

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОВЕРХНОСТИ И ЗОНДИРУЮЩЕГО ОСТРИЯ

Е.Ю. Шелковников, А.В. Тюриков, Б.А. Жуйков

Институт прикладной механики УрО РАН,
г. Ижевск

Современная туннельная микроскопия является одним из немногих методов исследования поверхности, позволяющих производить неразрушающий контроль ее параметров с атомным разрешением. Топология микровыступов (образованных при изготовлении СТМ-зонда) является существенным фактором, обуславливающим интегральную плотность электронных состояний острия, которая, в свою очередь, играет важную роль в формировании СТМ-изображений в совокупности с электронной плотностью состояний исследуемого образца. Поэтому очевидно, что разработка методики для идентификации кластерных материалов, позволяющей осуществлять теоретическое моделирование СТМ-изображений ультрадисперсных частиц (УДЧ) с учетом электронной плотности их состояний и топологии микровыступов зонда, является актуальной задачей.

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) регистрирует туннельный ток, протекающий между зондирующим острием (ЗО) и исследуемой поверхностью. При этом, согласно теории Бардина [1], выражение для туннельного тока имеет вид:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu\nu} f(E_\mu)(1 - f(E_\nu + V)) |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu), \quad (1)$$

где индекс V относится к молекулярным орбиталям (состояниям) поверхности; μ – к состояниям иглы; \hbar – постоянная Планка; E_μ – энергии состояний иглы; E_ν – поверхности; $f(E)$ – распределение Ферми; $M_{\mu\nu}$ – бардиновский матричный элемент:

$$M_{\mu\nu} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\Omega} d\vec{s} (\psi_\mu \vec{\nabla} \psi_\nu - \psi_\nu \vec{\nabla} \psi_\mu). \quad (2)$$

Из выражения (1) следует, что в процесс туннелирования вовлекаются электронные состояния, обладающие равными собственными энергиями. При этом число таких электронных состояний растет с ростом туннельного напряжения. При малых туннельных сдвигах ($V < 10 \text{ eV}$), а также при условии, что игла моделируется локально сферической

поверхностью (радиус кривизны которой R , а центр кривизны расположен в \vec{r}_0), туннельный ток, согласно [2,3], пропорционален электронной плотности состояний поверхности:

$$I \approx 0.1 R^2 e^{2kR} V \rho(\vec{r}_0, E_f); \quad (3)$$

$$\rho(\vec{r}_0, E_f) = \sum_v |\psi_v(\vec{r}_0)|^2 \delta(E_v - E_f).$$

В случае, когда число электронных состояний, вовлеченных в процесс туннелирования, велико (а это соответствует действительности при определенном подборе материала зонда), суперпозиция квадратов волновых функций (при условии их большого количества), обладающих различной симметрией (s, p, d), имеет симметрию, которую с большой долей точности можно считать сферической. При этом картина, наблюдаемая в СТМ-эксперименте, становится качественно сравнимой со схематично изображенной на рисунке 1. Пересекающиеся сферы – это поверхность постоянной электронной плотности каждого из атомов образца (пунктирная линия). Поверхность, получаемая при пересечении этих сфер – изоповерхность плотности невзаимодействующих между собой и зондом электронных состояний соседних атомов. Обязательное же взаимодействие можно описать как возмущение «пунктирной» поверхности, приводящее ее к виду, представленному на рисунке 1 сплошным серым цветом. Величина же возмущающего действия формально определяется радиусом кривизны (формой) виртуального зонда, введенного в модель специально с этой целью.

Попытки учесть точное взаимодействие исследуемой поверхности и зондирующего острия для расчета туннельного тока предпринимались давно, но до настоящего времени не привели к какому-либо результату, приемлемому для моделирования СТМ-изображений. Поэтому на данный момент существуют две основные методики их

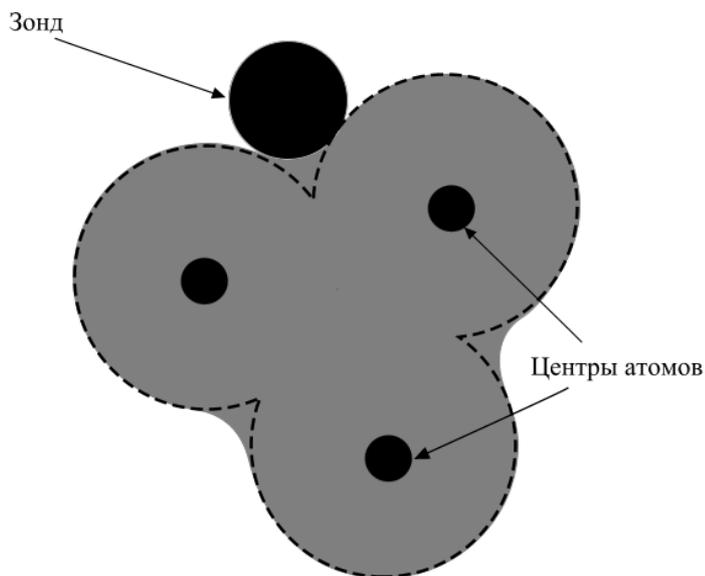


Рисунок 1 - Исоповерхность постоянной плотности электронных состояний атомов (пунктирная линия – изоповерхность плотности электронных состояний без учета взаимодействия состояний соседних атомов; поверхность, окрашенная серым – изоповерхность плотности взаимодействующих между собой и зондом электронных состояний)

построения. Первая связана с определением добавочных членов в ряд теории возмущений, нулевым приближением которой является выражение (1) [3]. Данный путь позволяет рассчитать туннельный ток с достаточной точностью, но сопряжен с длительными и объемными расчетами. Вторую методику можно назвать *полуэмпирической*, поскольку кроме точных расчетов в нее включаются эмпирические параметры, позволяющие учесть взаимодействие между зондом и поверхностью. Данная методика является приемлемой с точки зрения затрат машинного времени, однако ее достоверность целиком определяется входящими в нее эмпирическими параметрами. Эта методика и является объектом рассмотрения данной работы.

В случае, когда электронная плотность состояний исследуемой УДЧ на поверхности подложки известна (например, рассчитана ранее при помощи *ab initio* методов), а электронная плотность состояний зондирующего острого (ЗО) оценена согласно предложенной методике, можно предположить, что поверхность постоянного туннельного тока, обусловленная их взаимодействием, строится в результате сканирования изоповерхности

электронных состояний исследуемой УДЧ зондом, имеющим поверхность постоянной электронной плотности. Траектории зонда, «скользящего» вдоль УДЧ, позволяют сформировать изображение, которое с определенной точностью можно назвать моделью СТМ-изображения. При этом эмпирическими параметрами являются как значения постоянной электронной плотности исследуемой поверхности УДЧ, так и параметры, влияющие на форму поверхности вокруг ЗО. Управление эмпирическими параметрами, при сравнении моделируемой поверхности с известными экспериментальными данными, позволяет достичь необходимой точности моделирования.

Список литературы

1. Bardeen J. // Phys. Rev. Lett. - 1961.- V. 6.- P. 57.
2. Tersoff J. and Hamann D.R. // Phys. Ref. Lett.- 1985.- V. 31.- №2.- P. 805-813.
3. Tersoff J., Hamann D.R. // Phys. Ref. B.- 1985. - V. 38.- №12.- P. 805-813.