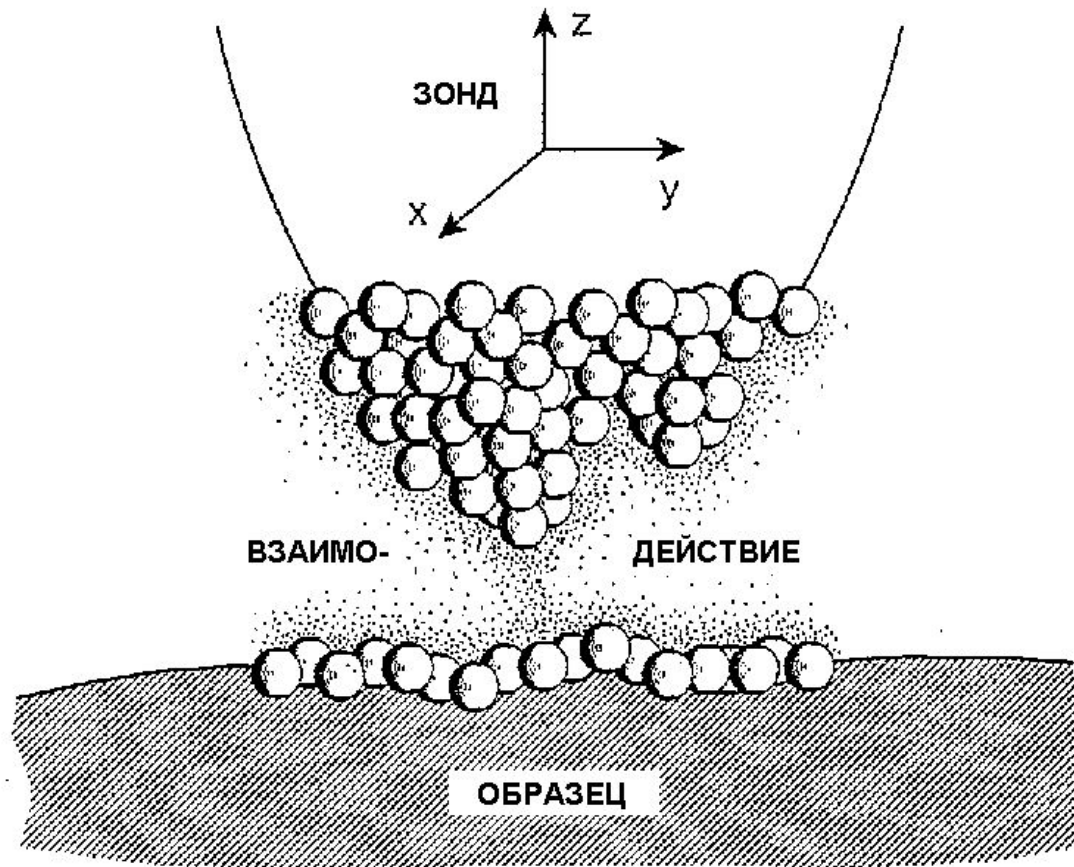
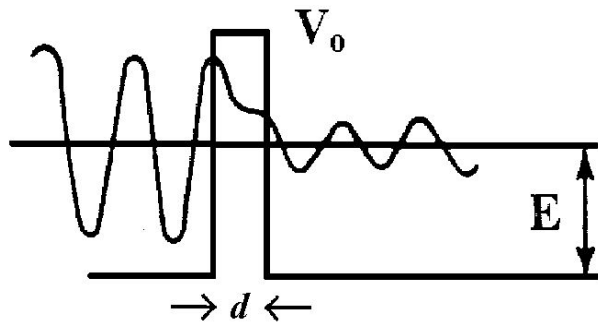


Лекция 10 Сканирующая туннельная спектроскопия. Туннельные и дифференциальные туннельные ВАХ. Влияние особенностей плотности электронных состояний образца на дифференциальную туннельную проводимость.



Физические основы СТМ



Туннелирование электрона через потенциальный барьер:

одномерная задача для свободного электрона

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (V(x) - E)\psi = 0 \quad \rightarrow \quad \psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0), \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & (0 < x < d), \\ Fe^{ikx} & (x > d), \end{cases}$$

$$k = \sqrt{2mE} / \hbar \quad \kappa = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \quad \text{Обратная длина затухания } \kappa \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\text{Коэффициент пропускания } T = |F/A|^2 \quad \text{при } d \gg 1/\kappa \quad T \approx \frac{16k^2 \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-2\kappa d}$$

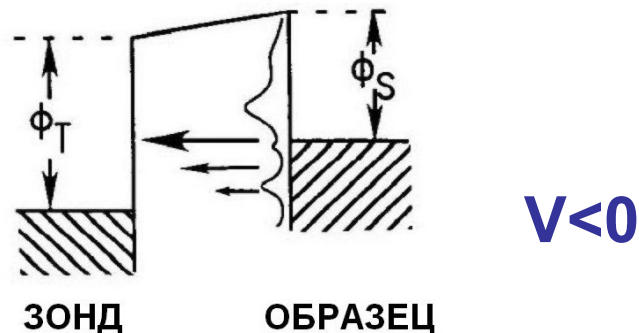
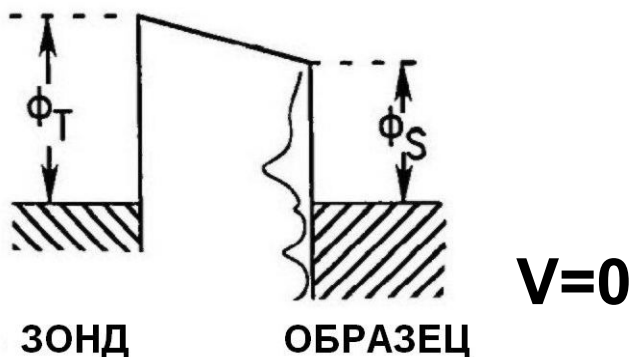
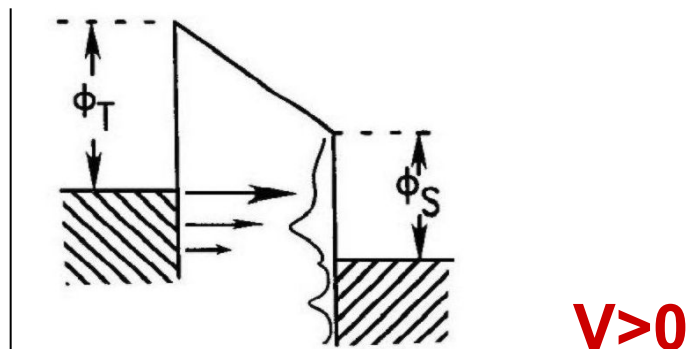
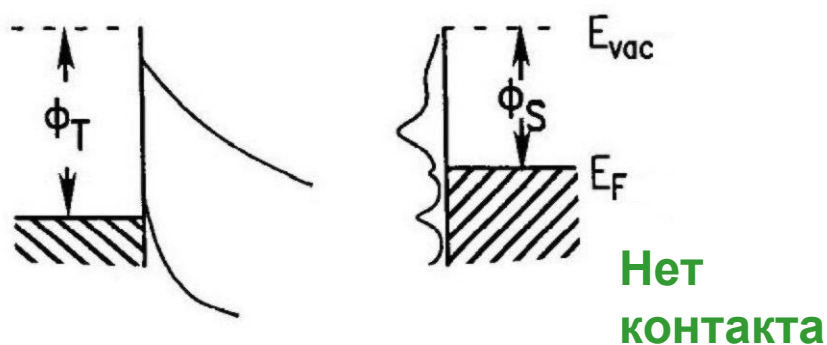
Экспоненциальная зависимость туннельного тока ширины барьера:

$$I = B \left(\bar{\phi} \exp(-Ad\sqrt{\bar{\phi}}) - (\bar{\phi} + eV) \exp(-Ad\sqrt{\bar{\phi} + eV}) \right)$$

при увеличении ширины барьера (расстояния между зондом и образцом) на 1 \AA туннельный ток уменьшится в ~ 7 раз:

$$\frac{I(d)}{I(d + \Delta d)} = \frac{\exp(-2\kappa d)}{\exp(-2\kappa(d + \Delta d))} = \exp(2\kappa \Delta d) \sim e^2$$

Туннелирование электрона между металлами



$$I = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s(\varepsilon) \rho_t(\varepsilon + eV) T(\bar{\varphi}, d, eV) [f(\varepsilon) - f(\varepsilon - eV)] d\varepsilon$$

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} d \sqrt{2m(\bar{\varphi} - eV/2 + \varepsilon_f - \varepsilon)}\right)$$

Если $kT \ll eV$

$$I = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{E_F - eV}^{E_F} \rho_s(\varepsilon) \rho_t(\varepsilon + eV) T(\bar{\varphi}, d, eV, \varepsilon) d\varepsilon$$

Если $\rho_t \approx const$

$$I = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_t \int_{E_F - eV}^{E_F} \rho_s(\varepsilon) T(\bar{\varphi}, d, eV, \varepsilon) d\varepsilon$$

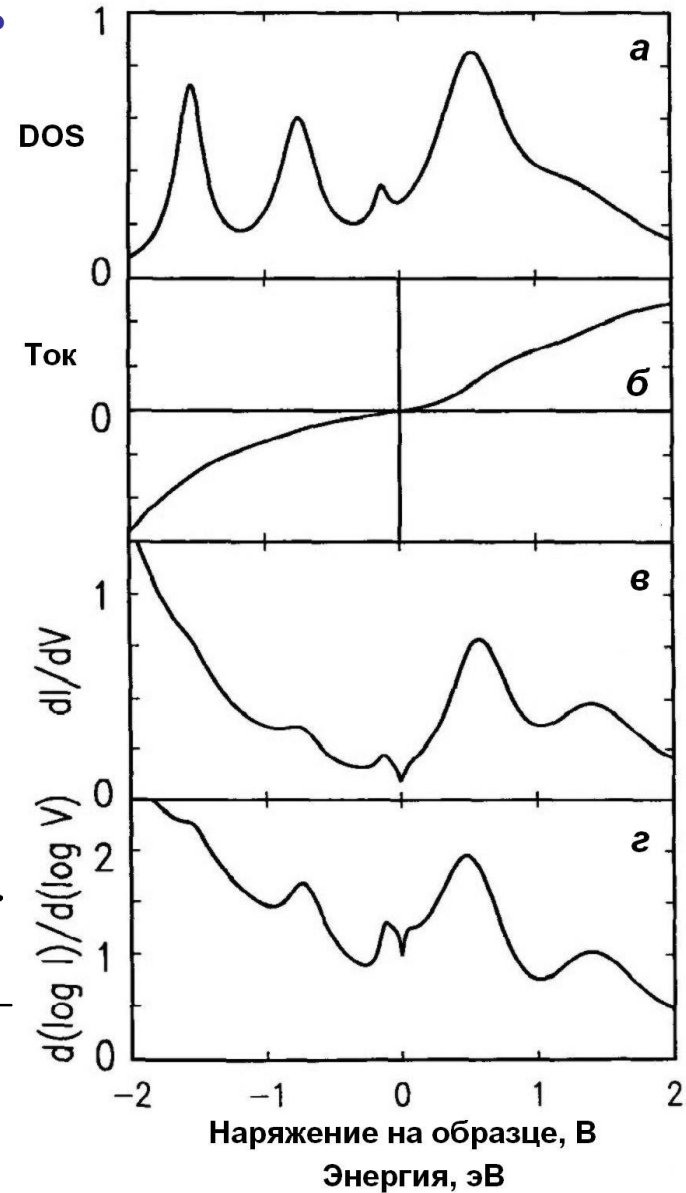
Сканирующая туннельная спектроскопия.

Дифференциальная туннельная проводимость

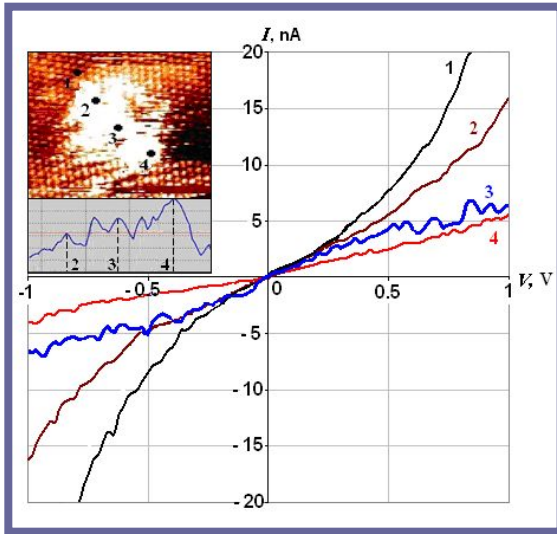
$$\frac{dI}{dV} \sim \rho_s(eV)T(\bar{\varphi}, d, eV, eV) + \int_{E_F}^{E_F+eV} \rho_s(\varepsilon) \frac{dT(\bar{\varphi}, d, eV, \varepsilon)}{dV} d\varepsilon$$

$$\frac{dI/dV}{I/V} \sim$$

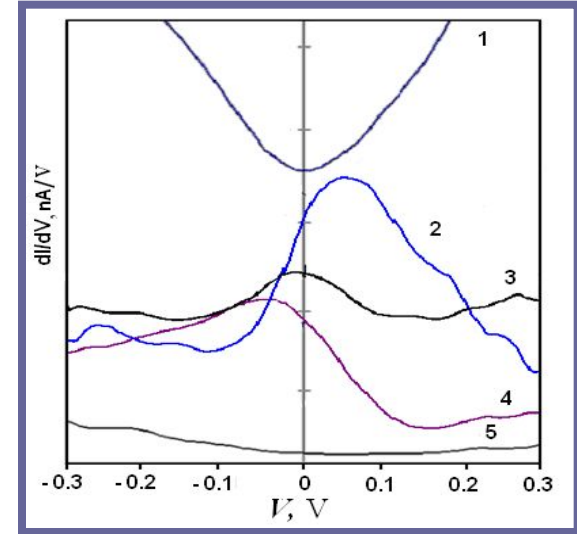
$$\sim \frac{\rho_s(eV) + \int_{E_F}^{E_F+eV} \frac{\rho_s(\varepsilon)}{T(\bar{\varphi}, d, eV, \varepsilon)} \frac{dT(\bar{\varphi}, d, eV, \varepsilon)}{dV} d\varepsilon}{\frac{1}{V} \int_{E_F}^{E_F+eV} \rho_s(\varepsilon) \frac{T(\bar{\varphi}, d, eV, \varepsilon)}{T(\bar{\varphi}, d, eV, eV)} d\varepsilon}$$



Данные СТС: Электронная локализация в двумерных шероховатых кластерах Au



$$dI / dV \sim \rho_s(\epsilon)$$



Туннельные вольтамперные характеристики ВОТГ (1) и различных участков одного кластера Au (размер ~2 нм) с локальной высотой 0.3 нм (2), 0.6 нм (3) и 0.9 нм (4).

Дифференциальные ВАХ для ВОТГ (1), 3D кластера Au (2), 2D кластера Au (3), атомов Au (4) и металлического золота (5).

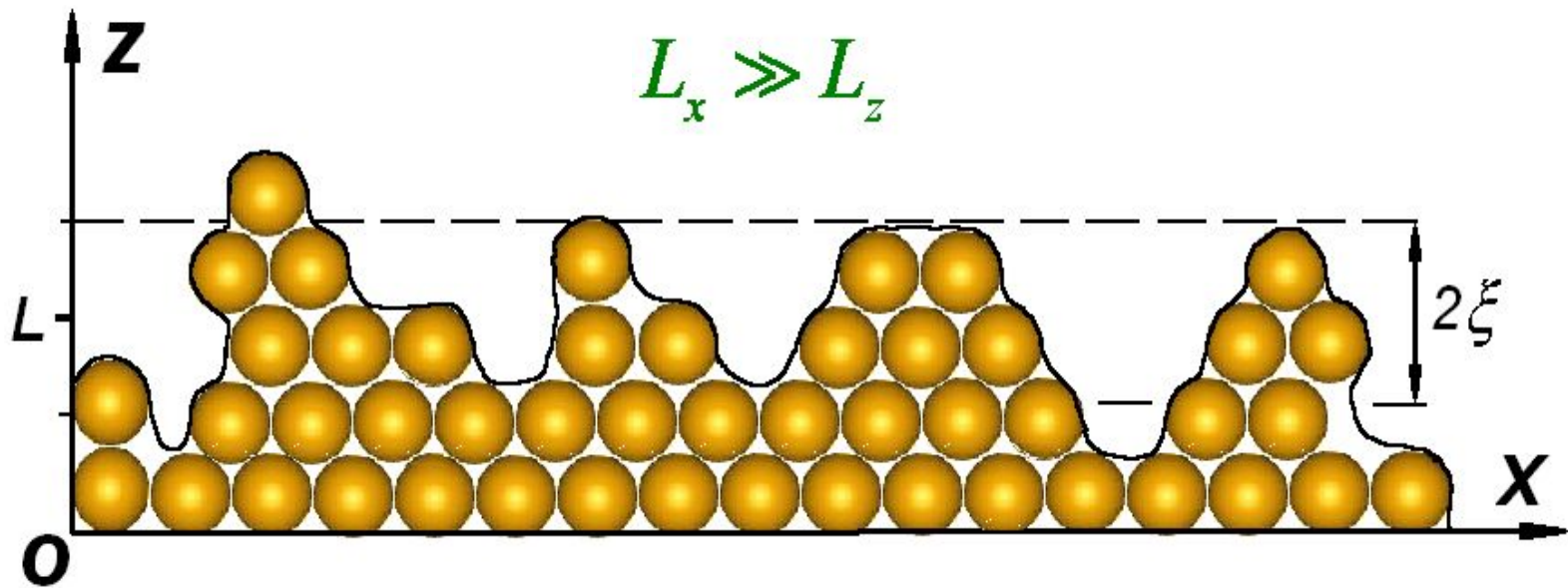
1. Нанокластер Au неоднородной высоты:

ВАХ в различных точках одного кластера различаются, туннельный ток зависит от локальной высоты кластера;

2. Нанокластеры различного размера и высоты:

Дифференциальные ВАХ кластеров Au в диапазоне прикладываемых напряжений $V = \pm 0.3$ В имеют пик в окрестности энергии Ферми.

ЭТИ РЕЗУЛЬТАТЫ МОГУТ СВИДЕТЕЛЬСТВОВАТЬ О СУЩЕСТВОВАНИИ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В КЛАСТЕРАХ AU С ШЕРОХОВАТОЙ ГРАНИЦЕЙ.



L – ширина пластины

$\xi(x)$ – величина флуктуаций на границе

$$\langle \xi(x) \rangle = 0$$

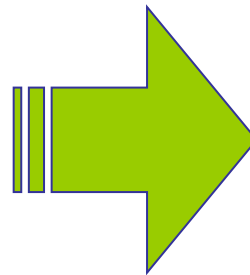
$$\langle |\xi(x)| \rangle = l$$

$$\langle \xi(x_1)\xi(x_2) \rangle = l^2 R \sqrt{2\pi} \delta(x_2 - x_1)$$

Граничные условия
на волновую
функцию

$$\psi(x, 0) = 0$$

$$\psi(x, L - \xi(x)) = 0$$



Граничное условие на
фазу волновой
функции

$$\frac{\partial}{\partial z} \ln \psi(x, z)_{z=L} = -\frac{1}{\xi(x)}$$

ПЕРЕХОД К ГЛАДКИМ ГРАНИЧНЫМ УСЛОВИЯМ

$$z = 0 \quad z = L - \xi(x) \implies X = x, \quad Z = \frac{Lz}{L - \xi(x)} \implies Z = 0 \quad Z = L$$

↓ СООТВЕТСТВУЮЩЕЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ

■ → ИМПУЛЬСОВ

$$p_x = P_x + P_z \frac{Z \xi'_x}{L} \quad \xi(x) \ll R \ll L \quad H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} = \left(\frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} \right) + V$$

$$p_z = P_z \left(1 + \frac{\xi(x)}{L} \right) \quad P_x \ll P_z$$

■ →
!!! ВОЗМУЩАЮЩИЙ ПОТЕНЦИАЛ !

$$V = \frac{\xi(x)}{mL} P_z^2 \quad P_z = \frac{\pi \hbar j}{L} \quad V^{(j)}(x) \approx \frac{\xi(x)}{mL} \left(\frac{\pi \hbar j}{L} \right)^2$$

■ →

ФЛУКТУИРУЮЩИЙ ПОТЕНЦИАЛ

$$\langle V(x) \rangle = 0$$

$$\langle V(x)V(x') \rangle = 2D\delta(x-x')$$

, где $D = \sqrt{2\pi} \frac{(\pi j\hbar)^4 l^2 R}{2m^2 L^6}$

ПОЛУЧИМ УРАВНЕНИЕ НА ФАЗУ ВОЛНОВОЙ

■ ■ → ФУНКЦИИ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

$$\varphi = \frac{\psi'}{\psi}$$

$$\varphi' = -\left(\varphi^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E\right) + \frac{2m}{\hbar^2}V(x)$$

■ ■ →

УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА ПЛАНКА

$$\frac{\partial P(x, \varphi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\left(\varphi^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E \right) P(x, \varphi) + D \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{\partial P(x, \varphi)}{\partial \varphi} \right)$$



$$J(E) = \left(\varphi^2 + E \frac{2m}{\hbar^2} \right) P(\varphi) + D \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{\partial P(\varphi)}{\partial \varphi}$$

СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЫ

$$N^{(-1)}(E) = \frac{2\pi^2 \left(j^4 l^2 R / 16 \right)^{1/3}}{L^2} \int_0^\infty \frac{dz}{\sqrt{z}} \exp \left(-\frac{z^3}{24} - z \frac{EmL^2}{(2\pi)^3 \hbar^2} \left(\frac{16L^3}{j^4 l^2 R} \right)^{2/3} \right)$$

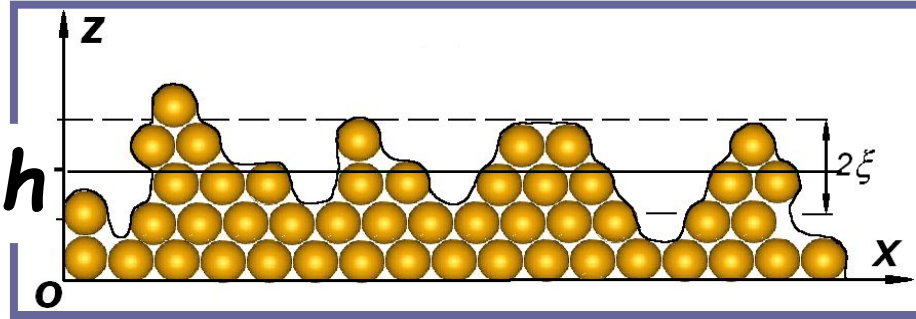
$$N_{2D}(E) = N_X(E) N_Y(E) \quad \rho_{total}(E) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{dN_{2D}(E)}{dE}$$



ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ПЛЕНКИ ВЫСОТОЙ L

$$\rho_{total}(E) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{d}{dE} \left(\frac{2\pi^2 \left(j^4 l^2 R / 16 \right)^{1/3}}{L^2} \int_0^\infty \frac{dz}{\sqrt{z}} \exp \left(-\frac{z^3}{24} - z \frac{EmL^2}{(2\pi)^3 \hbar^2} \left(\frac{16L^3}{j^4 l^2 R} \right)^{2/3} \right) \right)^{-2}$$

Локализация электронов в разупорядоченных поверхностных атомных слоях ИЛО нанокластеров



Переход к гладким граничным условиям приводит к появлению случайного потенциала

$$U^{(j)}(x) \approx \frac{\xi(x)}{h} E^{(j)}$$

$$\langle \xi(x) \rangle = 0$$

$$\langle |\xi(x)| \rangle = l$$

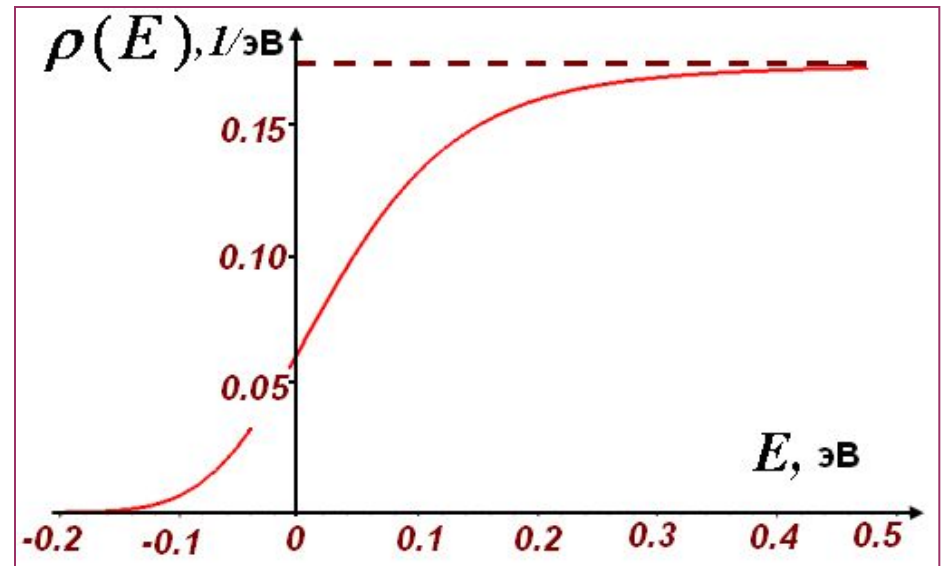
$$\langle \xi(x_1)\xi(x_2) \rangle = l^2 R \sqrt{2\pi} \delta(x_2 - x_1)$$

$$\rho^{2D}(E) = \frac{d}{dE} \left(\frac{2\pi^2 (j^4 l^2 R / 16)^{1/3}}{h^2} \int_0^\infty \frac{dz}{\sqrt{z}} \exp \left(-\frac{z^3}{24} - z \frac{Emh^2}{(2\pi)^3 \hbar^2} \left(\frac{16h^3}{j^4 l^2 R} \right)^{2/3} \right) \right)^{-2}$$

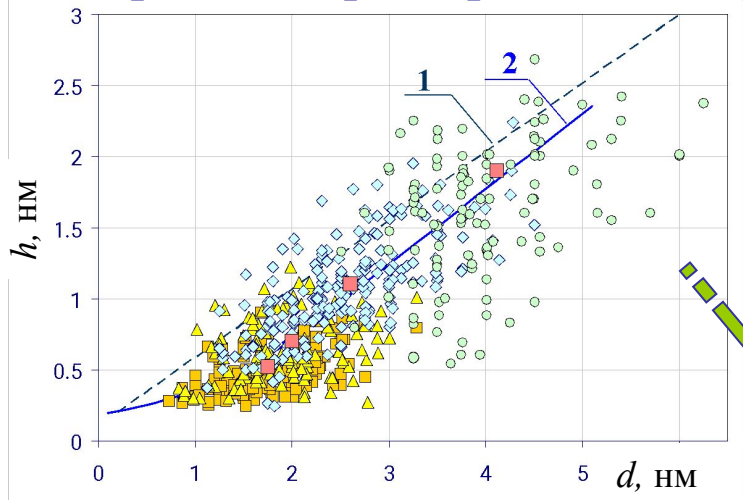
R - радиус корреляций, l - средняя амплитуда

Плотность состояний в двумерной системе с наличием случайного потенциала. ($R \sim 1 \text{ \AA}$ $l \sim 3 \text{ \AA}$ $h = 15 \text{ \AA}$)

Штриховая линия соответствует расчетной плотности состояний в приближении двумерного свободного электронного газа.

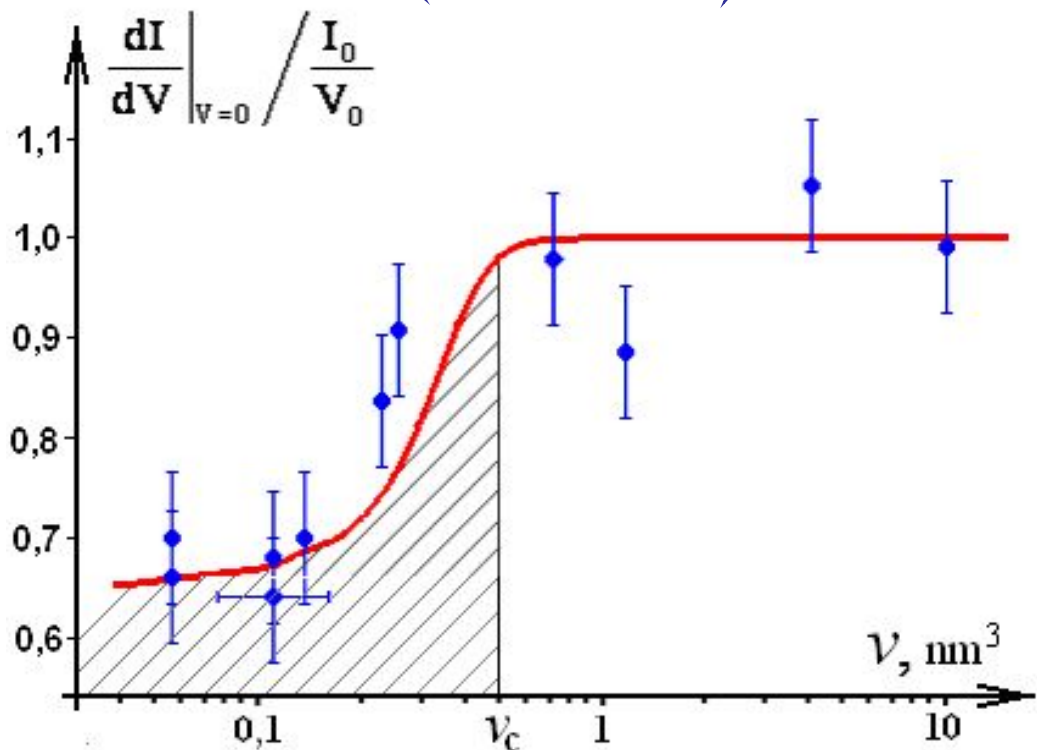


корреляция между высотой h и латеральным размером d кластеров Au

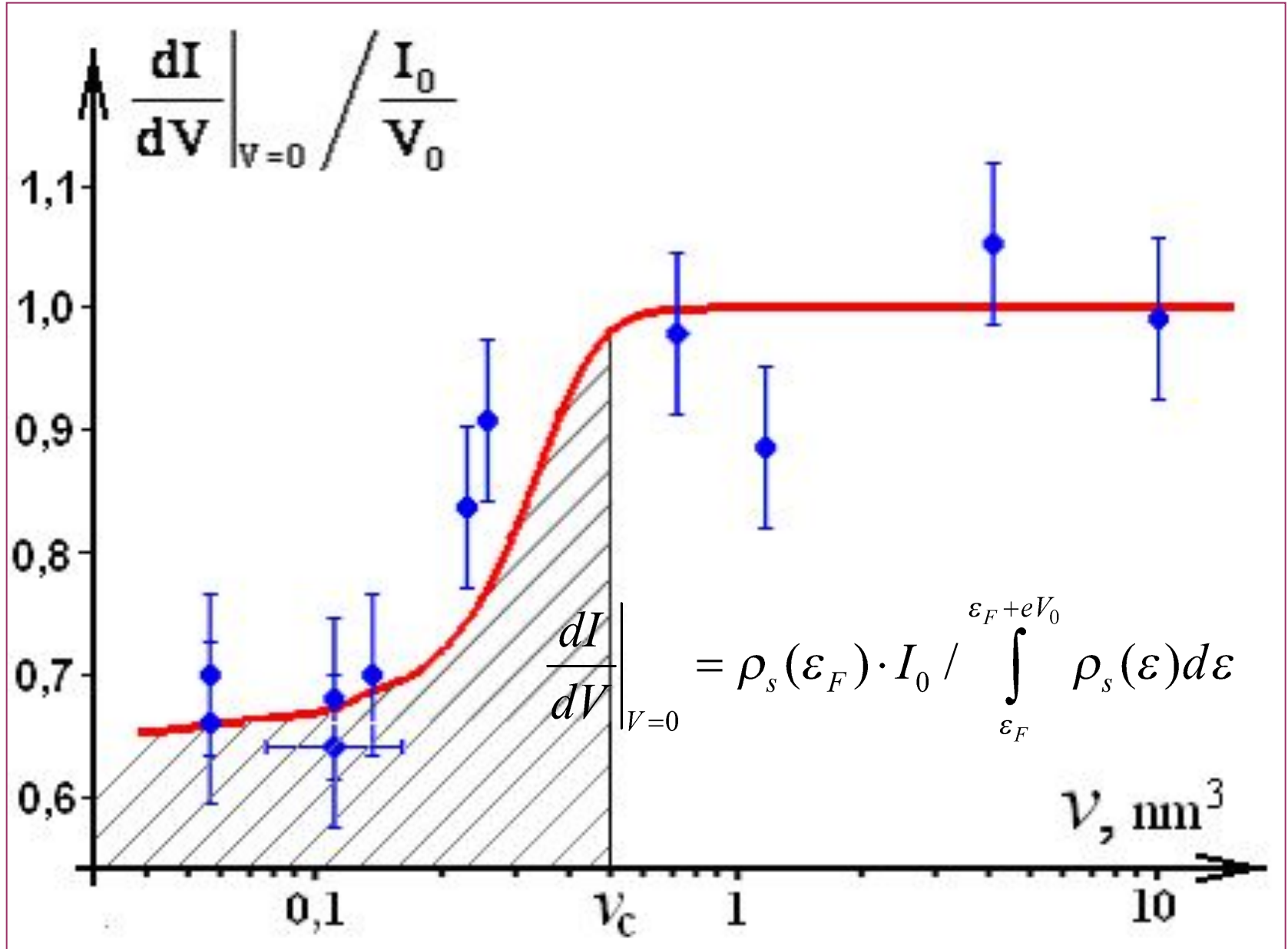


Туннельная проводимость при малых напряжениях отражает электронную плотность состояний на энергии Ферми

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=0} = \rho_s(\varepsilon_F) I_0 / \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_0} \rho_s(\varepsilon) d\varepsilon$$



СРАВНЕНИЕ РАСЧЕТНОЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ С ИЗМЕРЯЕМОЙ ТУННЕЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ



Заштрихованная область отвечает наличию **локализованных** электронных **состояний** на энергии **Ферми**.