

# ТУННЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ НА ГРАНИЦАХ ТЕРРАС НА ПОВЕРХНОСТИ ВИСМУТА

*В. С. Эдельман\**

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук  
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 декабря 2007 г.

Проведена сканирующая туннельная спектроскопия в области у границ террас двухатомной высоты на тригональной поверхности висмута. Установлено, что на плоской поверхности на расстоянии 2–3 нм от границ террас начинается трансформация спектра, исчезают особенности, характерные для плоской части вдали от границ, и появляются новые пики в плотности состояний. Анализ поведения вольт-амперных характеристик показывает, что на линиях окончания атомных плоскостей формируются одномерные, с шириной порядка межатомного расстояния, электронные системы со своими индивидуальными спектрами.

PACS: 73.20.At, 73.20.-r

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Электронные свойства висмута исследуются уже на протяжении многих десятков лет. Спектр электронов проводимости в объеме изучен весьма подробно, см. обзор [1]. Есть значительные успехи в вычислении зонной структуры [2], в которых достигнуто примечательное согласие с экспериментальными данными в самой чувствительной области — вблизи поверхности Ферми, что требует точности расчета энергии на уровне миллиэлектронвольта. Достигнут существенный прогресс и в исследовании поверхностных состояний. Так, в работе [3] методом сканирующей туннельной спектроскопии (СТС) изучены туннельные спектры для двух атомных граней — тригональной (111) (перпендикулярной направлению  $\Gamma$ - $T$  в традиционных обозначениях [2]) и «квазитригональной» поверхности двойника (перпендикулярной одному из трех эквивалентных направлений  $\Gamma$ - $L$ ), сосуществующих с тригональной поверхностью на сколе кристалла висмута, и показано, что на поверхности существуют двумерные электронные состояния, характеристики которых зависят от ориентации поверхности. В ряде работ ([4–7] и ссылки в этих работах) проведена фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)

для трех граней висмута — (111), (110) и (100). Получены данные по плотности двумерных состояний вблизи уровня Ферми и сделаны теоретические расчеты их спектра.

На основании этих работ можно считать экспериментально надежно установленным двумерный характер поверхностных состояний, плотность которых намного превышает аномально малую плотность электронов проводимости в объеме висмута [1]. Причина их появления — нарушение трансляционной симметрии кристалла из-за наличия свободной поверхности. Проведенные расчеты [5–7], несколько различающиеся как по предположениям, положенным в их основу, в частности, о степени влияния спин-орбитального взаимодействия, так и по численным результатам, подтверждают этот вывод.

Одно из очевидных направлений дальнейших исследований в рассматриваемой области — изучение электронных характеристик на дефектах поверхности. Некоторые из них, например, дефекты, залегающие под поверхностью, проявляются только по вариациям туннельных спектров [8], другие — протяженные террасы двухатомной высоты и нанострочки и впадины, двойниковые макроскопические и микроскопические прослойки, выходы дислокаций — обнаруживаются при сканирующей туннельной микроскопии [9]. Очевидно, что двумерные поверхностные состояния должны трансформироваться при при-

\*E-mail: edelman@kapitza.ras.ru

ближении к границам атомно гладких террас на расстоянии порядка  $\pi/k \approx 1-3$  нм ( $k$  — волновой вектор двумерных электронов, имеющий на уровне Ферми значения порядка  $1-3$  нм<sup>-1</sup> [5, 7]). На самих границах могут возникать одномерные электронные состояния [9–11]. Изучению таких состояний методом СТС посвящена эта работа.

Техника СТС, т.е. измерение локальных вольт-амперных характеристик с использованием сканирующего туннельного микроскопа, позволяет говорить об исследуемой поверхности довольно определенно, особенно если образцы готовить в условиях глубокого вакуума. Достоинство метода состоит также в том, что СТС позволяет исследовать спектр электронов с пространственным разрешением вплоть до атомного. Он естественно сочетается со сканирующей туннельной микроскопией, что позволяет сопоставлять результаты с фактической структурой поверхности. При этом желательно проводить исследования при низких температурах, чтобы избежать теплового размытия спектральных особенностей при низких энергиях и снизить вероятность туннелирования с излучением фононов. В висмуте это позволяет также избежать осложнений, обязанных тепловому движению границ атомных террас [9]. И весьма важно, что при изготовлении образцов таким методом, как раскалывание кристаллов *in situ* при низких температурах, могут появляться террасы с прямыми, почти атомно гладкими границами, макроскопические двойники и двойниковые прослойки квантованной ширины с идеальными границами [8–10]. Все это — физически хорошо определенные объекты, что расширяет возможности исследований.

## 2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследований использовались образцы в форме длинных палочек, ориентированных вдоль тригональной оси. Образцы размерами примерно  $1 \times 2 \times 5$  мм<sup>3</sup> вырезались на электроискровом станке из монокристаллов, выращенных из расплава методом [12] из исходного материала чистотой 99.99999%. При такой чистоте на поверхности скола концентрация примесных атомов должна быть на уровне около 1–10 атом/мкм<sup>2</sup>. Плотность дислокаций на сколе кристалла, определенная по ямкам травления в разбавленной азотной кислоте, была порядка 0.05 мкм<sup>-2</sup>. По середине высоты образца при его вырезании делался неглубокий надрез, задававший положение поверхности скола. Образцы

протравливались в азотной кислоте для удаления поверхностного загрязненного слоя и промывались в дистиллированной воде.

Исследования проведены на низкотемпературной установке [13] с использованием сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) [14]. В отличие от конструкции, описанной в работе [14], пьезоинерционные шаговые двигатели были заменены единым блоком трехкоординатного перемещения на основе электродинамических сил [15]. Особенность СТМ — возможность перемещать острие в трех направлениях шагами от долей до нескольких миллиметров под управлением компьютера, что позволяет выбирать исследуемый участок поверхности в пределах типичных размеров образцов порядка 1–2 мм, наблюдая его в микроскоп через оптические окна криостата. Тем самым в одном криогенном опыте можно исследовать десятки участков, т.е. фактически десятки разных образцов. Образец, установленный в СТМ, можно было ломать *in situ* при низких температурах в условиях глубокого вакуума или в среде теплообменного газа — гелия. Измерения велись при температуре образца вблизи точки кипения гелия.

Острие СТМ отрезалось ножницами от проволоки Pt + 6% Rh. При этом, как правило, получались мультиострийные иглы, но с ними достигался истинно туннельный контакт. К сожалению, острия, изготовленные методом электрохимического травления с последующим ионным распылением, при низких температурах не обеспечивали туннельного контакта. Ток появлялся только при механическом контакте, что можно объяснить вымораживанием проводимости нарушенного поверхностного слоя острия.

СТМ-изображения и вольт-амперные характеристики (ВАХ) получались традиционным путем под управлением компьютера с использованием платы АЦП-ЦАП фирмы L-card (Москва, Россия), обеспечивающей цифровую обратную связь. Для повышения отношения сигнал-шум регистрация каждой ВАХ проводилась многократно и результаты усреднялись. Обычно производилось 50–100 накоплений, и регистрация одной ВАХ занимала примерно 5 с. Измеряемые токи были порядка 0.3–6 нА, шумы порядка 1–2% обусловлены, в основном, механическими вибрациями.

В первых экспериментах после регистрации СТМ-изображений и обнаружения таких особенностей рельефа поверхности, как границы террас, снимался набор ВАХ в точках, координаты которых задавались оператором. Это занимало много времени и с учетом дрейфа СТМ делало не очень надежной привязку результатов к особенностям ре-

льефа. В дальнейшем была разработана процедура снятия набора ВАХ вдоль линии на поверхности с заданными шагом перемещения острия и числом шагов.

Большая часть измерений проведена при изменении напряжения  $U_{\text{Bi-tip}}$  между образцом висмута и острием в пределах  $\pm 0.65$  В. Часть измерений проведена при  $\pm 1.8$  В. На каждом шаге по  $x$  при работающей обратной связи, управляющей положением острия СТМ по координате  $z$ , перпендикулярной поверхности, при минимальном для выбранного диапазона напряжении устанавливался туннельный промежуток, при котором ток был равен заданному. Записывалась координата  $z$ , после чего «замораживалась» обратная связь СТМ и, тем самым, фиксировалось значение  $z$  и измерялся туннельный ток  $I$  при уменьшении заданными шагами напряжения  $U_{\text{Bi-tip}}$ . При достижении минимального значения напряжение возвращалось обратно, восстанавливалась работа обратной связи и процедура повторялась заданное число раз. После этого усредненный по всем измерениям результат  $I(U_{\text{Bi-tip}})$  записывался в память компьютера и острие смещалось на очередной шаг по  $x$ . По окончании каждого цикла формировался двумерный массив, первая строка которого давала зависимость  $z(x)$ , а в первом столбце содержались значения напряжения, при которых измерялся ток. Остальные строки отражали зависимость тока от координаты при соответствующем напряжении, столбцы матрицы — ВАХ при соответствующем  $x$ .

Результаты измерений обрабатывались программой ORIGIN, позволяющей проводить дифференцирование ВАХ со сглаживанием, их суммирование, усреднение и т. п. Разрешение особенностей ВАХ определялось числом точек на ней (обычно 127 или 255) и параметром сглаживания, выбиравшимся из компромисса достаточного подавления высокочастотных шумов и малого уширения узких линий.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

При туннельной спектроскопии весьма важно выделить эффекты, связанные именно с образцом, а не со свойствами сканирующего острия. Это не простая задача, так как реально про острие фактически ничего не известно, поскольку ни форму, ни даже материал его кончика в атомном масштабе экспериментально практически невозможно установить. Например, острие может оканчиваться вовсе не платиной (или родием), а любым на его поверхности сорбированным атомом или частицей образца, захваченной

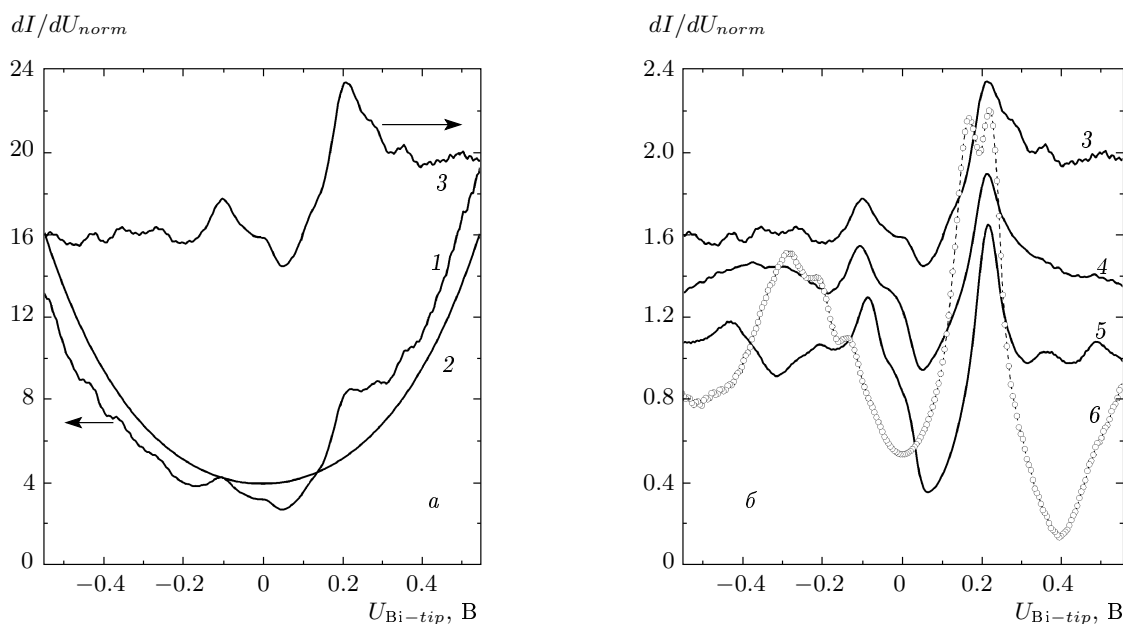
при случайном касании поверхности. Поэтому единственный выход — сравнение результатов, полученных в разных опытах. Если при этом и условия опытов, такие как ток, различны, то можно оценить и влияние на спектры из-за взаимодействия с острием, которое, очевидно, коррелирует с силой тока.

В ходе наших экспериментов были проделаны десятки опытов. При этом острия, как правило, были мультиострийными. Зарегистрированные с разными остриями ВАХ и вычисленные дифференциальные ВАХ (ДВАХ) различались по форме, и на них при росте напряжения начинала превалировать экспоненциальная зависимость (рис. 1а, кривая 1). Она обязана увеличению прозрачности туннельного барьера [3, 16], которая в первом приближении растет как  $\exp(U_{\text{Bi-tip}}/W)$ , где  $W$  — параметр, характеризующий работу выхода острия и образца. Чтобы исключить эту экспоненту, экспериментальная ВАХ, усредненная по многим измерениям, подгонялась зависимостью

$$I_{fit} = I_0 \operatorname{sh}(U_{\text{Bi-tip}}/W),$$

и сглаженная по нескольким точкам производная ВАХ по напряжению нормировалась на такую же производную от  $I_{fit}$  (рис. 1а, кривая 2). Такая процедура приводит примерно к тем же результатам, что и предложенное в работе [16] вычисление логарифмической производной тока по напряжению. Но она удобнее тем, что, уменьшая вклад от изменения прозрачности барьера, не приводит к неопределенности вблизи нуля напряжения, т. е. в самой интересной для нас области. Благодаря нормированию получается безразмерная ДВАХ  $dI/dU_{norm}$  (рис. 1а, кривая 3). Это позволяет проводить количественное сравнение результатов, полученных в разных опытах при разных стартовых условиях регистрации ВАХ.

Корректность процедуры нормирования подтверждает сравнение ДВАХ, полученных в разных опытах на рис. 1б. Отметим, что параметры  $W$  для трех представленных зависимостей сильно различались. При этом в случае характеристики 5 на рис. 1 нормирование практически не изменяло ее форму, особенно в области напряжений от  $-0.3$  до  $0.2$  В, где все три характеристики, полученные для тригональной плоскости, весьма похожи друг на друга. Уширение пиков для них по мере роста тока и, тем самым, близости острия к образцу, согласно работе [16], вполне ожидаемо. Их различия при больших напряжениях обязаны либо шуму, вклад которого растет пропорционально току, либо особенностям матричных элементов перекрытия



**Рис. 1.** Вид дифференциальных ВАХ на плоских участках поверхности, полученных в разных опытах: 1 — производная от экспериментальной ВАХ, 2 — производная от подгоночной функции вида  $I_0 \text{sh}(U_{Bi-tip}/W)$ , 3–5 — нормированные ДВАХ для тригональной плоскости, 6 — для квазитригональной плоскости (поверхность двойниковой прослойки), 1, 3 — ток  $I \approx 6$  нА при  $U_{Bi-tip} = -0.6$  В,  $W = 0.26$  В; 4 — 1.8 нА, 0.34 В; 5 — 0.3 нА, 0.56 В; 6 — 0.5 нА, 0.56 В. Характеристики 3, 4 смещены по оси  $y$  соответственно на 0.8 и 0.4

волновых функций, если их симметрия для разных острий различна.

Таким образом, структура нормированных ДВАХ 3–5 вблизи уровня Ферми не зависит от острия и обязана исключительно висмуту. Дополнительное тому подтверждение — сравнение с ДВАХ 6 (полученной в работе [3]) на поверхности двойниковой прослойки, имеющей другую ориентацию. Эта ДВАХ имеет вблизи уровня Ферми заметно иную форму.

Перейдем теперь к результатам, полученных вблизи границ террас. Большая их часть была получена в ходе одного сеанса измерений, проведенных в течение нескольких часов на одном и том же участке поверхности, топограмма которого показана на рис. 2. Выбор именно этого набора данных для анализа обусловлен рядом обстоятельств:

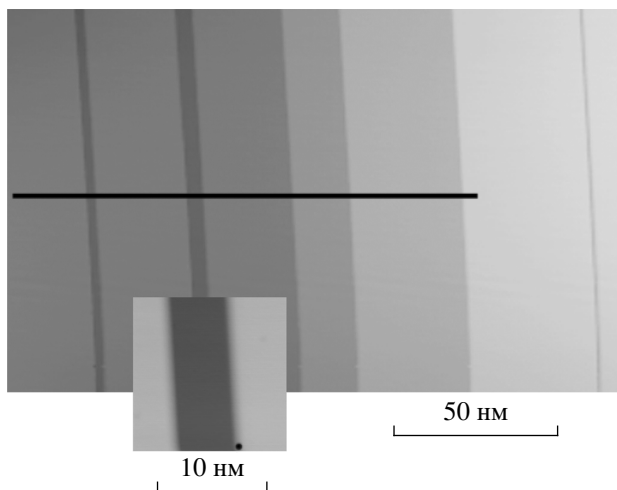
- 1) наличие нескольких террас с границами, прямыми в атомном масштабе, позволяет провести измерения на разных границах и сравнить результаты; гладкость границ позволяет говорить об их одномерном характере;
- 2) в отличие от других опытов, острие, к счастью, было одиночным, о чем говорит как равенство перепада высот при пересечении всех видимых границ,

так и отсутствие характерных при мультиострийности двойных границ;

3) влияние изменения прозрачности барьера при росте напряжения было меньше, чем в других опытах, и вносимые нормировкой изменения ДВАХ при напряжениях от  $-0.5$  до  $0.5$  В практически не изменяли их форму и разрешение особенностей было наилучшим;

4) к моменту проведения этих опытов была доработана описанная выше процедура одновременного измерения ВАХ и  $z(x)$ , что снимало неопределенность привязки результатов к рельефу.

Массивы ВАХ снимались при перемещении Pt + 6% Rh-острия СТМ вдоль черной линии, показанной на топограмме рис. 2. Она пересекает несколько атомно прямых границ террас, причем по трассе сканирования есть как спуски, так и подъемы, рис. 3а. И на зависимостях  $I(x)$  при фиксированных значениях напряжения появляются особенности каждый раз, когда острие пересекает границы, рис. 3б. Эти особенности не связаны с изменением условий туннелирования при изменении кривизны поверхности. Если вероятность туннелирования при этом и изменяется, это автоматически учитывается процедурой измерения



**Рис. 2.** СТМ-изображение участка поверхности висмута, на котором проводилась спектроскопия в области границ террас. Регистрация ВАХ проводилась при перемещении острия вдоль черной линии на топограмме. Точка на снятом с большим увеличением участке соответствует размеру области, приходящейся на один атом. Отсутствие изломов границы такого масштаба свидетельствует о ее атомной гладкости. Полный перепад уровней от светлого к темному на большем кадре равен 2 нм

ВАХ, которая задает начальное значение тока при заданном напряжении. Как видно на рис. 3в и особенно наглядно — на рис. 3г, ответственным за изменение тока является изменение ВАХ, т.е. спектра электронных состояний.

Приведенные на рис. 3 характеристики соответствуют трем характерным областям: плоским участкам вдали от границ, верхнему краю террас и примерно середине ступени. В каждой из этих трех областей ВАХ совпадают с точностью до шумов, что позволило их усреднить для снижения шума. Видно, что при переходе от плоскости к ступени пик, лежащий на 0.21 В выше уровня Ферми, сменяется пиком при 0.18–0.19 В, перегиб в нуле сменяется максимумом, а пик при  $-0.1$  В исчезает.

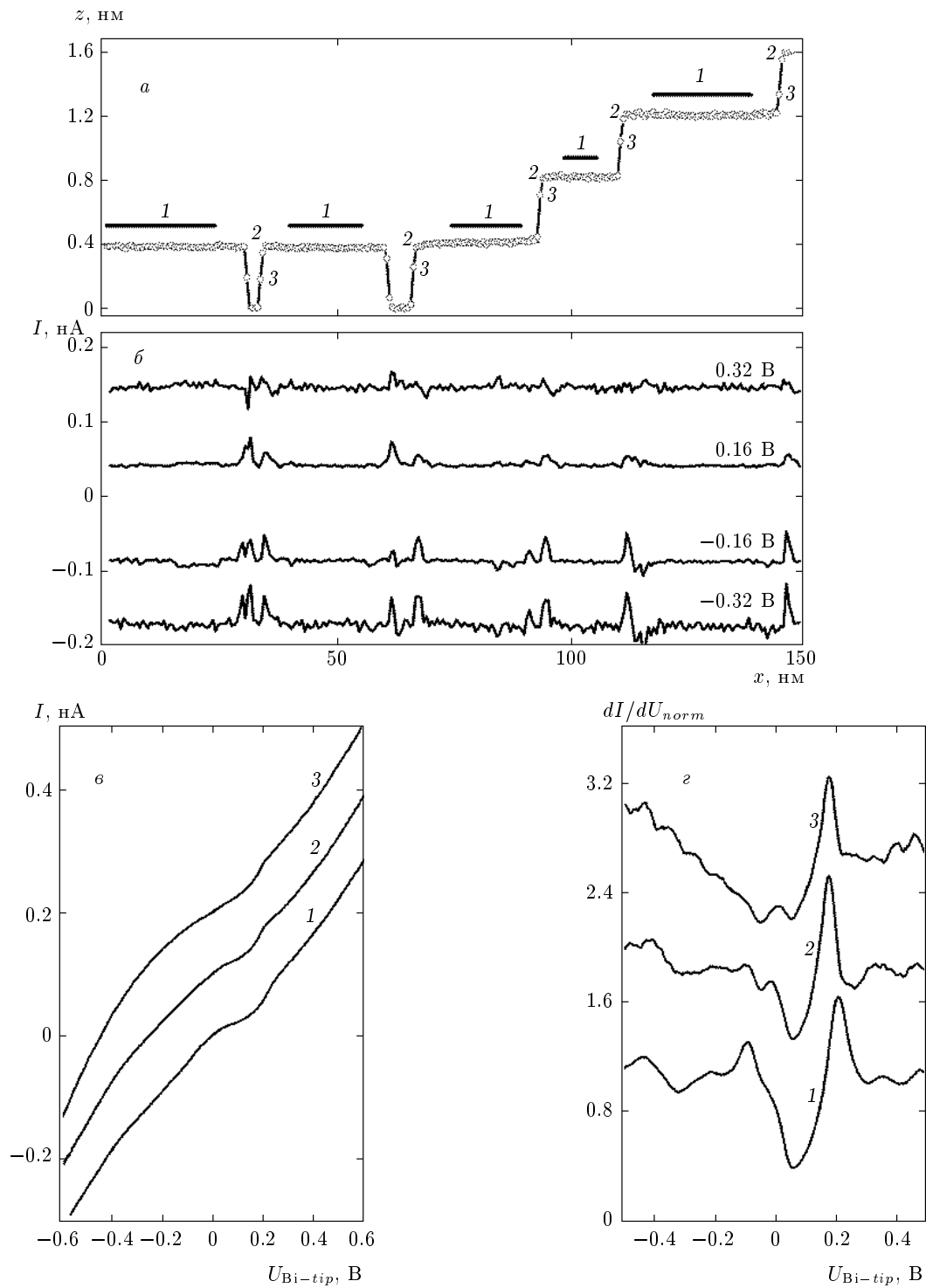
Малые участки трассы вблизи более широкого «каньона» ( $x \approx 60$ – $65$  нм, рис. 3а) и ближайшей от него ступени справа ( $x \approx 90$  нм) были просканированы несколько раз с лучшим пространственным разрешением, чем на рис. 3. Это позволило детально проследить изменение туннельных спектров в узких, шириной всего примерно 1 нм, зонах резкого изменения рельефа. На рис. 4 приведены зависимости  $z(x)$  и  $I(x)$  для этих участков. При построении этих зависимостей учитывался небольшой, менее 0.5 нм,

дрейф по координате  $x$  и менее 0.1 нм по координате  $z$ , наблюдавшийся при последовательных сканированиях: вводилась поправка на эти координаты, обеспечивающая совпадение зависимостей  $z(x)$ .

Видно, что токовые характеристики для «склона» и «подъема» заметно различаются. Так, при отрицательных напряжениях в области склона отчетливо выражен максимум с шириной около 1.5 нм, а на подъеме — небольшой максимум сменяется минимумом, ширина которого менее 1 нм. При положительных напряжениях различие также заметно. На спаде небольшой минимум сменяется узким, шириной менее 1 нм, максимумом, а на подъеме особенности выражены слабо и едва превышают уровень шумов. (Отметим, что стартовое значение тока при 0.64 В было в этих опытах равно 0.3 нА, поэтому при близких к этому значению напряжениях зависимость  $I(x)$  приближается к постоянному уровню.)

Различия склона и подъема вполне естественны, поскольку структура висмута задает различие структуры границ террас, смотрящих друг на друга, что обязано сказываться на их физических свойствах [9], рис. 5. Как видно на этом рисунке, если с одной стороны каньона двухатомной глубины (например, слева) расстояние по  $x$  между ближайшими атомами, лежащими в плоскости рисунка, на верхнем краю и на дне равно  $2/3$  атомного периода вдоль линии сканирования, то на другой стороне оно равно  $4/3$  периода (т.е. ряды сдвинуты на  $1 + 1.3$  периода). Установить, какой ситуации соответствуют наблюдаемые границы, можно, если в эксперименте видна атомная структура. К сожалению, в опытах, о которых идет сейчас речь, атомы не были видны. Однако, сопоставляя опыты, сделанные в разное время, удалось установить, что картина соответствовала представленной на рис. 5, о чем речь пойдет в конце этого раздела. Отметим, что если предположить, что линия раздела  $\text{Vi}$ –вакуум проходит так, как показано на этом рисунке, т.е. по атомам, лежащим в плоскости рисунка (светлые точки), то реальная траектория СТМ-острия для представленного на рис. 5 случая довольно хорошо соответствует ожидаемой. Априори можно ожидать, что переходные области должны быть заметно уширены, что, кстати, обычно и происходит. Можно предположить, что нам повезло и острие имеет структуру, например, такую, как показано на рисунке. При другой мыслимой ориентации кристаллита на кончике острия, например, направление  $[111]$  вдоль его оси, уширение неизбежно.

Вернемся к рассмотрению туннельных спектров. На рис. 6 приведены ДВАХ, усредненные по обла-



**Рис. 3.** Зависимость  $z(x)$  смещения острья СТМ по вертикали (а) и тока  $I(x)$  при нескольких значениях напряжения на туннельном промежутке (б) от координаты вдоль линии, помеченной на рис. 2; *c* — ВАХ, *d* — ДВАХ, усредненные для точек, помеченных соответствующими цифрами на зависимости  $z(x)$

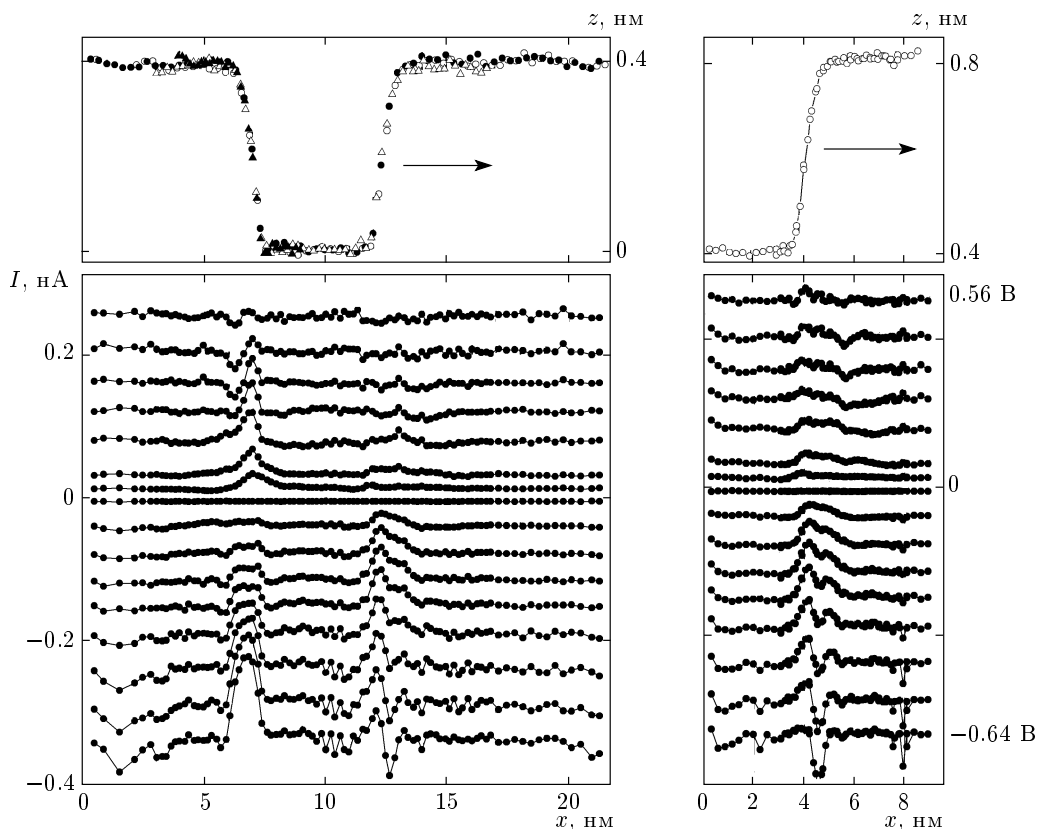


Рис. 4. Зависимости  $z(x)$  и  $I(x)$  слева — для «каньона» (в области вблизи 60 нм на рис. 3а) и справа — ступени (вблизи 90 нм). Разные символы на левом рисунке вверху соответствуют разным циклам измерений с разными шагами по  $x$  (всего 4 цикла для склона и 3 цикла для подъема). Значения тока усреднены по этим циклам. Слева — результаты, усредненные по двум циклам

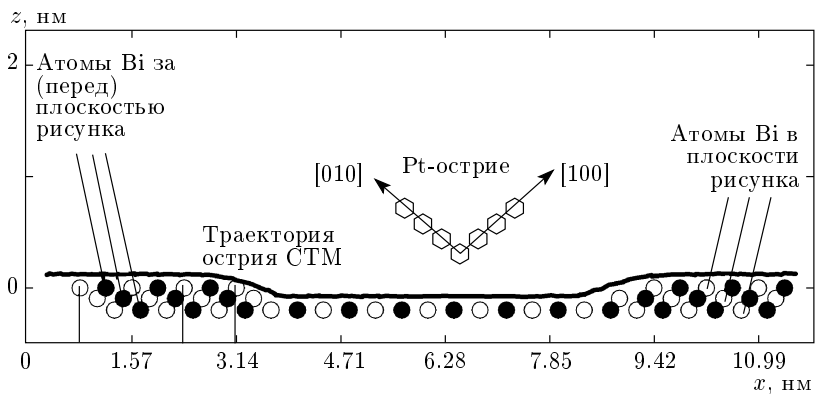
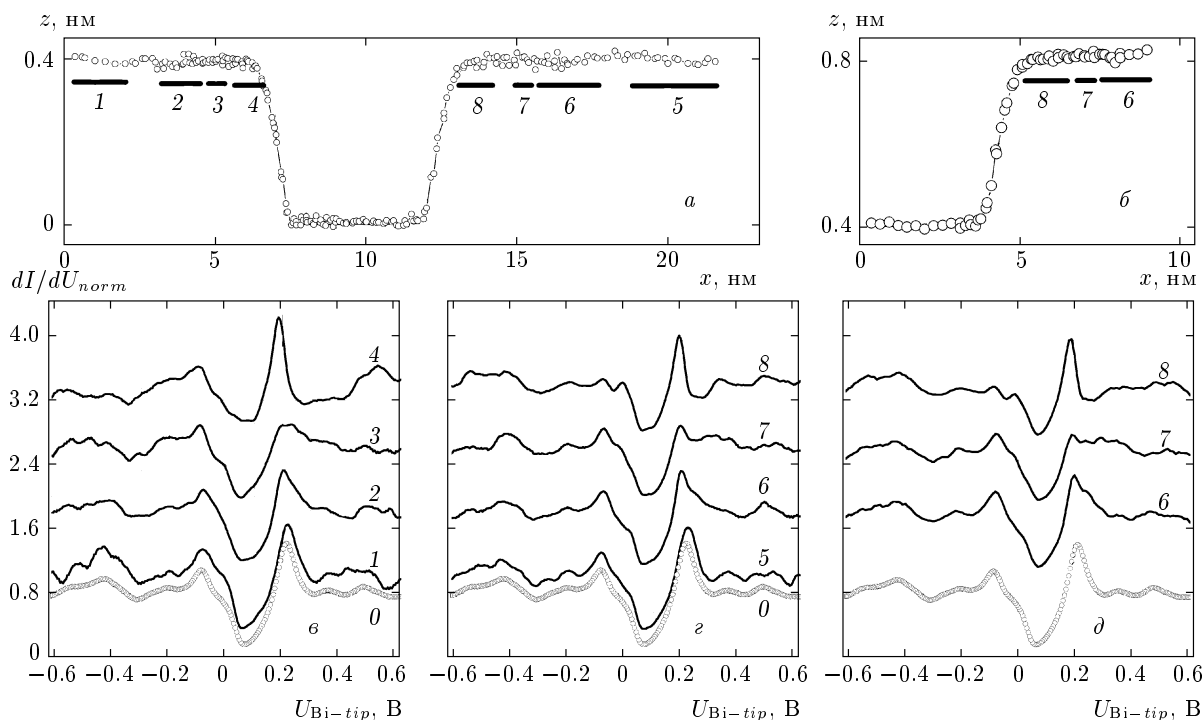


Рис. 5. Схема расположения атомов в поперечном сечении границ террас. Атомы, показанные пустыми кружками, лежат в плоскости рисунка и формируют атомные ряды на границах, идущих перпендикулярно плоскости рисунка. Темные точки — атомы, не лежащие в плоскости рисунка, а смещенные на половину периода по нормали к ней. Линия — измеренная зависимость  $z(x)$ . Над поверхностью условно показано острие при одной из многих возможных ориентаций его кончика, расположенное на расстоянии, характерном для СТМ-экспериментов. Шкала по оси  $x$  дана такой, чтобы засечки соответствовали положению атомов висмута верхнего ряда. (Совпадение чисел со значением  $\pi$  случайно!)



**Рис. 6.** Дифференциальные туннельные спектры, усредненные по областям, подчеркнутым жирными линиями на рис. *a* и *b*. Цифры под этими линиями соответствуют номерам на рис. *в, г, д*. Спектры, обозначенные цифрой *0*, получены на плоских участках вдали от границ. На рис. *в, г, д* спектры смещены по оси *y* последовательно на 0.8, 1.6 и 2.4, нулевой спектр — на  $-0.2$

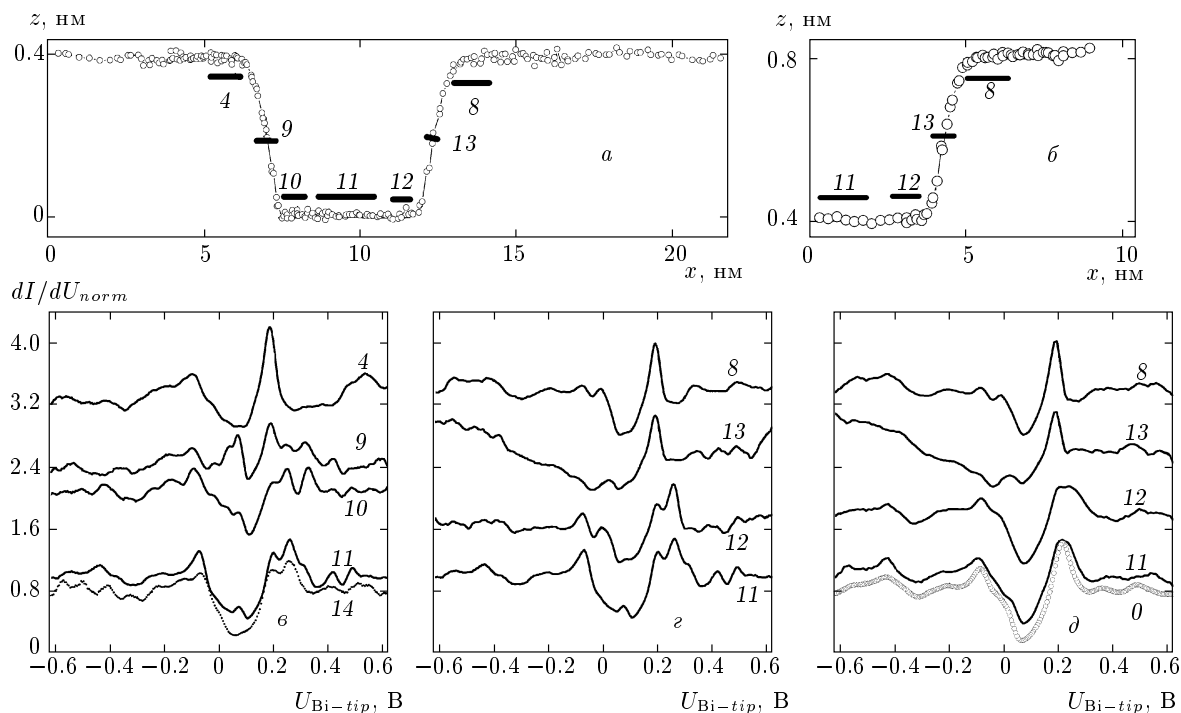
стям вдоль помеченных цифрами отрезков, показанных на верхних топограммах. На этом рисунке показаны результаты, полученные на плоских участках, когда влияние формы острия еще заведомо не должно сказываться. Поэтому наблюдающаяся эволюция ДВАХ связана, несомненно, с изменением спектра электронов висмута. На расстоянии 6–8 нм от середины ступеней и для склона (рис. 6*в*), и для подъема (рис. 6*г, д*) спектры 1 и 5 практически совпадают со спектром 0 вдали от границ. Но на расстоянии 3–4 нм наиболее характерный пик при +0.21 В (спектры 2, 6) начинает заметно искажаться, а при расстоянии 3–2.5 нм его амплитуда значительно уменьшается и он выглядит как сумма двух пиков при +0.21 и +0.19 В (спектры 3, 7). И наконец, на верхнем крае остается только узкий ярко выраженный пик при +0.19 В, амплитуда которого несколько больше для склона, спектр 4, чем для подъема, спектры 8. Заметим, что соответствующие спектры, приведенные на рис. 6*г, д*, полученные на разных ступенях, практически не различимы.

Существенное различие спектров 4 и 8 наблюдается вблизи нуля напряжения. Если для спектра 4

практически исчезает перегиб на ДВАХ при нуле напряжения, то для спектров 8 здесь появляется отчетливый пик с максимумом при  $-0.01$  В.

В области самих границ (рис. 7) спектры претерпевают значительные изменения. Прокомментируем некоторые из них. Так, на спектре 9*в* в сильно падает по амплитуде пик при +0.19 В; возможно, он виден только из-за конечного разрешения СТМ и относится к области 4. Зато появляется пик при +0.08 В, который виден только на этом спектре. На спектрах же 13*г, д* пик при +0.19 В остается практически таким же, как на спектрах 8, но исчезает пик при  $-0.08$  В, а пик при  $-0.01$  В смещается к значению +0.02 В. Спектры 12*г* и 12*д*, которые, казалось бы, относятся к одинаковым позициям, как и спектры 11*г* и 11*д*, заметно различны, при этом спектр 11*д* приближается к спектру 0 на плоской поверхности, в то время как наиболее характерная линия при +0.21 В на спектре 11*д* расщеплена на две и на нем появляется небольшой пичок при +0.07 В, а перегиб при нуле напряжения исчезает. Трудно с уверенностью утверждать, что спектры 12 не являются суперпозицией спектров 11 и 13, хотя отсутствие характерного для





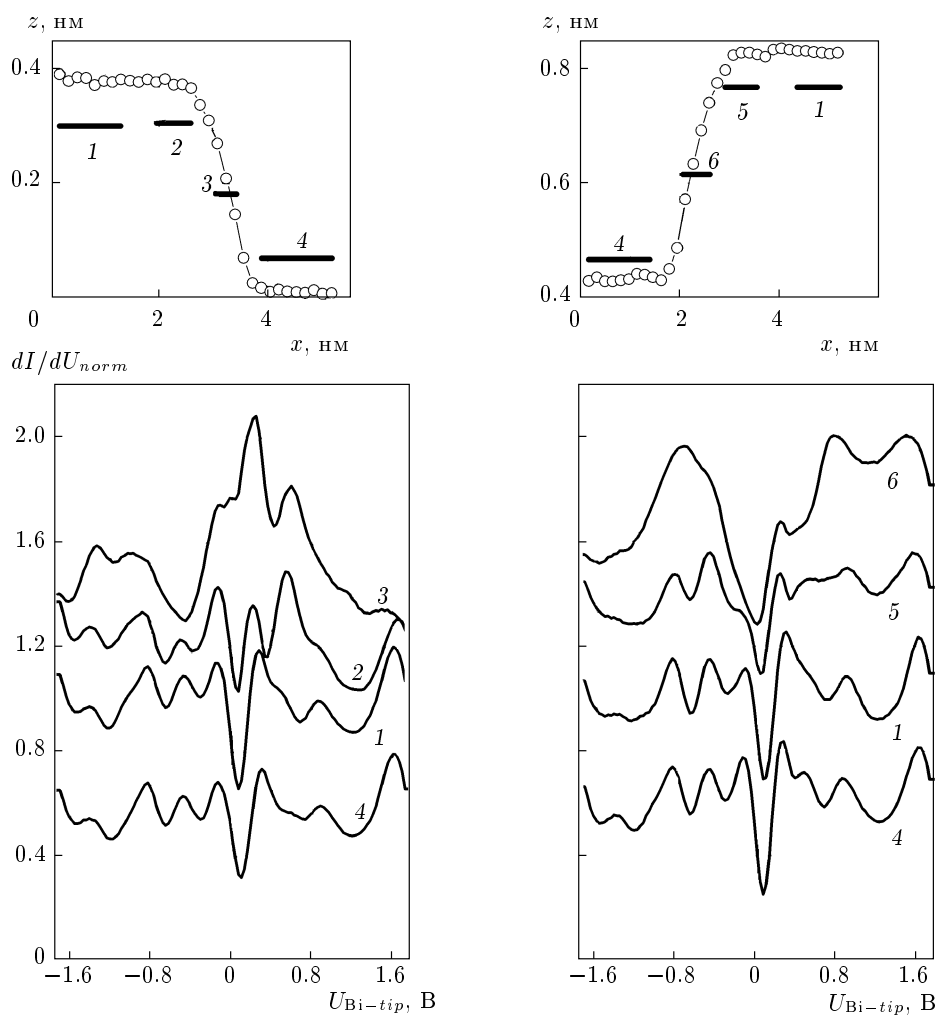
**Рис. 7.** Дифференциальные туннельные спектры, усредненные по областям, подчеркнутым жирными линиями на рис. а и б. Цифры под этими линиями соответствуют номерам на рис. в, г, д. Спектр, обозначенный цифрой «0», получен на плоских участках вдали от границ. Спектр 14 получен для дна каньона при  $x \approx 30$  нм (рис. 3). На рис. в, г, д спектры смещены по оси  $y$  последовательно на 0.8, 1.6 и 2.4, нулевой спектр — на  $-0.2$

спектра 13 возрастающего участка при положительных напряжениях позволяет говорить о его индивидуальности. Что касается спектра 10в, то выраженный пик при  $+0.33$  В и совершенно иная форма в области напряжений от  $-0.1$  до  $+0.2$  В свидетельствуют о том, что на нижнем крае каньона формируется электронная система с индивидуальным спектром.

На спектрах, зарегистрированных при больших напряжениях (рис. 8), видно, что на середине ступеней спектры 3 и 6 сильно отличаются как при спуске и подъеме, так и от спектров, полученных для плоских участков (спектры 1 и 4 как для спуска, так и для подъема), где они практически совпадают между собой. Отметим исчезновение на спектре 3 пиков при  $+1.6$  В и при  $-0.5$  В и появление пика при  $+0.6$  В. Похожий пик при  $+0.55$  В есть и на спектре 2 (он виден и на спектре 4, рис. 7). На спектре 6 вместо максимумов при  $+1.6$  В и  $+0.9$  В появляются более широкие максимумы при  $+1.5$  В и  $+0.75$  В, а на месте минимума при  $-0.7$  В появляется максимум. Отметим, что сравнивая спектры на этом рисунке со спектрами на рис. 6, 7, надо иметь в виду, что в области напряжений от  $-0.4$  В до  $+0.4$  В они сильно, на порядок, уширены и искажены при

численном дифференцировании, поскольку нас интересовало поведение ДВАХ при больших напряжениях, что потребовало для увеличения отношения сигнал/шум сглаживания по области, ширина которой сравнима с шириной особенностей при малых напряжениях.

В заключение этого раздела приведем спектр, полученный для верхнего края террасы в другом цикле измерений при больших стартовых токах (рис. 9), в сравнении со спектрами 4 и 8 на рис. 6. Этот спектр интересен не только тем, что подтверждает формирование на границе состояния, отличного от двумерного вдали от границ, но и позволяет установить кристаллографию границ для опытов, к которым относятся приведенные выше результаты. Как и для спектра 3 на рис. 1, пики на спектре 3 на рис. 9 заметно уширены по сравнению со спектрами 4 и 8. Однако ясно видно, что этот спектр при малых напряжениях совпадает со спектром 8 — на нем присутствует пик при напряжении, близком к нулевому, в то время как на спектре 4 в этом месте нет никаких особенностей. Таким образом, спектры 3 и 8 соответствуют одной и той же кристаллографической ситуации.

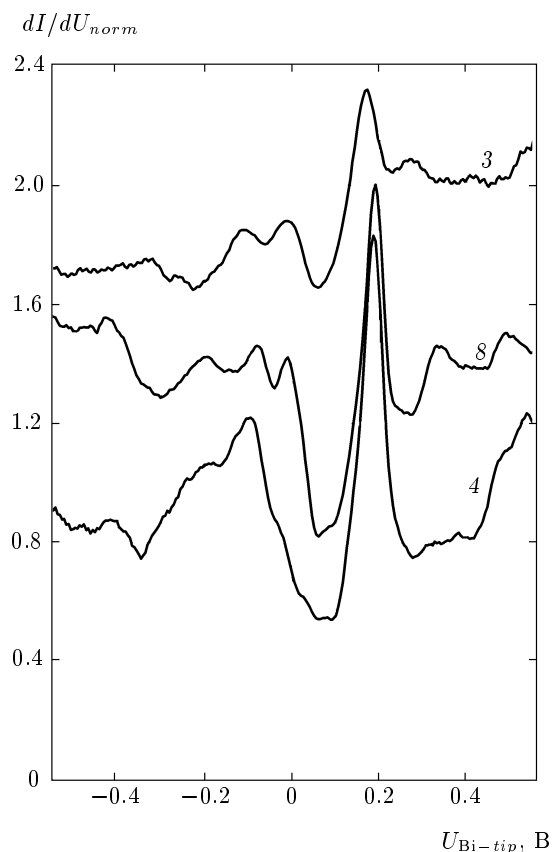


**Рис. 8.** Дифференциальные туннельные спектры, усредненные по областям, подчеркнутым жирными линиями на верхних рисунках. Цифры под этими линиями соответствуют номерам спектров на нижних рисунках. На нижних рисунках для спектров 1 нулевой уровень соответствует нулю по оси  $y$ , спектры 2, 5 смещены по этой оси на 0.4; 3, 6 — на 0.8, а спектры 4 смещены вниз на  $-0.4$

В отличие от описанных выше опытов, в этом случае, хотя острие не было одиночным и разрешение было значительно хуже, наблюдалась хорошо выраженная атомная структура (рис. 10). При этом мультиострийность искажала форму ступени на спаде, но не сказывалась на форме ступени при переходе с нижней террасы (слева на рис. 10) на верхнюю (справа на рис. 10), а высота ступени соответствовала ожидаемой. При этом картина атомной структуры на нижней и верхней террасах была одинаковой. Как видно на рис. 10, атомные ряды внизу сдвинуты относительно соответствующих атомных рядов вверху примерно на  $1/3$  (на  $0.31 \pm 0.05$ ) периода вдоль линии сдвига двух половин изображения. Таким образом, картина расположения атомов именно такая, как на рис. 5.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Основной качественный вывод, который следует из приведенных результатов, — на каждой границе атомных слоев возникает электронная система со своим специфическим спектром. Это однозначно следует из туннельных спектров, приведенных на рис. 6–8. (Исключение составляет лишь спектр 12 на рис. 7, соответствующий правой нижней границе каньона, но это скорее связано с формой сканирующего острья, которое не достаёт до нужного места.) Для этих состояний с характерными энергиями 0.1–0.2 эВ, отсчитываемыми от уровня Ферми, импульсы вдоль прямых границ должны быть довольно маленькими, не больше поперечных импульсов. Можно утверждать, что для электронов валентной зоны с максимумом вблизи 0.2 В, согласно картине



**Рис. 9.** Дифференциальные туннельные спектры при положении острия на верхнем краю террас. Спектр 3 получен при тех же условиях, что и относящийся к плоскому участку спектр 3 на рис. 1. Спектры 4 и 8 — те же самые, что и на рис. 6. Для спектра 4 нулевой уровень соответствует нулю по оси  $y$ , спектры 8 и 3 смещены по этой оси соответственно на 0.4 и на 0.8

эволюции спектров от 1 к 4 и от 5 к 8 (рис. 6), импульс имеет по порядку величины значение около  $(\pi/2) \cdot 10^{-7} \text{ см}^{-1}$ . Таким образом, электроны вдоль границ делокализованы на расстоянии больше межатомного и в этом смысле можно говорить об одномерных системах. Дополнительный аргумент — острие СТМ при сканировании движется под углом к границам, отличным от прямого, и спектры, очевидно, регистрируются в разных точках атомных цепочек. К тому же присутствует небольшой, порядка межатомного расстояния, дрейф при последовательной регистрации набора спектров. Так что совпадение спектров для разных ступеней свидетельствует в пользу делокализации электронов.

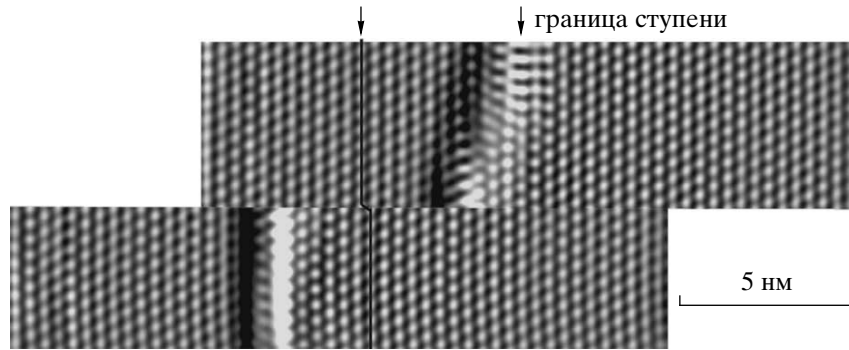
Однако остается ряд вопросов. Так, максимум ДВАХ при  $-0.08 \text{ В}$  присутствует на всех спектрах

и не претерпевает серьезных изменений. По своему положению он удовлетворительно согласуется с положением дна электронной зоны для двумерных электронов. Однако нечувствительность к перепаду высоты свидетельствует скорее о том, что волновая функция этого состояния простирается в глубь от поверхности.

Из простой картины, основанной на принципе неопределенности, выпадают спектры 9 и 13 на рис. 7. Характерный для спектра 9 пик при  $+0.08 \text{ В}$  совершенно отсутствует на спектрах 4, 10 в соседних областях, удаленных на расстояние порядка 1 нм. Если это значение подставить в оценку для поперечного импульса, то для энергии получим величину (при массе свободного электрона) порядка 0.5 В. Особенность же при 0.01–0.02 В на спектре 13 еще хуже укладывается в эту схему. Может быть, дело в том, что согласно схеме рис. 5, разные атомы кончика острия (и тем самым, состояния разной симметрии) принимают участие в формировании туннельного тока при регистрации ДВАХ 9 и 4, 10.

Особого рассмотрения требует спектр 11 на рис. 7. Он получен на плоском участке в середине каньона, но заметно отличается от спектра на плоских участках вдали от границ (спектр 0 на рис. 6). Бросается в глаза, что наиболее характерный пик вблизи  $+0.2 \text{ В}$  расщепился на два. Это могло бы быть связано с размерным квантованием из-за близости границ с обеих сторон. Выше была дана оценка импульса для этих электронов, и по их энергии можно оценить эффективную массу как 0.3 массы свободного электрона. Если вместо размера 2 нм в приведенной выше оценке подставим ширину каньона около 5 нм (рис. 7), то для характерной энергии размерного квантования получим  $0.2(2/5)^2 \text{ мэВ} \approx 30 \text{ мэВ}$ , что с учетом грубости оценки не сильно отличается от наблюдаемого расщепления пика при  $U \approx +0.2 \text{ В}$ . Однако спектр 14 на рис. 7 для дна более узкого каньона при  $x \approx 30 \text{ нм}$  (рис. 3) очень похож на спектр 11, хотя ширина этого каньона вдвое меньше, чем при  $x \approx 60\text{--}70 \text{ нм}$ .

В нашем случае при исследовании линейных одномерных структур необходимо рассматривать также механизмы перехода электронов из одномерной системы в двумерные и далее в трехмерные состояния. Чтобы оценить роль этих процессов, как и рассчитать туннельный ток, надо вычислить спектр этих состояний (и рассмотреть модели спектра острия), что выходит далеко за рамки нашей статьи. Можно, однако, предположить, что процессы растекания тока не очень существенны, поскольку приведенные на рис. 1 и рис. 9 спектры,



**Рис. 10.** Продифференцированное и сглаженное двумерной фурье-фильтрацией СТМ-изображение поверхности в области границы террас. Спектр 3 рис. 9 получен при положении острия на верхней террасе (область справа от границы) на расстоянии порядка 1 нм от середины ступени. Чтобы сделать наглядным сдвиг атомных рядов нижней террасы (область слева) относительно верхней, изображение разрезано по линии, проходящей по середине светлых пятен («атомов») и нижняя часть сдвинута относительно верхней так, чтобы атомные ряды справа совместились. Помеченная стрелкой ломаная линия проведена по ближайшим рядам, содержащим «разрезанные атомы». Видно, что относительное смещение рядов примерно равно  $1/3$  периода структуры вдоль линии сдвига

полученные при разных значениях тока, т. е. при значительном изменении сопротивления туннельного промежутка — одного из препятствий на пути тока, похожи друг на друга.

Автор признателен А. Ф. Андрееву за интерес к работе, А. В. Офицерову за участие в измерениях, В. И. Марченко за обсуждение. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 04-02-17369-а, 07-02-0051-а).

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Эдельман, УФН **123**, 257 (1977).
2. Y. Lin and R. E. Allen, Phys. Rev. B **52**, 1566 (1995).
3. А. В. Офицеров, В. С. Эдельман, ЖЭТФ **93**, 642 (2001).
4. G. Jezequel, J. Thomas, and I. Pollini, Phys. Rev. B **56**, 6620 (1997).
5. Ch. R. Ast and H. Höchst, Phys. Rev. B **67**, 113102 (2003).
6. Yu. M. Koroteev, G. Bihlmayer, J. E. Gayon, E. V. Chulkov et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 046403 (2004).
7. T. K. Kim, J. Wells, C. Kirkegaard, Z. Li et al., Phys. Rev. B **72**, 085440 (2005).
8. А. М. Трояновский, В. С. Эдельман, ЖЭТФ **115**, 2214 (1999).
9. А. М. Трояновский, В. С. Эдельман, Кристаллография **44**, 336 (1999).
10. V. S. Edelman, D. Yu. Sharvin, I. N. Khlyustikov, and A. M. Troyanovskii, Europhys. Lett. **34**, 115 (1996).
11. В. С. Эдельман, УФН **175**, 1111 (2005).
12. М. С. Хайкин, С. М. Черемисин, В. С. Эдельман, ПТЭ Вып. 4, 225 (1970).
13. И. Н. Хлюстикова, В. С. Эдельман, ПТЭ Вып. 1, 158 (1996).
14. V. S. Edelman, A. M. Troyanovskii, M. S. Khaikin, G. A. Stepanyan, and A. P. Volodin, J. Vac. Sci. & Technol. B, Second Ser. **9**, Pt. II, 618 (1991).
15. А. В. Офицеров, В. С. Эдельман, ПТЭ Вып. 2, 133 (2005).
16. J. A. Stroscio and R. M. Feenstra, in *Scanning Tunneling Microscopy*, ed. by J. A. Stroscio & W. J. Kaiser, San Diego: Academic Press (1993), p. 95.