

STM 中各种金属针尖 / 基底组合下的蒸发场强计算¹

李志扬 刘 武

(华中师范大学物理系 武汉 430079)

摘 要 稍前通过引入有效结合能的概念, 本文作者重新建立了扫描隧道显微镜的蒸发场强公式, 并计算了若干同种金属针尖与金属基底组合下的蒸发场强。本文进一步给出了更多的计算实例, 特别是重点讨论了异种金属针尖与金属基底组合下的蒸发场强计算。为了确定不同针尖样品间距时的有效结合能, 本文提出了一个普适函数, 来描述吸附原子离金属基底不同距离时的原子势能曲线。

关键词 STM, 有效结合能, 蒸发场强

中图分类号 O462.4

1 概 述

近年来扫描隧道显微镜 (STM) 中的场蒸发受到人们的广泛关注, 通过强电场可把金属针尖上的原子场蒸发到金属、半导体基底上, 或从这些基底上移走原子, 从而在基底上制作出纳米尺寸的原子堆或原子坑^[1-6]。但人们发现在 STM 中进行场蒸发, 所需电场比场离子显微镜 (FIM) 中低得多, 所观察到的场蒸发速率也比 FIM 中高很多。这是因为在 STM 中由于针尖与样品相距非常近, 被蒸发原子不仅受到发射电极上原子的作用, 同时也受到对电极上原子的作用, 这样大大降低了蒸发场强。因而有人称 STM 中场蒸发为化学辅助场蒸发。传统的电荷交换 (CE) 模型和成像势垒 (IE) 模型不能正确地描述 STM 中的场蒸发现象, 它们给出的理论计算值比实验测量值要高出几倍^[7]。我们曾根据 STM 的场蒸发的特点, 引入了有效结合能的概念, 并借用 Forbes 定义的标准势能, 对 STM 场蒸发过程进行了电热动力学分析, 从而建立了 STM 的蒸发场强计算公式, 首次得到了与实验吻合的计算结果^[8,9]。根据新建立的公式我们曾详细讨论了若干同种金属针尖 / 金属基底组合时的蒸发场强计算, 本文进一步给出了更多的计算实例, 特别是重点讨论了异种金属针尖 / 金属基底组合时的蒸发场强计算。在实验中人们使用最多的是 Au 基底, 因此在下面的实际计算中, 我们主要考虑 Cu, Ag, W 等几种金属针尖在 Au 基底上的蒸发场强。为了计算方便, 本文首先将引入一个普适函数来描述吸附原子在离异种金属基底不同距离时的原子势能曲线。

2 普适函数与有效结合能

在 STM 中由于针尖与样品相距非常近, 被蒸发原子与发射电极上原子相互作用以及与对电极上原子的相互作用的原子势能曲线相互交叠, 形成一个双势阱结构, 如图 1 所示。一个中性原子要从发射电极热激发到对电极, 所需越过的势垒高度为 Λ_{eff} , 它就是我们所定义的有效结合能。要计算在不同针尖与样品间距时的 Λ_{eff} , 可分别计算出被蒸发原子单独与发射电极以及对电极上原子之间的原子势能曲线, 然后再叠加确定总原子势能曲线进行求解。下面先用 Gollish 提出的 EBPM 法计算吸附原子与异种金属基底间的原子势能曲线。在 EBPM 法中, 原子势能定义为^[10]

$$U_a = \sum_{i \neq j} \sqrt{b_{A(i)}} \sqrt{b_{A(j)}} \Theta_{A(i)}(r_{ij}) \Theta_{A(j)}(r_{ij}) - \left| \sum_{i \neq j} \sqrt{a_{A(i)}} \sqrt{a_{A(j)}} \Phi_{A(i)}(r_{ij}) \Phi_{A(j)}(r_{ij}) \right|^2 \quad (1)$$

¹ 1999-07-20 收到, 1999-10-14 定稿

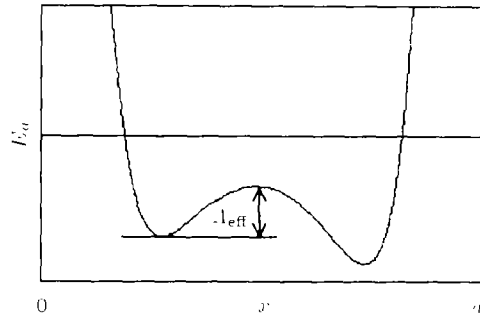


图1 STM 中原子势能曲线示意图
(E_a 表示原子势能, 发射电极与对电极分别位于 $x=0$ 和 $x=d$)

其中 $\Theta_{A(i)}(r_{ij}) = [Q_{AA}(r_{ij})]^{S\mu\lambda_A/2}$, $\Phi_{A(i)}(r_{ij}) = [Q_{AA}(r_{ij})]^{\lambda_A/2}$, $A(i)$ 表示原子种类, a, b, λ 是由原子种类确定的参数。常数 μ 为 0.6, $S = \mu/2$ 。 $Q(r_{ij})$ 表示位于 r_i 与 r_j 的原子之间的相互作用,

$$Q(r_{ij}) = \int \rho_i(r)\rho_j(r)dr \quad (2)$$

Gollisch 所使用的球对称原子电荷密度函数 $\rho(r)$ 是由相对论 Kohn-Sham 方程求得, 其中交换关联能采用 $X\alpha$ 近似。

图 2(a)-2(d) 是计算的 Au, Cu, Ag 和 W 原子离 Au(100) 表面不同距离的原子势能曲线。对吸附原子与同种金属基底间的原子势能曲线我们曾提出, 把它们归一化后可用如下的普适函数来描述^[8]:

$$E_a(x) = E_a(x_0)[1 + \beta(x - x_0)/L] \exp[-\beta(x - x_0)/L] \quad (3)$$

式中 x_0 为平衡位置, L 为 Thomas-Fermi 屏蔽常数, $\beta=0.75$ 。图 2(a)-2(d) 按 (3) 式归一化后的结果如图 3 所示。可见 (3) 式同样可以用来描述吸附原子与异种金属基底间的原子势能曲线。以此为基础, 进一步计算的 Cu, Ag 和 W 针尖与 Au(100) 基底不同间距时的有效结合能 Δ_{eff} 如图 4 所示。从图中可以看出, 当针尖基底间距减小时, 有效结合能迅速减小。而当大于 1.3nm 以后, 有效结合能趋近于金属针尖的结合能。

3 蒸发场强计算

我们建立的 STM 蒸发场强计算公式如下^[8,9]:

$$F = \frac{1}{ner_0} [\Delta_{\text{eff}} + \sum_{i=1}^n I_i - n\Phi - \eta_n(r_0) - KTI \ln(\nu/\kappa)] \quad (4)$$

式中 Δ_{eff} 为有效结合能, I_i 为第 i 电离能, Φ 为功函数, n 为离子价态, $\eta_n(r_0)$ 为化学势, r_0 为离子半径, K 为玻耳兹曼常数, T 为绝对温度, κ 为场蒸发速率, ν 为原子振荡频率。对负离子, 上式中的 $\sum I_i - n\Phi$ 应换为 $n\Phi - \sum E_{\text{aff},i}$, 其中 $E_{\text{aff},i}$ 为原子的电子亲和势。

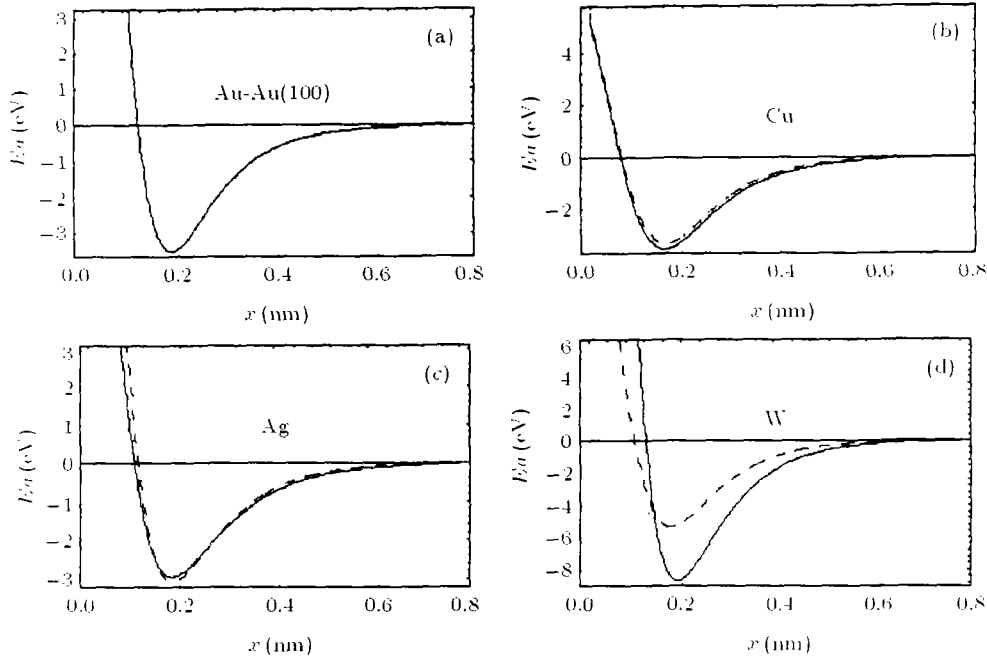


图 2 金属原子离同种金属基底 (实线) 与 Au(100) 基底 (虚线) 不同距离时的原子势能

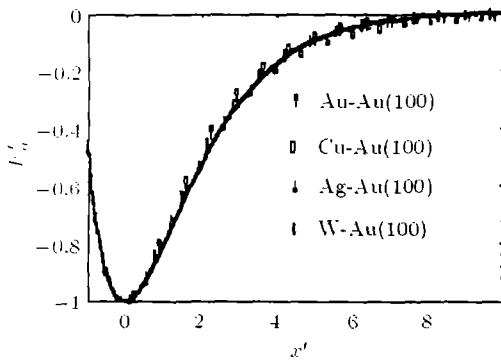


图 3 归一化后的原子势能曲线 E'_a , $x' = (x - x_0)/L$ 为归一化距离

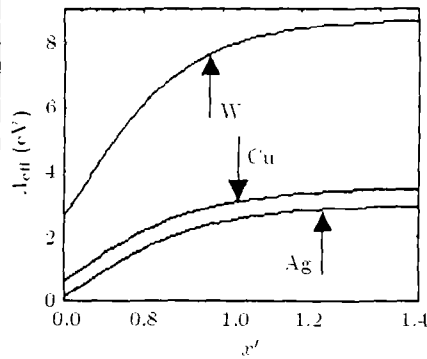


图 4 不同基底间距时的有效结合能 A_{eff}

根据 (4) 式计算的 Au, Cu, Ag 和 W 针尖离 Au(100) 基底不同间距时的蒸发场强如图 5 所示。计算中取 $\kappa = 10^{11}/s$, 且 $T=300K$ 。从图中可以看出, 当针尖基底间距大于 1.3nm 以后, STM 中蒸发场强趋近于 FIM 中的蒸发场强。而当针尖基底间距减小时, 蒸发场强迅速减小, 这与实验观察相一致。

4 结 论

本文用 EBPM 方法计算了吸附原子与异种金属基底间的原子势能曲线, 发现它们可用一个普适函数来表示。我们进一步计算了不同针尖与基底间距时的有效结合能和蒸发场强。当针尖与基底间距减小时, 有效结合能迅速减小, 从而导致蒸发场强迅速减小。

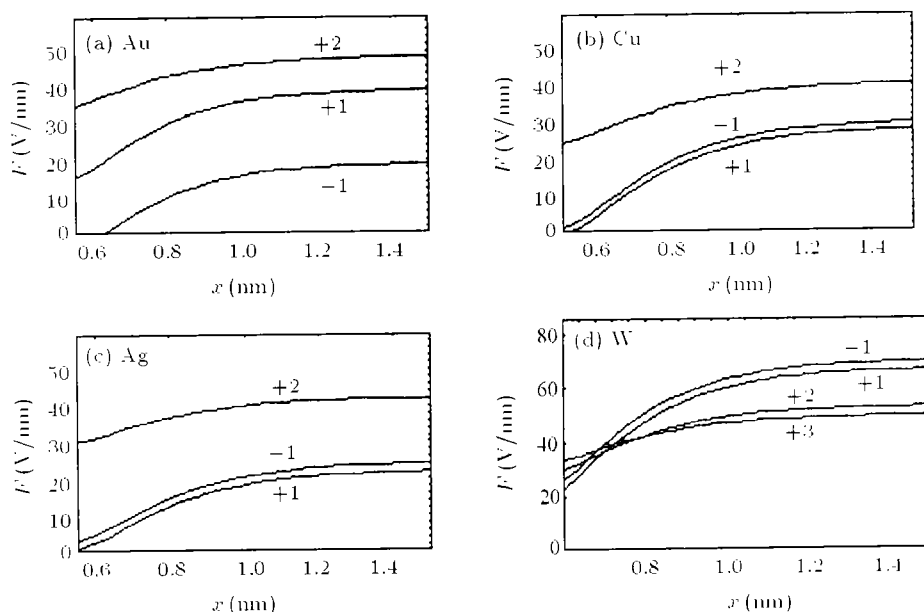


图 5 不同价态金属离子在 Au(100) 基底上的蒸发场强随针尖基底间距的变化

参 考 文 献

- [1] H. J. Mamin, P. H. Guethner, D. Rugar D, Atomic emission from a scanning tunneling microscope tip, *Phys. Rev. Lett.*, 1990, 65(19), 2418-2421.
- [2] G. S. Hsiao, R. M. Penner, J. Kingsley, Deposition of metal structures onto Si(111) surface by field evaporation in the scanning tunneling microscope, *Appl. Phys. Lett.*, 1994, 64(11), 1350-1352.
- [3] C. S. Chang, W. B. Su, T. T. Tsong, Field evaporation between a gold tip and a surface in the scanning tunneling microscope configuration, *Phys. Rev. Lett.*, 1994, 72(4), 574-577.
- [4] F. Grey, D. H. Huang, A. K. Koayashi, E. J. Snyder, Time-resolved atomic scale modification of silicon with a scanning tunneling microscope, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1994, 12(3), 1901-1905.
- [5] 李志扬, 刘武, 黄光明, 李兴教, 大气环境下 STM 金针尖场蒸发纳米书写实验研究, *电子显微学报*, 1997, 16(6), 787-788.
- [6] 李志扬, 刘武, 李兴教, 压电陶瓷扫描管在纳米加工中的应用, *压电与声光*, 1998, 20(1), 25-27.
- [7] T. T. Tsong, Effect of an electric field in atomic manipulation, *Phys. Rev. B*, 1991, 44(10), 13703-13710.
- [8] Zhiyang Li, Wu Liu, Xingjiao Li, Field evaporation in the configuration of a scanning tunneling microscope, *Ultramicroscopy*, 1998, 73(1), 147-155.
- [9] Zhiyang Li, Wu Liu, Xingjiao Li, An electrothermodynamic analysis of field evaporation in the configuration of a scanning tunneling microscope, *Chinese Physics Letters*, 1998, 15(8), 608-610.
- [10] Gollisch, *Surf. Sci.* 1986, 166(1), 87-96.

CALCULATION OF EVAPORATION FIELDS FOR VARIOUS
TIP/SUBSTRATE COMBINATIONS IN THE CONFIGURATION
OF A SCANNING TUNNELING MICROSCOPE

Li Zhiyang Liu Wu

(*Department of Physics, Huazhong Normal University, Wuhan 430079, China*)

Abstract An effective binding energy and a formula for evaporation fields in the configuration of a scanning tunneling microscope has been introduced. Based on which, evaporation fields for various tip/substrate combinations, especially those for non-identical tip/substrate combinations have been calculated. To do this a universal function for atomic potential of an adatom at different distances from a metal surface is proposed.

Key words STM, Effective binding energy, Evaporation field

- 李志扬: 男, 1964年生, 博士, 副教授, 近年来的研究方向主要在扫描探针显微镜 (SPM) 仪器研制、基于 SPM 的纳米加工技术以及纳米器件等。1992年曾在国内率先报道了有关光子扫描隧道显微镜的研制, 近年来在 STM 场蒸发理论和实验以及近场光学理论方面取得一系列进展, 并获得一项单电子器件国家专利。
- 刘 武: 男, 1941年生, 教授, 博士生导师, 1986年从美国滨州大学 Euler 场发射实验室访问研究回国后, 主持研制了国内首套综合性能居世界先进水平的 FEM-FIM-APFIM 实验系统, 利用该系统在固体微观结构直接测定、金属表面化学催化、化学反应中间生成物测定、负离子谱研究等方面取得一系列成果, 其中负离子谱技术已获得国家专利。