

УДК: 538.95

PACS numbers: 74.55.+v, 85.30.Hi, 73.50.-h

К последним достижениям в теории сканирующей туннельной микроскопии

Н.В. Хоткевич-Санина

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина Национальной академии наук Украины,
Проспект Ленина 47, г. Харьков, 61103, Украина*

Данная работа относится очень развитой на сегодняшний день области исследований проводящих материалов - сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). В этой статье впервые представлено строгое теоретическое решение двух важных задач для СТМ исследований – спектроскопии размерно квантованных пленок и проблемы восстановления Ферми-контура поверхностных электронов, которые, несмотря на наличие ряда экспериментальных работ, не имели до этого строгого теоретического описания. Приведены расчеты дифференциальной проводимости для системы СТМ-контакт и размерно квантованная пленка; СТМ-контакт и единичный рассеиватель на поверхности металла. Полученные теоретические результаты, безусловно, необходимы для правильной интерпретации экспериментов и дальнейшего расширения области применимости СТМ для исследования электронных спектров и Ферми-контуров двумерных поверхностных электронных состояний в проводящих материалах.

Ключевые слова: СТМ, тонкая пленка, кондактанс, туннелирование электронов, поверхностные состояния, единичный дефект, рассеяние электронов.

Дана робота стосується дуже розвиненої на сьогоднішній день галузі досліджень провідних матеріалів - скануючої тунельної мікроскопії (СТМ). У цій статті вперше представлено докладний теоретичний розв'язок двох важливих завдань для СТМ досліджень - спектроскопії розмірно квантованих плівок і проблеми відновлення Фермі - контура поверхневих електронів, які , незважаючи на наявність ряду експериментальних робіт, не мали до цього послідовного теоретичного опису . Наведено розрахунки диференціальної провідності для системи СТМ - контакт і розмірно квантована плівка; СТМ - контакт і одиничний розсіювач на поверхні металу. Отримані теоретичні результати, безумовно, необхідні для правильної інтерпретації експериментів і подальшого розширення області застосування СТМ для дослідження електронних спектрів та Фермі - контурів двовимірних поверхневих електронних станів в провідних матеріалах .

Ключові слова: СТМ, тонка плівка, кондактанс, тунелювання електронів, поверхневі стани, одиничний домішок, розсіювання електронів,.

This work relates with a scanning tunneling microscopy (STM), which is very advanced branch of a conducting materials research today. In this article a rigorous theoretical solution of two important problems for STM studies is presented for the first time. The problems are: spectroscopy of size-quantized films and recovery of a Fermi contour of surface electrons. Despite the presence of a number of experimental works, there is a lack of the rigorous theoretical description. Calculations of a differential conductance are given for a system with an STM contact and dimensionally quantized film; STM contact and surface electron. The theoretical results are, undoubtedly, necessary for the correct interpretation of experiments and further applicability of the STM to study the electronic spectra and the Fermi - surface contours of two-dimensional electron states in conducting materials.

Keywords: STM, thin film, conductance, electron tunneling, surface states, single defect, electron scattering.

Введение

В 1966 году Р. Янг (R.D. Young) предложил идею создания высокоточного прибора (топографера) для исследования поверхностей проводников, основанного на измерении туннельного тока между контактом малых размеров и исследуемым образцом [1]. В 1971 г. были получены первые «топографические изображения»

поверхности с разрешением около 3 нм по вертикали [2]. Современные модификации топографера, более известного как сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) [3], имеют разрешение до 0.01 нм в вертикальном и 0.1 нм в горизонтальном направлениях [4], и сегодня СТМ является одним из наиболее эффективных инструментов исследования свойств и характеристик

поверхностей проводников [5].

Теории СТМ посвящено значительное число работ (см., например, обзоры [6,7]). Их можно условно разделить на две группы. Первая - расчеты из первых принципов, учитывающие кристаллическую структуру исследуемого проводника, форму контакта СТМ, и позволяющие наиболее подробно описать эксперимент (см. обзор [8] и цитированную в нем литературу). Основным недостатком такого рода подходов является необходимость выполнения достаточно сложных численных расчетов для каждой конкретной системы контакт – образец. Потому при описании СТМ экспериментов широко используются результаты, основанные на упрощенных моделях туннельного барьера и определенных предположениях о виде электронных волновых функций. В этом случае, в рамках стандартных подходов теории туннельного эффекта, можно получить аналитические формулы, содержащие в явном виде функциональные зависимости вольт – амперных характеристик СТМ от физических параметров и, поэтому, применимые для широкого круга задач.

Ряд авторов уже предложили несколько достаточно хороших моделей для описания СТМ (см., например, [9,10]). В данной работе будет использована не менее удобная, и, по некоторым параметрам, более реалистичная модель, предложенная Куликом, Мицаем и Омельянчуком (КМО) [11]. В работе [11] рассматривается модель (рис.1) неоднородного бесконечно тонкого туннельного барьера

$$U(\mathbf{r}) = U_0 f(\rho) \delta(z),$$

где $f(\rho)$ - произвольная функция двумерного вектора $\rho = (x, y)$, удовлетворяющая следующему условию

$$() \quad \begin{cases} \sim 1, & \lesssim \\ \rightarrow \infty, & \end{cases}$$

В пределе стремящейся к бесконечности амплитуды $U_0 \rightarrow \infty$, уравнение Шредингера может быть решено асимптотически точно для произвольной функции $f(\rho)$, в том числе - для контакта радиусом меньше длины волны электрона.

Выбор потенциала (1) соответствует наличию в плоскости $z=0$ бесконечно тонкой непроводящей перегородки, в которой, однако, существует область радиуса a , в пределах которой проводимость возможна. Эта область может быть описана тета-функцией Хэвисайда $\theta(a - \rho)$, что соответствует круглому отверстию с жесткими границами, либо любой другой функцией, удовлетворяющей условию (2), к примеру, e^{ρ^2/a^2} [11].

Действительно, введение потенциала в виде (11) позволяет свести решение неоднородного уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}),$$

к решению однородного уравнения, но с дополнительными граничными условиями:

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(\rho, +0) &= \psi^{(-)}(\rho, -0); \\ \psi_z^{(+)}(\rho, +0) - \psi_z^{(-)}(\rho, -0) &= \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} U_0 f(\rho) \psi^{(\pm)}(\rho, 0), \end{aligned}$$

что заметно упрощает задачу отыскания волновой функции. Данная модель хорошо себя проявила при описании процесса туннелирования в решении ряда задач, касающихся теории сканирующей туннельной микроскопии (см. обзор [12]). В частности, с помощью нее были решены задачи о нахождении глубины расположения примеси под поверхностью металла как для СТМ с одним контактом [13], так и для сканирующего туннельного микроскопа с двумя kontaktами [14]; влиянии кондо примеси, находящейся под поверхностью металла на туннельный и дифференциальный проводимость в системе, содержащей туннельный контакт [15]; задачи о спин-поляризованной дифференциальной проводимости СТМ-контакта при существовании под поверхностью металла магнитного кластера [16] и многие другие (полный перечень работ см. в обзоре [12]). В данной статье будут рассмотрены два последних теоретических результата, в которых использована модель КМО – спектроскопия размерно-квантованных пленок и восстановление Ферми-контура поверхностных электронов.

Спектроскопия размерно-квантованных пленок

Рассмотрим систему, содержащую контакт сканирующего туннельного микроскопа и тонкую металлическую пленку, находящейся на непроводящей подложке (см. рис.1а.). Задача состоит в том, чтобы найти зависимость дифференциальной проводимости, или иначе говоря, кондактанса для такой системы от приложенного к контакту напряжения.

Толщина пленки d . Очевидно, что для использования модели КМО при решении уравнения Шредингера для данной задачи, следует дополнить граничные условия (4),(5) еще одним

$$\psi(\rho, d) = 0,$$

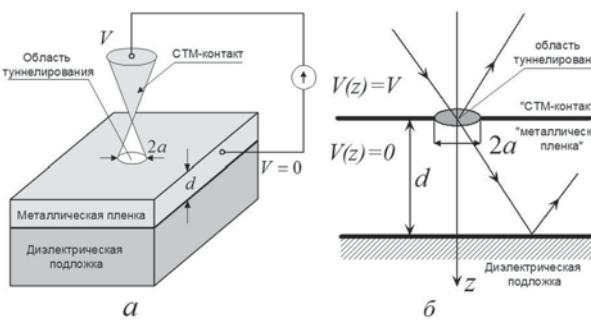


Рис.1. Схематическое изображение эксперимента с СТМ и тонкой металлической пленкой (а) и используемая в работе модель контакта между проводником объемного типа (СТМ-контакт) и металлической пленкой (б). Классические траектории на рис.1б показаны схематически.

которое соответствует условию абсолютной непрозрачности границы пленка-подложка для электронов.

Уравнение (3) может быть решено в пределе малого контакта $ka \ll 1$ ($k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$ - абсолютное значение волнового вектора электрона \mathbf{k}). В нулевом приближении по диаметру контакта решения уравнения (3) для $z > 0$ и $z < 0$ являются независимыми и удовлетворяют нулевому граничному условию $\Psi(\rho, 0) = 0$ на непроницаемой плоскости $z = 0$. Квантовое состояние в проводящем полупространстве $z < 0$ (контакт) определяются тремя компонентами волнового вектора электрона $\mathbf{k} = (k_{||}, k_z)$, здесь $k_{||}$ - двумерная компонента волнового вектора, параллельная поверхности образца. В металлической пленке $0 < z < d$ квантовые состояния характеризуются двумерным волновым вектором \mathbf{k} , перпендикулярным оси z , и дискретным набором квантовых чисел n ($n = 1, 2, 3, \dots$), что является результатом финитного размера проводника в направлении z . Собственными значениями энергии и волновыми функциями двух изолированных проводников для области $z < 0$ являются:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 (k_{||}^2 + k_z^2)}{2m^*} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$\psi_0(\mathbf{r}) = 2i \sin k_z z e^{ik_{||}\rho},$$

и для полупространства $z > 0$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}^2 + k_{zn}^2)}{2m^*}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\psi_0(\mathbf{r}) = -2i \sin k_{zn} z e^{ik\rho},$$

где $k_{zn} = \pi n/d$. В формулах (8) и (10) использована

нормировка волновой функции на единичный поток в падающей волне. Процедура нахождения волновой функции прошедших электронов в первом приближении по порядку малости $1/U_0$ методом КМО подробно описана в работе [11] и не является главной целью данной статьи. Однако следует привести выражения для волновой функции протуннелировавших в пленку и из пленки электронов, так как они позволяют вычислить туннельный ток и получить искомое выражение для контактанса рассматриваемой системы:

$$\psi_1(\rho, z) = \frac{ik_z \hbar^2 a}{m U_0} \int_0^\infty d\kappa' J_0(\kappa' \rho) J_1(\kappa' a) \frac{\sin k_z(d-z)}{\sin k_z d}, \quad 0 < z \leq d,$$

$$k_z = \sqrt{k^2 - \kappa'^2},$$

$$\psi_1(\rho, z) = \frac{ik_{zn} \hbar^2 a}{m U_0} \int_0^\infty d\kappa' J_0(\kappa' \rho) J_1(\kappa' a) e^{-ik_{zn}z}, \quad z < 0.$$

Как было показано в работе [17] для баллистического точечного контакта малого радиуса a , много меньшего длины свободного пробега электрона l : $a \ll l$, электрический потенциал $V(\mathbf{r})$ падает на расстоянии $r \sim a$ от контакта, так что в пределе $a \rightarrow 0$ потенциал $V(\mathbf{r})$ можно аппроксимировать ступенчатой функцией $V\Theta(-z)$. В этом приближении для вычисления электрического тока можно принять функции распределения электронов f^\pm при $z \neq 0$ как функции ферми f_F с энергиями, отличающимися на значения приложенного к контакту напряжения eV (e - отрицательный заряд электрона), $f^\pm = f_F(\varepsilon - eV\Theta(-z))$. На рис.2 проиллюстрированы занятые энергетические состояния в двух проводниках для обоих знаков приложенного напряжения eV . При $eV > 0$ электроны туннелируют из объемных состояний (СТМ-контакт) в пленку, и наоборот, при $eV < 0$ они туннелируют из пленки объемные состояния. Полный ток через контакт может быть вычислен путем интегрирования потока J^\pm в обоих направлениях:

$$I(V) = \frac{1}{2\pi d} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} \sum_{n=1}^{\infty} J^{(-)} f_F(\varepsilon) \times \\ \times (1 - f_F(\varepsilon - eV)) - \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} J^{(+)} \times \\ \times f_F(\varepsilon - eV) (1 - f_F(\varepsilon)),$$

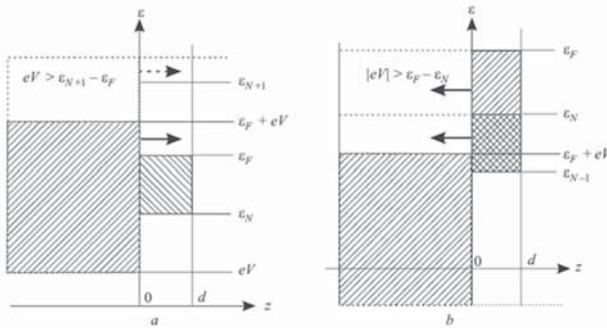


Рис.2. Занятые состояния при нулевой температуре в двух проводниках для обоих знаков приложенного напряжения: $eV>0$ (а) и $eV<0$ (б).

$$J^{(\pm)} = \frac{|e|\hbar}{m^*} \times \left. \times \int_0^a d\rho \rho \int_0^{2\pi} d\varphi \operatorname{Im} \left(\psi_1^*(\rho, z) \frac{\partial}{\partial z} \psi_1(\rho, z) \right) \right|_{z=\pm 0}.$$

В выражении (13) проводится интегрирование по двумерному волновому вектору \mathbf{k} и суммирование по дискретному квантовому числу для тока в положительном направлении оси (первое слагаемое), а по волновому вектору \mathbf{k} в полубесконечном проводнике для тока в отрицательном направлении оси (второе слагаемое). Для простоты будем считать температуру нулевой. В этом случае электрический ток определяется электронами, прошедшими контакт только в одном из направлений в зависимости от знака приложенного напряжения. Поток J^\pm вычисляется привычным образом посредством интегрирования по отверстию в плоскости $z = \pm 0$ (16), $\rho = (\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi)$. В случае

туннелирования в область $z > 0$ следует учитывать сдвиг по энергии eV , что в случае выбора шкалы

энергии в соответствии с рис. 2 означает, что абсолютное значение волнового вектора электрона в полупространстве $z < 0$ задается выражением $k = \sqrt{2m^*(\epsilon - eV)/\hbar}$.

Как известно, дифференциальной проводимостью (кондактансом) называют полную производную туннельного тока по напряжению $G = dI/dV$.

Используя волновые функции выражений (11) и (12) и подсчитав туннельный ток с помощью формул (13) и (14), получаем кондактанс для обоих направлений туннельного тока:

$$G^{(+)}(V) = G_1 \left(\frac{\tilde{k}_F}{2k_F} S_2(\tilde{k}_F) - \frac{1}{k_F^3} \int dk k^2 S_2(k) \right), \quad (15)$$

$eV > 0$;

$$G^{(-)}(V) = G_1 \left(\begin{aligned} & \frac{4}{3} \left(1 + \frac{|eV|}{\epsilon_F} \right) S_2(k_F) + \\ & + 4 \frac{|eV|}{\epsilon_F} \frac{\pi}{k_F} [\tilde{S}_3(k_F) - S_3(k_F)] + \\ & + \frac{4}{3} \frac{\pi}{(k_F d)^3} [\tilde{S}_5(k_F) - S_5(k_F)] - \\ & - \frac{k_F}{3\tilde{k}_F} \left[1 + \frac{4|eV|}{\epsilon_F} - 8 \left(\frac{|eV|}{\epsilon_F} \right)^2 \right] S_2(\tilde{k}_F) \end{aligned} \right), \quad eV \leq 0; \\ \text{В пределе } |eV| \rightarrow 0 \quad \text{дифференциальная}$$

проводимость, как и следовало ожидать, для обоих направлений туннельного тока одна и та же:

$$G(0) = G_1 S_2(k_F) = \frac{G_1}{6} N_F (N_F + 1) (2N_F + 1),$$

где $N_F = N(k_F)$ и G_1 - дифференциальная

проводимость контакта между проводником с состояниями объемного типа (область контакта) и тонкой пленкой с единственным доступным под

уровнем размерного квантования по оси z

$$G_1 = G_0(0) \frac{3\pi^3}{(k_F d)^3},$$

$G_0(0)$ - дифференциальная проводимость контакта

между двумя изолированными полупространствами. Для туннельного точечного контакта $G_0(0)$ задается

выражением [12,14]

$$G_0(0) = \left(\frac{k_F \hbar^2}{m^* U_0} \right)^2 \frac{e^2 (k_F a)^4}{36\pi\hbar}$$

В случае $d \rightarrow \infty$ выражения (15) и (16) превращаются в известные зависимости дифференциальной проводимости от напряжения для

точечного контакта между двумя изолированными проводящими полупространствами [18]:

$$G_0(V) = G_0(0) \left[1 + \frac{|eV|}{\epsilon_F} - \frac{1}{3} \left(\frac{|eV|}{\epsilon_F} \right)^3 \right].$$

Зависимость дифференциальной проводимости от напряжения представлена на рис.3 ниже. Для сравнения также представлена зависимость $G_0(V)/G_0(0)$ из формулы (20).

Пилообразная асимметричная зависимость зависимости на рис.3. может быть объяснена следующим образом. Пусть $eV > 0$ и электроны

могут туннелировать из объемных состояний в пленку (рис.2а), в которой заполнены N_F подзон размерного

квантования. Если напряжение eV меньше, чем расстояние $\Delta\epsilon$ между уровнем Ферми ϵ_F и дном следующего (свободного) подуровня $\epsilon_{N+1} = \pi^2 \hbar^2 (N_F + 1) / 2m^* d^2$, $\Delta\epsilon = \epsilon_{N+1} - \epsilon_F$, то

электрон может туннелировать в любую из N_F подзон размерного квантования. При $eV = \Delta\epsilon$ становится

возможным туннелирование в $(N_F + 1)$ подзону и кондактанс $G(V)$ испытывает положительный скачок.

Такие скачки повторяются при увеличении напряжения для всех лежащих выше подзон. При $eV < 0$, когда

электроны туннелируют из пленки в объемный металл (рис.3б), ситуация существенно другая. Если напряжение $|eV|$ становится больше чем расстояние

$\Delta\epsilon$ между дном последней частично заполненной подзоны $\epsilon_{N+1} = \pi^2 \hbar^2 N_F^2 / 2m^* d^2$ и энергией Ферми ϵ_F , $\Delta\epsilon = \epsilon_F - \epsilon_N$, вклад от подзоны N_F перестает

зависеть от напряжения, потому что для любого $|eV| > \Delta\epsilon$ все электроны этой подзоны могут

туннелировать в объемные состояния левого проводника. Поэтому дифференциальная проводимость падает для значений eV , совпадающих со значениями

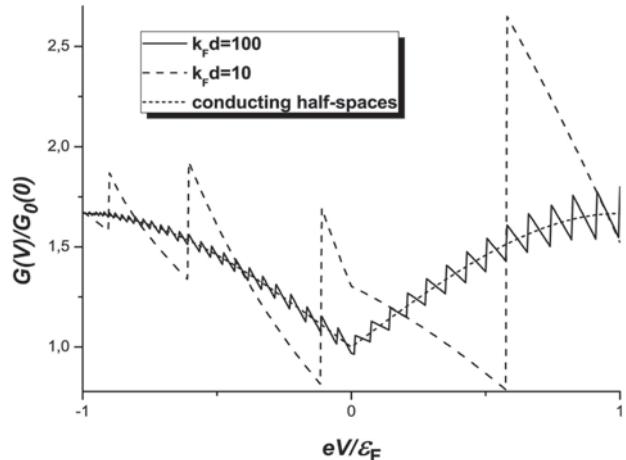


Рис. 3. Нормированная осцилляционная зависимость кондактанса $G(V)/G(0)$ от приложенного к контакту напряжения. Кривая носит пилообразный характер, что связано с квазиквантованным энергетическим спектром металлической пленки.

дна подзон размерного квантования в пленке. Расстояние между соседними скачками кондактанса по шкале напряжений равно расстоянию между энергетическими уровнями в пленке $\Delta\epsilon_N = \epsilon_{N+1} - \epsilon_N = 2\pi^2 \hbar^2 (2N_F + 1) / 2m^* d^2$. Для

$eV < 0$ число скачков кондактанса конечно и равно числу дискретных энергетических уровней под уровнем Ферми N_F . Ассиметрия вблизи $V = 0$ и

общая форма скачков кондактанса наблюдается в экспериментах (см., к примеру, [19]). В особом случае двумерной электронной системы, имеющей лишь один уровень в потенциальной яме, наблюдается лишь один отрицательный скачок $G(V)$. Такие скачки

наблюдались в работе [20] при СТМ исследованиях двумерного электронного газа на поверхностях благородных металлов. Для $eV > 0$ число скачков

формально не ограничено. Однако, для $eV > \epsilon_F$

приближение, используемое в данной работе, становится неприменимым, и должно учитываться влияние полевой эмиссии на туннельный ток [21,22].

Наблюдение проявления размерного квантования в СТМ проводимости возможно только при выполнении нескольких условий. Во-первых, расстояние между энергетическими уровнями должно быть достаточно большим и удовлетворять условию $\Delta\epsilon_N \gg \hbar/\tau, T$,

где τ время свободного пробега электронов в пленке и

T - температура. Во-вторых, поверхность металла в области контакта должна быть атомно гладкой [23]. Учет конечного времени жизни состояний, температурного размытия Ферми-ступеньки или наличие поверхностных неоднородностей приводит к сглаживанию скачков $G(V)$, представленных на

рис.3., вычисления для которого были выполнены в предположении об идеально зеркальных поверхностях, $T = 0$ и $\tau \rightarrow \infty$. Учитывая данные ограничения,

вольт-амперные кривые на рис.3 дают справедливое качественное описание экспериментальных результатов, к примеру, работы [24].

Хотелось бы также обратить внимание, что даже в приближении закона Ома (17) $eV \rightarrow 0$, не наблюдается

прямой пропорциональности кондактанса $G(V)$

плотности состояний изолированной пленки

$$\rho_f(\varepsilon) = \frac{m^* N_F}{\pi \hbar^2 d},$$

Что является следствием геометрии задачи. Связь между дифференциальной проводимостью и локальной плотностью состояний была изучена в приближении сильной связи для туннельных контактов, где геометрия контакта могла изменяться в широких пределах между точечным и планарным [25]. Авторы работы [25] показали, что кондактанс в общем случае не пропорционален плотности состояний образца, хотя черты плотности состояний могут все же присутствовать.

Хотелось бы отметить, что для любой модели потенциала, а не только для случая прямоугольной ямы, которая ограничивает движение электронов в одном из направлений, кондактанс имеет пилообразную зависимость от напряжения, с расстояниями между скачками напряжения сравнимыми с расстояниями между под уровнями размерного квантования.

Таким образом, предсказанная зависимость кондактанса от напряжения может быть использована для спектроскопии размерно-квантованных уровней. Преимуществом данного метода по сравнению с широко используемой для спектроскопии технологией фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES, см. [26]) является возможность исследовать уровни, расположенные не только ниже энергии Ферми, но и незанятые уровни над энергией Ферми, что наряду с быстротой СТМ исследований и в разы меньшей по сравнению с

ARPES стоимостью оборудования делает данный метод конкурентоспособной альтернативой для спектроскопии тонких металлических пленок.

СТМ и восстановление ферми-контура поверхностных электронов металла

Другим важным и довольно интересным с точки зрения физики металлов направлением деятельности является использование сканирующего туннельного микроскопа для решения задач, связанных с восстановлением Ферми-контура (ФК) поверхностных электронов. Основной проблемой является анализ картины стоячих волн, которая наблюдается на СТМ изображениях. Эти СТМ изображения являются ни чем иным, как зависимостью туннельного тока I , или,

чаще, кондактанса $G = dI / dV$ от положения контакта над поверхностью образца (от координат). Интерференционная картина является особенно четкой в случае единичного рассеивателя. Физическая природа осцилляций та же, что и у осцилляций Фриделя в электронной плотности состояний поблизости от рассеивателя [27]. Эти осцилляции являются результатом квантовой интерференции между налетающей на дефект и рассеянной электронными волнами.

Ряд авторов уже пытались установить соответствие между ФК двумерных электронных состояний, возникающих на поверхности ряда металлов, и формой осцилляционных минимумов и максимумов, наблюдавшихся на СТМ-изображениях [28]-[37]. Эти авторы используют метод преобразования Фурье для восстановления ФК поверхностных электронов, использование которого можно объяснить довольно просто. При низких температурах основной вклад в локальную плотность состояний под острием контакта дают электроны с энергией равной фермиевской. Преобразование Фурье дает изображение в \mathbf{k} -пространстве. В частности, это процедура, позволяющая выделить наиболее часто встречающуюся величину. Поэтому электроны с Фермиевской энергией дадут основной вклад в формирование изображения в \mathbf{k} -пространстве. Полученный контур, согласно авторам [28]-[37], является удвоенным ФК поверхностных электронов. Казалось бы, такой подход не вызывает недоверия, однако задачей физика-теоретика является не принимать ничего без строгого доказательства и проверять все результаты, как бы очевидны они не были, аналитически.

При дальнейшем рассмотрении данной задачи также возникает другой вопрос: какие тогда контуры (осцилляционные минимумы и максимумы) мы видим на СТМ-изображении, полученном в эксперименте?

Повторяет ли их форма форму ФК поверхностных электронов? Или же их связь другая? Для изотропного ФК (т.е. для окружности) ответ, казалось бы, очевиден: период осцилляций кондактанса $\Delta r = 2\pi / 2k_F$ задается удвоенным значением фермиевского волнового вектора $2k_F$. В случае анизотропного закона дисперсии электрон в реальном пространстве движется вдоль направления вектора скорости V_e , который не параллелен волновому вектору \mathbf{k} . В рассматриваемом двумерном случае

можно ожидать, что ситуация будет подобна случаю дефекта под поверхностью металла [38,39], т.е. что период осцилляций в реальном пространстве $\Delta r = 2\pi / 2\mathbf{k}_F \mathbf{n}_0$, где \mathbf{n}_0 - двумерный единичный

вектор, направленный от дефекта к точке на поверхности под острием контакта, а \mathbf{k}_F - двумерный

фермиевский волновой вектор, абсолютное значение которого зависит от его направления. Таким образом, в СТМ-изображении мы наблюдаем кривую, которая «нарисована» проекцией волнового вектора \mathbf{k}_F на

направление нормали к ФК. В случае сильно анизотропного закона дисперсии эта кривая может быть существенно отлична от самого ФК. Таким образом, возникает вопрос, можем ли мы восстановить ФК непосредственно из СТМ-изображения?

В случае туннелирования в поверхностные состояния теория КМО [11] не теряет своей применимости, однако, следует дополнить уравнение Шредингера потенциалом $V_{sur}(z)$ при $z > 0$,

позволяющим ввести поверхностные состояния типа Шокли. Потенциал $V_{sur}(z)$ и барьер $U(\mathbf{r})$ при $z = 0$ формируют потенциальную яму, которая локализует электроны возле поверхности. Явный вид функции $V_{sur}(z)$ не важен для нас. Достаточно предположить что $V_{sur}(z)$ это монотонная аналитическая функция,

которая обеспечивает существование лишь одного энергетического уровня по оси z в области $z > 0$ при

энергии, меньшей фермиевской \mathcal{E}_F . Длина локализации поверхностного состояния предполагается много большей чем характерный радиус контакта $a \ll l$.

Пусть в плоскости поверхности $z = 0$ в точке

$\mathbf{r}_0 = (\rho_0, z_0 > 0)$ расположен единичный точечный

дефект (см. рис.4). Рассеяние электронов дефектом опишем короткодействующим рассеивающим потенциалом $D(\mathbf{r}) = gD(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, локализованный в области $z > 0$ характерного радиуса r_D вокруг точки

$\mathbf{r}_0 = (\rho_0, z_0)$, g - константа, определяющая силу взаимодействия электрона с дефектом. Рассеивающий потенциал нормирован следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} D_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = 1.$$

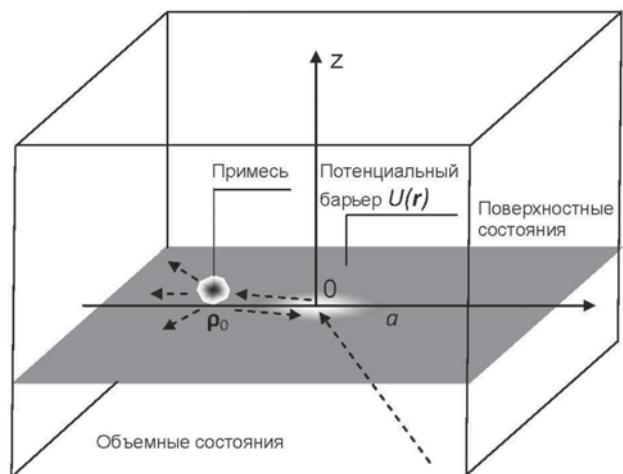


Рис.4. Модель системы, содержащей СТМ-контакт и единичный рассеиватель на поверхности металла.

Для получения аналитического решения уравнения Шредингера и вычисления тока будем использовать упрощенную модель анизотропного закона дисперсии $\epsilon(\mathbf{k})$ носителей заряда:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_{2D}(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z},$$

где \mathbf{k} - волновой вектор электрона в плоскости поверхности образца, $\epsilon_{2D}(\mathbf{k})$ - произвольная

функция, описывающая энергетический спектр поверхностных состояний, m_z - эффективная масса,

характеризующая движение электрона вдоль нормали к поверхности.

Искомая волновая функция протуннелировавших в поверхностные состояния электронов удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\begin{aligned} & \left(\varepsilon_{2D} \left(\frac{\hbar \partial}{i \partial \rho} \right) + \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m_z \partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) + \\ & + \left(\varepsilon - U(\mathbf{r}) - D(\mathbf{r}) - \right. \\ & \left. - V_{sur}(z) \theta(z) \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

где ε - энергия электрона. В отличие от предыдущей главы, для решения задачи необходимо лишь выполнение граничных условий (6), (7).

Путь вычисления туннельного тока I и дифференциальной проводимости $G=dI/dV$ после решения уравнения Шредингера (24) тот же, что описан в главе I.

Полученное выражение для кондактанса является слишком громоздким и непригодным для анализа, поэтому введем несколько дополнительных предположений и прибегнем к его асимптотическому виду. А именно, выражение принимает более удобный для восприятия вид для контактов малого радиуса

$\kappa_F a \ll 1$ ($\kappa_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\varepsilon_F - \varepsilon_0)}$) и в пределе короткодействующего рассеивающего потенциала $\kappa_F r_D \ll 1$:

$$G = G_0 \begin{cases} 1 + \frac{2\tilde{g}}{(2\pi\hbar)^2 \rho_{2D}(\varepsilon_F - \varepsilon_0)} \\ \operatorname{Re} G_{2D}^+(\rho_0; \varepsilon_F - \varepsilon_0) \\ \oint_{\varepsilon_F - \varepsilon_0 = \varepsilon_{2D}(\mathbf{k})} \frac{dl_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \cos \mathbf{k}\rho \end{cases}. \quad (25)$$

В формуле (25)

$$G_0 = \frac{e^2 \hbar^5 |\chi_0'(z=0)|^2}{8m_z^3 U_0^2} S_{eff}^2 \rho_{2D}(\varepsilon_F - \varepsilon_0) \Omega(\varepsilon_F) \quad (26)$$

кондактанс туннельного точечного контакта между невозмущенными наличием дефекта поверхностными состояниями и состояниями объемного типа, $G_{2D}^+(\rho_0; \varepsilon_F - \varepsilon_0)$ - двумерная функция Грина, $\chi_0(z)$

- решение уравнения Шредингера в нулевом приближении по обратной высоте барьера $1/U_0$ для

z-компоненты волновой функции,

$$\rho_{2D}(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \oint_{\varepsilon=\varepsilon_{2D}(\mathbf{k})} \frac{dl_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \quad (27)$$

- двумерная плотность состояний. Интегрирование в (27) ведется по дуге $l_{\mathbf{k}}$ контура постоянной энергии,

$v_{\mathbf{k}} = |\partial \varepsilon_{2D}(\mathbf{k}) / \hbar \partial \mathbf{k}|$ - абсолютное значение

двумерного вектора скорости,

$$\Omega(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m_z}}{\hbar} \int_0^\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\varepsilon - \varepsilon'} \rho_{2D}(\varepsilon'),$$

$$S_{eff} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\rho}{f(\rho)}$$

- эффективная площадь контакта и

$$\tilde{g} = g \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \int_0^{\infty} dz D_0(\rho, z - z_0) |\chi_0(z)|^2$$

- эффективная константа взаимодействия с дефектом для электронов поверхностных состояний. Для больших расстояний между контактом и дефектом $k_F \rho_0 \gg 1$ уравнение (25) может быть еще более упрощено и конечная формула для дифференциальной проводимости принимает удобный для анализа вид:

$$\frac{G_{osc}}{G_0} = \tilde{g} \frac{\operatorname{sgn} K(\mathbf{k}) \cos(2\mathbf{k}\rho_0)}{2\rho_{2D}(\varepsilon) \hbar^2 v_{\mathbf{k}}^2 |K(\mathbf{k})| \rho_0} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\varepsilon_F - \varepsilon_0, \phi_0)},$$

ϕ_0 где - точка стационарной фазы интеграла (25) при $\rho = \rho_0$. Асимптотическая формула (31) может быть использована для описания экспериментальных данных с хорошей точностью, если a и r_D меньше чем фермиевская длина волны λ_F и $k_F \rho_0 \gg 1$.

Из формулы (31) видно, что период осцилляций дифференциальной проводимости определяется функцией $\mathbf{k}(\varepsilon_F, \phi_0) \rho_0$. Учитывая тот факт, что в точке стационарной фазы $\mathbf{k}(\varepsilon_F, \phi_0)$ вектор ρ_0

параллелен скорости электрона $\rho_0 \parallel \mathbf{v}_k(\varepsilon_F, \phi_0)$, имеем

$$\mathbf{k}(\varepsilon_F, \phi_0) \rho_0 = \mathbf{k} \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \rho_0 = h(\varepsilon_F, \phi_0) \rho_0.$$

В (32) $\mathbf{v}_k / v_k = \mathbf{n}_k$ - единичный вектор нормали к контуру постоянной энергии $\varepsilon_{2D}(\mathbf{q}) = \varepsilon_F - \varepsilon_0$ в точке, заданной вектором \mathbf{k} .

По определению функция $h(\phi) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_k > 0$ - расстояние

между центром кривой и касательной, проведенной к кривой через конец вектора \mathbf{k}_k - ни что иное, как хорошо известная в дифференциальной геометрии опорная функция выпуклой плоской кривой [40]. На рис.5 ниже приведена геометрическая разница между кривой и ее опорной функцией. Для заданных $h(\phi)$, а также ее первой и второй производной $\dot{h}(\phi)$ и $\ddot{h}(\phi)$, выпуклая плоская кривая задается

параметрическими уравнениями [40]:

$$\begin{cases} \kappa_x(\phi) = h(\phi) \cos \phi - \dot{h}(\phi) \sin \phi \\ \kappa_y(\phi) = h(\phi) \sin \phi + \dot{h}(\phi) \cos \phi \end{cases}$$

и радиус кривизны $R(\phi)$ это

$$R(\phi) = h(\phi) + \ddot{h}(\phi),$$

кривизна $K(\phi) = 1/R(\phi)$. Очевидно, что для окружности

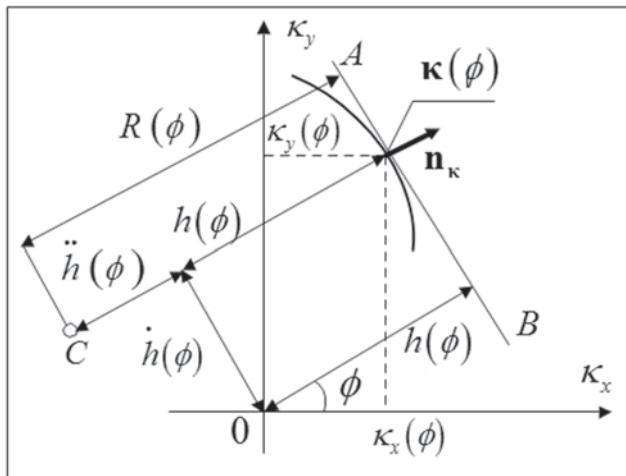


Рис. 5. Геометрические соотношения между координатами $k_x(\phi)$ и $k_y(\phi)$ параметрически заданной выпуклой кривой, ее опорной функцией $h(\phi)$ и производными $\dot{h}(\phi)$, $\ddot{h}(\phi)$ по углу ϕ , радиусом кривизны $R(\phi)$ и вектором нормали в точке . АВ – касательная к кривой в точке $k(\phi)$.

$|\mathbf{k}|$ - константа и зависимость опорной функции от угла совпадает с самой кривой, $h=k$.

Минимумы и максимумы осцилляционной зависимости кондактанса являются кривыми постоянной фазы осциллирующих функций из уравнения (32), $2h(\phi_0)\rho_0=\text{const}$, и видимые контуры определяются функцией

$$\rho_0(\phi_0) = \frac{\text{const}}{2h(\phi_0)}.$$

Таким образом, уравнения (33) и (34) дают принципиальную возможность восстановить ФК напрямую из СТМ-изображения. Невыпуклый контур

$\rho_0(\phi_0)$ может быть разделен на части, где кривизна имеет постоянный знак, и для каждой из них может быть применена процедура, описанная выше.

Для ответа на вопрос, какой же контур $F(\mathbf{q})$ можно получить из преобразования Фурье СТМ-изображения, проанализируем выражение (31).

Хотя формула (31) справедлива при $k_F \rho_0 > 1$, в области $k_F \rho_0 > 1$ отличие истинного периода осцилляций $\Delta \rho_0$ от значения $\Delta \rho_0 = \pi/h(\phi_0)$ пренебрежимо мала, что может быть показано точно для эллиптического ФК [41]. Выполняя преобразование Фурье находим

$$\begin{aligned} (2\pi)^2 F(\mathbf{q}) = & \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \rho \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\cos(2h(\phi)\rho)}{\rho} \exp(iQ(\phi)\rho) = \\ & \frac{\pi}{2} \left[\frac{1}{2h(\phi_1) - Q(\phi_1)} + \frac{1}{2h(\phi_2) + Q(\phi_2)} \right] - \\ & - i \int_0^{2\pi} d\phi \frac{Q(\phi)}{Q^2(\phi_1) - 4h^2(\phi_1)}, \end{aligned} \quad (36)$$

где

$$Q(\phi) = (q_x \cos \phi + q_y \sin \phi),$$

$\phi_{1,2} = \phi_{1,2}(q_x, q_y)$ - решения уравнения

$$2h(\phi_{1,2}) = \pm Q(\phi_{1,2}).$$

Функция $F(\mathbf{q})$ имеет сингулярность при

$$2h(\phi_{1,2}) = \pm Q(\phi_{1,2}).$$

Из уравнений (33) следует, что для k_x и k_y принадлежащих контуру постоянной энергии

$$\kappa_x \cos \phi + \kappa_y \sin \phi = h(\phi) > 0,$$

$$\kappa_x \sin \phi - \kappa_y \cos \phi = \dot{h}(\phi).$$

Легко видеть, что одновременное выполнение условий (38) и (39) при $\phi = \phi_1$ эквивалентно уравнениям (40) и (41), которые являются параметрическими уравнениями контура постоянной энергии, т.е. преобразование Фурье дает удвоенный ФК поверхностных электронных состояний. Решение $\phi = \phi_2$ второго уравнения соответствует центрально симметричной точке $-\mathbf{q}=(-q_x, -q_y)$ двумерной поверхности Ферми.

Рис. 6 является иллюстрацией картины стоячих

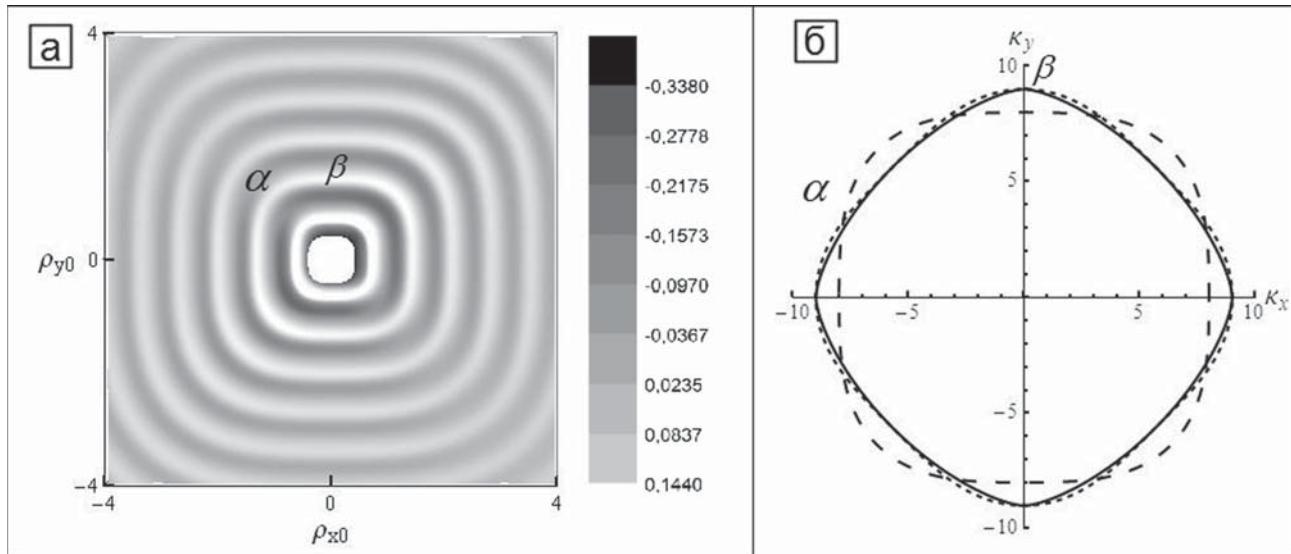


Рис. 6. а) Осцилляционная картина зависимости кондактанса $G(V)$ (31) от координат, возникающая из-за рассеяния электрона поверхностью дефектом. Координаты ρ_{x0} , ρ_{y0} даны в единицах $1/k_0$. Опорная функция задана выражением (42). б) Ферми-контура (сплошная линия), его опорная функция (короткоточкированная линия) и $1/h$ (длиннопунктирная линия), k_x и k_y даны в единицах k_0 .

волн пространственного изменения дифференциальной проводимости (32) вокруг дефекта для модельного ФК, который выбран как выпуклая фигура с опорной функцией [42]

$$h(\phi) = 2k_0 (\cos^2 2\phi + 4).$$

В отсутствие спин-орбитального взаимодействия, как следствие центральносимметричности двумерной поверхности Ферми $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(-\mathbf{k})$, контур, описываемый опорной функцией $h(\phi)$ (42) также имеет это свойство $h(\phi) = h(\phi + \pi)$. Параметрические уравнения кривой на рис.6 могут быть легко получены из (33). Рис. 6б показывает различие между истинной формой кривой и ее опорной функцией.

Соотношение между контурами постоянной фазы $\rho_0 = \text{const}/2h(\phi)$ в осциллирующей зависимости кондактанса (31) на рис.6 могут быть объяснены следующим образом [38]. Для анизотропного ФК поверхностные электроны движутся вдоль направления вектора скорости v_k , который в общем случае не параллелен волновому вектору \mathbf{k} . Стоячая волна в любой точке СТМ-изображения определяется скоростью, направленной от контакта к дефекту. Для частей контура Ферми, имеющего малую кривизну (точка α на рис. 6б) все электроны для различных \mathbf{k} имеют малые скорости. В реальном пространстве они все вместе формируют узко направленный пучок электронов и дают вклад только в малую область СТМ-изображения. Наоборот, для электронов, принадлежащих малым частям ФК с большой кривизной (точка β на рис. 6б), малое изменение угла ϕ (и, следовательно, малое изменение $k(\phi)$)

приводит к большой разнице в направлении скорости. Такие малые части ФК определяют большие сектора в интерференционной картине. Мы подчеркиваем, что, несмотря на сходство, контуры постоянной фазы в $G(\rho_0)$ не являются просто повернутыми контурами Ферми.

Таким образом, мы исследовали дифференциальную проводимость системы, которая содержит туннельный точечный контакт малого размера и единичную рассеивающую примесь на поверхности металла. Рассмотрен случай туннелирования из поверхностных состояний. Главной задачей было учсть рассеяние электронов поверхностью дефектом и изучить форму получившихся в результате осцилляций. Анализ был проведен на основе асимптотической формулы для кондактанса, справедливой для большой высоты туннельного барьера, больших расстояний между контактом и дефектом и малого размера контакта. Была найдена связь между формой картины стоячих волн в осцилляционной части зависимости кондактанса от координат, и геометрией двумерного Ферми-контура. Было показано, что СТМ-изображение не повторяет форму ФК, а дает контуры обратной опорной функции $1/h(\phi)$ двумерного ФК. В работе описана строгая математическая процедура восстановления ФК из СТМ-изображения в реальном пространстве.

Одним из главных достижений работы является то, что задача была решена для произвольной формы поверхности Ферми-контура. Это значит, что изложенная в работе теория может быть применима для интерпретации экспериментальных данных, полученных от любого металлического образца.

Конечно, стоит отметить, что все известные металлы могут иметь поверхностные состояния. Но без потери общности можно сказать, что представленное в статье выражение для дифференциальной проводимости может быть применимо для любого металла, имеющего поверхностные электронные состояния.

На сегодняшний день СТМ-исследования становятся новым методом фермиологии. Используя Фурье-трансформ сканирующую туннельную спектроскопию (СТС) ФК может быть найден из стоячих волн электронов, вызванных наличием дефекта, для электронов, имеющих энергию, близкую к фермиевской. Для подтверждения соответствия между полученными контурами и реальным ФК используются различные теоретические приближения (обзор экспериментальных и теоретических результатов по этому вопросу см. [29]). Однако, в некоторых случаях (см, к примеру, рис. 2 в [29]) такое соответствие не очевидно. Мы предложили другой способ, который стал очень многообещающим в физике металлов [43]: экспериментальные данные сравниваются с теоретическими формулами, полученными для произвольного контура Ферми, т.е. обратная задача восстановления ФК из экспериментальных данных должна быть решена.

Таким образом, полученные в этой статье формулы для дифференциальной проводимости и описанная процедура восстановления поверхностного ФК, которая может быть напрямую из СТМ-изображения в реальном пространстве, может служить хорошей альтернативой преобразованию Фурье СТМ изображений.

Благодарность

Автор выражает благодарность, во-первых, кандидату физико-математических наук Владимиру Владимировичу Хоткевичу и доктору физико-математических наук Андрею Владимировичу Хоткевичу, чье увлечение наукой и самоотверженный труд на поприще различных областей экспериментальной физики вдохновили меня избрать физику своей профессией; и во-вторых, своему научному руководителю, доктору физико-математических наук, профессору Колесниченко Юрию Алексеевичу за многолетнюю поддержку и содействие, без которых была бы невозможна данная работа и ее исследования, о которых в ней идет речь.

1. R. D. Young, Rev. Sci. Instrum. 37, 275 (1966).
2. R. D. Young, Phys. Today 24, 42 (1971); R. Young, J. Ward, and F. Scire, Rev. Sci. Instrum. 43, 999 (1972).
3. G. Binnig and H. Rohrer, Rev. Mod. Phys. 59, 615 (1987).
4. C. Bai, Scanning tunneling microscopy and its applications.

New York, Springer Verlag (2000).

5. S. N. Magonov, Myung-Hwan Whangbo, Surface Analysis with STM and AFM, VSH, Weinheim, New York, Basel, Cambridge, Tokyo (1996).
6. W. A. Hofer, A. S. Foster, A. L. Shluger, Rev. Mod. Phys., 75, 1287 (2003).
7. J. M. Blanco, F. Flores, Rubén Pérez, Progr. Surface Science, 81, 403 (2006).
8. H. Lin, J. Rauba, K. S. Thygesen et al., Front. Phys. China, 5(4), 369 (2010).
9. J. Tersoff, D. Hamann, Phys. Rev. Lett. 50 1998 (1983); Phys. Rev. B, 31, 805 (1985).
10. C.J. Chen, Phys. Rev. B, 65, 148 (1985); J. Vac. Sei. Technol. A 9 (1), 44 (1991).
11. I. O. Kulik, Yu .N. Mitsai, A. N. Omel'yanchuk, Sov. Phys.-JETP, 39, 514 (1974) [Zh. Eksp. Theor. Phys. 66, 1051 (1974)].
12. Ye. S. Avotina, Yu. A. Kolesnichenko and J. M. van Ruitenbeek, Low Temp. Phys., 36, 849 (2010) [Fiz. Nizk. Temp., 36, 1066 (2010)].
13. Ye. S. Avotina, Yu. A. Kolesnichenko, A. N. Omelyanchouk et al., Phys. Rev. B 71, 115430 (2005).
14. N.V.Khotkevych, Yu.A. Kolesnichenko, J.M. van Ruitenbeek Journal of Phys.: Conf. ser. 400 042031 (2012).
15. Ye S Avotina, Yu A Kolesnichenko and J M van Ruitenbeek J. Phys.: Condens. Matter 20 115208 (2008).
16. Ye. S. Avotina, Yu. A. Kolesnichenko, and J. M. Ruitenbeek, Phys. Rev. B 80, 115333 (2009).
17. I.O. Kulik, A.N. Omel'anchuk, and R.I. Shekhter, Fiz. Nizk. Temp. 3, 1543 (1977) [Sov. J. Low Temp. Phys. 3, 740 (1977)].
18. Ye. S. Avotina, Yu. A. Kolesnichenko, and J.M. Ruitenbeek, J. Phys.: Condens. Matter 20, 115208 (2008).
19. C.-S. Jiang, H.-B. Yu, X.-D. Wang, C.-K. Shih, and Ph. Ebert, Phys. Rev. B 64, 235410 (2001).
20. L. Bürgi, N. Knorr, H. Brune, M.A. Schneider, K. Kern, Appl. Phys. A 75, 141 (2002).
21. O.Yu. Kolesnychenko, O.I. Shklyarevskii, and H. van Kempen, Phys. Rev. Lett. 83, 2242 (1999).
22. C. Pauly, M. Grob, M. Pezzotta, M. Pratzer, and M. Morgenstern, Phys. Rev. B 81, 125446 (2010).
23. Tavger : B. A. Tavger, V. Ya. Demikhovskii, Soviet Physics Uspekhi, 11, 644 (1969).
24. I. B. Altfeder, D. M. Chen, and K. A. Matveev, Phys. Rev. Lett. 80, 4895 (1998).
25. C. Berthod, T. Giamarchi, Phys. Rev. B 84, 155414 (2011).
26. A. Damascelli Physica Scripta T109, 61-74 (2004).
27. Friedel F. Nuovo Cimento 7 287 (1958).
28. Petersen L., Hofmann Ph., Plummer E. W., Besenbacher F., Petersen L. et al. J. of El. Spec. and Rel. Phen. 109 97 (2000).
29. Simon L., Bena C., Vonau F., Cranney M. and Aube D. J. Phys. D: Appl. Phys. 44 464010 (2011).
30. Petersen L., Sprunger P.T., Hofmann Ph. et al. Phys. Rev. B 57 R6858 (1998).

31. Vonau F., Aubel D., Gewinner G., Pirri C., Peruchetti J. C., Bolmont D. and Simon L. Phys. Rev. B 69 R081305 (2004).
32. Sprunger P. T., Petersen L., Plummer E. W., Lagsgaard E. and Besenbacher F. Science 275 1764 (1997).
33. Petersen L., Schaefer B., Lagsgaard E., Stensgaard I., Besenbacher F. Surf. Science 457 319-325 (2000).
34. Fujita D., Xu M., Onishi K., Kitahara M. and Sagisaka K. J. of El. Micr. 53 177 (2004).
35. Briner B. G., Hofmann Ph., Doering M., Rust H.-P., Plummer E. W. and Bradshaw A. M. Europhys. Lett. 39 67 (2004).
36. Petersen L., Laitenberger P., Lagsgaard E. and Besenbacher F. Phys. Rev. B 58 5361 (1998).
37. Kralj M., Milun M., Pervan P. Surface Science 557 208 (2004).
38. Avotina Ye. S., Kolesnichenko Yu. A., Otte A. F. and Ruitenbeek J. M. Phys. Rev. B 74 085411 (2006).
39. Avotina Ye. S., Kolesnichenko Yu. A., Roobol S. B. and Ruitenbeek J. M. Low Temp. Phys. 34 207 (2008).
40. Guggenheim H. W. Differential geometry (General Publishing Company) (1997).
41. N.V.Khotkevych, Yu.A. Kolesnichenko Fizika Nizkikh Temperatur 39 No. 3 384–389 (2013).
42. Rabinowitz S. Missouri J. of Math. Scien. 9 23 1997.
43. Lifshits I. M., Azbel M.Ya., and Kaganov M. I. Electron theory of metals (New York Colsultants Bureau) (1973) .