

А. С. Кулумбетов

Докторант кафедры Методика преподавания физики и астрономии

Чирчикский Государственный Педагогический Университет

**МЕТОД СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ В
ИССЛЕДОВАНИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ
ПРИМЕСНОГО КРЕМНИЯ.**

Аннотация: В обзорной статье излагается работы исследовании примесного кремния методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). На сегодняшний день исследование и сравнение электрических свойств на поверхности примесного кремния на макро и микро уровне является актуальным для создания фотоэлементов и электронных устройств. Были приведены работы по изучению поверхностного потенциала, проводимости, р-п перехода, структуры и дефектов примесного кремния.

Ключевые слова: Кремний, Сканирующая туннельная микроскопия, примесный кремний, Атомно-силовая микроскопия

A. S. Kulumbetov

PhD student of the Department of Methods of teaching physics and astronomy

Chirchik State Pedagogical University

**THE METHOD OF SCANNING TUNNELING MICROSCOPY IN THE
STUDY OF THE ELECTRICAL PROPERTIES OF THE SURFACE OF
IMPURITY SILICON.**

Abstract: The review article describes the work on the study of impurity silicon using scanning tunneling microscopy (STM). Today, the study and comparison of electrical properties on the surface of impurity silicon at the macro and micro levels is important for the creation of photovoltaic cells and electronic devices. Works on studying the surface potential, conductivity, p-n junction, structure and defects of impurity silicon were presented.

Keywords: Silicon, Scanning tunneling microscopy, impurity silicon, Atomic force microscopy

В работе [1] исследовали туннельную проводимость атомных кластеров (C_{60} , Si_6H_x , $AsSi_2H_x$), нанесенных на окисленные поверхности $Si(100)$ p-типа, с помощью сканирующей туннельной микроскопии, где металлический зонд/вакуумный барьер/кластер/оксид/кремниевые структуры образуют наноразмерный асимметричный туннель с двойным барьером (АОСТ). Усиление проводимости наблюдалось при прямом смещении, возникающем при резонансной инжекции электронов через незанятую орбиталь кластеров, которая была пространственно локализована в пределах диаметра ≈ 1 нм для C_{60} . Положения резонансных пиков и слабый поверхностный диполь указывали на то, что орбитальные энергии C_{60} и Si_6H_x находились за пределами запрещенного энергетического зазора Si и смещен относительно энергии Ферми кремния для сильно легированных подложек. Напротив, орбитальная энергия легированных кластеров $AsSi_2H_x$ была ниже уровня Ферми кремния. Эти результаты демонстрируют, что конфигурация АОСТ-перехода выявляет электронную связь кластеров с поверхностями полупроводника.

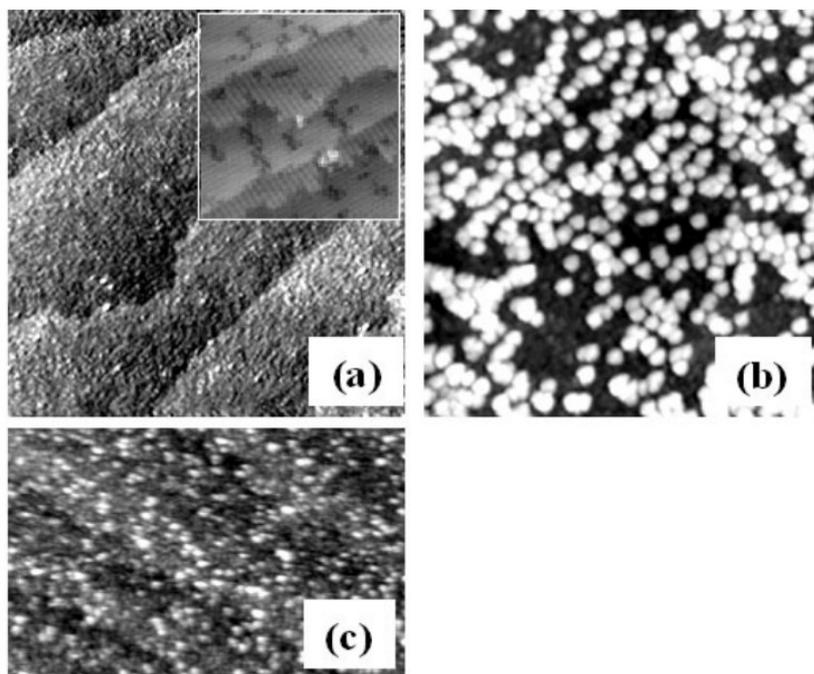


Рис. 1. STM Топографии поверхности окисленного Si(100)-(2 × 1) толщиной ≈0,3 нм до (а) и после осаждения кластеров C₆₀ (б) и Si₆H_x (в). Плотность скоплений составляла ≈3 × 10¹² см⁻² в (с) и ≈2 × 10¹³ см⁻² в (б). Области изображения составляют 50 × 50 нм² в (а) и (б) и 50 × 30 нм² в (с). На вставке (а) показана поверхность Si(100)-(2 × 1) площадью 20 × 20 нм², полученная после мгновенного нагрева при 1100 °С. Начальное напряжение составляло +2 В, а туннельный ток - 0,3 нА.

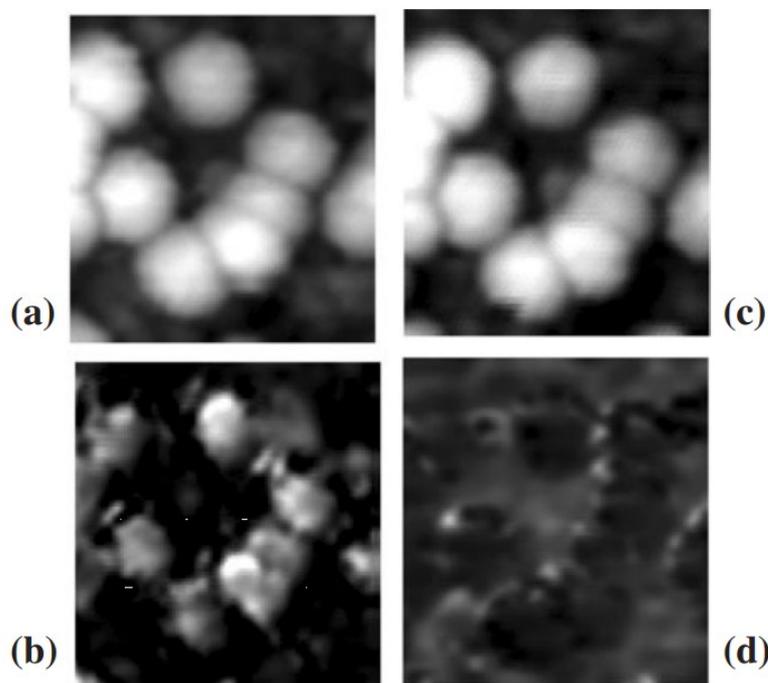
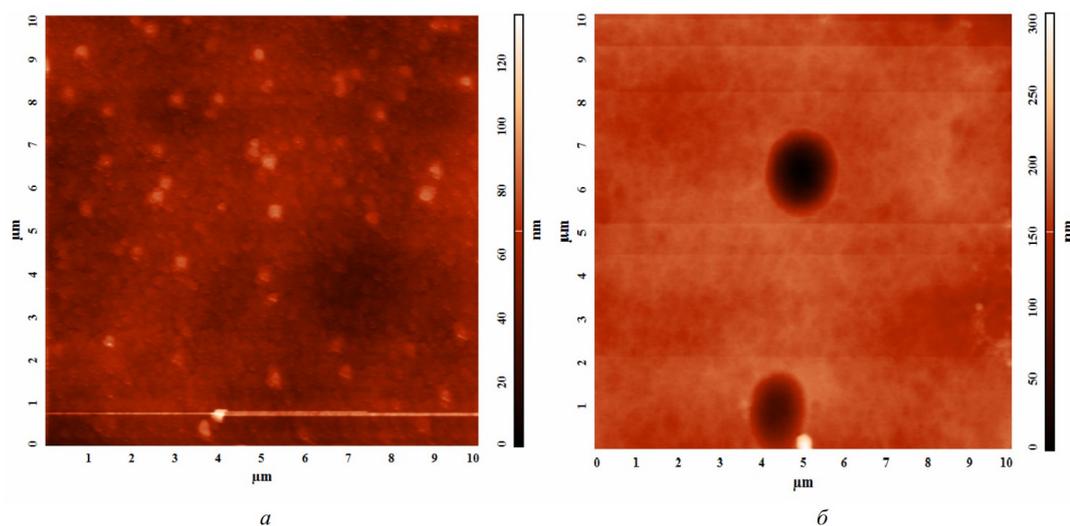


Рис. 2. STM топографии поверхности окисленного Si(100)-(2 × 1) толщиной ≈0,3 нм до (а) и после осаждения кластеров C₆₀(б) и Si₆H_x (в). Плотность скоплений составила ≈3 × 10¹² см⁻² в (с) и ≈2 × 10¹³ см⁻² в (б). Области изображения составляют 50 × 50 нм² в (а) и (б) и 50 × 30 нм² в (с). На вставке (а) показана поверхность Si(100)-(2 × 1) площадью 20 × 20 нм², полученная после мгновенного нагрева при 1100°С. Начальное напряжение составляло +2 В, а туннельный ток составлял 0,3 нА.

Были исследованы СЭ на основе монокристаллического кремния (100), произведенные методом бестигельной зонной плавки [2]. Исследование проводилось с помощью сканирующего зондового микроскопа на базе платформы зондовой нанолaborатории NTEGRA AURA компании NT-MDT. Процесс исследования топографии поверхности СЭ осуществлялся в контактном режиме АСМ.



На рисунке 3. Представлены АСМ-изображения размером 10×10 мкм рабочей поверхности СЭ, СЭ № 1 (рисунок, *а*) и СЭ № 2 (рисунок, *б*). Рисунок иллюстрирует то, что поверхность СЭ отличается по особенностям рельефа, не смотря на одинаковую технологию производства.

На АСМ-изображении (рисунок, *а*) наблюдаются дефекты структуры поверхности после травления, предположительно связанные с осадками примесей кислорода или углерода при взаимодействии с кремнием, которые называются преципитатами.

Изучены [3] электронные свойства оборванной связи (ОС) атомного масштаба (ОС) и проволок ОС на поверхностях Si(100)- 2×1 :H с помощью сканирующей туннельной микроскопии в сверхвысоком вакууме (UHV-STM). Распад состояний ОС, близких к средней щели, индуцированный неспаренным ОС, зависит от кристаллической ориентации Si(100) поверхность. Длина затухания ОС-состояний непарного провода ОС может составлять $\sim 2,5$ нм вдоль направления димерного ряда. Также продемонстрировано возмущение от непарного ОС к соседнему парному ОС.

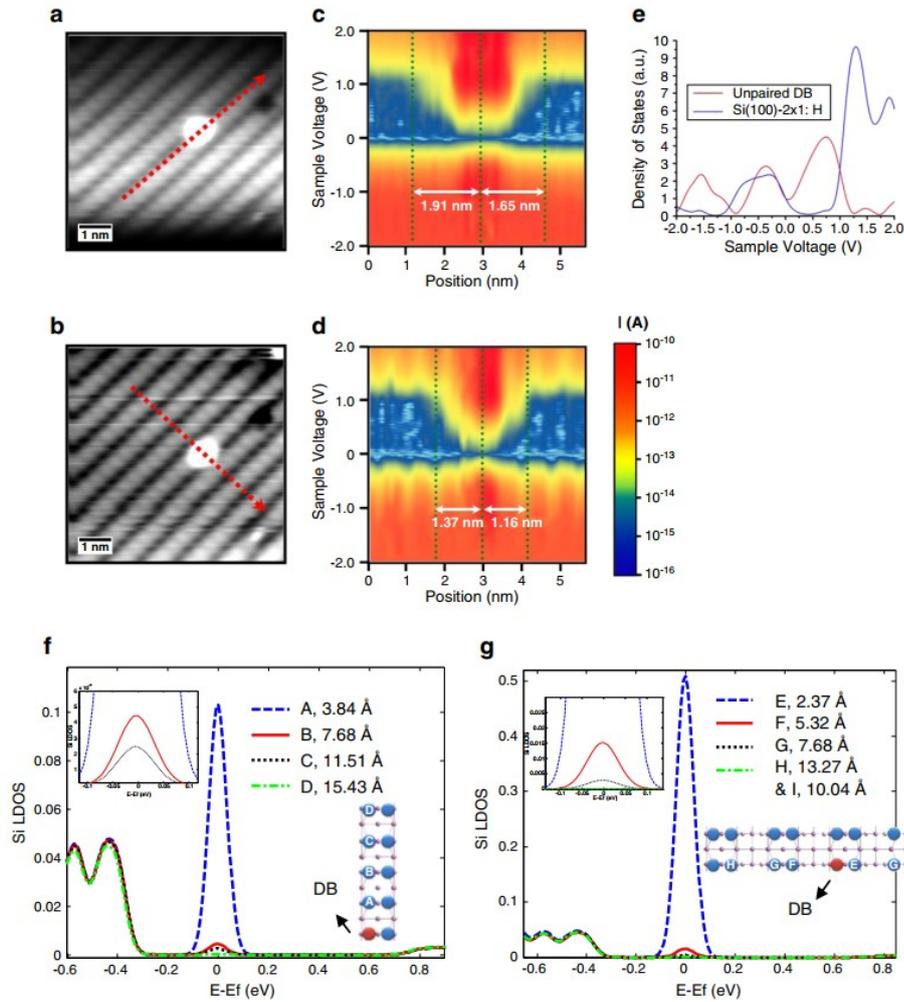


Рис. 4. (а) STM-изображение непарной оборванной связи в заполненном состоянии на поверхности Si(100)-2×1:H. ($V_s=-2,0$ В, $I_s=50$ Па) (б) STM-изображение БД в том же димере Si после переключения положения слева направо. (с, d) Логарифмические спектры I–V, построенные в зависимости от положения в (с) для непарного ОС в (а) и в (d) для ОС в (б). Красные пунктирные стрелки в (а) и (б) указывают, где были получены карты I-V спектров. Зеленые пунктирные линии в (с) и (d) используются для выделения положений центра непарного ОС и где ширина запрещенной зоны Si полностью равна восстановленный. (е) спектры DOS-V непарного ОС в (а) и кремниевой подложке. (f) Смоделированные LDOS атомов Si вдоль направления димера Si с расстоянием от ОС. (Вставка показывает увеличенный вид для атомов B, C и D.) (g) Смоделированные LDOS атомов Si в направлении димера Si с расстоянием от ОС. (Вставка показывает увеличенный вид атомов F, G, H и I.).

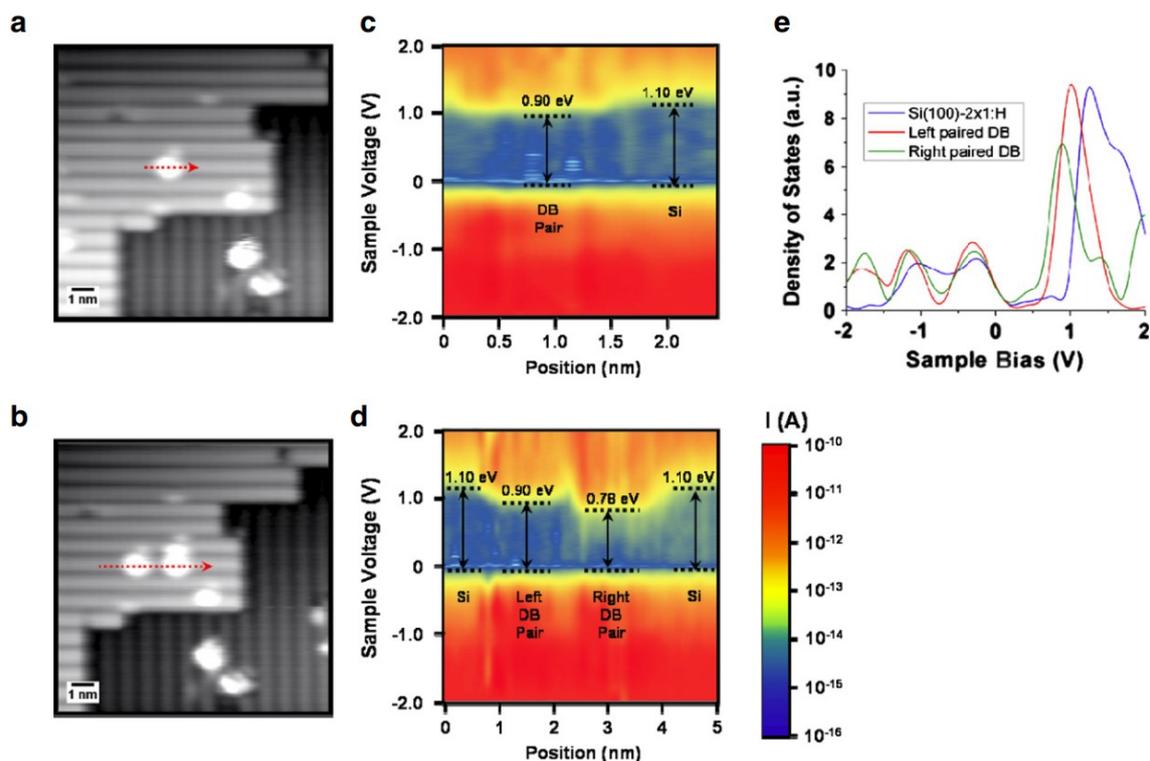


Рис. 5. (а) STM-топографическое изображение парного ОС, полученное путем удаления двух атомов водорода из одного и того же димера Si. (б) STM-топографическое изображение кластера ОС, сформированного справа от парного ОС на (а). (с) Логарифмическая карта I–V спектров, полученная для парной базы данных, как указано красной пунктирной стрелкой в (а). (d) Логарифмическая карта I–V спектров, полученная для обеих парных баз данных в (б) вдоль красной пунктирной стрелки. (е) Спектр DOS-V как для парных OCS, так и для подложки Si в (б).

Суммарно, были исследовали латеральный распад состояний ОС вокруг непарного ОС. Длина распада анизотропна для Si(100) поверхность. Состояние, близкое к средней щели, непарного ОС распадается на $\sim 1,9$ нм на соседние атомы Si вдоль ряда димеров Si, в то время как состояния ОС исчезают на $\sim 1,4$ нм поперек рядов димеров Si, и моделирование согласуется с этими экспериментальными значениями. С увеличением взаимодействий в направлении димерного ряда длина затухания непарного провода ОС увеличивается до $\sim 2,5$ нм в направлении димерного ряда Si, в то время как длина затухания в направлении, перпендикулярном димерному ряду, составляет сравнимо с непарным ОС. Мы также продемонстрировали, что непарный ОС может нарушать электронные свойства соседнего парного ОС, уменьшая ширину запрещенной зоны

парного ОС с 0,90 эВ до 0,78 эВ. Другой спаренный ДБ на расстоянии 1,9 нм от непарного ДБ остается невозмутимым.

Способность определять расположение легирующих примесей фосфора в кремнии имеет решающее значение [4] для проектирования, моделирования и анализа наноразмерных устройств на основе атома для будущих приложений квантовых вычислений. Мы определяем эффекты, которые играют решающую роль в моделировании STM-изображений и должны быть точно смоделированы для STM-визуализации скрытых примесей и кластеров с несколькими примесями для получения надежной информации о местоположении. Были продемонстрированы, что метрология, сочетающая STM-визуализацию с моделированием плотной связи, может привести к выраженной неопределенности из-за орбитальной модели наконечника, эффектов оборванных связей и выбора локальной атомной основы для представления плотной связи.

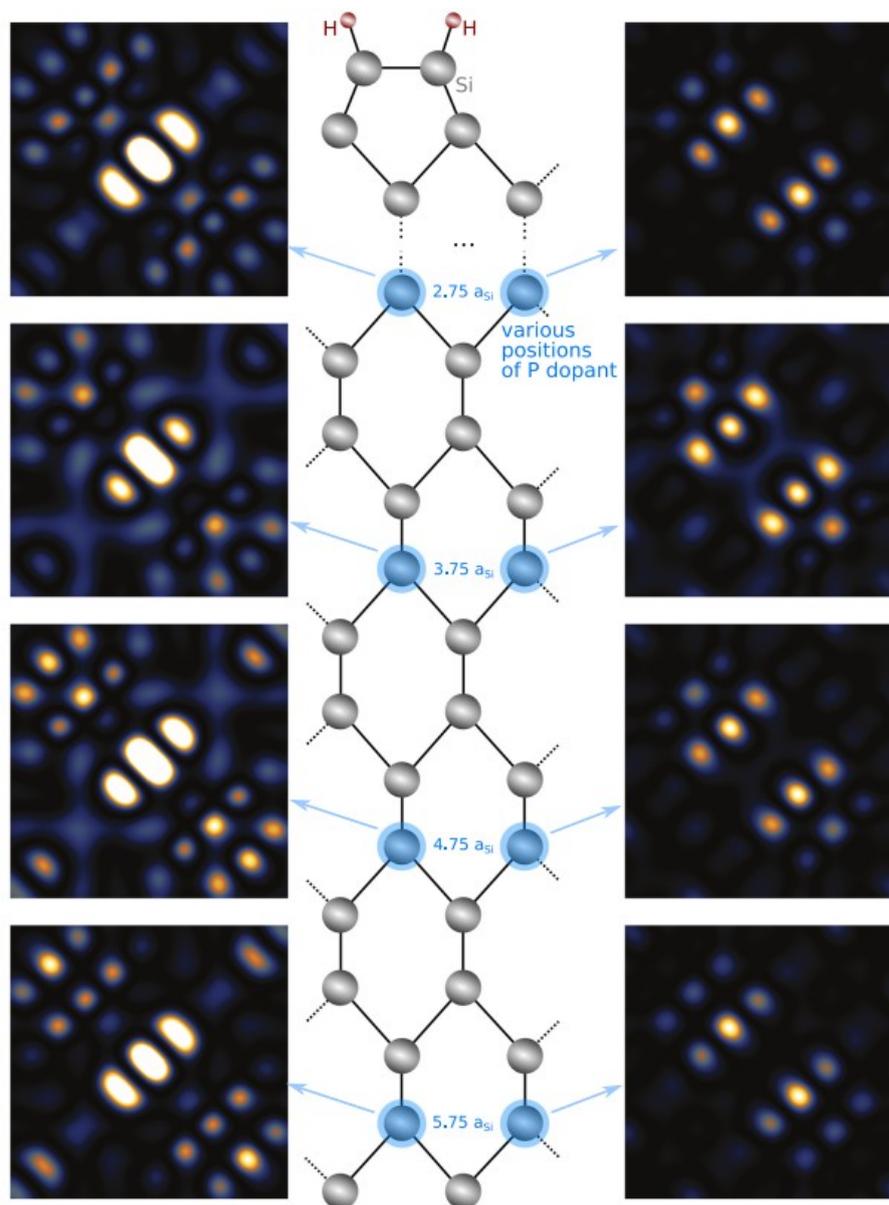


Рис. 6. Смоделированные изображения STM для различных местоположений примесей. На всех изображениях используется одно и то же общее состояние наконечника. Каждое изображение независимо нормализовано, чтобы выделить изменения относительной интенсивности элементов на каждом изображении вместо общего уменьшения интенсивности, зависящего от глубины.

Были даны краткое описание результатов исследований [5], полученных в экспериментах, посвященных выяснению механизмов электропроводности поверхностных фаз на кремнии. Исследования проводились в условиях сверхвысокого вакуума с использованием дифракции электронов низкой энергии, сканирующей туннельной микроскопии и метода измерения удельного сопротивления с помощью четырехточечного зонда. Влияние морфологии поверхности и, в частности, плотности островков адсорбата на электрическое

сопротивление электропроводность для такой поверхности показана на примере субмонослойных систем In/Si(100) $c(4 \times 12)$ -Al и Al/Si(100) $c(4 \times 12)$ -Al, взятых в качестве примеров. Кроме того, представлены результаты исследований анизотропии электропроводности поверхностных фаз Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -In и Si(111) 4×1 -In. Отмечено влияние кристаллической структуры поверхностных фаз на проводящие свойства таких систем.

Поверхность кремния (111), закаленная при высоких температурах, была исследована [6] методами атомно-силовой микроскопии (АСМ), сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и отражательной электронной микроскопии (РЭМ). Показано, что треугольные отрицательные островки глубиной менее ангстрема наблюдались на кремнии (111) после закалки. Предполагается, что образование поверхностных вакансий во время $(1 \times 1) \Rightarrow (7 \times 7)$ поверхностного фазового перехода отвечает за образование отрицательных островков.

В рукописи [7] об исследовании одиночных оборванных связей (ОС) на поверхности кремния с водородной связью (100) с использованием низкотемпературного сканирующего туннельного микроскопа (LT-STM). Исследуя образцы, полученные при различных температурах отжига, мы установили критическую роль подповерхностных примесей мышьяка в электронных свойствах ОС. Мы показываем, что когда приповерхностная концентрация легирующих примесей снижается в результате кратковременного отжига при температуре 1250°C, отдельный ОС демонстрирует резкий скачок проводимости в своей $I(V)$ спектроскопии, который не обусловлен эффектом плотности состояний, а скорее соответствует Переход БД в состояние заряда. Положение напряжения этого перехода идеально коррелирует с зависящими от смещения изменениями в STM-изображениях БД при различных состояниях заряда. Расчеты по теории функционала плотности (DFT) дополнительно подчеркивают роль подповерхностных примесей в свойствах ОС,

демонстрируя влияние расстояния между ОС и легирующей добавкой на состояние ОС. Мы обсуждаем возможные теоретические модели электронного переноса через ОС, которые могли бы объяснить наши экспериментальные наблюдения.

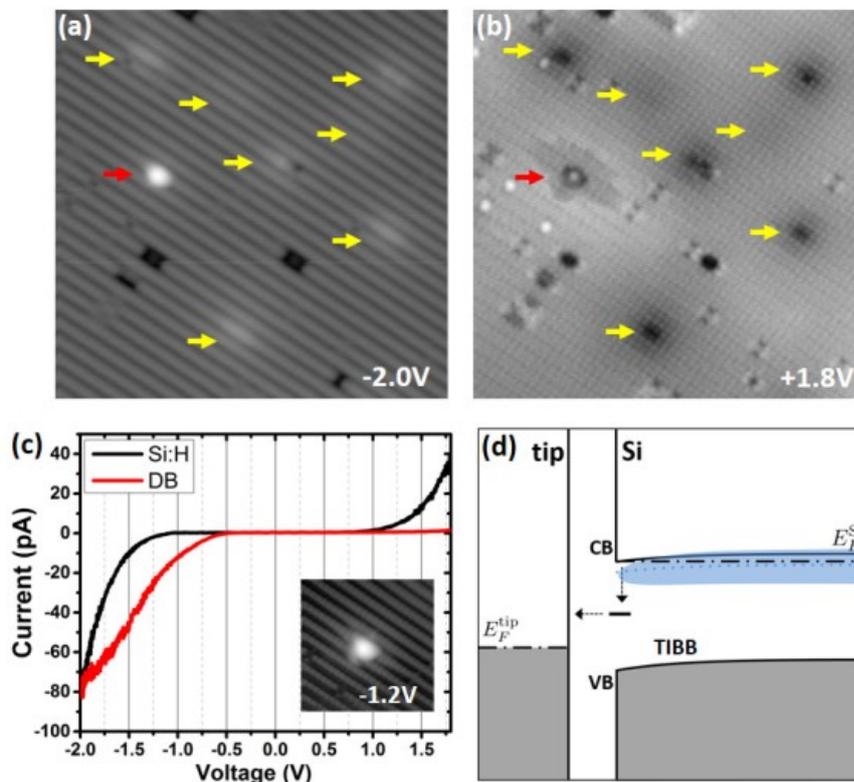


Рис. 7. (20×20) нм² при постоянном токе (30 пА) заполненное состояние (а) и пустое состояние (б) STM-изображения поверхности Si(100): H - 2×1 образца, обработанного вспышкой при 1050°C. Желтые стрелки указывают на подповерхностные примеси (As), в то время как красная стрелка указывает на одиночный DB. (с) I(V) спектроскопия, полученная на единичном DB (красная кривая) и поверхности Si:H (черная кривая). Вставка на (с) показывает изображение STM с постоянным током, на котором одиночный DB выглядит ярким при -1:2 В. (d) Схематическая диаграмма энергетического диапазона, показывающая механизм туннелирования через DB в случае высоколегированного образца при 1050°C. Штрих-пунктирные линии представляют уровни Ферми наконечника и образца, $E_{F}^{tip}; Si$. Заштрихованная синяя область указывает на образование донорной полосы, которая сливается с зоной проводимости.

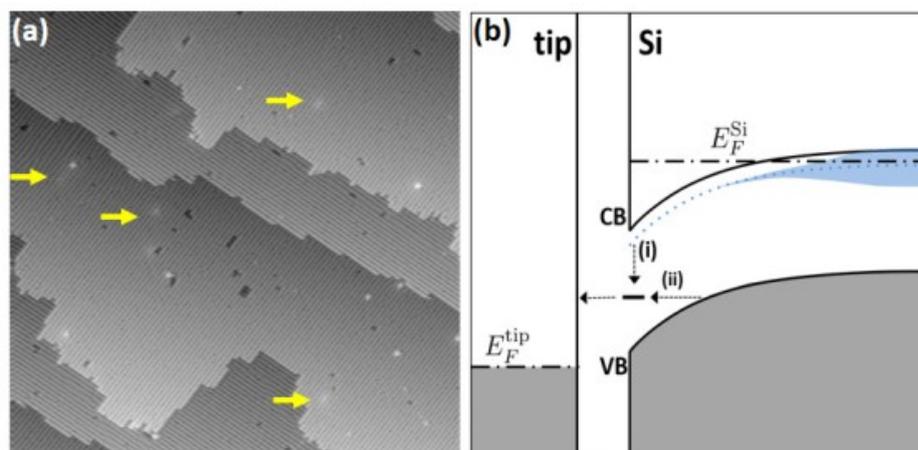


Рис. 3. (а) (80×80) нм² изображение STM с постоянным током (40 пА) в заполненном состоянии при $-2:0$ В. Желтыми стрелками указаны подповерхностные примеси. (б) Схематическая диаграмма энергетического диапазона, показывающая возможную динамику во время STS ДБ в занятых состояниях для образца, разогретого до 1250°C . Штрихпунктирные линии представляют уровни Ферми наконечника и образца, тип ссылки; Si, а синяя пунктирная линия представляет энергию связанного состояния донора. Заштрихованная синяя область указывает на образование донорной полосы, которая сливается с СВ. Римские цифры обозначают процессы, которые извлекают или инжектируют электроны из значения DB. Energies и TIBV преувеличены для наглядности.

Электросиловая микроскопия (EFM) и визуализация поверхностного потенциала (SP) - это два метода АСМ, которые характеризуют материалы по электрическим свойствам [8]. Проводящий наконечник АСМ взаимодействует с образцом посредством кулоновских сил дальнего действия. Эти взаимодействия изменяют амплитуду и фазу колебаний кантилевера АСМ, которые регистрируются для создания изображений EFM или SP (см. Резонансный сдвиг, стр. 8). На изображении EFM (рис. 1) фаза, частота или амплитуда колебаний кантилевера нанесены на график в каждой плоскости (X,Y) координаты. Эта фаза, частота или амплитуда связаны к градиенту электрического поля между наконечником и образцом. На изображении SP (рис. 2) показаны изменения поверхностного потенциала на образце. АСМ-наконечник, переносящий напряжение, также позволяет производить электрическую модификацию материалов на поверхности или под ней, как показано на рисунках 1 и 10. EFM используется для отображения вертикального (Z) и почти вертикального градиента электрического поля между наконечником и

образом в зависимости от координат в плоскости X и Y. Это делается с помощью LiftMode™ (см. стр. 8). Поле из—за захваченных зарядов - на образце или под ним поверхность — часто достаточно велика для создания контраста на изображении EFM. В противном случае можно создать поле, приложив напряжение между наконечником и образцом. Напряжение может подаваться непосредственно от электроники микроскопа под управлением программного обеспечения АСМ или от внешнего источника питания с соответствующими токоограничивающими элементами. EFM выполняется в одном из трех режимов: определение амплитуды, определение фазы или приложения включают анализ электрических сбоев, обнаружение захваченных зарядов, количественную оценку контактной разности потенциалов (CPD) между металлами и/или полупроводниками, отображение относительной силы и направления электрической поляризации, проверка электрической непрерывности и выполнение электрического считывания/записи.

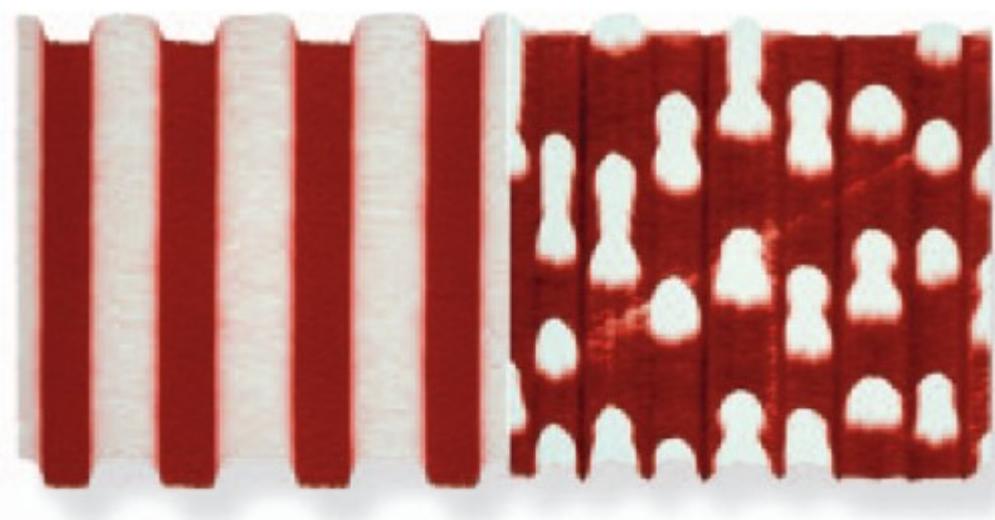


Рис 8. Топография (слева) и SP-изображение (справа) CD-RW. На SP-изображении указано положение битов. Изображения любезно предоставлены Ясуо Итикавой, Tokyo Corporation, Токио, Япония. сканы размером 5 мкм.а.в.

Использованные источники:

1. Leonid Bolotov, Noriyuki Uchida, Toshihiko Kanayama. Scanning tunnelling spectroscopy of atomic clusters deposited on oxidized silicon surfaces: induced surface dipole and resonant electron injection [<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/15/42/006>]// Journal of Physics: Condensed Matter.-2003.- №42(15)
2. Королев Е.В., Александрова Г.А., Пчеляков О.П. Исследование топографии солнечных элементов методом атомно-силовой микроскопии // Актуальные проблемы авиации и космонавтики. 2015. №11. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/issledovanie-topografii-solnechnyh-elementov-metodom-atomno-silovoy-mikroskopii> (дата обращения: 29.12.2023).
3. Wei Ye, Kyoungmin Min, Pamela Peña Martin, Angus A. Rockett, N.R. Aluru, Joseph W. Lyding, Scanning tunneling spectroscopy and density functional calculation of silicon dangling bonds on the Si(100)-2×1:H surface [<https://doi.org/10.1016/j.susc.2012.11.015>]// Surface Science.- 2013.- №(609).- URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039602812004207>
4. Rózański, P.T., Bryant, G.W. & Zieliński, M. Scanning tunneling microscopy of buried dopants in silicon: images and their uncertainties. npj Comput Mater 8, 182 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00857-w>
5. Цуканов Дмитрий Анатольевич, Грузнев Дмитрий Вячеславович, Лавринойтис Мария Валерьевна Исследование кристаллической структуры и электрических свойств поверхностных фаз металлов на кремнии // Вестник ДВО РАН. 2006. №4. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/issledovanie-kristallicheskoj-struktury-i-elektricheskikh-svoystv-poverhnostnyh-faz-metallov-na-kremnii> (дата обращения: 29.12.2023).

6. Насимов Д.А., Шеглов Д.В., Родякина Е.Е., Kosolobov S.S. Fedina L.I., Teys L.A., Латышев А.В. AFM and STM studies of quenched Si(111) surface
[https://www.researchgate.net/publication/289265450_AFM_and_STM_studies_of_quenched_Si111_surface]// Physics of Low-Dimensional Structures .-2003.- №3.
7. Hatem Labidi., Marco Taucer., Mohammad Rashidi., Mohammad Koleini., Lucian Livadaru., Jason Pitters., Martin Cloutier., Mark Salomons., and Robert A Wolkow., Published 15 July 2015. New Journal of Physics, Volume 17, 17 073023 DOI 10.1088/1367-2630/17/7/073023
8. F.M. Serry, K. Kjoller, J. T. Thornton, R. J. Tench, and D. Cook A.B. Electric Force Microscopy, Surface Potential Imaging, and Surface Electric Modification with the Atomic Force Microscope (AFM). 2004. Veeco Inst. <https://studyres.com/doc/20719320/electric-force-microscopy--surface-potential-imaging--and...?ysclid=lmkkils75n766506361>