

## СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ НЕРАВНОВЕСНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

П.И.Арсеев, Н.С.Маслова, С.И.Орешкин, В.И.Панов, С.В.Савинов<sup>1)</sup>

Московский государственный университет

119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 ноября 2000 г.

Методом сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии изучено взаимодействие двух примесных локализованных состояний атомов Si на поверхности GaAs. Обнаружены эффекты двукратного "включения" и "выключения" состояний для каждого из взаимодействующих атомов, взаимное затягивание уровней этих состояний за счет туннельного взаимодействия и стабилизация уровней вблизи  $E_F$ . В рамках расширенной модели Андерсона дано объяснение наблюдаемым эффектам.

PACS: 61.16.Ch, 68.35.Bs, 68.65.+g, 71.55.Eq, 73.20.Dx

С уменьшением размеров и понижением размерности полупроводниковых электронных систем ключевую роль в электронных процессах начинают играть примесные состояния и их взаимодействие. Особое влияние такие состояния оказывают на электронную структуру поверхности. На сегодняшний день эффекты взаимодействия примесных состояний на поверхности и границах раздела изучены слабо, а эффекты неравновесного взаимодействия примесных состояний практически не исследовались. Вместе с тем современные тенденции развития полупроводниковой электроники требуют детального анализа подобного рода процессов, поскольку в перспективе они могут стать основой для реализации элементов полупроводниковой электроники нанометровых размеров.

В настоящей работе методом сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии (СТМ/СТС) изучены эффекты взаимодействия примесных локализованных состояний, образованных на поверхности (110) GaAs парой идентичных атомов примеси Si, разделенных расстоянием 3 нм [1]. Исследуемым образцом служил монокристалл GaAs, легированный взаимокомпенсирующими примесями Si и Zn с концентрацией  $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  и  $2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , соответственно.

Измерения проводились при температуре 4.2 К с помощью сканирующего туннельного микроскопа, позволяющего получать чистую поверхность образца *in situ* с помощью механизма скалывания [2].

Взаимодействие примесных состояний изучалось нами путем измерения туннельной проводимости  $(dI/dV)/(I/V)$  по участку поверхности размером 10 нм · 10 нм с шагом 0.25 нм. На рисунке показано измеренное пространственное распределение локальной электронной плотности вблизи взаимодействующих примесей *a* и *b* в зависимости от энергии для ключевых состояний этих взаимодействующих примесных атомов.

На рисунке 1.1 представлено СТМ изображение взаимодействующих атомов Si. На остальной серии рисунков изображено пространственное распределение нормированной туннельной проводимости вблизи атомов в зависимости от туннельного

<sup>1)</sup> e-mail: spm@spmlab.phys.msu.su

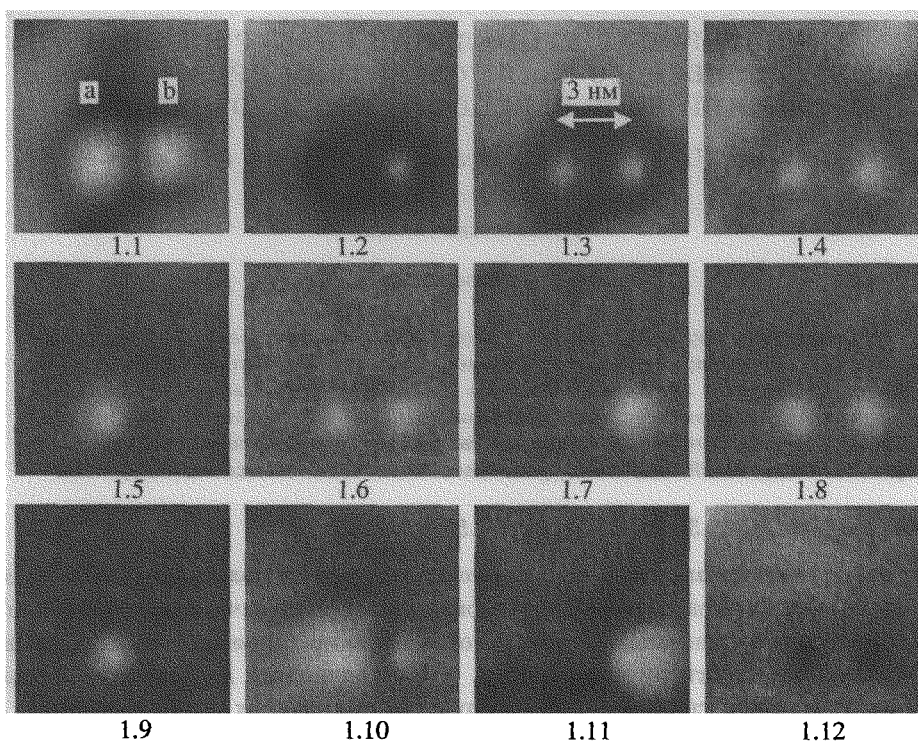


Рис.1. СТМ изображение и изображение нормированной туннельной проводимости вблизи взаимодействующих примесных атомов кремния *a* и *b*: 1.1-СТМ изображение атомов при  $V_t = 1.5$  В; 1.2-1.12-изображения туннельной проводимости  $\frac{\delta I/\delta V}{I/V}$ : 1.2 при  $V_t = 2.0$  В; 1.3 при  $V_t = 1.55$  В; 1.4 при  $V_t = 1.4$  В; 1.5 при  $V_t = 1.1$  В; 1.6 при  $V_t = 0.8$  В; 1.7 при  $V_t = 0.55$  В; 1.8 при  $V_t = 0.2$  В; 1.9 при  $V_t \approx 0.0$  В; 1.10 при  $V_t = -0.2$  В; 1.11 при  $V_t = -0.4$  В; 1.12 при  $V_t = -1.5$  В

напряжения, приложенного к острию СТМ. Следует отметить, что вклад от других легирующих примесей вблизи выбранных взаимодействующих атомов Si наблюдался лишь в виде распределенного неоднородного кулоновского потенциала в кристалле. Этот потенциал вызывал асимметрию начального состояния взаимодействующей пары атомов Si, наблюдаемую в различии СТМ/СТС изображений этих атомов при нулевом напряжении на переходе  $V_t \approx 0$ .

В экспериментально наблюдаемом пространственном распределении локальной туннельной проводимости видно двукратное “включение” и “выключение” каждого состояния, связанного с атомами *a* и *b* при изменении туннельного напряжения. В окрестности каждого из этих атомов после “включения” избыточная туннельная проводимость существует в интервале напряжений  $\approx 0.75$  В, что много больше ширины уровня локализованного состояния. В то же время переход из одного состояния в другое для атомов происходит при изменении напряжения в интервале порядка 0.15 В, что сопоставимо с шириной уровня энергии локализованного состояния.

Для объяснения поведения пространственного распределения туннельной проводимости в окрестности двух примесных атомов предложена модель, аналогичная

модели Андерсона [3–5], учитывающая кулоновское взаимодействие локализованных электронов и влияние туннельного напряжения на положение энергетических уровней примесных атомов.

Изменение приложенного напряжения может приводить к переходу примесного атома из состояния, при котором атом находится в “парамагнитном” режиме к состоянию, при котором атом может находиться в “магнитном” режиме (энергия электронов с различными спинами и их числа заполнения отличаются). Взаимодействие примесных состояний с состояниями непрерывного спектра предполагается не слишком малым – таким, что изменение энергии примесных состояний за счет кулоновского взаимодействия локализованных зарядов определяется средними числами заполнения при фиксированном значении приложенного напряжения. Эта ситуация отличается от эффектов, обусловленных кулоновской блокадой, связанной с дискретностью чисел заполнения локализованных состояний [7].

Действительно, кулоновская блокада при наличии как внутриатомного кулоновского взаимодействия, так и межатомного [7] приводит к появлению пиков в туннельной проводимости при изменении напряжения на контакте, ширина которых порядка ширины уровня локализованного состояния (и не превышает 0.1 эВ).

В нашей модели наличие туннельного взаимодействия между примесными атомами может приводить к перераспределению локализованного заряда между атомами и к эффекту затягивания уровней энергии локализованных состояний друг относительно друга в некотором интервале приложенного напряжения. В результате при анализе экспериментальных данных необходимо учесть следующие факторы.

1. Появление избыточной локальной туннельной проводимости в окрестности примесного атома наблюдается, если  $|\varepsilon_{a(b)}(V) - E_F| < \Gamma$  ( $\Gamma$ -уширение локализованного уровня атома). При этом, если приложенное напряжение превосходит ширину уровня  $|eV| > \Gamma$ , то локальная туннельная проводимость может возрастать как при прохождении энергии локализованного состояния через уровень Ферми образца  $E_F^S$ , так и через уровень Ферми острья  $E_F^T = E_F^S - eV$ .

2. Кулоновское взаимодействие локализованных электронов может описываться в самосогласованном приближении среднего поля в модели Андерсона. Это приближение хорошо применимо, когда энергия кулоновского взаимодействия локализованных электронов  $U_{a(b)}$  не сильно превышает критическое значение  $U_{cr}$ .

При изменении напряжения на контакте, то есть при изменении положения затравочного уровня примесного атома  $\varepsilon_{a(b)}^0(V)$  может происходить переход от “парамагнитного” режима к “магнитному”. Таким образом, кулоновское взаимодействие локализованных электронов в некотором интервале значений приложенного напряжения может приводить к возникновению двух различных по энергии состояний для электронов с противоположным спином на отдельном примесном атоме. При дальнейшем увеличении приложенного напряжения возможен обратный переход примесного атома к “парамагнитному” состоянию.

3. За счет взаимодействия атомов закон распределения локализованных зарядов в области контакта СТМ становится более сложным. Происходит значительное перераспределение локализованного заряда между атомами так, что возможна стабилизация уровней энергии одного из атомов вблизи уровня Ферми образца или острья и затягивание энергетических уровней друг относительно друга. Так, в неравновесной ситуации, когда при отличном от нуля напряжении  $V$  уровень  $\varepsilon_a^{-\sigma}(V)$  попадает

в окрестность  $E_F^S$  и лежит выше  $\epsilon_b^{\pm\sigma}(V)$ , то наличие связи между атомами  $a$  и  $b$  приводит к перераспределению заряда между ними и усилению “магнитного” режима атома  $a$  и, следовательно, к увеличению расстояния между уровнями  $\epsilon_a^\sigma$  и  $\epsilon_a^{-\sigma}$ . В случае, когда  $V_t = 0$  взаимодействие между атомами приводит к ослаблению “магнитного” режима атома  $a$  и выравниванию энергий  $\epsilon_a^\sigma$  и  $\epsilon_a^{-\sigma}$ .

Используя предложенную модель, проанализируем экспериментальные результаты.

При  $V \approx 0$  энергия локализованного состояния атома  $a$   $\epsilon_a(0)$  близка к уровню Ферми образца  $E_F^S$ . Атом  $a$  проявляется в виде повышенной туннельной проводимости, то есть в виде светлого пятна на СТС изображении (рисунок 1.9). Здесь кулоновское взаимодействие локализованных электронов  $U_a$  не сильно превосходит критическое значение  $U_{cr}$ , принятое в модели Андерсона и атом  $a$  находится в “парамагнитном” режиме  $\epsilon_a^\sigma = \epsilon_a^{-\sigma}$ ,  $\langle n_a^\sigma \rangle = \langle n_a^{-\sigma} \rangle$ . При этих условиях энергия локализованного состояния атома  $b$ , равная  $\epsilon_b(0)$ , лежит ниже уровня Ферми, поэтому атом  $b$  не виден на СТС изображении туннельной проводимости. Предполагается, что энергия кулоновского взаимодействия локализованных электронов на атоме  $U_b$  меньше  $U_{cr}$  и атом  $b$  также находится в “парамагнитном” режиме.

При увеличении положительного напряжения на острие энергия атомов  $a$  и  $b$  понижается за счет внешнего поля (приложенного напряжения) и при  $V_t \approx 0.15$  В энергия атома  $b$ , равная  $\epsilon_b(V)$ , становится близка к уровню Ферми острия  $E_F^T$ . В результате происходит включение атома  $b$  и он становится виден на СТС изображении также в виде светлого пятна, при этом в области атома  $a$  сохраняется избыточная туннельная проводимость (рисунок 1.8) Это связано с тем, что при небольшом понижении энергии атома  $a$  происходит переход из “парамагнитного” режима Андерсоновской примеси к “магнитному”, поскольку энергия внутриузельного кулоновского отталкивания не сильно отличается от критического значения. Энергии электронов с противоположными спинами и их числа заполнения становятся различными:

$$\epsilon_a^{\pm\sigma} = \epsilon_a^0 - \alpha V + U_a < n_{\mp\sigma}(V) > .$$

При таком переходе одно из чисел заполнения  $n_{\mp\sigma}(V)$  (для определенности  $n_\sigma(V)$ ) увеличивается, а другое ( $n_{-\sigma}(V)$ ) – уменьшается. Это приводит к более быстрому убыванию  $\epsilon_a^\sigma(V)$  по сравнению со случаем, когда зависимость энергии от чисел заполнения не учитывается. Соответственно,  $\epsilon_a^{-\sigma}(V)$  растет, а уровень  $\epsilon_a^\sigma(V)$  стабилизируется в окрестности энергии Ферми острия. Кроме того, разность энергий  $\epsilon_a^\sigma(V)$ ,  $\epsilon_b^\sigma(V)$  атомов  $a$  и  $b$  не превышает суммарной ширины этих уровней и, следовательно, существенным становится перераспределение заряда между атомами. Уменьшение чисел заполнения на  $b$  атоме  $n_b^\sigma(V)$  и одновременное увеличение  $n_a^\sigma(V)$  на атоме  $a$  приводят к росту энергии состояния  $\epsilon_a^{-\sigma}(V, n_a^\sigma)$  и к дальнейшему понижению энергии состояния  $\epsilon_a^\sigma(V, n_a^{-\sigma})$ , то есть к еще большему сближению уровней  $\epsilon_a^\sigma(V)$  и  $\epsilon_b^\sigma(V)$ . Происходит как бы затягивание уровня  $\epsilon_a^\sigma(V)$  в область энергии  $\epsilon_b^\sigma(V)$ , а различие энергий электронов с противоположными спинами на атоме  $a$   $\epsilon_a^\sigma(V)$  и  $\epsilon_a^{-\sigma}(V)$  возрастает. Таким образом в окрестности обоих атомов  $a$  и  $b$  существует избыточная туннельная проводимость, что экспериментально наблюдается в диапазоне напряжений от  $\approx 0.15$  В до  $\approx 0.5$  В.

При дальнейшем увеличении  $V_t$  положение уровня  $\epsilon_a^\sigma$  в основном определяется внешним полем в силу малости  $\langle n_a^{-\sigma} \rangle$ . Уровень с энергией  $\epsilon_a^\sigma(V)$  удаляется от уровня Ферми и атом  $a$  выключается при  $V_t \approx 0.55$  В. (рисунок 1.7).

При изменении напряжения от  $V_t \approx 0.55$  В до  $V_t \approx 0.75$  В избыточная туннельная проводимость видна только в окрестности атома  $b$ . Энергия локализованного состояния атома  $b$  остается в окрестности уровня Ферми острия  $E_F^T$  вплоть до напряжения  $V_t \approx 1.1$  В (рисунок 1.5), при котором происходит “выключение” этого атома. Таким образом, избыточная туннельная проводимость вблизи атома  $b$  сохраняется в диапазоне напряжений от  $V_t \approx 0.2$  В до  $V_t \approx 1$  В, (рисунок 1.5-1.8), поскольку кулоновское взаимодействие локализованных электронов и уменьшение среднего числа заполнения данного уровня при увеличении приложенного напряжения стабилизируют энергию этого уровня в окрестности  $E_F^T$ . При напряжениях, превышающих  $V_t \approx 1$  В изменение энергии локализованного состояния атома  $b$  определяется в основном внешним полем.

Вторичное включение атома  $a$  происходит при  $V_t \approx 0.8$  В (рисунок 1.6). Это связано с изменением энергии электрона со спином  $-\sigma$  за счет внешнего поля  $\epsilon_a^{-\sigma} = \epsilon_a^0(0) - \alpha V + U_a < n_\sigma >$ . Появление избыточной туннельной проводимости в окрестности атома  $a$  соответствует попаданию уровня  $\epsilon_a^{-\sigma}(V < n_\sigma >)$  в область шириной  $\Gamma$  в окрестности уровня Ферми образца  $E_F^S$  (прохождению уровня  $\epsilon_a^{-\sigma}(V)$  через уровень Ферми образца). При этом  $< n_a^{-\sigma} >$  начинает увеличиваться и возможен обратный переход атома  $a$  в “парамагнитный” режим:  $\epsilon_a^\sigma(V) = \epsilon_a^{-\sigma}(V)$ . Зависимость энергии этого локализованного состояния от числа заполнения приводит к стабилизации уровня  $\epsilon_a^{-\sigma}$  в окрестности уровня Ферми образца при изменении напряжения на контакте до  $V_t \approx 1.5$  В. Отметим, что при напряжениях превышающих  $V_t \approx 1.4$  В, (рисунок 1.4), пространственное распределение туннельной проводимости сильно зависит от модификации зонной структуры полупроводника в окрестности примесных атомов (рисунки 1.2, 1.3) [7, 8].

В области отрицательных напряжений на острие энергии локализованных состояний атомов  $a$  и  $b$   $\epsilon_a^{\pm\sigma}$  и  $\epsilon_b^{\pm\sigma}$  возрастают. Оба атома  $a$  и  $b$  находятся в “парамагнитном” состоянии. При  $V_t \approx -0.2$  В уровень энергии атома  $b$  проходит через уровень Ферми образца  $E_F^S$ , в результате происходит “включение” атома  $b$  (рисунок 1.10). Кулоновское взаимодействие локализованных электронов приводит к стабилизации этого уровня в окрестности  $E_F^S$  при изменении напряжения до  $V_t \approx -1$  В, так же как и для положительного напряжения. При напряжении  $V_t \approx -0.4$  В разность между энергией уровня локализованного состояния атома  $a$  и энергией Ферми становится больше ширины этого уровня. Происходит “выключение” атома  $a$  (рисунок 1.11). В результате избыточная плотность состояний в окрестности атома  $a$  исчезает.

При отрицательном напряжении на острие избыточная туннельная проводимость одновременно наблюдается вблизи обоих атомов только в интервале напряжений от  $V_t \approx -0.2$  В до  $V_t \approx -0.3$  В. Отметим, что при отрицательной полярности приложенного напряжения на острие область локализации электронной плотности в окрестности примесного состояния возрастает с увеличением напряжения на контакте, что связано с приближением энергии локализованного состояния к границе зонного спектра.

В области больших отрицательных напряжений на острие  $V_t < -1$  В туннельная проводимость имеет минимальную величину в окрестности атомов  $a$  и  $b$  (рисунок 1.12). Это, по-видимому, связано с тем, что при напряжении на контакте, близком к границе зоны проводимости, локальный изгиб зон на поверхности полупроводника

в окрестности примесных атомов существенным образом меняет туннельные характеристики СТМ перехода.

Данная работа частично поддержана проектами: ФТН # 97-1086, ПАС # 1.2.99, МНЭ # 40.Э49, Российского фонда фундаментальных исследований # 00-02-17759, # 00-15-96555.

- 
1. Н.С.Маслова, В.И.Панов, С.В.Савинов, УФН **170(5)**, 575 (2000).
  2. С.И.Васильев, С.И.Орешкин, В.И.Панов и др., ПТЭ **4**, 140 (1997).
  3. И.М.Лифшиц, С.Л.Гредескул, Л.А.Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, М.: Наука, 1982.
  4. P.W.Andersson, Phys.Rev. **124**, 41 (1961).
  5. P.I.Arseev, N.S.Maslova, and S.V.Savinov, JETP Lett. **68(4)**, 320 (1998).
  6. N.S.Maslova, S.I.Oreshkin, V.I.Panov et al., JETP Lett. **67**, 146 (1998).
  7. I.H.Ruzin, V.Chandrasekar, E.I.Levin et al., PRB **45**, 13469, (1992).
  8. A.Depuydt, C.Van Haesendonck, N.S.Maslova et al., PRB **60**, 2619 (1999).