

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗОНДА РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ
СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА С ПОВЕРХНОСТЬЮ ОБРАЗЦА**

© 2012 г. А.С. АНТОНОВ, Д.Н. СОКОЛОВ, Н.Ю. СДОБНЯКОВ,
Т.Ю. ЗЫКОВ, А.Ю. КОЛОСОВ

Тверской государственный университет
e-mail: nsdobnyakov@mail.ru

Физика поверхностных явлений в настоящее время является одним из наиболее интенсивно развивающихся разделов науки. Именно на фундаментальных исследованиях в области физики поверхности твердого тела основаны успехи современных микро- и нанoeлектроники, гетерогенного катализа, космических технологий и т.п. Поэтому исследование разнообразных электронных, атомных и молекулярных процессов, происходящих на поверхности твердых тел, остается актуальной задачей, а заветным желанием исследователей на протяжении многих лет – непосредственное наблюдение за поведением отдельных атомов на поверхности твердого тела и изучение процессов с участием одиночных или небольших групп атомов. В частности, особый интерес представляют собой наноразмерные пленки с фрактальной структурой, получаемые в условиях самоорганизации, далеких от равновесных, результаты для образца «золото на слюде» получены нами в работах [1, 2]. Кроме исследования морфологии поверхности образца СТМ позволяет исследовать и его локальную электронную структуру проводящих поверхностей с атомным разрешением методом сканирующей туннельной спектроскопии.

С помощью этого метода, можно исследовать зависимости туннельного тока, протекающего в системе острие-образец, от приложенного напряжения смещения (ВАХ туннельного перехода). При этом при анализе этих данных информация об электронной структуре образца может быть сильно искажена, если не брать во внимание влияние различных факторов, которые не всегда можно корректно учесть (упругая деформация острия под действием пондеромоторных сил, термическое расширение острия). Знание структуры зонда СТМ важно для качественной интерпретации данных СТМ с атомным разрешением, улучшения параметров пространственного разрешения, поскольку электронная структура острия зонда влияет на условия туннелирования электронов в разных участках образца. Несмотря на тот факт, что к настоящему времени существует способ получения зондов с заданной электронной структурой при использовании ориентированных монокристаллических игл с заранее известной кристаллографической структурой [3], актуальной задачей является моделирование процессов, происходящих при технологическом использовании зонда.

При изменении напряжения между острием и образцом может происходить термический разогрев острия, вызванный энергией, выделяющейся в приповерхностной области острия в процессе туннелирования электронов (термическое расширение острия, связанное с выделением энергии Джоуля-Ленца и энергии Ноттинггама) [4]. Этот эффект может оказать влияние на вольт-амперные характеристики туннельного барьера, т.к. ширина зазора зависит от приложенного напряжения. Ранее нами было показано [5], что при исследовании ВАХ контакта металл-металл для образца золота и острия вольфрама получаемые экспериментальные результаты свидетельствуют о необходимости тщательного учета параметров, влияющих на туннельный ток, для извлечения информации об электронной структуре образца. Форма туннельного барьера

и ее изменение от приложенного напряжения оказывает существенное влияние на получаемые данные. Для анализа экспериментальных данных необходим детальный учет прозрачности туннельного барьера. Причем эффект термического расширения острия оказывает существенное влияние на форму вольт-амперных характеристик системы даже при малых по сравнению с работой выхода напряжениях смещения. Отметим, что изменение длины острия происходит в основном за счет термического расширения. Причем вклад энергии Джоуля-Ленца пренебрежимо мал в сравнении с вкладом энергии Ноттинггама. При этом тепловое расширение острия может достигать величин, сравнимых с шириной туннельного промежутка и возможно возникновение лавинообразного процесса теплового расширения острия, приводящего к возникновению контакта между острием зонда и поверхностью образца.

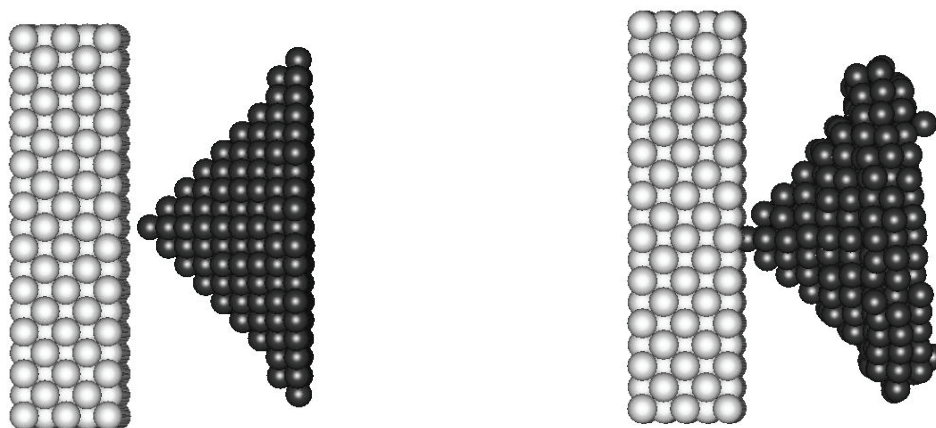


Рис. 1. Система острие-образец до (левый рисунок) и после проведения (правый рисунок) процесса моделирования.

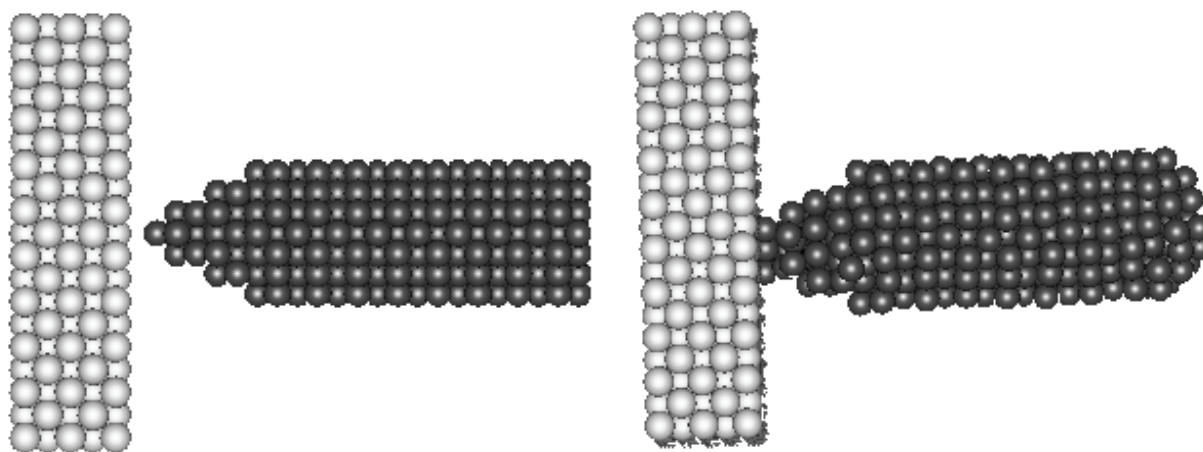


Рис. 2. Система острие-образец до (левый рисунок) и после проведения (правый рисунок) процесса моделирования.

В рамках настоящей работы нами произведено моделирование взаимодействия острия зонда (медь) с поверхностью образца (золото) в процессе нагревания зонда при прохождении туннельного тока для различных конфигураций острия. На Рис. 1, 2 показана эволюция системы острие-образец до и после проведения процесса моделирования для конфигурации острия конус и стержень соответственно (расстояние между образцом и острием в начальной конфигурации составляет 0,1 нм).

Для описания взаимодействия использовался многочастичный потенциал Гупта, который хорошо зарекомендовал себя для описания металлических систем:

$$U = \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j \neq i}^N A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) - \left[\sum_{j \neq i}^N \zeta^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) \right]^{1/2} \right\}.$$

Здесь r_{ij} - расстояние между атомами i и j в кластере, параметр A - экспериментальное значение энергии когезии, r_0 - параметр кристаллической решётки, p и q - значения упругих постоянных кристаллической структуры при $T = 0$ К, данные параметры для системы медь-золото взяты из работы [6].

Необходимо отметить, что для измерения ВАХ неприемлемо наличие механического контакта между образцом и острием или даже частичный перенос вещества острия (см. Рис. 1,2 после проведения процесса моделирования) на образец, однако данная технология может быть использована при реализации поверхностной модификации в нанометровой области образца с использованием СТМ [7]. Поскольку данная технология

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зыков Т.Ю., Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Базулев А.Н., Антонов А.С. Исследование морфологии рельефа поверхности золота на слюде методом сканирующей туннельной микроскопии. // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2009, т. 11, № 4, с. 309-313.
2. Сдобняков Н.Ю., Зыков Т.Ю., Базулев А.Н., Антонов А.С. Применение метода сканирующей туннельной микроскопии для исследования рельефа различной размерности золота на слюде. // Вестник ТвГУ, серия «Физика». – 2009, № 41, вып. 6, с. 112-119.
3. Чайка А.Н., Назин С.С., Семенов В.Н., Глебовский В.Г., Божко С.И., Люббен О., Красников С.А., Радикан К., Швец И.В. Использование монокристаллического вольфрама для создания высокоразрешающих зондов СТМ с контролируемой структурой. // Металлы. – 2011, № 4, с. 3-10.
4. Корнилов О.А. Изучение влияния формы туннельного барьера на туннельный ток в СТМ. // «ВНКСФ-7» / Тезисы ВНКСФ-7, 5-10 апреля 2001 г. Санкт-Петербург. – СПб: АСФ России, 2001, с. 187.
5. Сдобняков Н.Ю., Антонов А.С., Зыков Т.Ю., Соколов Д.Н., Воронова Е.А., Михайлова О.В. Измерение вольт-амперных характеристик туннельного контакта вольфрам-золото. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2011, вып. 3, с. 206-216.
6. Gupta R.P. Lattice relaxation at a metal surface. // Physical Review. B. – 1981. – V. 23. – № 12. – P. 6265-6270.
7. Владимиров Г.Г., Дроздов А.В., Резанов А.Н. Влияние физико-химических свойств материала острия на модификацию поверхности импульсом напряжения в сканирующем туннельном микроскопе. // Письма в ЖТФ. – 2000, т. 26, вып. 9, с. 36-40.