

240 К. Аналогично можно предположить, что для слоев хлора и иода на поверхности Cu(111) критическая температура должна быть выше комнатной.

Таким образом, нами впервые показано, что наблюдаемые в картинах дифракции электронов структуры $\text{Me}(111) - (n\sqrt{3} \times n\sqrt{3})R30^\circ - \text{Hal}$ представляют собой одноосносжатые неоднородные решетки, состоящие из доменов со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ - \text{Hal}$, которые разделены линейными доменными стенками. Внутри доменных стенок атомы галогена расположены более плотно и занимают адсорбционные центры менее глубокие, чем в домене. Установлено, что сжатие структуры $\text{Me}(111) - (\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ - \text{Hal}$ может происходить как через формирование сверхплотных доменных стенок (случай $\text{Cu}(111)/\text{Cl}_2$), так и через формирование плотных доменных стенок (случай $\text{Cu}(111)/\text{I}_2$). Высказано предположение, что наблюдаемые несоразмерные структуры $\text{Me}(111) - (n \times n) - \text{Hal}$ могут формироваться при температурах поверхности выше критической, т.е. в условиях, когда кинетическая энергия атома адсорбата становится больше глубины потенциального рельефа подложки и сжатие происходит однородно и изотропно, без формирования доменных стенок. Предполагается, что такой температурой для $\text{Ag}(111)/\text{Br}_2$ является $T = 250$ К, для $\text{Ag}(111)/\text{Cl}_2$ температура перехода должна быть ниже 240 К, а для $\text{Cu}(111)/\text{Cl}_2$ и $\text{Cu}(111)/\text{I}_2$ — выше 300 К.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и технологии РФ (проект № 1.7.99).

Список литературы

1. Jones R G *Prog. Surf. Sci.* **27** 25 (1988)
2. Rovida G, Pratesi F *Surf. Sci.* **51** 270 (1975)
3. Goddard P J, Lambert R M *Surf. Sci.* **67** 180 (1977)
4. Jones R G, Kadodwala M *Surf. Sci.* **370** L219 (1997)
5. Конторова Т А, Френкель Я И *ЖЭТФ* **8** 1340 (1938)
6. Frank F C, van der Merwe J H *Proc. R. Soc. London* **198** 205 (1949)
7. Frank F C, van der Merwe J H *Proc. R. Soc. London* **198** 216 (1949)
8. Bak P *Rep. Prog. Phys.* **45** 587 (1982)
9. Kern K et al. *Solid State Commun.* **62** 391 (1987)
10. Lambie G M et al. *Phys. Rev B* **34** 2975 (1986)
11. Holmes D J et al. *J. Vac. Sci. Technol. A* **5** 703 (1987)
12. Eltsov K N et al. *Phys. Low-Dim. Struct.* (7/8) 115 (1996)
13. Inukai J, Osawa Y, Itaya K *J. Phys. Chem. B* **102** 10034 (1998)
14. Andryushechkin B V, Eltsov K N, Shevlyuga V M *Phys. Rev B* (послано в печать)
15. Andryushechkin B V et al. *Surf. Sci.* **407** L633 (1998)
16. Bowker M, Waugh K C *Surf. Sci.* **134** 639 (1983)
17. Holmes D J, Panagiotides N, King D A *Surf. Sci.* **222** 285 (1989)

PACS numbers: 61.16.Ch, 68.35.-p, 78.50.-w

Туннельная спектроскопия локализованных состояний единичных примесных атомов на поверхности полупроводников

Н.С. Маслова, В.И. Панов, С.В. Савинов

Примесные состояния и атомные дефекты играют ключевую роль при формировании электронных систем на поверхности и границах раздела полупроводников.

С уменьшением размеров и с понижением размерности системы влияние изолированных локализованных состояний становится определяющим и требует детального изучения их взаимодействия с поверхностной структурой кристалла [1]. Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия (СТМ/СТС) [2] является, по нашему мнению, наиболее совершенным методом для такого рода исследований, поскольку позволяет изучать свойства единичных локализованных состояний и их взаимодействие на поверхности и дает принципиальную возможность идентифицировать изолированную атомную примесь по особенностям в спектре туннельной проводимости и СТМ изображению. Вместе с тем, особенности туннелирования в СТМ контактах, масштабы которых сопоставимы с межатомными расстояниями, приводят к существенно неравновесным процессам, что вызывает появление эффектов, искажающих первоначальную (невозмущенную) плотность состояний и затрудняет интерпретацию результатов измерений. Основные из этих эффектов были изучены нами в работах [3–9] и последовательно учитываются при анализе экспериментов.

В настоящем сообщении представлены результаты исследований изолированных локализованных и взаимодействующих примесных состояний единичных атомов на поверхности полупроводников A_3B_5 . Измерения проводились на чистой поверхности (110) монокристаллов GaAs и InAs с различными легирующими примесями при температуре 4 К.

На рисунке 1 в качестве характерного примера приведено СТМ изображение примесных атомов Si и Zn на поверхности GaAs (110), которые различаются симметрией и радиусом локализации примесного состояния. Основное различие атомов примеси определяется по особенностям в спектрах туннельной проводимости. На рисунке 2а – в приведены СТМ изображения и СТС

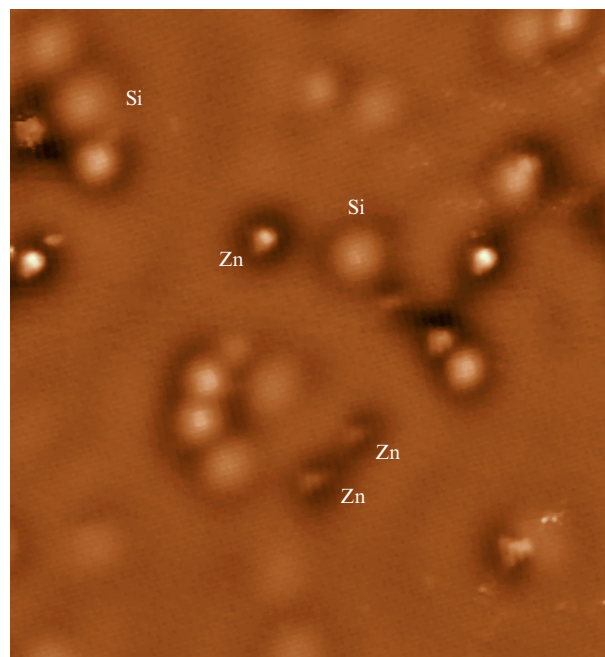


Рис. 1. СТМ изображение участка поверхности GaAs (110) с двойным легированием атомами Si и Zn. Размер изображения $40,8 \times 40,8$ нм, туннельное напряжение на образце $V_t = 1,5$ В.

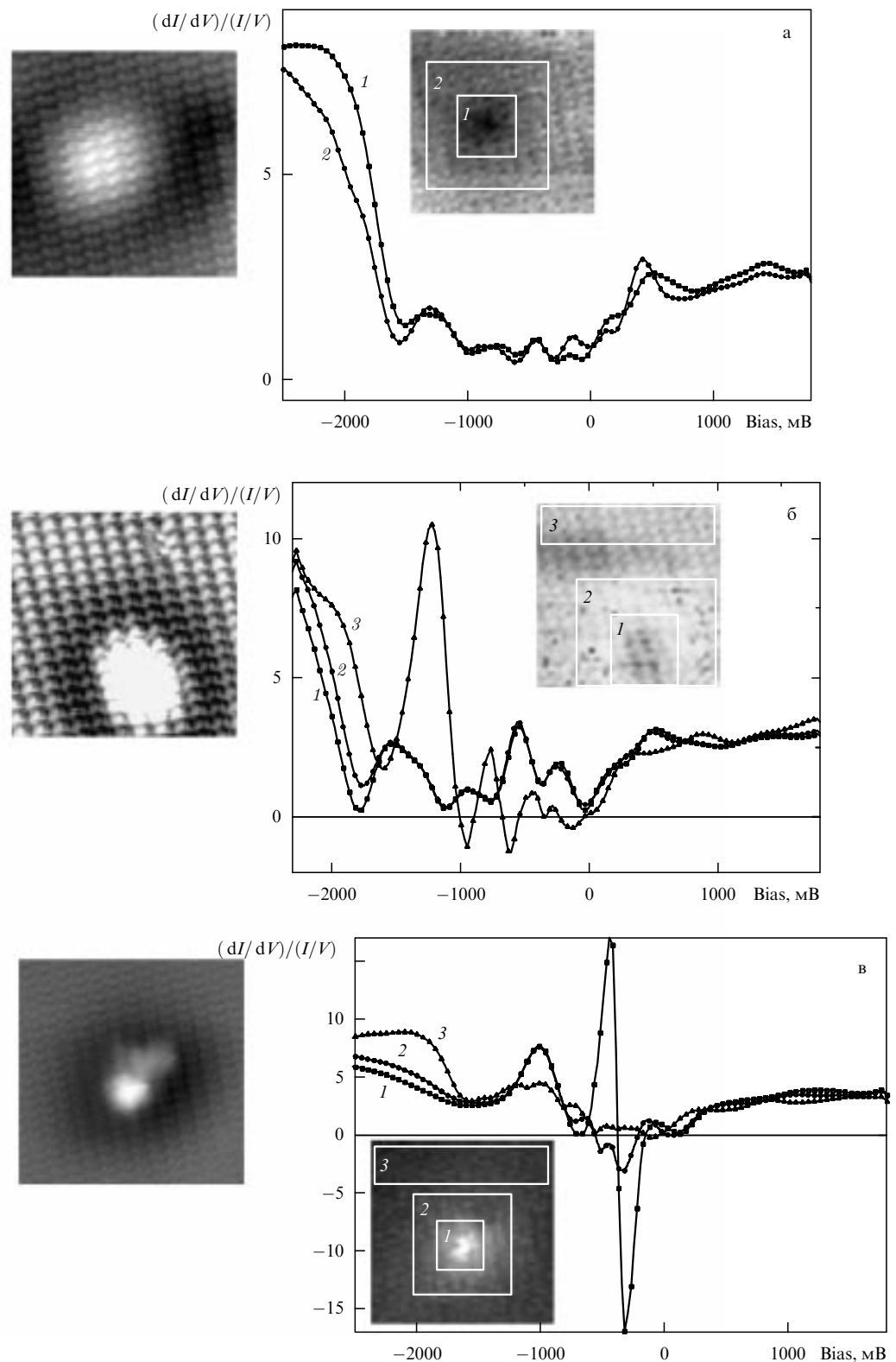


Рис. 2. (а) СТМ изображение примесного состояния атома Si. Размер кадра $5,8 \times 5,8$ нм, туннельное напряжение на образце $V_t = 1,5$ В. Туннельная проводимость вблизи атома Si на поверхности (110) GaAs. (б) СТМ изображение примесного состояния атома Te. Размер кадра $5,8 \times 5,8$ нм, туннельное напряжение на образце $V_t = 1,5$ В. Туннельная проводимость вблизи атома Te на поверхности (110) GaAs. (в) СТМ изображение примесного состояния атома Zn. Размер кадра $5,8 \times 5,8$ нм, туннельное напряжение на образце $V_t = 1,5$ В. Туннельная проводимость вблизи атома Zn на поверхности (110) GaAs. На вставках отмечены области поверхности, для которых приведены графики туннельной проводимости.

спектры примесей Te, Si и Zn на поверхности GaAs. Донорные примесные состояния Te и Si имеют радиус

локализации около 4 нм. Акцепторная примесь Zn имеет вытянутую форму, определяемую типом симметрии

локализованной орбитали, и радиус локализации порядка 2 нм.

В спектрах туннельной проводимости имеются общие закономерности. На графиках туннельных спектров для всех примесей и для чистой поверхности полупроводников запрещенная зона сдвинута и ее ширина отличается от ширины объемной зоны. Этот эффект связан с изгибом зон, индуцированным зарядом, возникающим на локализованном состоянии примеси и/или на игле СТМ вследствие конечного времени релаксации туннелирующих электронов. На кривых туннельной проводимости, измеренных над примесями (независимо от знака их заряда), присутствуют пики в запрещенной зоне и на ее краях. Такое поведение туннельной проводимости обусловлено кулоновским взаимодействием локализованных зарядов, которые изменяют начальное положение уровней примесного состояния относительно границ запрещенной зоны. Локальная плотность состояний в окрестности примесного атома существенно меняется и в глубине валентной зоны. В частности, для донорных примесей Te и Si наблюдается уменьшение плотности состояний при энергиях порядка 2 эВ, а для акцепторной примеси Zn плотность состояний в валентной зоне увеличивается. Вместе с тем каждая изученная нами примесь имеет хорошо воспроизводимые индивидуальные особенности в спектрах туннельной проводимости.

Взаимодействие примесных состояний изучалось нами для двух близлежащих атомов Si. Разработанная методика впервые позволила проследить эволюцию пространственной структуры электронной плотности вблизи примесных атомов в зависимости от потенциала и определить ее связь с симметрией локализованных состояний взаимодействующих электронов с данной энергией. На последовательности изображений (рис. 3) приведена зависимость от энергии областей взаимного перекрытия электронной плотности (получаемая кадр за кадром), из которой определяются моменты включения и выключения взаимодействий и симметрия этих состояний. Величина перекрытия состояний зависит от приложенного потенциала и, следовательно, может управляться внешним электрическим полем.

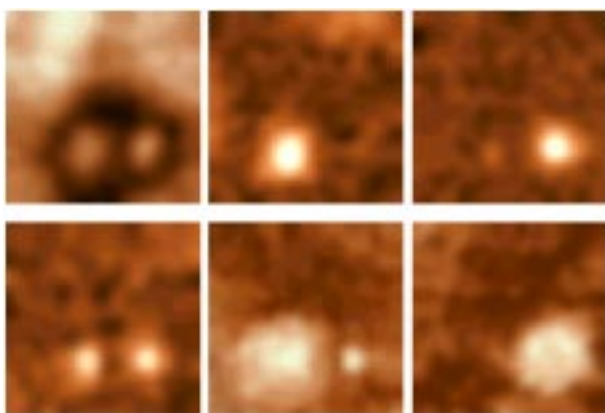


Рис. 3. Эволюция пространственного распределения локальной электронной плотности взаимодействующих атомов примесей Si в зависимости от энергии (приложенного к образцу туннельного потенциала). Размер изображения 10×10 нм, $I_t = 400$ пА. Изменение туннельного напряжения от $-1,5$ В до $+1$ В.

Характерный энергетический диапазон, на котором распределение локальной электронной плотности претерпевает существенные изменения, составляет величину порядка 0,1 эВ, что сравнимо с уширением энергетических уровней локализованных состояний за счет межчастичного взаимодействия.

Влияние дополнительного возмущающего потенциала, связанного с примесными атомами в подповерхностном слое или с влиянием острия СТМ, может приводить к появлению асимметрии в распределении электронной плотности в окрестности двух взаимодействующих примесей вплоть до возникновения электронного состояния, локализованного преимущественно в области только одного из примесных атомов.

Пики в спектрах туннельной проводимости, характеризующие тип и взаимодействие примесных атомов, исчезают при удалении от дефекта на расстояние, определяемое максимальным значением радиуса локализации состояния взаимодействующих атомов (для "мелких" примесей оно может превышать 10 нм). При удалении от дефекта меняется не только амплитуда пика, но и его энергия. Это связано с сильной зависимостью энергетического спектра от кулоновского взаимодействия электронов, локализованных на примесных атомах.

Теоретический анализ энергетического спектра и симметрии состояний в двухузельной расширенной модели Хаббарда дает качественное объяснение особенностей локальных спектров туннельного тока, полученных в экспериментах.

Развитая методика также позволила изучить детали формирования пространственной и энергетической структуры изолированной оборванной связи на поверхности. На рисунке 4 показана зависимость пространственной локализации оборванной связи примесного атома Сг от туннельного потенциала, возникающей при замещении As узла в решетке InAs. Видно, что возмущающий потенциал, вносимый примесным атомом переходного металла, ограничен размерами одного периода кристаллической решетки. Область повышенной электронной плотности вблизи атома и ее форма соответствуют пространственной локализации неспаренного электрона на гибридной орбитали оборванной связи Сг с отсутствующим (верхним) атомом In. Вытянутая форма электронного облака и ее зависимость от туннельного потенциала демонстрируют пространственную направленность, характерную для гибридной орбитали с участием d-электронного состояния. Оценка характерной энергии кулоновского отталкивания локализован-

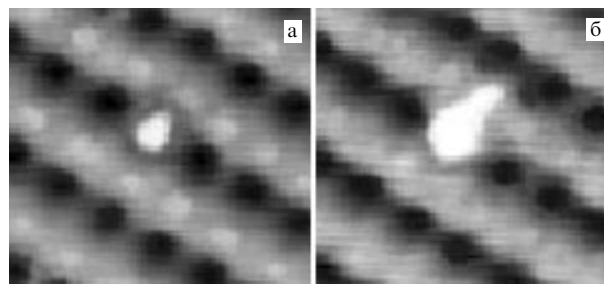


Рис. 4. СТМ изображение пространственной локализации гибридной орбитали оборванной связи примесного атома Сг в зависимости от V_t : (а) $V_t = 1$ В; (б) $V_t = 1,1$ В.

ных электронов такого состояния дает величину $U \sim \sim e^2/a_0 \sim 0,5$ эВ при $a_0 \sim 0,5$ нм, сопоставимую с шириной запрещенной зоны, что приводит к сдвигу уровней наблюдаемых для СТС спектров в окрестности глубоких примесных состояний.

Из анализа результатов СТМ/СТС исследований различных примесных атомов мы выявили наиболее общие закономерности поведения их туннельных спектров, СТМ/СТС изображений и изучили основные эффекты, вызывающие изменение этих закономерностей, что дает возможность идентифицировать изолированную атомную примесь в полупроводнике.

Отметим также, что использованная здесь методика регистрации эволюции пространственного распределения электронной плотности впервые продемонстрировала возможность контроля и измерения состояния информационных битов, создаваемых на базе единич-

ных взаимодействующих атомов примеси в полупроводниковой матрице [10].

Список литературы

1. Маделунг О *Физика твердого тела. Локализованные состояния* (М.: Мир, 1985)
2. Binnig G, Rohrer H, Gerber C, Weibel E *Phys. Rev. Lett.* **50** 120 (1983)
3. Maslova N S et al. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **67** 130 (1998)
4. Маслова Н С и др. *ЖЭТФ* **102** 925 (1992)
5. Арсеев П И, Маслова Н С *ЖЭТФ* **102** 1056 (1992)
6. Маслова Н С, Панов В И *УФН* **157** 185 (1989)
7. Depuydt A et al. *Appl. Phys. A* **66** 171 (1998)
8. Depuydt A et al. *Phys. Rev. B* **60** 2619 (1999)
9. Maslova N S et al. *Phys. Low-Dim. Struct.* (5/6) 131 (1997)
10. Kane В E *Nature* (London) **393** 133 (1998)