\eta)^4 - 2(1-\eta^2)^2 \cos(2\kappa\eta l)}. \quad (3.9.9)$$

Якщо  $E > U_0$ , то відповідно до класичної механіки частинка не повинна «відчувати» наявності потенціального бар'єра, тобто повинно бути  $R=0, D=1$ . Але з виразів (3.9.6)–(3.9.7) випливає, що навіть за умови  $E > U_0$

$|B_1|^2 \neq 0$ ,  $|A_3|^2 \neq 0$ , і, отже, в квантовій механіці  $R > 0, D < 1$ .

Це може бути пояснено лише на основі співвідношень невизначеностей Гейзенберга. З точки зору квантової механіки частинка з енергією  $E$ , перебуваючи над бар'єром з висотою  $U_0 < E$ , з певною скінченною ймовірністю може

опинитися на час  $\Delta t \sim \frac{\hbar}{E - E'}$  у стані з енергією  $E' < U_0$  і «відчути» потенціальний бар'єр.

Розглянемо тепер випадок  $E < U_0$ , коли «показник заломлення» потенціального бар'єра  $\eta$  є уявною величиною:

$\eta = i\chi$ ,  $\chi = \sqrt{-1 + U_0 / E}$ . Покладемо для спрощення подальших виразів, що  $e^{\kappa\chi l} \gg 1$ , тобто будемо вважати, що потенціальний бар'єр є достатньо широким. Тоді з (1.4.10), (3.9.8) випливає, що

$$D = |A_3|^2 \approx \frac{16\chi^2}{(1+\chi^2)^2} e^{-2\kappa\chi l}. \quad (3.9.10)$$

Якщо ввести позначення  $D_0 = 16\chi^2 (1+\chi^2)^{-2}$  та підставити у вираз (3.9.10) безпосередні значення для  $\kappa$  та  $\chi$ , то одержимо відому формулу (1.4.12) для коефіцієнта прозорості прямокутного потенціального бар'єра:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}. \quad (3.9.11)$$

Проаналізуємо вираз (3.9.10). Якщо  $E < U_0$ , то за законами класичної фізики має бути  $R=1, D=0$ , тобто повинно мати місце явище повного відбивання частинок від бар'єра. В той же час, відповідно до (3.9.10),  $D > 0$ , а, отже,  $R < 1$ . Тобто в такому випадку відбувається явище тунелювання частинок крізь потенціальний бар'єр, що може бути пояснено лише в припущенні, що частинкам притаманні хвильові властивості.

**Задача 3.10.** Знайти коефіцієнт прозорості параболічного потенціального бар'єра висотою  $U_0$  (рис. 3.10.1).

**Розв'язок.** З рис. 3.10.1 можна визначити явний вигляд функції  $U(x)$ :

$$U(x) = U_0 \left( 1 - \frac{x^2}{l^2} \right) \text{ при } -l \leq x \leq l,$$

$$U(x) = 0 \text{ при } x < -l, x > l.$$

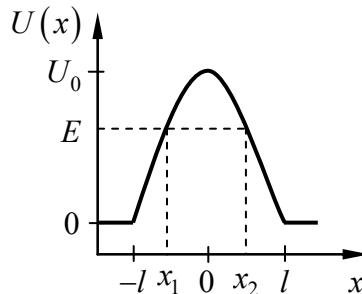
Виходячи з виразу для  $U(x)$ , легко знайти координату  $x_1$  точки входу частинки в бар'єр та координату  $x_2$  точки виходу частинки з бар'єра. Координати цих точок знаходяться з рівняння:

$$E = U_0 \left( 1 - \frac{x_{1,2}^2}{l^2} \right), \quad (3.10.1)$$

звідки

$$x_{1,2} = \pm l \sqrt{1 - \frac{E}{U_0}}. \quad (3.10.2)$$

Згідно (1.4.11) коефіці-



**Рис. 3.10.1.** Параболічний потенціальний бар'єр висотою  $U_0$  та шириною  $2l$ ;  $E$  – енергія частинки.

ент прозорості бар'єра  $D$ :

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2S}{\hbar} \sqrt{2m} \right\}, \quad (3.10.3)$$

де  $S = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - E} dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{(U_0 - E) - U_0 x^2 / l^2} dx$ . Введемо но-

ві змінні  $A = U_0 - E$ ,  $B = U_0 / l^2$ . Тоді  $x_{1,2} = \pm \sqrt{A/B}$ ,

$$S = \sqrt{B} \int_{-\sqrt{A/B}}^{\sqrt{A/B}} \sqrt{-x^2 + A/B} dx. \quad (3.10.4)$$

Скориставшись співвідношенням

$$\int \sqrt{a^2 - x^2} dx = \frac{x}{2} \sqrt{a^2 - x^2} - \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{x}{a} + \text{const},$$

з (3.10.4) одержимо:

$$I = \frac{\pi(U_0 - E)}{2\sqrt{U_0}} l. \quad (3.10.5)$$

Таким чином, коефіцієнт прозорості параболічного потенціального бар'єра

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{\pi l \sqrt{2m}}{\hbar \sqrt{U_0}} (U_0 - E) \right\}. \quad (3.10.6)$$

**Задача 3.11.** Знайти коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра при автоелектронній емісії електронів з металу під дією електричного поля з напруженістю  $\vec{E}$ . Вважати, що вектор  $\vec{E}$  перпендикулярний до поверхні металу. Яка залежність густини струму емісії від напруженості поля  $E$ ?

**Розв'язок.** Якщо до металу прикласти сильне електричне поле, то таке поле може виривати електрони з металу – з'являється струм. Це явище отримало назву автоелектронної емісії.

Для того, щоб вивільнити електрон з металу, необхідно витратити певну енергію  $Q$ . Отже, потенціальна енергія електрона всередині металу менша, ніж назовні.

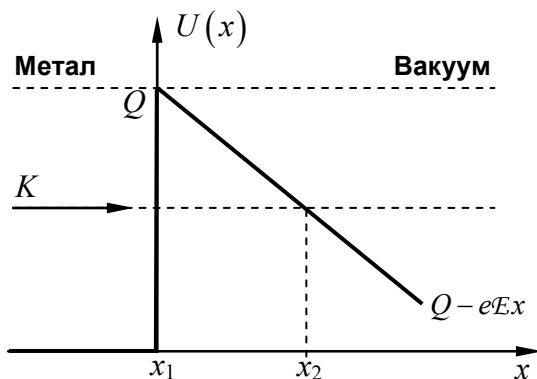
Введемо прямокутну систему координат таким чином, щоб вісь  $x$  цієї системи координат співпадала з напрямком зовнішньої нормалі до поверхні металу, а площина  $x=0$  співпадала б з границею розділу «метал – вакуум» (рис. 3.11.1). Нехай всередині металу (при  $x < 0$ ) потенціальна енергія електрона дорівнює нулеві, тоді потенціальна енергія електрона  $U(x)$  ззовні металу ( $x > 0$ ) буде мати вигляд:

$$U(x) = Q - eEx. \quad (3.11.1)$$

Якщо кінетична енергія електрона дорівнює  $K$ , тоді розрахунок коефіцієнта прозорості бар'єра  $D$ , згідно (1.4.11), по суті зводиться до обчислення інтеграла

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - K]} dx, \quad (3.11.2)$$

де  $x_1$  та  $x_2$  – координати точок, в яких  $K = U(x)$  (див. рис. 3.11.1). З рисунку видно, що  $x_1 = 0$ . Координата другої точки  $x_2$  знаходиться з умови  $K = U(x_2)$  і, відповідно, дорів-



**Рис. 3.11.1.** Спрощений вигляд просторового розподілу потенціальної енергії  $U(x)$  на границі «метал – вакуум» при автоелектронній емісії.



ною  $x_2 = (Q - K) / eE$ .

Для обчислення інтеграла  $I$  введемо нову змінну інтегрування  $y = eEx / (Q - K)$ . Тоді,

$$I = \frac{(Q - K)^{3/2}}{eE} \sqrt{2m} \int_0^1 \sqrt{1 - y} dy = \frac{2}{3} \frac{(Q - K)^{3/2}}{eE} \sqrt{2m}. \quad (3.11.3)$$

Відповідно, коефіцієнт прозорості бар'єра:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{4}{3\hbar} \frac{(Q - K)^{3/2}}{eE} \sqrt{2m} \right\}, \quad (3.11.4)$$

де  $D_0$  – амплітудне значення прозорості бар'єра.

Якщо кінетична енергія електрона  $K$  дорівнює енергії Фермі металу  $E_F$ , величина  $Q$  називається роботою виходу електрона  $W$  і є характерним параметром речовини. У цьому випадку вираз (3.11.4) набуває вигляду:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{4}{3\hbar} \frac{W^{3/2}}{eE} \sqrt{2m} \right\}, \quad (3.11.5)$$

Густина струму холодної емісії  $j$  пропорційна до коефіцієнта прозорості бар'єра  $D$ , отже

$$j = j_0 \exp \left( -\frac{B}{E} \right), \quad (3.11.6)$$

де  $B = \frac{4}{3\hbar} \frac{W^{3/2}}{e} \sqrt{2m}$  при  $K = E_F$ . Тобто зі збільшенням напруженості поля  $E$  густина струму холодної емісії суттєво зростає.

**Запитання 3.12.** На яку відстань треба наблизити вістря СТМ до поверхні металу для спостереження помітного тунельного струму?

**Відповідь.** Процес тунелювання електронів між вістрям СТМ та зразком стає помітним, коли ширина потенціального бар'єра, який існує в області між зразком та вістрям, стає співрозмірною або меншою за довжину хвилі де

Бройля  $\lambda_B$  електронів. Отже, помітний тунельний струм буде спостерігатись, якщо відстань між вістрям та поверхнею металу  $l \sim \lambda_B$ .

Згідно (1.1.1), величина довжини хвилі де Бройля електрона визначається її імпульсом, а значить  $\lambda_B$  залежить від енергії електрона  $E$ . Характерною енергією електрона в твердому тілі є енергія Фермі  $E_F$  – максимальна енергія електронів у металі за температури  $T = 0$  К. За кімнатних температур енергія більшості електронів у металі близька за величиною до енергії Фермі.

Якщо, наприклад, покласти  $E_F = 5$  еВ, то, скориставшись формулою  $p = \sqrt{2m_e E} \approx \sqrt{2m_e E_F}$ , можна легко обчислити довжину хвилі де Бройля для електронів з енергією  $E \approx E_F$ :

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_F}} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \approx 5,5 \text{ \AA}. \quad (3.12.1)$$

Таким чином, помітний тунельний струм почне спостерігатись при  $l \approx 5,5 \text{ \AA}$  – саме на цю відстань треба наблизити вістря СТМ до поверхні металу.

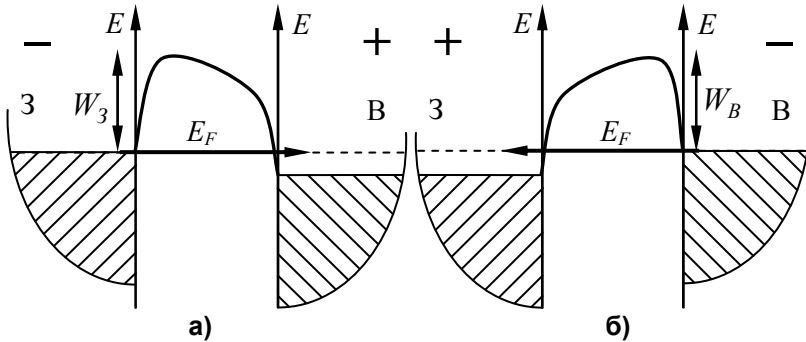
**Запитання 3.13.** Яка фізична величина визначає висоту тунельного бар'єра між вістрям СТМ та зразком при тунелюванні електронів з рівня Фермі?

**Відповідь.** Висота тунельного бар'єра визначається роботою виходу поверхні, з якої відбувається тунелювання електронів.

Якщо припустити, що до вістря СТМ прикладений позитивний потенціал, а до зразка – негативний потенціал (рис. 3.13.1а), то висота тунельного бар'єра визначається роботою виходу електрона зі зразка  $W_3$  (без урахування впливу електричного поля на форму потенціального бар'єра – більш детально про це див. задачу 3.11).

Якщо полярність напруги, прикладеної між зразком та

вістрям, змінюється на протилежну (рис. 3.13.1б), відбувається тунелювання електронів з вістря у зразок – в цьому випадку висота тунельного бар'єра визначається роботою виходу матеріалу вістря  $W_B$ .



**Рис. 3.13.1.** Схематичне зображення енергетичної діаграми системи зразок (З) – тунельний бар'єр – вістря (В) СТМ за умови, що: а) до вістря прикладений позитивний потенціал, а до зразка – негативний; б) до вістря прикладений негативний потенціал, а до зразка – позитивний. Для спрощення вважається, що вістря та зразок виготовлені з однакового металу.  $W_3$  – робота виходу матеріалу зразка,  $W_B$  – робота виходу матеріалу вістря,  $E_F$  – рівень енергії Фермі за нульової напруги. Суцільна лінія між зразком та вістрям відображає форму потенціального бар'єра. Стрілкою вказаний напрямок тунелювання електронів.

**Задача 3.14.** Оцінити для електронів прозорість прямокутного потенціального бар'єра висотою 4 еВ і шириною 5 Å.

**Розв'язок.** Прозорість прямокутного потенціального бар'єра  $D$  можна розрахувати за допомогою виразу (1.4.12), в якому, для спрощення, покладемо  $D_0 \sim 1$ . Отже, порядок величини прозорості прямокутного потенціального бар'єра буде описуватись виразом

$$D \sim \exp \left\{ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m_e (U_0 - E)} \right\}, \quad (3.14.1)$$

в якому, згідно умов задачі,  $U_0 - E = 4$  еВ,  $l = 5$  Å . Підставляючи числові дані, одержуємо:

$$D \sim \exp \left\{ -\frac{2 \cdot 5 \cdot 10^{-10}}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 4 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \right\} = 3,5 \cdot 10^{-5} . \quad (3.14.2)$$

**Задача 3.15.** Відстань між вістрям СТМ та поверхнею зразка зменшилась на  $1$  Å . Як зміниться при цьому тунельний струм? При розрахунках вважати, що робота виходу поверхні  $W = 4$  еВ.

**Розв'язок.** Напрямок протікання тунельного струму (зі зразка у вістря або з вістря у зразок) визначається полярністю напруги, прикладеної між зразком та вістрям. Отже, при зміні відстані між вістрям СТМ та зразком напрямок протікання тунельного струму не змінюється, оскільки полярність прикладеної напруги залишається тією ж самою.

При зміні відстані між вістрям та зразком змінюється ширина потенціального бар'єра, а, отже, завдяки зміні прозорості бар'єра змінюється і величина тунельного струму.

Для кількісної оцінки зміни величини тунельного струму знайдемо відношення прозоростей двох прямокутних бар'єрів, товщини яких відрізняються на  $\Delta l = 1$  Å . Нехай початкова ширина бар'єра була  $l$  , тоді відношення прозорості бар'єрів може бути оцінено виразом:

$$\frac{D_2}{D_1} = \frac{e^{-2\beta(l-\Delta l)}}{e^{-2\beta l}} = e^{2\beta \Delta l} , \quad (3.15.1)$$

де  $D_1$  – значення прозорості початкового бар'єра,  $D_2$  – значення прозорості бар'єра після наближення вістря СТМ до зразка,

$$\beta = \frac{\sqrt{2m_e U_0}}{\hbar} \quad (3.15.2)$$

– характерний коефіцієнт, який визначає прозорість прямокутного потенціального бар'єра висотою  $U_0$  для елект-

рона,

$$\beta [\text{\AA}^{-1}] = 0,513\sqrt{U_0}, \text{ де } U_0 \text{ задається в еВ.} \quad (3.15.3)$$

Виходячи з (3.15.1), (3.15.3) та припускаючи, що електрони тунелюють з рівня Фермі і, відповідно,  $U_0 \sim W$ , маємо:

$$\frac{D_2}{D_1} = e^{2\beta\Delta l} = e^{2 \cdot 0,513 \cdot \sqrt{4} \cdot 1} = e^{2,052} = 7,78. \quad (3.15.4)$$

Тобто прозорість змінюється майже на порядок, а значить у стільки ж разів зміниться і величина тунельного струму!

**Запитання 3.16.** STM працює в режимі сталого тунельного струму. Яким чином можна отримати інформацію стосовно топографії поверхні досліджуваного зразка у цьому режимі роботи STM?

**Відповідь.** Координата  $z_\theta$  вістря STM – координата, яка характеризує висоту вістря над поверхнею зразка – визначається системою зворотного зв'язку. Одним з основних елементів цієї системи є двигуни на основі п'єзоелементів – так звані п'єзодвигуни. У наближенні лінійного п'єзоелефекту координати вістря  $(x_\theta, y_\theta, z_\theta)$  є пропорційними відповідним миттєвим значенням напруг, прикладених до п'єзоелементів. Отже, вимірюючи значення напруг, прикладених до п'єзоелементів, можна визначити значення відповідних координат.

Одночасно вимірюючи значення напруг, які відповідають координатам  $(x_\theta, y_\theta, z_\theta)$ , можна визначити траєкторію руху вістря  $z_\theta(x_\theta, y_\theta)$ , тобто визначити топографію поверхні досліджуваного зразка.

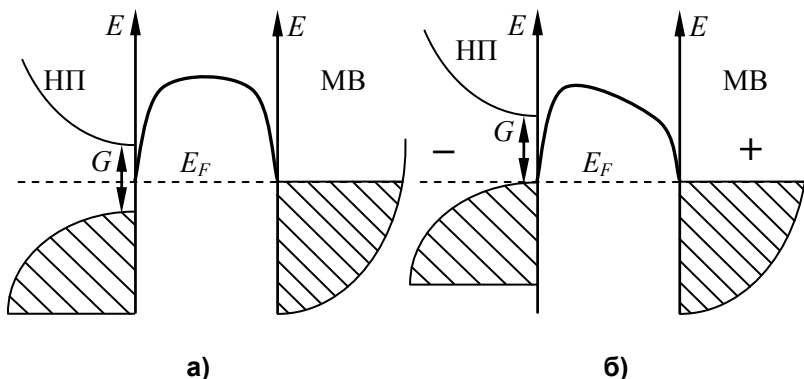
**Запитання 3.17.** Яку мінімальну напругу  $V$  треба прикласти до тунельного проміжку між металевим вістрям STM та поверхнею напівпровідника, щоб спостерігати тунельний струм?

**Відповідь.** На рис. 3.17.1 зображено енергетичну діаграму для випадку металевого вістря STM, яке знаходиться над

поверхнею напівпровідникового зразка. З діаграми видно, що електрони будуть тунелювати з валентної зони напівпровідника у вільні стани, які є в металі, за тунельної напруги  $V > G/2e$  (див. рис. 3.17.1б).

Звичайно, що при таких же напругах, але зворотної полярності, буде можливим тунелювання електронів з металу у вільні стани зони провідності напівпровідника.

У випадку легованого напівпровідника рівень Фермі знаходиться біля дна зони провідності (напівпровідник n-типу), або поблизу верху валентної зони (напівпровідник p-типу), відповідно тунельний струм буде спостерігатися при менших напругах для однієї полярності, і при більших – для протилежної.



**Рис. 3.17.1.** Схематичне зображення енергетичної діаграми системи напівпровідник (НП) – тунельний проміжок – металеве вістря (МВ) СТМ: а) напруга між зразком та вістрям  $V = 0$ ; б) напруга між зразком та вістрям  $V \geq G/2e$ .  $G$  – ширина забороненої зони напівпровідника,  $E_F$  – рівень енергії Фермі системи при  $V = 0$ . Суцільною лінією в області тунельного проміжку показано форму потенціального бар'єра між напівпровідником та вістрям СТМ.

**Запитання 3.18.** Що таке двовимірне СТМ зображення? Що означає колір точки на цьому зображенні?

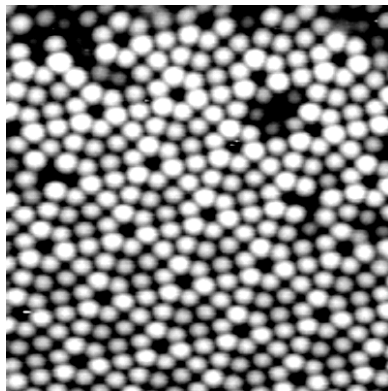
**Відповідь.** Типове двовимірне СТМ зображення – це зо-

браження, в якому колір кожної його точки характеризує величину тунельного струму (в режимі сталої висоти) або координату вістря  $z_e$  над поверхнею зразка (в режимі сталого струму) – див. наприклад, рис. 3.18.1.

Щоб СТМ зображення було легко інтерпретувати, колір кожної точки зображення розглядають як відтінок, градацію двох основних кольорів, якими часто є чорний та білий кольори.

У чорно-білих СТМ зображеннях (див. рис. 3.18.1) чорний колір точки означає, що в цій точці величина тунельного струму або координата  $z_e$  є мінімальними, а білий колір точки означає, що величина тунельного струму або координата  $z_e$  є максимальними. Відповідно, градація сірого кольору точки зображення визначає величину тунельного струму або координату  $z_e$  в цій точці в межах від мінімальної до максимальної величини.

Іноді використовують інші кольорові схеми, наприклад, можлива схема, в якій колір точки формується шляхом змішування червоного та блакитного кольорів. Відзначимо, що для оптимального представлення СТМ даних необхідно, щоб базові кольори кольорової схеми були інверсними, тобто, після інверсії один базовий колір переходив у інший, наприклад, білий – у чорний, блакитний – у червоний тощо.



**Рис. 3.18.1.** Типове чорно-біле двовимірне СТМ зображення поверхні Si(111).

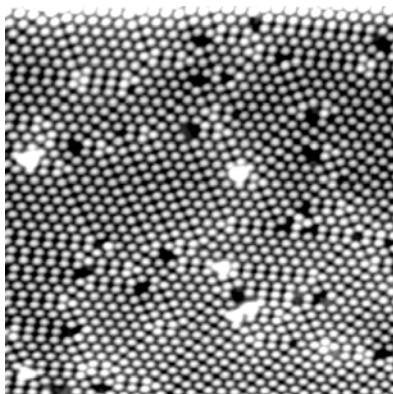
**Запитання 3.19.** Чи можна, використовуючи СТМ зображення, наведене на рис. 3.19.1, яке одержано у режимі сталої висоти, визначити величину тунельного струму, який протікає між вістрям СТМ та зразком? Градієнт стру-

му при переміщенні вістря над поверхнею зразка?

**Відповідь.** Колір точки  $C$  на СТМ зображенні (див. рис. 3.19.1) пов'язаний з величиною тунельного струму  $I$  у цій точці співвідношенням:

$$C = \zeta C_1 + (1 - \zeta) C_2,$$
$$\zeta = \frac{I - I_{\min}}{I_{\max} - I_{\min}}, \quad (3.19.1)$$

де  $C_1$  – це колір, який відповідає максимуму тунельного струму  $I_{\max}$ , а  $C_2$  – це колір, який відповідає мінімуму тунельного струму  $I_{\min}$ . З (3.19.1) випливає, що колір точки визначається не абсолютною величиною тунельного струму  $I$ , а нормованою амплітудою  $\zeta$ . Отже, якщо величини  $I_{\max}$  та  $I_{\min}$  невідомі, за кольором точки  $C$  не можна однозначно визначити величину тунельного струму  $I$ . Це також означає, що абсолютну величину градієнта струму (з розмірністю А/м) також визначити не можна. Отже, виходячи тільки з СТМ зображення, наведеного на рис. 3.27.1, не можна визначити ані величину тунельного струму, ані його градієнт. Однак можна якісно визначити як змінюється тунельний струм при переході від однієї точки СТМ зображення до іншої. Очевидно, що ця зміна визначається величиною  $\zeta$ , яка обумовлює колір точки на СТМ зображенні.



**Рис. 3.19.1.** Типове чорно-біле двовимірне СТМ зображення поверхні Ge(111).

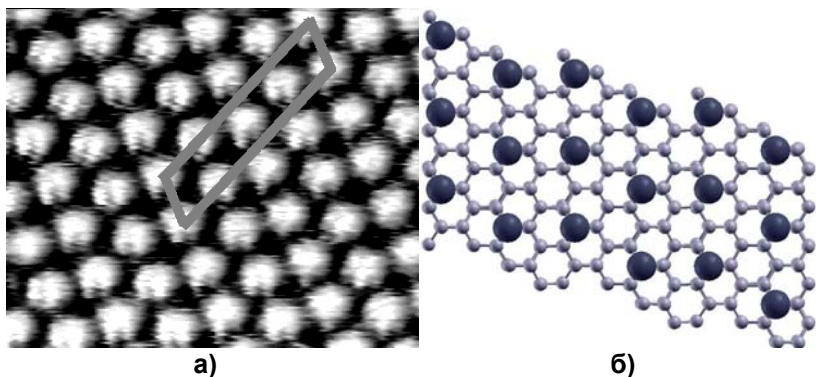
**Запитання 3.20.** Наведіть приклади, коли СТМ зображення поверхні суттєво відрізняється від топографії самої поверхні.

**Відповідь.** Реальне вістря скінченної аспектності (гостроти) не може достовірно передавати форму занадто виступаючих над площиною поверхні острівців. У разі якщо ост-



рівці самі по собі мають більшу аспектність ніж вістря (іншими словами є гострішими за вістря), то в результаті СТМ досліджень одержуємо СТМ зображення самого вістря, а не поверхні! Саме такий випадок зображено у другому розділі книги на рис. 2.2.6в, що наочно демонструється схематичною моделлю, наведеною на рис. 2.2.6г.

Отже, проста топографічна інтерпретація СТМ даних можлива не завжди. Ще одним прикладом ситуації, коли СТМ зображення поверхні суттєво відрізняється від топографії самої поверхні, може бути зображення поверхні графіту (див. рис. 2.2.7б у розділі 2), яке виглядає як набір атомів у вузлах гексагональної ґратки, без будь-якого на-тяку на існування шестигранних кілець, в яких є зв'язаними атоми вуглецю (див. модель на рис. 2.2.7а).



**Рис. 3.20.1.** а) СТМ зображення ділянки реконструйованої атомарно чистої поверхні  $\text{Ge}(111) - c(2 \times 8)$  розміром  $6 \text{ нм} \times 5 \text{ нм}$ ; одиночна елементарна комірка  $c(2 \times 8)$  окреслена жирною сірою лінією; б) модель атомарно чистої поверхні  $\text{Ge}(111) - c(2 \times 8)$ , зображеної ліворуч. Темним кольором виділено атоми, які видно на СТМ зображенні зразка

Нарешті, третім прикладом ситуації, коли СТМ зображення поверхні суттєво відрізняється від топографії самої поверхні, може бути атомарно чиста поверхня  $\text{Ge}(111) - c(2 \times 8)$ , зображена на рис. 3.20.1а. Поруч на рис. 3.20.1б для порівняння наведено модель цієї поверхні, де темним

кольором виділені саме ті атоми, які видно на СТМ зображенні.

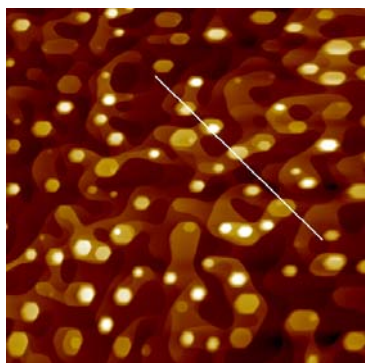
Таким чином, СТМ зображення поверхні зразка не завжди може бути ідентичним реальній топографії цієї поверхні. Це означає, що інтерпретація СТМ зображень не завжди є простою та тривіальною задачею.

**Запитання 3.21.** Що таке тривимірне СТМ зображення? Як можна побудувати це зображення на основі двовимірного СТМ зображення?

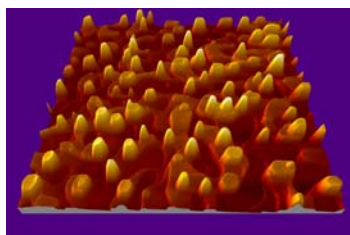
**Відповідь.** Тривимірні СТМ зображення зручно використовувати для представлення рельєфу поверхні зразка.

Припустимо, що відоме двовимірне СТМ зображення поверхні деякого зразка, тобто відома залежність  $z = f(x, y)$ , де  $z$  – висота точки над поверхнею зразка,  $x, y$  – координати цієї точки на поверхні зразка. У двовимірному СТМ зображенні координата  $z$  закодована за допомогою відтінку кольору. У тривимірному СТМ зображенні координата  $z$  являє собою висоту точки над деякою плоскою поверхнею у віртуальній тривимірній моделі поверхні реального зразка. Знаючи залежність  $z = f(x, y)$  в кожній точці поверхні зразка, можна побудувати тривимірну модель цієї поверхні.

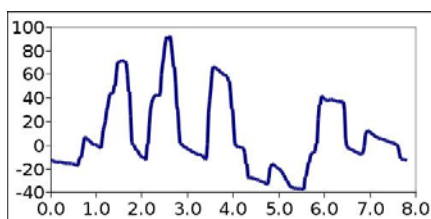
На рис. 3.21.1 наведено один з прикладів представлення СТМ даних у вигляді двовимірного та тривимірного СТМ зображень. На рис. 3.21.2 наведено інший приклад тривимірного СТМ зображення ділянки поверхні наноструктурованого моношару нітриду бору з розмірами  $17 \times 17 \text{ нм}^2$ . У цьому зображенні використано сильно спрощену кольорову схему, в якій є лише три кольори. Домінуюча частина поверхні, що знаходиться на певній висоті, позначена синім кольором. Круглі заглиблені ділянки поверхні виділені зеленим кольором. Нарешті, наночастинки золота розташовуються в круглих заглибленнях, проте їхні вершини є вищими за домінуючу частину поверхні. Ці наночастинки зображені червоним кольором.



а)



б)



в)

Рис. 3.21.1. Різні форми представлення STM даних поверхні зразка розміром  $12 \times 12$  мкм<sup>2</sup>: а) двовимірне STM зображення; б) тривимірне зображення; в) типовий рельєф поверхні зразка вздовж білої лінії, накресленої на двовимірному STM зображенні.

**Запитання 3.22.** На поверхні металу утворився острівцець оксиду, який не відрізняється за висотою від оточуючої поверхні, але має більшу роботу виходу. Як буде виглядати цей острівцець на STM зображенні поверхні металу?

**Відповідь.** Оксиди металів характеризуються більшою роботою виходу ніж чисті метали, тому зростання роботи виходу в межах острівця призведе до локального збільшення висоти поте-

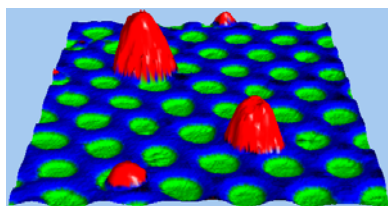


Рис. 3.21.2. Тривимірне STM зображення наноструктурованої поверхні нітриду бору (синій та зелений кольори) з наночастинками золота (червоний колір). Розмір зображення  $17 \times 17$  нм<sup>2</sup>.

нціального бар'єра і зменшення його прозорості. В свою чергу, зменшення прозорості потенціального бар'єра призведе до зменшення величини тунельного струму. Отже, зображення острівця оксиду буде «темнішим», порівняно з сусідніми ділянками поверхні.

**Запитання 3.23.** Чому СТМ зображення окремих атомів на поверхні інколи мають розміри, що перевищують реальні в декілька разів?

**Відповідь.** СТМ зображення поверхні є результатом згортки форми реальної поверхні та форми вістря. Оскільки форма реального вістря відрізняється від форми ідеального (нескінченно тонкого та гострого) вістря, кожен об'єкт в СТМ виглядатиме більшим. І цей ефект буде тим сильніший, чим менші розміри об'єктів або більші розміри вістря.

**Задача 3.24.** Оцінити, наскільки зміниться величина тунельного струму між двома металевими електродами при збільшенні температури від нуля до 1000 К?

**Розв'язок.** При зростанні температури електродів змінюється енергетичний розподіл електронів у них (розподіл Фермі – Дірака), внаслідок чого з'являються електрони з енергіями, вищими за енергію Фермі. Характерною зміною енергії електронів є величина  $\Delta E = k_B T$ . Ця зміна є досить малою, наприклад, для температури  $T_{\max} = 1000$  К  $\Delta E$  має порядок 0,1 еВ, тому на практиці впливом температури на величину тунельного струму часто нехтують.

Оцінимо зміну величини тунельного струму за рахунок підвищення температури до  $T_{\max} = 1000$  К. Нехай висота потенціального бар'єра дорівнює  $U_0$  (відносно енергії Фермі), тоді тунельний струм, як функція температури, згідно (1.4.12), може бути наближено записаний як

$$I(T) = I_0 \exp \left\{ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m_e (U_0 - k_B T)} \right\}, \quad (3.24.1)$$

де  $l$  – ширина бар'єра,  $I_0$  – деякий множник, що має роз-

мірність струму,  $m_e$  – нерелятивістська маса електрона і враховано, що зі збільшенням температури тунельний струм зростає. З (3.24.1) випливає, що

$$\begin{aligned} \frac{I(T_{\max})}{I(0)} &= \frac{\exp\left\{-\frac{2l}{\hbar}\sqrt{2m_e(U_0 - k_B T_{\max})}\right\}}{\exp\left\{-\frac{2l}{\hbar}\sqrt{2m_e U_0}\right\}} = \\ &= \exp\left\{-\frac{2l}{\hbar}\sqrt{2m_e U_0}\left(\sqrt{1 - \frac{k_B T_{\max}}{U_0}} - 1\right)\right\}. \quad (3.24.2) \end{aligned}$$

Оскільки  $k_B T_{\max} \ll U_0$  вираз  $\sqrt{1 - k_B T_{\max} / U_0}$  можна представити у вигляді:

$$\sqrt{1 - \frac{k_B T_{\max}}{U_0}} \approx 1 - \frac{k_B T_{\max}}{2U_0},$$

звідки, з урахуванням (3.24.2), відразу одержуємо:

$$\frac{I(T_{\max})}{I(0)} = \exp\left\{\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_e U_0} \frac{k_B T_{\max}}{U_0}\right\}. \quad (3.24.3)$$

Нехай  $l = 10 \text{ \AA}$ ,  $U_0 = 4 \text{ еВ}$ , тоді

$$\beta = \sqrt{2m_e U_0} / \hbar = 0,513 \cdot \sqrt{4} = 1,026 \text{ \AA}^{-1}, \quad k_B T_{\max} = 0,086 \text{ еВ і}$$

$$\frac{I(T_{\max})}{I(0)} = \exp\left\{10 \cdot 1,026 \cdot \frac{0,086}{4}\right\} = 1,247. \quad (3.24.4)$$

Отже, збільшення температури від 0 до 1000 К у даному випадку призвело до зростання величини тунельного струму на 24,7%.

**Задача 3.25.** Оцінити похибку вимірювання тунельного струму в СТМ, вважаючи, що ця похибка обумовлена струмом термоелектронної емісії з поверхні зразка. Розглянути випадки різних температур: а)  $T_1 = 300 \text{ К}$ ; б)  $T_2 = 1000 \text{ К}$ ; в)  $T_3 = 2000 \text{ К}$ .

**Розв'язок.** Максимальна густина струму термоелектронної

емісії  $j(T)$  з поверхні зразка, який має температуру  $T$ , може бути обчислена за формулою Річардсона – Дешмана:

$$j(T) = AT^2 \exp\left\{-\frac{W}{k_B T}\right\}, \quad (3.25.1)$$

де  $A = 120,4 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-2}$ ,  $W$  – робота виходу електрона з поверхні зразка,  $k_B$  – стала Больцмана.

Зазначимо, що характерний робочий об'єм системи вістря СТМ – зразок є  $\varphi \sim 1 \text{ см}^3$ . Враховуючи це, припустимо, що струм термоелектронної емісії  $I(T)$  протікає крізь область з площею  $S \sim 1 \text{ см}^2$ , отже

$$I(T) = j(T)S = CT^2 \exp\left\{-\frac{W}{k_B T}\right\}, \quad (3.25.2)$$

де  $C = 120,4 \text{ А} \cdot \text{К}^{-2}$ .

Вважаючи, наприклад, що  $W = 4 \text{ еВ}$ , та підставляючи у (3.25.2) числові дані, одержуємо:

а)  $I(300 \text{ К}) = 1,34 \cdot 10^{-51} \text{ А};$

б)  $I(1000 \text{ К}) = 511,5 \text{ пА};$

в)  $I(2000 \text{ К}) = 992,6 \text{ мА}.$

З розрахованих даних випливає, що нормальний режим роботи СТМ, в якому робочий тунельний струм, як правило, не перевищує кількох нА, можливий лише в області температур  $T \leq 1000 \text{ К}$ . За температур суттєво більших за цю граничну температуру, наприклад, за температури в декілька тисяч кельвінів, струм термоелектронної емісії є суттєво більшим за тунельний струм, що унеможливорює роботу СТМ.

**Запитання 3.26.** Чому методи скануючої тунельної мікроскопії та спектроскопії застосовуються переважно для дослідження поверхонь провідних зразків?

**Відповідь.** Для використання методів скануючої тунельної мікроскопії та спектроскопії необхідно, щоб між поверхнею

зразка та вістрям СТМ протікав тунельний струм. Цей струм буде існувати лише тоді, коли у зразку є вільні носії заряду, які можуть утворити цей струм (розглядається випадок, коли до зразка прикладений негативний потенціал, а до вістря – позитивний, тобто відбувається тунелювання електронів з поверхні зразка у вістря СТМ). Отже, провідність зразка має бути відмінною від нуля і достатньо високою для утворення помітного тунельного струму.

**Запитання 3.27.** Чим визначається роздільна здатність СТМ?

**Відповідь.** Вістря СТМ може переміщуватись як вздовж поверхні досліджуваного зразка – при цьому змінюються координати  $(x_g, y_g)$  вістря, так і наблизитись та віддалитись від поверхні зразка – при цьому змінюється координата  $z_g$  вістря. Відповідно розрізняють дві роздільні здатності СТМ.

Вертикальна роздільна здатність (за координатою  $z$ ) визначається дуже сильною залежністю тунельного струму від відстані (див. задачу 3.15) і обмежується точністю рестрації змін тунельного струму.

Латеральна роздільна здатність (за координатами  $x, y$ ) визначається просторовою локалізацією хвильової функції вістря та точністю позиціонування вістря над певною точкою поверхні зразка.

**Задача 3.28.** Шуми в колі вимірювання тунельного струму становлять  $\Delta I = 100$  пА. Яка буде роздільна здатність за висотою при тунельному струмі: 1)  $I_1 = 1$  нА; 2)  $I_2 = 5$  нА; 3)  $I_3 = 10$  нА? Вважати, що середня робота виходу вістря та зразка дорівнюють  $W = 4,5$  еВ.

**Розв'язок.** Величина тунельного струму  $I(I)$  визначається прозорістю потенціального бар'єра, а, отже,

$$I(I) \sim e^{-2\beta I}, \quad (3.28.1)$$

де  $\beta = \sqrt{2m_e W} / \hbar = 0,513 \cdot \sqrt{4,5} = 1,088 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $l$  – ширина тунельного бар'єра. Очевидно, що похибка вимірювання тунельного струму – характерний шум  $\Delta I$ , виходячи з (3.28.1), призводить до похибки визначення ширини бар'єра  $\Delta l$ , причому величина  $\Delta l$  є роздільною здатністю СТМ за висотою.

Похибка визначення струму  $\Delta I$  може бути записана у вигляді:

$$\Delta I = I(l) - I(l + \Delta l) \sim e^{-2\beta l} - e^{-2\beta(l + \Delta l)}. \quad (3.28.2)$$

З (3.28.1)–(3.28.2) випливає, що

$$\frac{\Delta I}{I(l)} \sim \frac{e^{-2\beta l} - e^{-2\beta(l + \Delta l)}}{e^{-2\beta l}} = 1 - e^{-2\beta \Delta l}, \quad (3.28.3)$$

звідки

$$\Delta l = -\frac{\ln\left(1 - \frac{\Delta I}{I}\right)}{2\beta}. \quad (3.28.4)$$

Підставляючи у цю формулу характерні значення з умови задачі, одержуємо:

- 1)  $I_1 = 1 \text{ нА}$ ,  $\Delta l = 0,048 \text{ \AA}$ ;
- 2)  $I_2 = 5 \text{ нА}$ ,  $\Delta l = 0,0093 \text{ \AA}$ ;
- 3)  $I_3 = 10 \text{ нА}$ ,  $\Delta l = 0,0046 \text{ \AA}$ .

Отже, зі збільшенням величини робочого тунельного струму роздільна здатність СТМ за висотою підвищується.



# Завдання для самостійної роботи

---

1. Свого часу винахідників СТМ Г. Бінніга та Г. Роера підозрювали у фальсифікації одержаних ними перших СТМ зображень, стверджуючи принципову неможливість одержання атомної роздільної здатності в створеному ними приладі. Навести можливі аргументи «викривачів фальсифікацій» та продемонструвати хибність їхніх припущень з точки зору сучасної нанофізики.

2. Як і чому зміниться тунельний струм, якщо вістря СТМ замінити іншим, тієї ж геометричної форми, але зробленим з іншого матеріалу? Вважати, що всі інші параметри СТМ експерименту не змінюються. Вказівка: використати модель вільних електронів. Розглянути випадок вістрів СТМ, виготовлених з алюмінію (енергія Фермі  $E_F = 11,63$  еВ) та золота ( $E_F = 5,51$  еВ).

3. За допомогою СТМ з металевим вістрям було виміряно вольт-амперну характеристику напівпровідникового зразка. Як зміниться ця вольт-амперна характеристика, якщо вістря СТМ буде виготовленим з напівпровідника, а зразок буде металевим? Вважати, що всі інші параметри експерименту не змінюються. Розглянути випадки легованого та власного напівпровідника.

4. Що таке аспектність вістря СТМ? На які параметри СТМ зображення впливає аспектність вістря?

5. Як впливає просторовий розподіл хвильової функції атома, який знаходиться на кінці вістря СТМ, на роздільну здатність СТМ?

6. Чим визначається форма потенціального бар'єра між вістрям СТМ та зразком?

7. Чи можливе дослідження за допомогою СТМ напівпровідникових зразків за температури  $T \rightarrow 0$ ? Металевих зразків за температур в декілька тисяч кельвінів?

**8.** Чутливість п'єзодвигуна при переміщенні вістря перпендикулярно до поверхні зразка складає  $8 \text{ \AA/V}$ . Аналогово-цифровий перетворювач для вимірювання траєкторії переміщення вістря має розрядність 8 біт. При скануванні певної ділянки поверхні максимальний перепад напруг на цьому п'єзодвигуні дорівнює 8 В. Чи можливо ідентифікувати на такому зображенні моноатомні сходинки висотою  $2 \text{ \AA}$ ?

**9.** Під поверхнею монокристалічного зразка, в другому атомному шарі, знаходиться міжвузельний чужорідний атом. Чи може він проявлятися на СТМ зображенні і за яких умов?

**10.** Система зворотного зв'язку СТМ має смугу пропускання 2 кГц. За який мінімальний час можливе одержання СТМ зображення  $256 \times 256$  точок?

**11.** Чи можливо провести модифікацію поверхні зразка за рахунок прикладання між зразком та вістрям великої напруги?

**12.** Поверхня зразка при огляді неозброєним оком не є дзеркально-гладкою. Чи можливе СТМ дослідження цієї поверхні за допомогою п'єзосканера (див. завдання 8), якщо максимально допустима напруга на ньому дорівнює 200 В.

**13.** Чи можливе дослідження за допомогою СТМ молекули ДНК людини? В разі позитивної відповіді запропонувати реалістичний план проведення експерименту.

**14.** Яким чином можна реалізувати підвід вістря СТМ до поверхні зразка? Розглянути випадки неперервного та кроково-дискретного руху.

**15.** СТМ працює в режимі сталого струму. Чим відрізняється цей режим роботи СТМ від режиму сталої висоти?

**16.** Оцінити площу частини поверхні зразка, яка буде ушкоджена в процесі втикання вістря у зразок. Розглянути лише ефекти, пов'язані з механічним зіткненням вістря та поверхні зразка.

**17.** Колір точки на СТМ зображенні визначається як геометричними розмірами об'єкта на поверхні зразка так і його

го роботою виходу. В яких випадках кожен з цих факторів є визначальним?

**18.** Яка принципова різниця СТМ зображень молекули, адсорбованої на поверхні зразка, одержаних у «вільних» та «зайнятих» станах? За яких напруг можна отримати ці зображення?

**19.** При дослідженні поверхні GaAs виявилось, що атоми Ga на СТМ зображенні є темнішими за атоми As. За якої полярності напруги було одержано це СТМ зображення? Чи зміниться це СТМ зображення, якщо полярність напруги буде протилежна?

**20.** Чи можна за вольт-амперною характеристикою зразка, виміряної за допомогою СТМ, визначити тип провідності зразка? Якщо відповідь позитивна, то пояснити, як це можна зробити.

## ЗНАЧЕННЯ ДЕЯКИХ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ФІЗИЧНИХ СТАЛИХ

### *Універсальні сталі*

Швидкість світла у вакуумі

$$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$$

Гравітаційна стала

$$G = 6,67259 \cdot 10^{-11} \text{ Н} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{кг}^{-2}$$

Стала Планка

$$h = 6,6260755 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 4,1356692 \cdot 10^{-15} \text{ еВ} \cdot \text{с}$$

$$\hbar = 1,0545726 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 6,5821220 \cdot 10^{-16} \text{ еВ} \cdot \text{с}$$

### *Фізико-хімічні сталі*

Стала Авогадро

$$N_A = 6,0221367 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

Атомна одиниця маси

$$1 \text{ а.о.м.} = 1,6605402 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

Універсальна газова стала

$$R = 8,314510 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$$

Стала Больцмана

$$k_B = 1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$$

Стала Стефана-Больцмана

$$\sigma = 5,67051 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$$

### *Електромагнітні сталі*

Елементарний електричний заряд

$$e = 1,60217733 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

Стала Фарадея

$$F = 96485,309 \text{ Кл} \cdot \text{моль}^{-1}$$

Електрична стала

$$\varepsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ Ф} \cdot \text{м}^{-1}; \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 8,9875518 \cdot 10^9 \text{ м} \cdot \text{Ф}^{-1}$$

Магнітна стала

$$\mu_0 = 12,5663706 \cdot 10^{-7} \text{ Гн} \cdot \text{м}^{-1}; \frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7} \text{ Гн} \cdot \text{м}^{-1}$$

### ***Атомні сталі***

Перший борівський радіус

$$a_0 = 0,529177249 \text{ Å} = 0,529177249 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

Стала Рідберга

$$R_\infty = 1,0973731 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} = 13,6056981 \text{ еВ}$$

Стала тонкої структури

$$\alpha = 7,29735308 \cdot 10^{-3} = \frac{1}{137,0359895}$$

Магнетон Бора

$$\mu_B = 9,2740154 \cdot 10^{-24} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} = 5,78838263 \cdot 10^{-5} \text{ еВ Тл}^{-1}$$

Ядерний магнетон

$$\mu_N = 5,0507866 \cdot 10^{-27} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} = 3,15245166 \cdot 10^{-8} \text{ еВ Тл}^{-1}$$

### ***Електрон***

Нерелятивістська маса

$$m_e = 9,1093897 \cdot 10^{-31} \text{ кг} = 5,48579903 \cdot 10^{-4} \text{ а.о.м.}$$

Енергія спокою

$$E_{e0} = 8,1871111 \cdot 10^{-14} \text{ Дж} = 0,51099906 \text{ MeV}$$

Питомий заряд

$$-\frac{e}{m_e} = -1,75881962 \cdot 10^{11} \text{ Кл кг}^{-1}$$

Класичний радіус електрона

$$r_e = 2,81794092 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\Lambda_e = 2,42631058 \cdot 10^{-12} \text{ м}$$

### ***Протон***

Нерелятивістська маса

$$m_p = 1,6726231 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1,007276470 \text{ а.о.м.}$$

Відношення маси протона до маси електрона

$$\frac{m_p}{m_e} = 1836,152701$$

Енергія спокою

$$E_{p0} = 1,50327861596 \cdot 10^{-10} \text{ Дж} = 938,27231 \text{ MeV}$$

Питомий заряд

$$\frac{e}{m_p} = 9,5788309 \cdot 10^7 \text{ Кл кг}^{-1}$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\Lambda_p = 1,32141002 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

### ***Нейтрон***

Нерелятивістська маса

$$m_n = 1,6749286 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1,008664904 \text{ а.о.м.}$$

Відношення маси нейтрона до маси протона

$$\frac{m_n}{m_p} = 1,001378404$$

Енергія спокою

$$E_{n0} = 1,5053507412 \cdot 10^{-10} \text{ Дж} = 939,56563 \text{ MeV}$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\Lambda_n = 1,31959110 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

## Додаток 2

### ЗНАЧЕННЯ РОБОТИ ВИХОДУ ЕЛЕКТРОНА $W$ ДЛЯ ДЕЯКИХ МЕТАЛІВ

Метал	$W$ , еВ	Метал	$W$ , еВ
Алюміній	3,74	Мідь	4,47
Барій	2,29	Молібден	4,27
Вісмут	4,62	Натрій	2,27
Вольфрам	4,50	Нікель	4,84
Залізо	4,36	Платина	5,29
Золото	4,58	Срібло	4,28
Калій	2,15	Титан	3,92
Кобальт	4,25	Цезій	1,89
Літій	2,39	Цинк	3,74

## Додаток 3

### РОЗВ'ЯЗОК СИСТЕМИ РІВНЯНЬ ДЛЯ ЗАДАЧІ ПРО ПРОХОДЖЕННЯ ЧАСТИНКИ КРИЗЬ ПРЯМОКУТНИЙ ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР'ЄР

У даному додатку детально розглянуто розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь (2.1.10), тобто одержання виразу (2.1.11) для невідомого коефіцієнта  $A_3$ , методом послідовного виключення невідомих. Пронумеруємо рівняння системи:

$$1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad (\text{ДЗ.1})$$

$$i\alpha - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2, \quad (\text{ДЗ.2})$$

$$A_2 e^{\beta d} + B_2 e^{-\beta d} = A_3 e^{i\alpha d}, \quad (\text{ДЗ.3})$$

$$\beta A_2 e^{\beta d} - \beta B_2 e^{-\beta d} = i\alpha A_3 e^{i\alpha d}. \quad (\text{ДЗ.4})$$

З рівняння (ДЗ.1) знаходимо коефіцієнт  $B_1$ :

$$B_1 = A_2 + B_2 - 1$$

і підставляємо його в рівняння (ДЗ.2):

$$i\alpha - i\alpha(A_2 + B_2 - 1) = \beta A_2 - \beta B_2. \quad (Д3.5)$$

Далі з перетвореного рівняння (Д3.5) знаходимо коефіцієнт  $A_2$ :

$$A_2 = \frac{[2i\alpha - B_2(i\alpha - \beta)]}{i\alpha + \beta} \quad (Д3.6)$$

і також підставляємо його в перетворені рівняння (Д3.3)–(Д3.4):

$$e^{\beta d} \frac{[2i\alpha - B_2(i\alpha - \beta)]}{i\alpha + \beta} + B_2 e^{-\beta d} = A_3 e^{i\alpha d}, \quad (Д3.7)$$

$$\beta e^{\beta d} \frac{[2i\alpha - B_2(i\alpha - \beta)]}{i\alpha + \beta} - \beta B_2 e^{-\beta d} = i\alpha A_3 e^{i\alpha d}. \quad (Д3.8)$$

Серія подальших перетворень рівняння (Д3.7) дозволяє одержати з нього вираз для коефіцієнта  $B_2$ :

$$B_2 = \frac{[A_3 e^{i\alpha d} (i\alpha + \beta) - 2i\alpha e^{\beta d}]}{[e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) - e^{\beta d} (i\alpha - \beta)]}. \quad (Д3.9)$$

Оскільки отриманий вираз є досить складним, тому є доцільним перегрупувати доданки в рівнянні (Д3.8) перед тим, як зробити в ньому підстановку (Д3.9):

$$\begin{aligned} -B_2 \beta [e^{\beta d} (i\alpha - \beta) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta)] = \\ = i\alpha A_3 e^{i\alpha d} (i\alpha + \beta) - 2i\alpha e^{\beta d}. \end{aligned} \quad (Д3.10)$$

Тепер останнє рівняння системи містить коефіцієнт  $B_2$ , тільки один раз і можна досить зручно підставити вираз для цього коефіцієнта (Д3.10):

$$\begin{aligned} -[A_3 e^{i\alpha d} (i\alpha + \beta) - 2i\alpha e^{\beta d}] \beta [e^{\beta d} (i\alpha - \beta) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta)] = \\ = i\alpha A_3 e^{i\alpha d} (i\alpha + \beta) [e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) - e^{\beta d} (i\alpha - \beta)] - \\ - 2i\alpha \beta e^{\beta d} [e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) - e^{\beta d} (i\alpha - \beta)]. \end{aligned}$$



Одержано рівняння з однією невідомою величиною  $A_3$ , яку, власне, і необхідно знайти. З цією метою згрупуємо всі доданки, що містять  $A_3$  в лівій стороні рівняння:

$$\begin{aligned} & -A_3 e^{i\alpha d} (i\alpha + \beta) \beta \left[ e^{\beta d} (i\alpha - \beta) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) \right] - \\ & -i\alpha A_3 e^{i\alpha d} (i\alpha + \beta) \left[ e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) - e^{\beta d} (i\alpha - \beta) \right] = \\ & = -2i\alpha \beta e^{\beta d} \left[ e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) - e^{\beta d} (i\alpha - \beta) \right] - \\ & -2i\alpha e^{\beta d} \beta \left[ e^{\beta d} (i\alpha - \beta) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) \right] \end{aligned}$$

та проведемо серію спрощень:

$$\begin{aligned} A_3 \beta e^{i\alpha d} \left\{ e^{\beta d} (i\alpha + \beta) (i\alpha - \beta) \left( 1 - \frac{i\alpha}{\beta} \right) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta)^2 \left( 1 + \frac{i\alpha}{\beta} \right) \right\} = \\ = 4i\alpha \beta (i\alpha + \beta), \end{aligned}$$

$$A_3 \beta e^{i\alpha d} \left\{ e^{\beta d} (i\alpha - \beta) \left( 1 - \frac{i\alpha}{\beta} \right) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) \left( 1 + \frac{i\alpha}{\beta} \right) \right\} = 4i\alpha \beta,$$

$$A_3 e^{i\alpha d} \left\{ e^{\beta d} (i\alpha - \beta) (\beta - i\alpha) + e^{-\beta d} (i\alpha + \beta) (\beta + i\alpha) \right\} = 4i\beta \alpha,$$

$$A_3 \left[ -e^{\beta d} (\beta - i\alpha)^2 + e^{-\beta d} (\beta + i\alpha)^2 \right] = \frac{4i\beta \alpha}{e^{i\alpha d}},$$

$$A_3 \left[ e^{-\beta d} \left( \frac{\beta}{\alpha} + i \right)^2 - e^{\beta d} \left( \frac{\beta}{\alpha} - i \right)^2 \right] = \frac{4i\beta}{\alpha e^{i\alpha d}}.$$

Нарешті, з останнього рівняння можна одержати явний вираз для коефіцієнта  $A_3$  в зручному для подальшого використання вигляді:

$$A_3 = \frac{4i\beta}{\alpha e^{i\alpha d}} \frac{1}{e^{-\beta d} \left( \frac{\beta}{\alpha} + i \right)^2 - e^{\beta d} \left( \frac{\beta}{\alpha} - i \right)^2}. \quad (ДЗ.11)$$

## ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ Д. І. МЕНДЕЛЄЄВА

Період	Ряд	ГРУПИ ЕЛЕМЕНТІВ									
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII		
I	1	(H)						H 1,00797 Водень	He 4,0026 Гелій	<div>Визначення елемента</div> <div> <div> <div>Li 3 Літій</div> <div>6.939</div> </div> <div>Атомний номер</div> <div>Відносна атомна маса</div> </div>	
II	2	Li 6,939 Літій	Be 9,0122 Берилій	B 10,811 Бор	C 12,01115 Вуглець	N 14,0067 Азот	O 15,9994 Кисень	F 18,9984 Фтор	Ne 20,179 Неон		
III	3	Na 22,9898 Натрій	Mg 24,305 Магній	Al 26,9815 Алюміній	Si 28,086 Кремній	P 30,9738 Фосфор	S 32,064 Сірка	Cl 35,453 Хлор	Ar 39,948 Аргон		
IV	4	K 39,102 Калій	Ca 40,08 Кальцій	21 44,956 Sc Скандій	22 47,90 Ti Титан	23 50,942 V Ванадій	24 51,996 Cr Хром	25 54,9380 Mn Марганець	26 55,847 Fe Залізо	27 58,9330 Co Кобальт	28 58,71 Ni Нікель
	5	29 63,546 Cu Мідь	30 65,37 Zn Цинк	31 69,72 Ga Галій	32 75,59 Ge Германій	33 74,9216 As Миш'як	34 78,96 Se Селен	35 79,904 Br Бром	36 83,80 Kr Криптон		
V	6	Rb 85,47 Рубідій	Sr 87,62 Стронцій	39 88,905 Y Ітрій	40 91,22 Zr Цирконій	41 92,906 Nb Ніобій	42 95,94 Mo Молібден	43 [99] Tc Технецій	44 101,07 Ru Рутеній	45 102,905 Rh Родій	46 106,4 Pd Паладій
	7	47 107,868 Ag Срібло	48 112,40 Cd Кадмій	49 114,82 In Індій	50 118,69 Sn Олово	51 121,75 Sb Сурма	52 127,60 Te Телур	53 126,9044 I Йод	54 131,30 Xe Ксенон		
VI	8	Cs 132,905 Цезій	Ba 137,34 Барій	57 138,91 La* Лантан	72 178,49 Hf Гафній	73 180,948 Ta Тантал	74 183,85 W Вольфрам	75 186,2 Re Реній	76 190,2 Os Осмій	77 192,2 Ir Іридій	78 195,09 Pt Платина
	9	79 196,967 Au Золото	80 200,59 Hg Ртуть	81 204,37 Tl Талій	82 207,19 Pb Свинець	83 208,980 Bi Вісмут	84 [210]* Po Полоній	85 [210] At Астат	86 [222] Rn Радон		
VII	10	87 [223] Fr Францій	88 [226] Ra Радій	89 [227] Ac** Актиній	104 [261] Rf Резерфордій	105 [262] Db Дубній	106 [263] Sg Сиборгій	107 [262] Bh Борій	108 [265] Hs Хасій	109 [266] Mt Мейтнерій	110

Ланта- ноїди	58 140,12 Ce Церій	59 140,907 Pr Празеодим	60 144,24 Nd Неодим	61 [147]* Pm Прометій	62 150,35 Sm Самарій	63 151,96 Eu Європій	64 157,25 Gd Гадоліній	65 158,924 Tb Тербій	66 162,50 Dy Диспрозій	67 164,930 Ho Гольмій	68 167,26 Er Ербій	69 168,934 Tm Тулій	70 173,04 Yb Ітербій	71 174,97 Lu Лютецій
Акти- ноїди	90 232,038 Th Торій	91 [231] Pa Проактіній	92 238,03 U Уран	93 [237] Np Нептуній	94 [244] Pu Плутоній	95 [243] Am Америцій	96 [247] Cm Кюрій	97 [247] Bk Берклій	98 [251] Cf Каліфорній	99 [254] Es Ейнштейній	100 [257] Fm Фермій	101 [257] Md Менделевій	102 [255] No Нобелій	103 [256] Lr Лоуренсій

## **СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ**

### **Підручники та навчальні посібники**

1. Бахтизин Р.З., Галлямов Р.Р. Физические основы сканирующей зондовой микроскопии: Учебное пособие. –Уфа: РИО БашГУ, 2003. – 82 с.
2. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии: Учебное пособие. – Нижний Новгород: Институт физики микроструктур РАН, 2004. – 114 с.
3. Находкін М. Г., Шека Д. І. Фізичні основи мікро- та наноелектроніки: Підручник. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2005. – 431 с.
4. Неволин В.К. Основы туннельно-зондовой нанотехнологии: Учебное пособие. – М.: МГИЭТ (ТУ), 1996. – 91 с.
5. Рыков С.А. Сканирующая зондовая микроскопия полупроводниковых материалов и наноструктур. – СПб: Наука, 2001. – 53 с.
6. Сканирующая зондовая микроскопия биополимеров / Под ред. И.В. Яминского. – М.: Научный мир, 1997. – 86 с.

### **Література для поглибленого вивчення матеріалу**

7. Бинниг Г., Рорер Г. Сканирующая тунельная микроскопия – от рождения к юности // Успехи физических наук. – 1988. – Т. 154, № 2. – С. 261-278.
8. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1983. – 664 с.
9. Володин А.П. Новое в сканирующей микроскопии // Приборы и техника эксперимента. – 1998. – № 6. – С. 3-42.
10. Методы анализа поверхностей / под ред. А. Зандерны. – М.: Мир, 1979. – 582 с.
11. Панов В.И. Сканирующая туннельная микроскопия и

- спектроскопия поверхности // Успехи физических наук. – 1988. – Т.155, № 1. – С. 155-158.
12. Фелдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок. – М.: Мир, 1989. – 341 с.
  13. Ципенюк Ю.М. Квантовая микро- и макрофизика. – М.: Физматкнига, 2006. – 638 с.
  14. Эдельман В.С. Развитие сканирующей туннельной и силовой микроскопии // Приборы и техника эксперимента. – 1991. – № 1. – С. 24-42.
  15. Эдельман В.С. Сканирующая туннельная микроскопия // Приборы и техника эксперимента. – 1989. – № 5. – С. 25-49.
  16. Alford T.L., Feldman L.C., Mayer J.W. Fundamentals of Nanoscale Film Analysis. – New York: Springer, 2007. – 336 p.
  17. Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E. Surface studies by scanning tunneling microscopy // Physical Review Letters. – 1982. – Vol. 49, № 1. – P. 57-61.
  18. Binnig G., Rohrer H. Scanning tunneling microscopy – from birth to adolescence // Reviews of Modern Physics. – 1987. – Vol. 59, № 3. – P. 615-625.
  19. Duke C.B. Tunneling in solids. – New York: Academic Press, 1969. – 353 p.
  20. Ibach H. Physics of Surfaces and Interfaces. – Berlin: Springer-Verlag, 2006. – 646 p.
  21. Surface characterization methods: principles, techniques, and applications. / Ed. by A.J. Milling. – Basel: Marcel Dekker, Inc., 1999. – 429 p.

**Навчальний посібник**

ГОРЯЧКО Андрій Миколайович

КУЛИК Сергій Петрович

ПРОКОПЕНКО Олександр Володимирович

# **Основи скануючої зондової мікроскопії та спектроскопії**

## **Частина 1**

Літературний редактор

Оберемок Олена Сергіївна

Підписано до друку 08.11.2010. Формат 60x84/16.  
Гарнітура Arial. Ум.-друк. арк. 11,1.

Радіофізичний факультет  
Київського національного університету  
імені Тараса Шевченка