

Квантово-размерные эффекты в тонких слоях металлов на поверхности монокристаллов и их анализ

© А.М. Шикин, В.К. Адамчук

Научно-исследовательский институт физики им. В.А. Фока
 Санкт-Петербургского государственного университета,
 198504 Санкт-Петербург, Петергоф, Россия
 E-mail: shikin@paloma.spbu.ru

(Поступила в Редакцию 3 октября 2007 г.)

Приводится краткий обзор результатов исследований квантово-размерных эффектов в тонких пленках металлов (Au, Ag) на поверхности тугоплавких металлов (W(110), Mo(110)) и *d*-металлов (Ni(111)), начиная с субмонослойных покрытий и до толщин порядка десяти монослоев, полученных методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Представлены экспериментальные серии спектров квантовых электронных состояний и их изменений по мере роста толщины пленок для валентных состояний как *sp*-, так и *d*-характера. Проведен теоретический анализ энергий формирующихся квантовых состояний с позиций классической фазовой модели и расширенной фазовой модели с использованием элементов приближения линейной атомной цепочки. Показано хорошее соответствие между экспериментальными результатами и теоретическими оценками.

Работа выполнена в рамках проектов НШ-9826.2006.2 и 5902.2008.2, РФФИ (№ 06-02-04008, № 07-02-00809) и поддержана грантами ФЦП (02.518.11.7029 и 02.513.11.3355).

PACS: 73.20.-r, 73.21.Fg

1. Введение

Изучение физико-химических свойств низкоразмерных систем является в настоящее время предметом самого широкого круга исследований вследствие необходимости создания новых электронных устройств с нанометровыми и атомными размерами, а также уникальности их электронной структуры и свойств (см., например, [1–15]). Системы данного типа находят широкое применение при создании квантовых лазеров, в слоистых магнитных системах с размерной модуляцией обменного магнитного взаимодействия, используемых при разработке устройств записи и считывания нового поколения, при создании поверхностных сверхрешеток на основе периодически расположенных квантовых объектов и т.д. Одной из основных особенностей низкоразмерных систем является модификация их электронной структуры при ограничении размеров системы в одном или нескольких координатных направлениях до размеров, сравнимых с длиной волны де-Бройля. В этом случае в направлении, где происходит ограничение размеров, имеет место переход от непрерывной электронной структуры валентной зоны, например с законом дисперсии

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}, \quad (1)$$

к дискретной электронной структуре, характеризующейся определенным дискретным набором энергетических уровней (например, в направлении *z*)

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + E_{zn}. \quad (2)$$

Энергии данных дискретных уровней (здесь E_{zn}) определяются параметрами ограничения волновых функций в данном направлении, т.е. соответствием размеров системы длине волны стоячих волн, формирование которых возможно в данной системе. На рис. 1 приведены примеры различного типа низкоразмерных систем, в которых ограничение волновых функций имеет место в одном координатном направлении (это двумерные (2D) системы), в двух (это одномерные (1D) системы) и во всех трех направлениях (это нуль-мерные (0D) системы). В таких случаях говорят о системах пониженной размерности 2D-, 1D- и 0D-типа. В соответствии с размерностью системы дискретизация электронной структуры или формирование спектров квантовых состояний (см. (2)) для таких систем

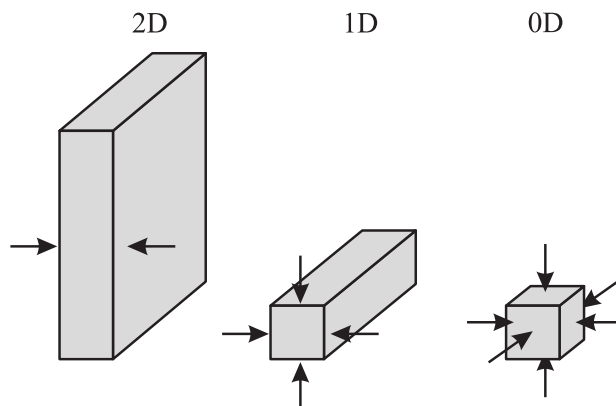


Рис. 1. Пространственное ограничение волновых функций в двумерных (2D), одномерных (1D) и нуль-мерных (0D) системах.

имеет место соответственно в одном, двух или трех направлениях. При этом независимо от размерности системы, т.е. числа координатных ограничений, взаимосвязь между размерами системы и энергетическим спектром квантовых состояний будет одного и того же типа в каждом из направлений и поэтому будет действительна для любых типов систем с размерными ограничениями.

Далее рассмотрим тип низкоразмерных систем с ограничением волновых функций только в одном из направлений и просуммируем экспериментальные результаты, полученные для такого типа систем, подразумевая, что взаимосвязи между размерами системы в данном направлении и особенностями спектров квантовых состояний, формирующихся при таком размерном ограничении, являются общими и характерными для всех низкоразмерных систем любой размерности. Одной из простейших систем, где имеет место квантование электронной структуры в одном из координатных направлений, являются ультратонкие пленки металлов с пространственными ограничениями волновых функций размерами (толщиной) пленки. В настоящей работе мы будем рассматривать ультратонкие пленки благородных металлов толщиной от одного-двух десятков атомных слоев, сформированные на атомарно-чистых плотноупакованных гранях монокристаллов d -металлов. Это связано с тем, что в настоящее время поперечные размеры различных низкоразмерных систем становятся сравнимыми с атомными размерами, и поэтому именно такие параметры толщин пленок (или размерных ограничений) и анализ закономерностей формирования их электронной структуры и являются особенно необходимыми и актуальными для развития современной нано- и пикоэлектроники. В настоящей работе представлены результаты регулярных экспериментальных исследований, посвященных изучению модификации электронной структуры таких ультратонких пленок и теоретическому анализу формируемых спектров квантовых состояний в зависимости от толщины пленок, начиная от субмонослойных покрытий и до 10–15 атомных слоев. Изменения структуры спектров исследовались в режиме непрерывного напыления при перманентном формировании пленок, обладающем наибольшей наглядностью и информативностью. Изучены экспериментальные серии толщинных зависимостей энергий квантовых состояний, а также проанализировано влияние энергетических параметров электронной структуры как напыляемого металла, так и подложки на формируемые спектры квантовых состояний. В работе также представлены различные теоретические модели оценки энергии квантовых состояний, справедливые для ультратонких и тонких слоев различных металлов на различных подложках, и показано, как использовать эти модели для целей прогнозируемого анализа электронной структуры систем с размерными ограничениями.

2. Модель потенциального ящика и фотоэлектронная спектроскопия как метод изучения спектров квантовых состояний

Как отмечалось выше, основной причиной, вызывающей переход от непрерывного спектра электронных состояний к дискретному спектру с определенным набором энергетических состояний, является пространственное ограничение волновых функций размерами системы, сравнимыми с соответствующей длиной волны де-Бройля. В пленочных металлических системах ограничение волновых функций в пределах толщины пленки осуществляется за счет влияния потенциальных барьеров, возникающих на границах пленки: барьера на межфазовой границе со стороны подложки и поверхностного потенциального барьера со стороны вакуума (рис. 2). При этом необходимым условием такого ограничения со стороны подложки является либо наличие локальной запрещенной зоны (ΔE_g) в электронной структуре подложки в выделенном направлении, т.е. в направлении роста пленки (на рис. 2 это направление z), либо по

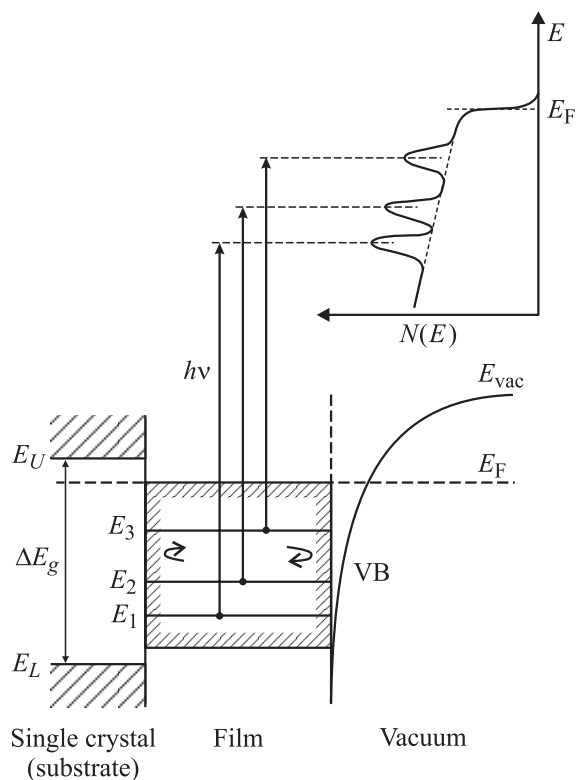


Рис. 2. Ограничение волновых функций в тонких металлических слоях за счет потенциального барьера со стороны вакуума, с одной стороны, и локальной запрещенной зоны в электронной структуре подложки, с другой стороны. Данное размерное ограничение приводит к квантованию электронной структуры валентной зоны (энергии E_1 , E_2 , E_3), которое может быть зарегистрировано при помощи метода фотоэлектронной спектроскопии (см. текст).

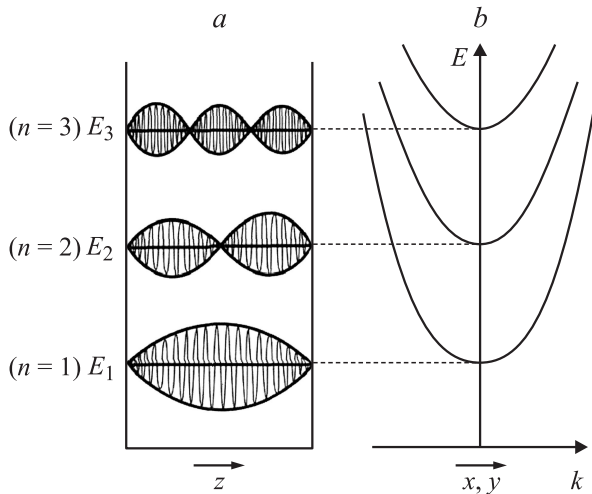


Рис. 3. *a)* Процессы квантования электронной структуры с позиций формирования дискретного набора стоячих волн в потенциальном ящике, размеры которого соответствуют толщине формируемой пленки металла. Квантование имеет место только в одном направлении (z). *b)* Дисперсионные зависимости в других направлениях (x, y), имеющие непрерывный характер.

крайней мере наличие зоны состояний, с которыми не смешиваются волновые функции электронов в создаваемой пленке. Ограничение волновых функций размерами (толщиной) формируемой пленки можно описать моделью потенциального ящика с соответствующими размерами, приводящей к энергетической дискретизации спектра электронных состояний (рис. 2, 3). Энергии соответствующих квантовых состояний определяются из условий формирования в таком потенциальном ящике дискретного набора стоячих электронных волн с длиной волны, кратной ширине потенциального ящика (рис. 3). В простейшем приближении свободных электронов энергии квантовых состояний в такой системе находятся из условия равенства нулю волновых функций на границах потенциального ящика и определяются обратной квадратичной зависимостью от ширины потенциального ящика L

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi n}{L} \right)^2, \quad (3)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — квантовое число, характеризующее кратность длины волны формирующихся стоячих волн (различные моды) по отношению к размерам потенциального ящика, m^* — масса электрона. С изменением ширины потенциального ящика или соответственно толщины пленки спектр квантовых состояний, т.е. их энергетическое положение, изменяется. С увеличением ширины L расстояние между энергетическими уровнями уменьшается, а сами значения энергий квантовых состояний стремятся ко дну потенциального ящика. Необходимым условием для формирования хорошо определенных спектров квантовых состояний в напыляемой

пленке является когерентность многократного отражения электронных волн от границ пленки в различных ее участках, т.е. ее высокая пространственная однородность по толщине и высокое качество формируемой пленки. В противном случае некогерентное рассеяние приведет к полному размыванию квантово-размерных эффектов. Отмеченное квантование электронной энергетической структуры может быть зарегистрировано при помощи метода фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением в направлении нормали к поверхности пленки. В результате фотовозбуждения с энергией квантов $h\nu$ (рис. 2) спектр возбужденных и вышедших в вакуум фотоэлектронов в направлении квантования электронной структуры пленки (т.е. в направлении z) будет повторять энергетическое распределение плотности электронных состояний, определяемое условием формирования соответствующих стоячих электронных волн (рис. 3 и формула (3)). При этом энергетическое распределение квантовых состояний будет проявляться в фотоэлектронном спектре в виде осциллирующей электронной плотности или периодически расположенных пиков (см. верхнюю часть рис. 2), энергетическое положение которых будет изменяться с изменением толщины адсорбируемой пленки. Регистрируя соответствующие изменения фотоэлектронных спектров, мы можем получать информацию о структуре спектров квантовых состояний. Далее представлены экспериментальные фотоэлектронные спектры для пленок благородных металлов на поверхностях монокристаллов d -металлов. На рис. 4, *a* в качестве примера, иллюстрирующего структуру спектров квантовых состояний и их изменение по мере увеличения толщины пленки (или величины размерного ограничения волновых функций), представлены изменения экспериментальных фотоэлектронных спектров, измеренных для пленки $Ag(111)$, формируемой на поверхности монокристалла $Ni(111)$, начиная от субмонослойных покрытий и до толщины пленки, равной 14 монослоям [5]. Спектры измерены методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (или углом захвата фотоэлектронов) 1° в направлении, перпендикулярном поверхности, при энергии фотонов $h\nu = 50 \text{ eV}$. Здесь нижний спектр соответствует чистой поверхности $Ni(111)$, а увеличение толщины слоя Ag по мере напыления соответствует сдвигу измеряемых фотоэлектронных спектров вверх по рисунку. Верхний спектр соответствует толщине слоя Ag , равной 14 монослоям. Энергетическое положение особенностей спектров отсчитывается от уровня Ферми. На рис. 4 представлена область состояний валентной зоны, соответствующая $Ag(sp)$ -состояниям. Состояния d -типа расположены при энергиях связи выше 4 eV и не показаны на рисунке. На представленных спектрах явным образом видно формирование периодических осциллирующей электронной плотности в фотоэлектронных спектрах в области $Ag(sp)$ -состояний, энергетическое

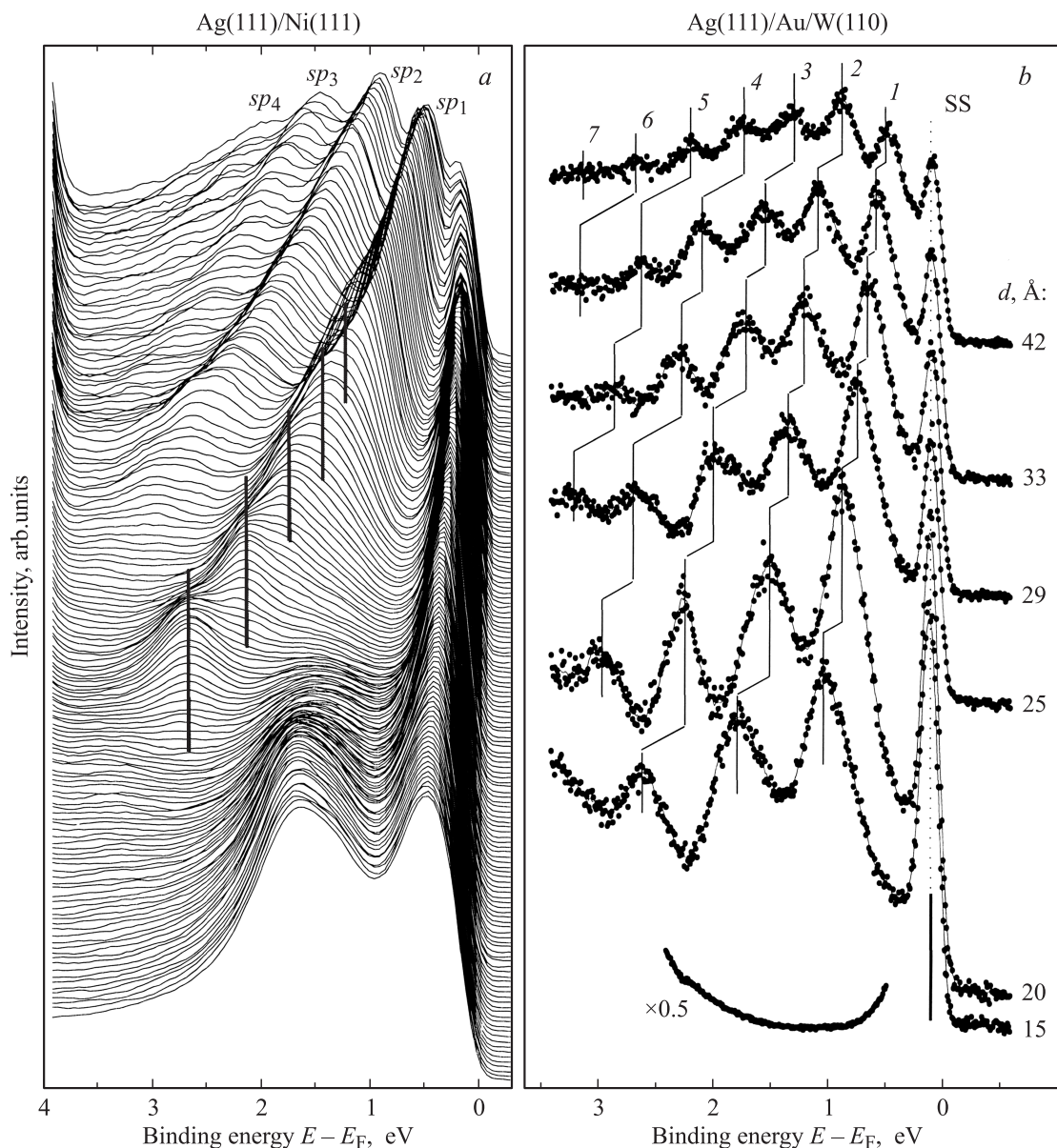


Рис. 4. *a)* Серия экспериментальных фотоэлектронных спектров валентной зоны, измеренных в процессе непрерывного напыления Ag на поверхность Ni(111), показывающая формирование соответствующих спектров квантовых состояний и их изменение по мере напыления. *b)* Аналогичные спектры квантовых состояний, формируемых в системе двойной ямы с промежуточным ультратонким слоем Au(111) толщиной 8 Å на поверхности W(110), в зависимости от толщины верхней пленки Ag(111). Толщина формируемых Ag-пленок увеличивается от нижнего спектра к верхнему.

положение которых изменяется по мере увеличения толщины пленки. Число квантовых состояний с ростом толщины пленки также увеличивается. При толщине пленки в 14 монослоев в спектрах экспериментально можно выделить четыре различных квантовых состояния (sp_n), различающиеся значением n ($n = 1-4$). На рис. 4, *b* приведены аналогичные спектры квантовых состояний и их изменение по мере увеличения толщины пленки для другой, более сложной системы двойной потенциальной ямы, состоящей из ультратонкого слоя Au(111) толщиной 8 Å на поверхности монокристалла W(110) и пленки Ag(111) изменяющейся толщины [6]. Видно, что и для

такого типа низкоразмерных систем имеет место квантование электронной структуры, проявляющееся в формировании осциллирующей электронной плотности, положение которых изменяется с изменением толщины пленки Ag(111). На представленных спектрах можно уже выделить шесть-семь пиков (ветвей) квантовых состояний.

Следует отметить, что в случае 3D-монокристалла Ag(111) никаких осцилляций электронной плотности Ag(sp)-состояний в фотоэлектронных спектрах валентной зоны не наблюдается. Формирование периодически расположенных особенностей, связанных с формированием квантовых состояний и изменяющих свое энергетиче-

ческое положение с изменением толщины, наблюдается только для тонких и ультратонких пленок напыляемых металлов, т.е. только в случае размерного ограничения соответствующих волновых функций.

Необходимо также отметить, что спектр квантовых состояний является дискретным только в направлении ограничения волновых функций в пленке (z) (рис. 3, *a*). В направлениях вдоль пленки (x, y), где нет размерных ограничений, электронный спектр представляет собой набор парабол с законом дисперсии $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ с минимумами энергий, соответствующими энергиям квантовых состояний в направлении z (рис. 3, *b*). Схема фотоэлектронного эксперимента по измерению спектров квантовых состояний в адсорбируемых пленках металлов приведена на рис. 5. После формирования пленки (или непосредственно в процессе ее напыления) на поверхность посылаются электромагнитное излучение или поток квантов света с определенной энергией $h\nu$. Возбужденные фотоэлектроны e^- выходят под разными углами в вакуум, где могут быть зарегистрированы при помощи энергоанализатора. Энергоанализатор имеет малую входную диафрагму и может выделять электроны, вылетевшие под определенными углами. Тогда, изменяя угол анализа, можно определить угловое распределение возбужденных фотоэлектронов. В экспериментах по изучению спектров квантовых состояний изучаются в основном электроны, вылетевшие по нормали к поверхности пленки, т.е. в направлении квантования энергетического спектра электронов. Спектры, представленные на рис. 4, измерены именно при такой геометрии эксперимента.

3. Особенности экспериментального наблюдения спектров квантовых состояний и формирования изучаемых систем

Спектры квантовых состояний, представленные в настоящей работе, и их изменения по мере роста толщины пленок исследовались методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением в направлении, перпендикулярном поверхности пленок, т.е. в направлении их роста (рис. 5). Спектры измерялись с использованием синхротронного излучения высокой интенсивности с легко перестраиваемой энергией квантов света, используемого для возбуждения электронов твердого тела. В представленных экспериментах использовались энергии возбуждения $h\nu$ в области 50–65 eV, что соответствует максимуму поверхностной чувствительности метода фотоэлектронной спектроскопии ($\sim 5\text{--}6 \text{ \AA}$). В качестве подложек для роста пленок благородных металлов использовались атомарно-чистые плотноупакованные монокристаллические поверхности W(110) и Mo(110). Изучаемые системы характеризуются послойным ростом пленок благородных металлов и высоким качеством и однородностью напыляемых

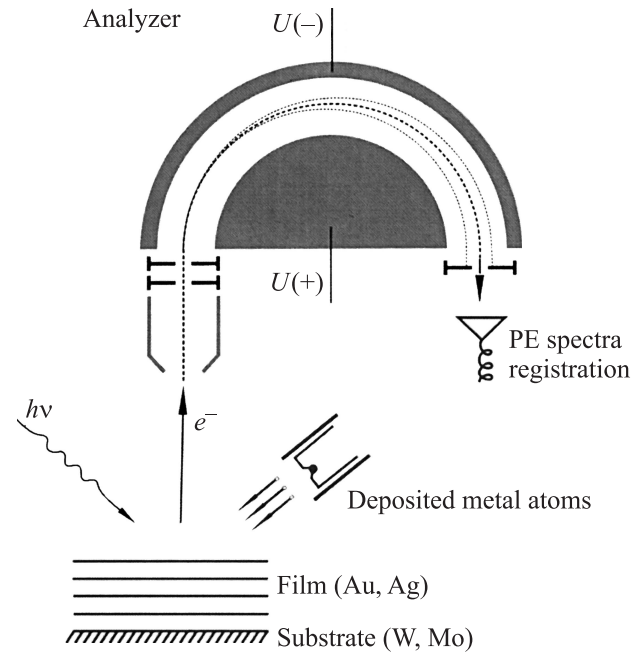


Рис. 5. Схема фотоэмиссионного эксперимента с угловым разрешением по изучению спектров квантовых состояний в режиме перманентного напыления пленки с одновременной непрерывной регистрацией спектров.

пленок (о чем свидетельствуют и сами спектры наблюдаемых квантовых состояний). Рост пленок осуществлялся путем напыления атомов благородных металлов в условиях сверхвысокого вакуума на атомарно-чистую поверхность монокристаллов. Исследования проводились в режиме перманентного напыления, т.е. непрерывного напыления пленок с одновременной регистрацией фотоэлектронных спектров. Скорость напыления выбиралась такой, чтобы в течение времени формирования каждого монослоя удавалось зарегистрировать не менее 10–15 фотоэлектронных спектров. Для измерения спектров использовался полусферический энергоанализатор VG Escalab с энергетическим разрешением 50 meV и угловым разрешением 1° . В качестве источника возбуждения использовалось монохроматическое излучение требуемой энергии накопительного кольца центра синхротронного излучения BESSY российско-германского канала вывода синхротронного излучения.

Напыление производилось путем термического распыления кусочка Au или Ag, наплавленного на проволоку (W-Re), которая нагревалась прямым пропусканием тока. Контроль потока испаряемого вещества производился при помощи кварцевого резонатора, расположенного в эквивалентных с образцом условиях. Скорость напыления составляла $\sim 0.15\text{--}0.2 \text{ \AA}/\text{min}$. Атомарно-чистые поверхности W(110) и Mo(110) получались в результате предварительного окисления поверхностей при температуре 1200°C в атмосфере кислорода при давлении $5 \cdot 10^{-8}$ Торр с последующим кратковременным прогревом до 2000°C в условиях сверхвысокого вакуума.

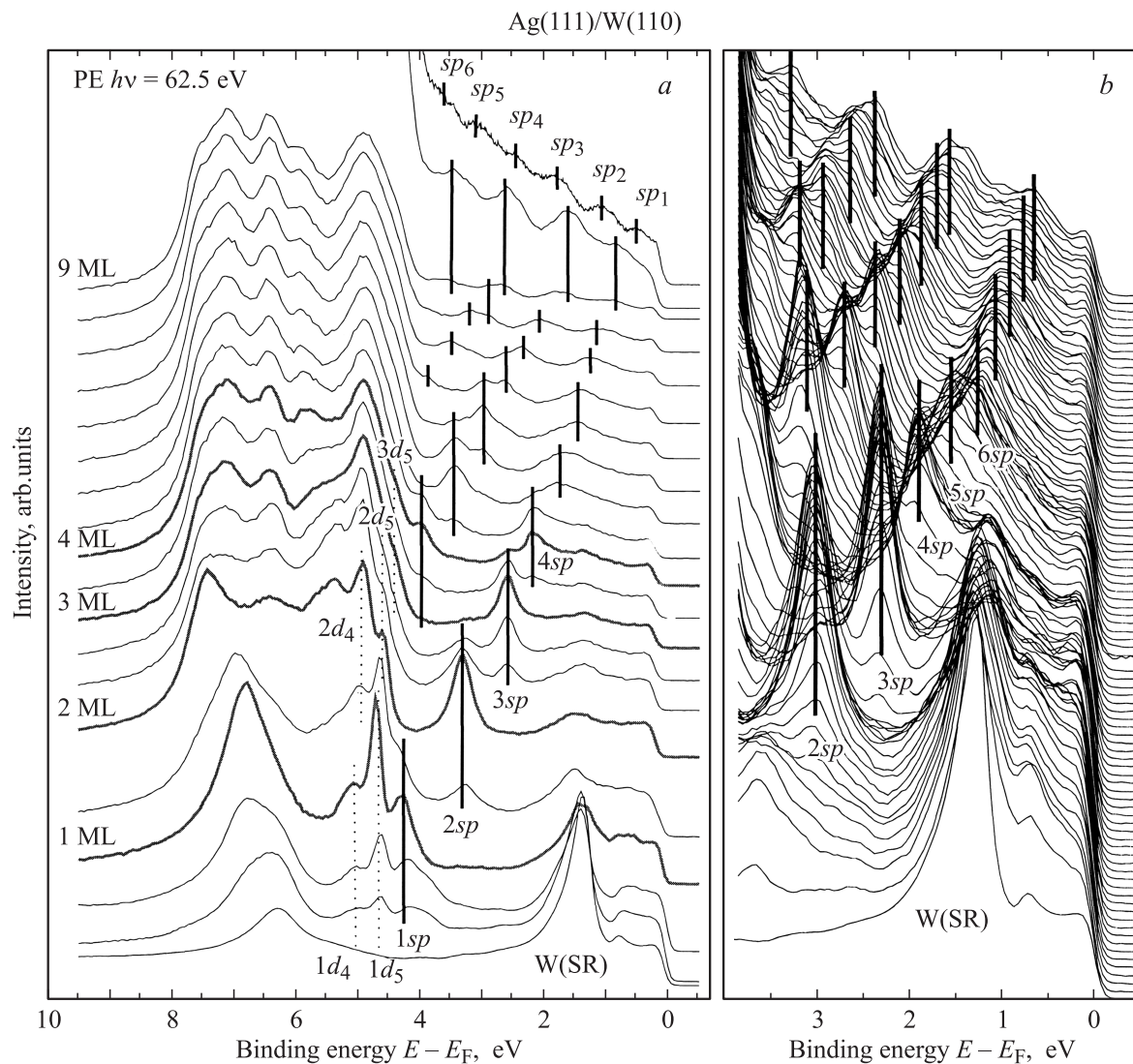


Рис. 6. Серии фотоэлектронных спектров, измеренных по нормали к поверхности в процессе напыления пленок Ag(111) на поверхность W(110), показывающие формирование соответствующих спектров квантовых состояний как sp -, так и d -характера при изменении толщины напыляемой пленки. На части *a* выборочно показано от одного до трех спектров на формируемый монослой в полном диапазоне существования sp - и d -состояний. На части *b* представлены непрерывные изменения спектров в диапазоне sp -состояний, показывающие дискретность формирования пиков квантовых состояний.

Базовое давление в исследовательской камере поддерживалось на уровне не хуже чем $1-2 \cdot 10^{-10}$ Торр.

Далее показано, как экспериментально формируются спектры квантовых состояний в пленках металлов в атомном пределе толщин на примере ультратонких слоев благородных металлов (Ag, Au), формируемых на поверхностях монокристаллов W и Mo. Представлены сами фотоэлектронные спектры, а также изменения энергий квантовых состояний и их интенсивности в зависимости от толщины формируемых слоев. Особое внимание уделено анализу спектров квантовых состояний в атомном пределе толщин, т.е. толщинам, начиная от субмонослойных покрытий и до нескольких атомных монослоев. Проанализированы процессы квантования электронной структуры как для sp -электронов, так

и d -электронов и выделены основные закономерности формирования электронных спектров.

4. Экспериментальные результаты. Спектры квантовых состояний в ультратонких слоях металлов и их изменение в зависимости от толщины формируемых слоев

На рис. 6, *a, b* приведены изменения экспериментальных фотоэлектронных спектров в процессе напыления серебра (Ag) на атомарно-чистую монокристаллическую поверхность W(110), начиная от субмонослойных покрытий и до толщин пленок девяти атомных монослоев.

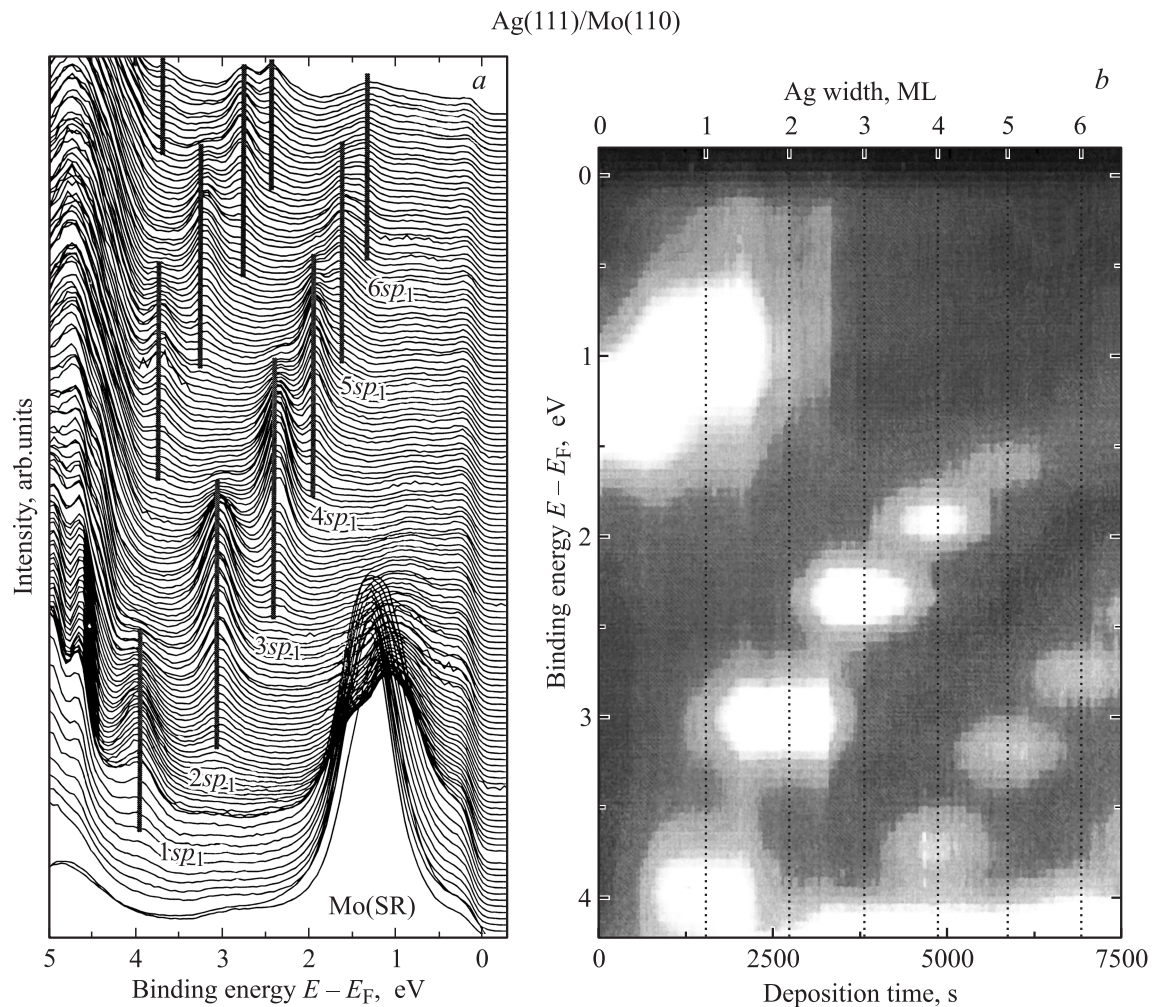


Рис. 7. Изменение структуры фотоэмиссионных спектров (*a*) и диаграмма изменений энергии и интенсивности квантовых состояний (*b*) в процессе напыления слоев Ag(111) на поверхность Mo(110). Толщины слоев (в монослоях) отложены на верхней шкале части (*b*). Максимумы интенсивностей квантовых состояний соответствуют светлым пятнам. Толщина слоев Ag на части *a* увеличивается от нижнего спектра к верхнему.

На рис. 6, *a* спектры представлены выборочно — один-три спектра на каждый формируемый монослой для области энергий, включающей как *sp*-, так и *d*-состояния. Толщины напыляемых слоев Ag(111) показаны слева от измеряемых спектров. На представленных рисунках увеличение толщины слоев соответствует движению от нижнего спектра (спектр для чистой подложки) к верхним. На рис. 6, *b* представлено детальное (непрерывное) изменение спектров области *sp*-квантовых состояний, измеренное непосредственно в процессе перманентного напыления, т.е. непрерывного изменения толщины напыляемого слоя серебра, иллюстрирующее ступенчатое изменение энергий квантовых состояний. Из анализа спектров видно, что по мере напыления Ag особенности, характеризующие подложку (W(SR)), ослабевают и в спектрах появляются ярко выраженные дискретные по энергии особенности, связанные с формированием спектров квантовых состояний в напыляемой пленке Ag(111). Область с энергиями связи более 4 eV — это

область Ag(*d*)-состояний, а с энергиями менее 4 eV — это область ярко выраженных квантовых состояний *sp*-характера. Особенности *sp*-характера с энергиями связи более 4 eV не видны на фоне высокоинтенсивных *d*-состояний. Спектры квантовых состояний проявляются путем модуляции плотности электронных состояний в виде периодически расположенных особенностей (пигов) в наблюдаемых фотоэлектронных спектрах. Положения пигов квантовых состояний, соответствующих различным толщинам пленки (выраженным в монослоях), отмечены вертикальными черточками с соответствующими обозначениями Nsp_n или Nd (где *d* или *sp* — тип электронного состояния, *N* — количество монослоев в формируемой пленке, *n* — значения, соответствующие различным ветвям квантовых состояний). По мере напыления (т.е. с изменением толщины пленки) эти особенности изменяют свое энергетическое положение, с общей тенденцией их движения к уровню Ферми с увеличением толщины напыляемой пленки. Однако это

движение не происходит непрерывным образом. Изменение энергетических положений квантовых состояний носит ступенчатый характер. Особенно это проявляется для более тонких слоев, где энергетическое расстояние между соответствующими квантовыми состояниями больше. По мере напыления Ag особенности появляются в спектрах, а затем исчезают и появляются уже при других энергиях. На рис. 7, *a, b* приведены аналогичные изменения спектров квантовых состояний для тонких пленок Ag(111) на поверхности монокристалла Mo(110) по мере увеличения толщины пленки Ag(111). На представленных спектрах ступенчатый характер изменения энергий пиков квантовых состояний при каждом увеличении толщины слоя Ag на один монослой. На рис. 7, *a* приведены изменения соответствующих фотоэмиссионных спектров, а на рис. 7, *b* представлены совместные изменения интенсивности и энергии пиков квантовых состояний по мере роста толщины пленки. На представленных диаграммах увеличение интенсивности квантовых состояний соответствует переходу от красного к желтому и белому цвету, а сам спектр квантовых состояний представлен в виде дискретных пятен, появляющихся и исчезающих при различных энергиях по мере напыления Ag или увеличения толщины пленки. Толщина напыленных слоев (выраженная в монослоях) показана на рис. 7, *b* сверху. На представленных на рис. 6, 7 фотоэмиссионных спектрах и диаграммах изменения квантовых состояний явным образом виден ступенчатый характер изменений энергий квантовых состояний для основных ветвей квантовых состояний. По мере увеличения толщины пленки энергетическое положение пиков квантовых состояний изменяется. Формирование каждого максимума интенсивности на представленных диаграммах (светлые пятна) соответствует завершению строительства каждого нового монослоя по мере роста толщины пленки. При толщине пленки в один монослой (1 ML) в спектре формируется одно квантовое *sp*-состояние при энергии ~ 4.2 eV для системы Ag/W(110) и ~ 3.9 eV для системы Ag/Mo(110) (остальные состояния для этой толщины на рис. 6 обусловлены *d*-состояниями). Для системы Ag/Mo(110) данное *sp*-состояние отчетливо видно на рис. 7, *b*. Для системы Ag/W(110) это состояние локализовано более близко к области *d*-состояний и на рис. 7, *b* не показано (обрезано в совокупности с *d*-состояниями ввиду его значительной интенсивности). Однако данное квантовое состояние, характерное для одного монослоя Ag на поверхности W(110), хорошо можно видеть на рис. 6, *a* (обозначено как состояние *1sp*). При переходе к формированию второго монослоя данное состояние уменьшается по интенсивности и затем исчезает из спектров. Следующее квантовое состояние, соответствующее покрытию в два монослоя (т.е. следующее яркое пятно на представленных диаграммах), формируется при энергиях ~ 3.1 и 3.0 eV соответственно. Максимум интенсивности данного квантового состояния соответствует формированию уже сплошного покрытия толщиной в два моно-

слоя. При формировании третьего монослоя энергия пика квантового основного состояния опять изменяется. Данное состояние уже локализовано при энергии ~ 2.4 eV для обеих систем, и т.д. При этом при формировании четвертого монослоя в спектрах появляется дополнительное квантовое состояние, характеризующее следующую ветвь квантовых состояний. Энергии этих состояний опять расположены в области ~ 3.8 – 4 eV и также изменяются ступенчатым образом при увеличении толщины пленки на очередной атомный монослой. При толщинах пленки шесть-семь монослоев в спектрах появляется третья ветвь квантовых состояний, которая так же, как и первые две ветви, движется в сторону уровня Ферми, по мере увеличения толщины напыляемой пленки. При толщинах девять и шесть монослоев для систем Ag/W(110) и Ag/Mo(110) в спектрах можно выделить от трех до пяти ветвей квантовых состояний (рис. 6, 7), соответствующих различным значениям *n* в фазовом уравнении (4).

Отмеченный выше ступенчатый характер изменения энергий квантовых состояний по мере формирования каждого нового монослоя по толщине и соответствие энергий квантовых состояний строго определенной толщине пленки (в монослоях) можно использовать для прецизионной оценки толщины формируемых пленок и контроля момента формирования ультратонкого покрытия требуемой толщины.

Более подробное и детальное изменение энергии и интенсивности пиков квантовых состояний, формирующихся по мере увеличения толщины пленки Ag(111) на поверхности W(110), представлено на рис. 8, *a*. На рис. 8, *b* представлены соответствующие изменения интенсивностей пиков квантовых состояний, появляющихся и исчезающих по мере увеличения пленки Ag(111). Подобное представление результатов эксперимента позволяет проводить подробный анализ поведения спектров квантовых состояний и сравнение результатов эксперимента с соответствующими теоретическими оценками. Далее в качестве примера проведен соответствующий анализ энергий квантовых состояний для систем Ag/W(110) и Au/W(110). Для этих же систем проведены теоретический расчет энергии квантовых состояний на основе расширенной фазовой модели и сравнение теоретических оценок с экспериментальными результатами. Дополнительным преимуществом такого рассмотрения результатов является то, что оно позволяет проводить непосредственное сравнение экспериментальных результатов для различных серий экспериментов на одном рисунке, тем самым повышая достоверность полученных результатов. В частности, на рис. 8, *a* различными символами представлены результаты, полученные в различных экспериментах (при использовании для фотоэлектронных экспериментов синхротронного излучения (темные кружки) или He-резонансной лампы (квадраты)). Представленные зависимости энергий квантовых состояний от толщины напыляемого слоя явным образом подтверждают сделанное ранее заключение о ступенчатом характере

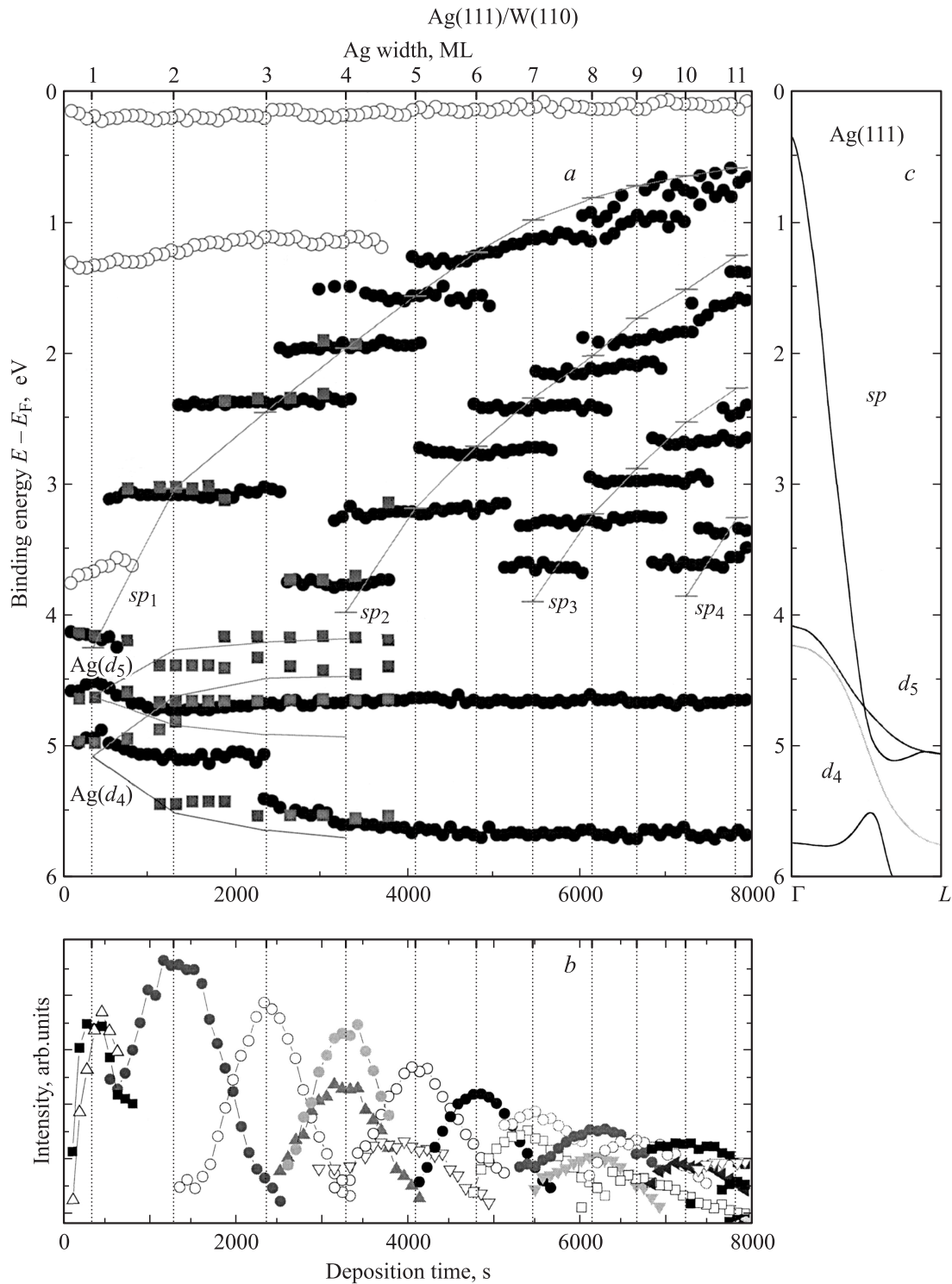


Рис. 8. Изменения энергий (*a*) и интенсивностей (*b*) пиков квантовых состояний в процессе напыления Ag на поверхность W(110). Шкала толщин напыляемых слоев (в монослоях) представлена в верхней части рисунка. *c* — электронная структура *sp*- и *d*-состояний для Ag(111). Светлые кружки соответствуют пикам подложки. Различные символы отвечают разным сериям измерений.

изменений энергии пиков квантовых состояний при малых толщинах пленки, причем для всех наблюдаемых ветвей квантовых состояний (что не может быть описано адекватным образом в модели потенциального ящика).

Причем для второй и третьей ветвей квантовых состояний ступенчатый характер изменений энергий квантовых состояний можно выделить вплоть до максимальных толщин, измеренных для данной системы (10–12 моно-

слоев). Как видно из рис. 8, *b*, интенсивность каждого нового формирующегося квантового состояния (которое, как отмечалось, характеризуется своей определенной энергией) достигает максимума при формировании каждого нового сплошного монослоя, а затем спадает и исчезает из спектров. При этом начало формирования следующего монослоя сопровождается появлением в спектрах нового квантового состояния (пика), уже при двукратной энергии, с максимумом интенсивности при формировании сплошного покрытия уже с данной толщиной, которое затем также исчезает из спектров, и т.д. Появление каждого следующего пика квантовых состояний происходит практически сразу при достижении максимума интенсивности пика предыдущего квантового состояния, т.е. сразу после завершения строительства предыдущего монослоя и при начале строительства нового монослоя. По мере заполнения данного монослоя площадь покрытия с данной толщиной увеличивается, и растет интенсивность пика квантового состояния вплоть до полного завершения данного монослоя.

Следует отметить, что квантование энергетического спектра электронных состояний проявляется не только для *sp*-состояний, но также и для состояний *d*-характера. Из представленных спектров и энергетических зависимостей (рис. 6, *a*, 8, *a*) видно, что энергии пиков *d*-состояний (область состояний с энергией более 4 eV) также меняются в зависимости от толщины пленки. Для монослойного покрытия это два пика с энергиями 4.6 и 5.0 eV (для d_5 - и d_4 -состояний соответственно). Для покрытия в два монослоя можно выделить особенности с энергиями 4.4, 4.8, 5.1 и 5.4 eV и т.д. Области энергий формируемых квантовых состояний различного характера (*sp* и *d*) соответствуют областям существования данных состояний в электронной структуре в исследуемом направлении, т.е. Ag(111). Энергетическая структура валентных состояний для Ag(111) приведена на рис. 8, *c*. Состояния *sp*-характера локализованы в области 7–0.3 eV. Однако энергетическая область 4–7 eV для квантовых состояний *sp*-характера маскируется влиянием более интенсивных *d*-состояний. Сами Ag(*d*) состояния характеризуются пятью ветвями электронных состояний (d_1 , d_2 , d_3 , d_4 и d_5) (рис. 8, *c*). Область локализации верхних зон *d*-состояний, для которых наблюдается формирование соответствующих квантовых состояний, соответствует диапазонам 4.1–5.0 eV для d_5 -состояний и 4.2–5.7 eV для d_4 -состояний.

Явным образом изменение энергии квантовых состояний *d*-характера в зависимости от толщины пленки можно проследить на примере системы Au/W(110). На рис. 9 приведены изменения экспериментальных фотоэмиссионных спектров (спектров квантовых состояний) в процессе напыления Au на поверхность W(110), начиная от субмонослойных покрытий и до толщины ~15 монослоев. Толщины напыляемых слоев показаны слева от представленных спектров. Как и ранее, на рис. 9 представлено от одного до трех спектров на каждый

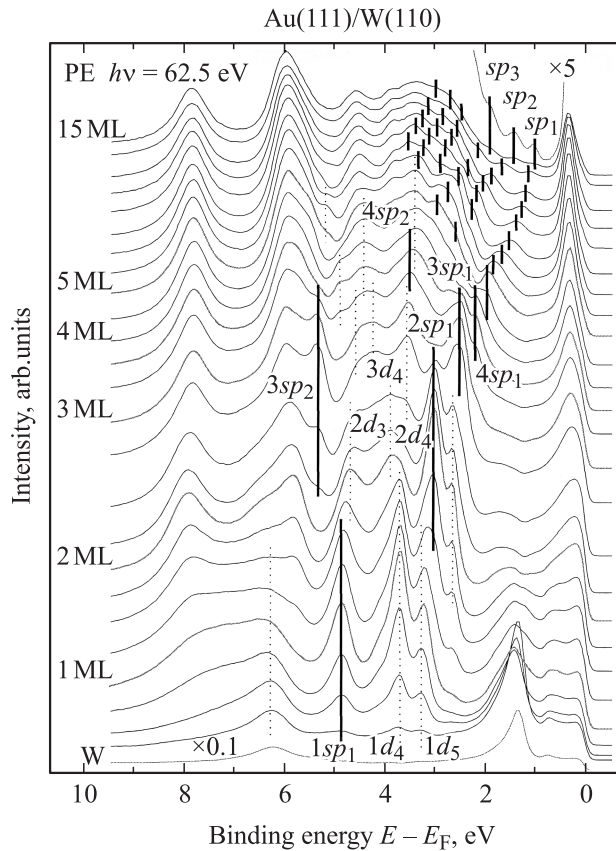


Рис. 9. Изменения структуры фотоэлектронных спектров, измеренных в процессе напыления Au на поверхность W(110), отображающие формирование спектров квантовых состояний *sp*- и *d*-характера.

монослой, а полностью все изменения интенсивности и энергий формируемых квантовых состояний, измеренные в процессе перманентного напыления, приведены на рис. 10. Для данной системы область явного наблюдения квантовых состояний *sp*-характера — это область с энергиями от 2.5 eV и до уровня Ферми. Полная зона *sp*-состояний локализована между 9 и 1 eV. Область формирования соответствующих квантовых *d*-состояний — это область энергий 2.5–6.0 eV. В этой области *sp*-состояния в основном маскируются вкладом высокоинтенсивных *d*-состояний. Данные области формирования квантовых *sp*- и *d*-состояний можно сравнить с областями локализации *sp*- и *d*-состояний в объемной структуре Au(111), приведенной на рис. 10, *c*. Детальные изменения энергии пиков квантовых состояний как *sp*-, так и *d*-характера в процессе напыления Au на поверхность W(110) представлены на рис. 10, *a*. Соответствующие изменения интенсивности пиков квантовых состояний приведены на рис. 10, *b*. Из анализа приведенных зависимостей (как и ранее) можно сделать вывод о ступенчатом характере изменений энергий квантовых состояний с толщиной пленки до пяти-шести монослоев для состояний как *sp*-, так и *d*-характера. Причем

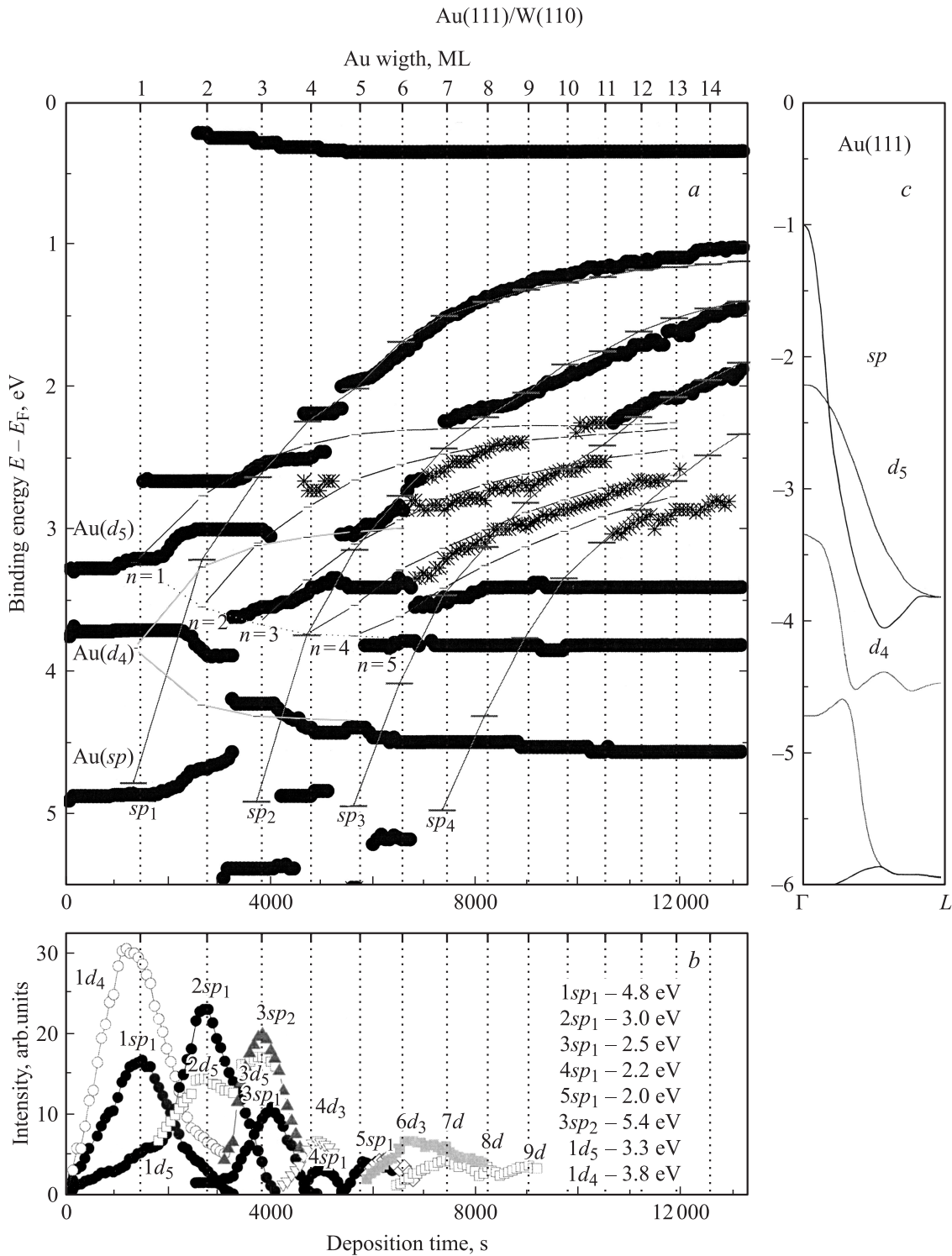


Рис. 10. Изменения энергий (a) и интенсивностей (b) пиков квантовых состояний, формирующихся в процессе напыления Au на поверхность W(110). Шкала толщин напыляемых слоев Au(111) (в монослоях) приведена в верхней части рисунка. c — электронная структура sp- и d-состояний для поверхности Au(111) в направлении ΓL зоны Бриллюэна, соответствующей направлению роста пленки. Различные символы отвечают разным сериям измерений.

формирование каждого нового монослоя, как и ранее для системы Ag/W(110), характеризуется появлением и ростом своего соответствующего квантового состояния. При формировании сплошного слоя данной толщины

интенсивность данного квантового состояния достигает максимума, и при формировании следующего монослоя данное квантовое состояние уменьшается по интенсивности, а затем исчезает из спектров.

Из анализа рис. 10, *a* видно, что квантовые d_5 -состояния локализованы в области энергий 2.2–3.8 eV. На представленных спектрах можно выделить до четырех квантовых состояний данного характера. Дополнительно в спектрах также можно выделить квантовые состояния d_4 -характера. Они локализованы в области энергий 3–5 eV. Что касается квантовых состояний sp -характера, то они проявляются явным образом в спектрах при более низких энергиях связи (менее 2.2 eV) и движутся при увеличении толщины пленки к краю соответствующей sp -зоны (~ 1.0 eV). Напомним, что аналогичным образом ведут себя sp - и d -квантовые состояния и для системы Ag/W(110) (рис. 8). Для системы Ag/W(110) изменения энергии квантовых sp -состояний были также локализованы в области существования sp -состояний в объемной структуре Ag(111) (область энергий до 0.3 eV), а изменения энергий квантовых d -состояний находились в пределах зоны d -состояний (область энергий более 4 eV).

Здесь следует отметить, что в том случае, когда формируется пленка с другой структурой, например Ag(110), область изменений энергий квантовых sp -состояний также сильно изменяется в соответствии с особенностями объемной электронной структуры в данном направлении. Так, например, для Ag(100) направления область энергий sp -состояний простирается до 2 eV выше уровня Ферми. И соответствующим образом изменения энергий квантовых sp -состояний для пленок Ag(100) (например, на поверхности W(100) [14]) находятся в этих пределах. При этом формирующиеся квантовые состояния пересекают уровень Ферми при определенных толщинах. В то же время для пленок Ag(111), как мы видим, формируемые квантовые состояния никогда не пересекают уровень Ферми, независимо от толщины пленки (для сравнения спектров квантовых состояний для пленок с различной кристаллографической структурой и различными параметрами соответствующих электронных структур см., например, работу [15]).

При этом если сравнить энергии квантовых состояний для пленок с одной и той же кристаллографической структурой, но на различных подложках (например, Ag(111) на поверхности W(110) и Mo(110) — рис. 6, 7 или Ni(111) [5] — рис. 4), то можно заметить, что энергии квантовых Ag(sp)-состояний различаются при формировании пленок на различных подложках, т.е. спектры формируемых квантовых состояний определяются как особенностями электронной энергетической структуры самих пленок, так и особенностями электронной структуры подложки.

Чем определяются энергии квантовых состояний, как зависят от особенностей электронной структуры подложки и адсорбата, как меняются с изменением толщины пленки и каким образом можно предсказать их поведение, обсуждается в следующих разделах.

5. Классическая фазовая модель учета энергий квантовых состояний

Приближение потенциального ящика, отмечавшееся ранее, является простейшим приближением и может только качественно показать поведение спектра формируемых квантовых состояний. Более реалистичной и более общей моделью является модель аккумуляции фазы или фазовая модель, где условия формирования стоячих электронных волн в пленке (рис. 3) определяются на основе учета фазовых изменений при отражении электронной волны от обеих границ пленки и при прохождении электронной волны внутри пленки (рис. 2), которые связаны следующим фазовым уравнением [1,2,7,8]:

$$\Phi_C + \Phi_B + 2k(E)d = 2\pi n, \quad (4)$$

где Φ_C — изменение фазы при отражении от подложки (кристалла), Φ_B — изменение фазы при отражении от поверхностного потенциального барьера, $2kd$ — набег фазы при прохождении электронной волной толщины пленки ($d = L$). В пределе атомных толщин $d = a_0 N$, где a_0 — это толщина монослоя, а N — количество монослоев. При этом зависимость $k(E)$ определяется дисперсионными электронными соотношениями, которые могут быть разными в различных приближениях, используемых для описания поведения электронного газа в твердом теле. Случай потенциального ящика, описанный выше, является частным случаем в данной модели при условии $\Phi_C = \Phi_B = \pi$.

В общем случае члены фазового уравнения и их энергетическая зависимость определяются особенностями электронной энергетической структуры подложки и напыляемого металла и могут зависеть от энергии электронов в твердом теле различным образом в разных энергетических диапазонах, что приводит к более сложной зависимости энергии квантовых состояний по сравнению с моделью потенциального ящика.

В приближении почти свободных электронов (а это как раз приближение, используемое в классическом варианте фазовой модели [7,8]) зависимость членов фазового уравнения (4) от энергии и параметров электронной структуры подложки и адсорбата определяется эмпирическими выражениями:

$$\Phi_B = \left[\frac{3.4(\text{eV})}{E_{\text{vac}} - E} \right]^{1/2} \pi - \pi, \quad (5)$$

где E_{vac} — уровень вакуума; E — энергия электронов, отсчитываемая от уровня дна валентной зоны;

$$\Phi_C = 2 \arcsin[(E - E_L)/(E_U - E_L)]^{1/2} - \pi, \quad (6)$$

где E_U и E_L — положения верхнего и нижнего краев запрещенной зоны в электронной структуре подложки (рис. 2).

В случае выбора в качестве описания модели „почти свободного электронного газа“ выражение для $k(E)$ можно представить в виде [7,8]:

$$k(E) = G^{1/2} - [(G + E) - (4GE + V_g^2)^{1/2}]^{1/2}, \quad (7)$$

где $G = \frac{\hbar^2 k_{BZ}^2}{2m}$ — размер зоны Бриллюэна, V_g — энергетический параметр, удвоенная величина которого соответствует величине запрещенной зоны, т.е. $2V_g = \Delta E_g$.

Классическая фазовая модель хорошо описана в работах [1,2,7–11] в применении к различным пленочным системам и различным параметрам электронной структуры и показывает хорошее соответствие между экспериментальными данными и теоретическими оценками для толщин пленок от десятка и до нескольких десятков монослоев.

Однако при переходе к толщинам слоев, сравнимым с атомными размерами, т.е. с толщиной в несколько монослоев и менее, классическая фазовая модель имеет существенное ограничение. Фазовое уравнение (4) в классическом варианте модели описывает поведение некой „огibaющей“ волны, т.е. волны, которая модулирует амплитуду реальных блоховских волновых функций (рис. 3, *a*), при условии, что длина волны „огibaющей“ много больше размеров атома. Поэтому данная модель не может быть применена к ситуации, когда длина волны „огibaющей“ сравнима с размерами атома или длиной волны реальных атомных функций, наполняющих данную огibaющую. При этом, как уже отмечалось выше, в настоящий момент наибольший интерес для исследований вызывает анализ особенностей электронной структуры для систем именно с поперечными размерами от одного до нескольких атомов (максимум до одного-двух десятков атомов). Поэтому и соответствующие модельные пленочные системы, и сами модели для их анализа должны соответствовать данным размерам; для случая пленочных систем это должны быть толщины пленок порядка нескольких монослоев.

Для описания поведения спектров квантовых состояний при толщинах пленок от одного монослоя до нескольких монослоев, т.е. в атомном пределе толщин, была разработана другая модификация фазовой модели — так называемая расширенная фазовая модель [12–14]. В отличие от классического варианта эта модель основана уже не на приближении почти свободных электронов. В данной модели используются элементы приближения сильной связи (в частности, для описания зависимости $k(E)$), т.е. приближения, более адекватного для описания именно в атомном пределе толщин. Далее даны основные положения расширенной фазовой модели, ее отличия от классической фазовой модели и проанализировано, каким образом расширенная фазовая модель может быть применена для оценки энергий формируемых квантовых состояний и их изменений в зависимости от толщины пленки, начиная с субмонослойных и монослойных покрытий, а также

показано, как особенности электронной энергетической структуры подложки и адсорбируемого металла влияют на вид спектров квантовых состояний и их энергетическое положение.

6. Расширенная фазовая модель

В варианте расширенной фазовой модели по сравнению с классическим вариантом описание ряда членов фазового уравнения (4) и сама интерпретация фазового уравнения производятся с позиций приближения сильной связи (или ее простейшего варианта — линейной атомной цепочки [16]), хорошо применимого для систем с атомными размерами. В применении к пленочным системам толщина пленки (в единицах атомов) при таком подходе заменяется на эквивалентное число атомов в линейной цепочке, расположенной в направлении ограничения волновых функций и квантования электронной структуры z , т.е. в направлении изменения толщины пленки. Считается, что направления x, y не влияют на результат, и ими пренебрегают (что также делалось ранее в модели потенциального ящика и классической фазовой модели). В рамках данной модели в фазовом уравнении (4) в первую очередь изменяется член $(2k(E)d)$, где вид зависимости $k(E)$ определяется уже исходя из энергетической зависимости, характерной для модели линейной атомной цепочки [16], что приводит к выражению [12–14]

$$(2kd) = 2 \arccos [2E / (E_U^* - E_L^*)^{-1}] N, \quad (8)$$

где E_U^* и E_L^* — верхняя и нижняя границы зоны, формирующей квантовые состояния (рис. 2). Здесь и далее все решения уравнения (4) для упрощения проводятся в предположении $a_0 = 1$. Поскольку исходя из анализа максимальной интенсивности соответствующих квантовых состояний мы с достоверностью можем определить моменты формирования каждого последующего монослоя, зависимости от времени напыления, представленные на рис. 8, 10, могут быть легко перестроены в зависимости от количества напыленных монослоев (см. верхние части рис. 8 и 10).

Дополнительно к этому в рамках расширенной модели в фазовое уравнение (4) также вводится дополнительный член (Φ_{scatt}), описывающий изменение фазы волновой функции на границе с подложкой в области энергий вне запрещенной зоны в энергетической структуре подложки в том случае, когда эта область характеризуется состояниями, не смешивающимися с волновыми функциями пленки. Для W(110) запрещенная зона локализована в области 6.3–3.3 eV (рис. 11, *b*), а зона состояний Σ_5^2 , не смешивающихся с волновыми функциями в пленке Au(111), локализована в области энергий 3.3–1.2 eV. При этих условиях формирование квантовых состояний возможно и в области энергий вне запрещенной зоны в энергетической структуре подложки, т.е. также и в области зоны Σ_5^2 -состояний. В рамках классической

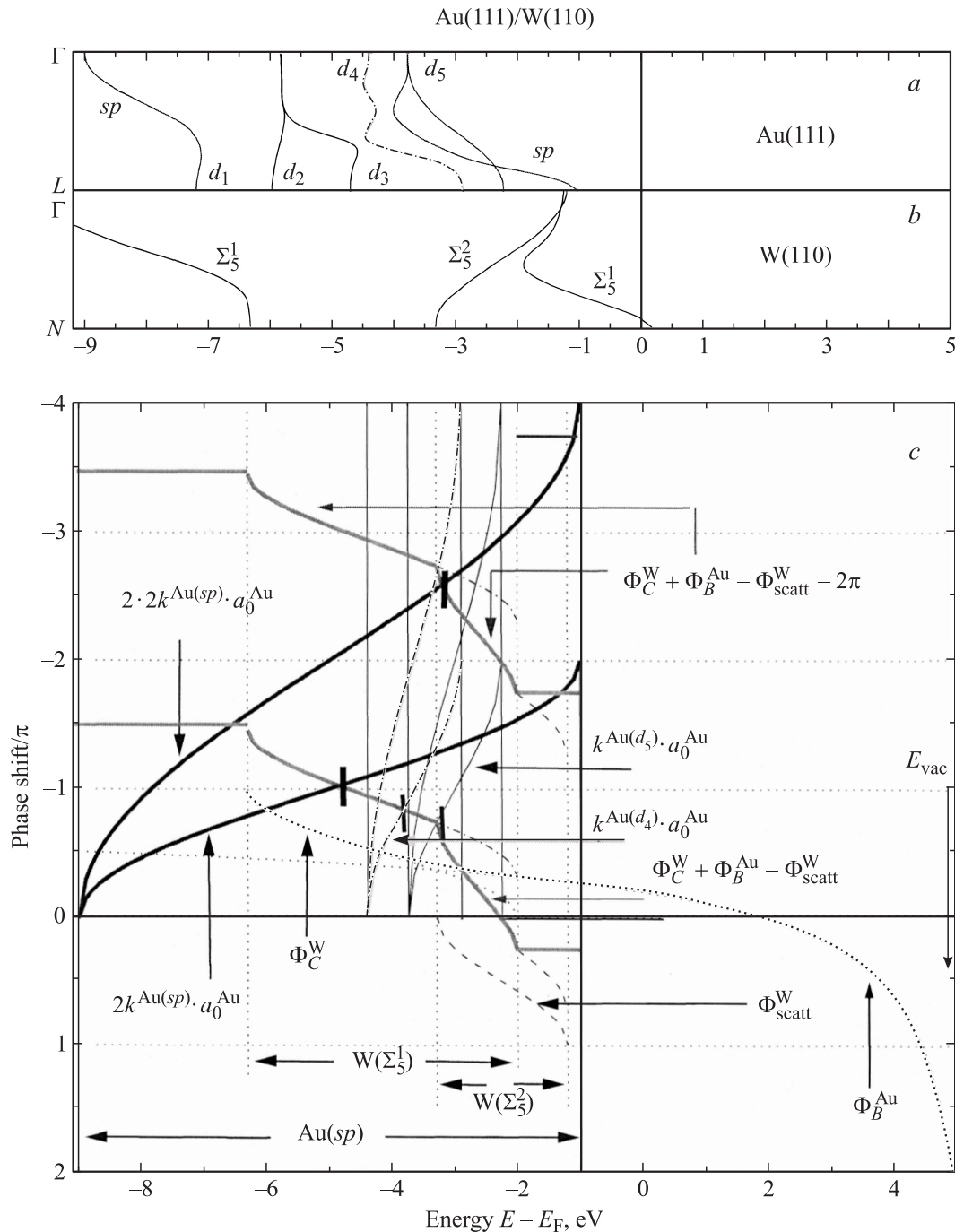


Рис. 11. Графическое решение фазового уравнения для квантовых состояний sp - и d -характера (см. текст) для системы Au(111)/W(110) для первых двух монослоев Au (c) в сравнении с особенностями электронной структуры Au(111) (a) и W(110) (b).

фазовой модели формирование квантовых состояний вне границ запрещенной зоны в подложке описать невозможно, хотя в действительности формирование квантовых состояний в таких энергетических областях экспериментально наблюдается. Например, для систем Ag/W(110) и Ag/Mo(110) (рис. 6–10) это область состояний с энергиями в диапазоне ~ 0 –3 eV, т.е. вне границ запрещенной зоны в энергетической структуре W(110) и Mo(110). В работах [12–14] было предложено описывать

энергетическую зависимость Φ_{scatt} на основе фазовых соотношений, характерных для зоны не запрещенных (подобно Φ_C), а разрешенных состояний, но с другим типом симметрии, также по формуле, аналогичной (8),

$$\Phi_{\text{scatt}} = -2 \arccos[2E/(E_U^{**} - E_L^{**})^{-1}]. \quad (9)$$

Только здесь E_U^{**} и E_L^{**} — верхняя и нижняя границы зоны разрешенных состояний в энергетической структуре подложки, отличных по симметрии от волновых

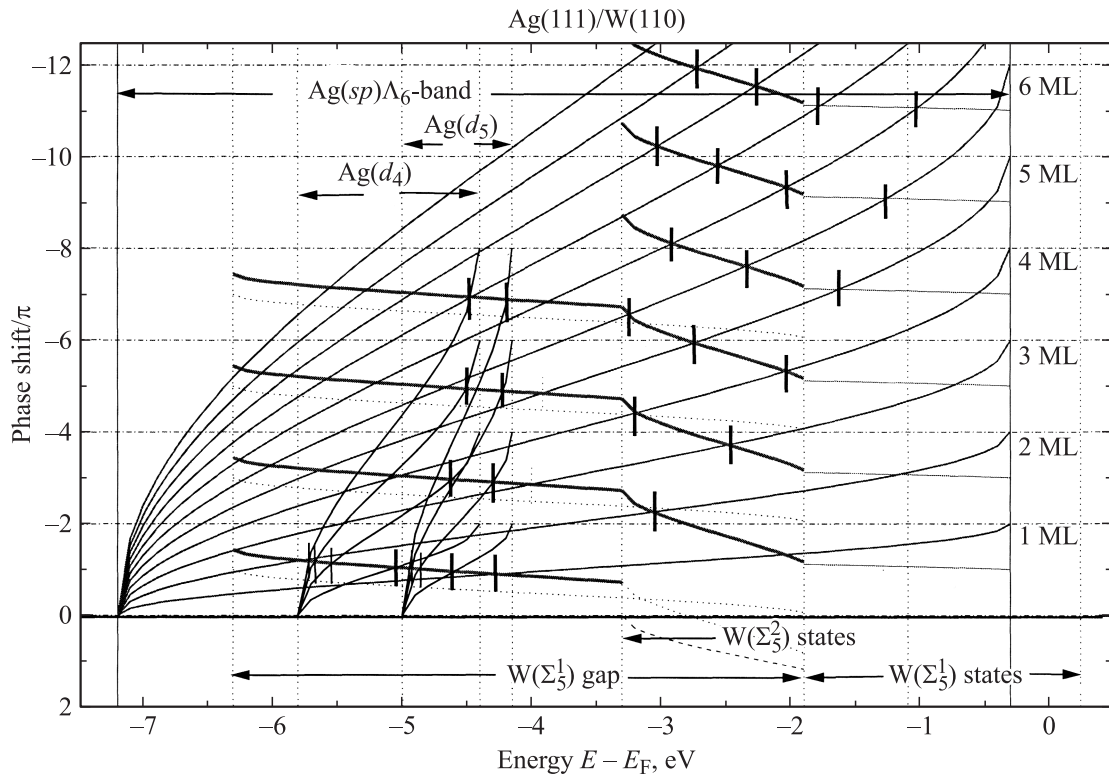


Рис. 12. Графическое решение фазового уравнения для sp - и d_5, d_4 -квантовых электронных состояний для системы Ag(111)/W(110) в расширенном энергетическом диапазоне для оценки квантовых состояний в пленках с толщиной от одного до десяти монослоев.

функций в пленке. Для W(110) и Mo(110) значения E_U^{**} и E_L^{**} соответствуют энергиям ~ 3.3 и ~ 1 eV. В таком представлении общее изменение фазы в пределах от верха до низа зоны данных состояний соответствует 2π , что отличается от величины общего изменения фазы для члена Φ_C от верха до низа запрещенной зоны, равного π , определяемого выражением (6).

При этом в рамках расширенной фазовой модели сами члены фазового уравнения уже не имеют смысла изменения фазы при отражении электронной волны от границ пленки и при прохождении сквозь пленку. При данном подходе уравнение (4) — это уравнение для фазовых соотношений между различными частями волновой функции в пределах пленки (член $2kd$), а также изменение фазовых соотношений (в зависимости от энергии) на границах пленки при сшивке волновой функции внутри пленки и вне ее (т.е. в подложке член Φ_C и в вакууме член Φ_B).

Простейший и наиболее эффективный способ решения фазового уравнения — графический. Примеры графического решения фазового уравнения для пленки Au(111) на поверхности W(110) приведены на рис. 11, c (для пленок толщиной один и два монослоя) и для пленки Ag(111) на поверхности W(110) для толщин вплоть до семи-десяти монослоев на рис. 12. При графическом способе решения фазового уравнения (уравнения типа (4) с добавлением члена Φ_{scatt} и перестановкой

слагаемых) строятся графические суммы членов уравнения $(\Phi_C(E) + \Phi_B(E) + \Phi_{scatt}(E) - 2\pi n)$, с одной стороны (они обозначены на рис. 11, c ломаными линиями в области от 9 до 1 eV), и, с другой стороны, графические суммы членов уравнения $(-2k(E)a_0N)$, которые для $N = 1, 2$ на рис. 11, c и 12 представлены сплошными линиями; см. соответствующие надписи на рисунке (зависимости строятся в приближении $(a_0 = 1)$). Строятся наборы соответствующих зависимостей (на рис. 12 они представлены для более высоких значений n и N , чем на рис. 11) для различных величин n и N и приравниваются. Места их пересечения (т.е. значения энергий, при которых имеет место пересечение соответствующих зависимостей) и дают решения фазового уравнения. Графические суммы первого типа, полученные в результате суммирования $\Phi_C, \Phi_B, \Phi_{scatt}$, представляют собой набор зависимостей, сдвинутых относительно друг друга на величину $2\pi n$. Диапазон энергетических изменений каждого члена графической суммы определяется соответствующими параметрами энергетической структуры (ср. с электронной структурой Au(111) и W(110), представленной на рис. 11, a, b) по формулам (5), (6), (9). Зависимости $(2k(E)a_0N)$ представляют собой набор кривых с общим диапазоном изменения фазы, равным $(0 - 2\pi)N$ (см. (8)), т.е. изменение фазы волновой функции в пределах каждого монослоя составляет 2π . При этом область изменения энергии определяется грани-

цами зоны данного типа состояний: для sp -состояний на рис. 11 это область 9.0–1.0 eV; для d_5 -состояний это область 3.8–2.2 eV, и т.п. Для одного монослоя ($N = 1$) пересечение наборов графических сумм дает для sp -состояний только одно значение энергии, равное 4.8 eV. Оно обозначено на рис. 11, *c* вертикальной чертой. Для двух монослоев ($N = 2$) можно найти уже две точки пересечения соответствующих наборов кривых — это энергии, равные ~ 6.5 и ~ 3.0 eV; для трех монослоев — уже три точки пересечения, и т.д. Из графического решения фазового уравнения на рис. 12 для системы Ag/W(110) видно, что количество решений (т.е. квантовых состояний) возрастает с ростом толщины пленки. Все точки пересечения, соответствующие графическому решению фазового уравнения для различных толщин пленок (a_0N), обозначены на рис. 11 и 12 вертикальными черточками. Аналогичным образом решается фазовое уравнение для квантовых состояний d -характера. На рис. 11 и 12 показано решение для верхних d_5 - и d_4 -состояний для пленок толщиной до двух и четырех монослоев соответственно.

Если нанести значения энергий, полученные при графическом решении фазового уравнения при различных толщинах пленки ($N = 1, 2, 3, \dots$), на экспериментальные зависимости энергий квантовых состояний от толщины (рис. 8 и 10), то получится хорошее соответствие с экспериментальными данными. На рис. 8 и 10 теоретические значения энергий квантовых состояний, полученные на основе графических решений фазового уравнения, показаны для sp -квантовых состояний горизонтальными черточками, соединенными прямыми линиями. Значения энергий квантовых состояний d_5 - и d_4 -характера показаны соответствующими ломаными линиями, расположенными в областях существования данных состояний в электронной структуре. Из сравнения теоретических и экспериментальных данных видно хорошее соответствие для квантовых состояний как sp -, так и d -характера.

Применение данной методики позволяет теоретически оценивать энергетические положения квантовых состояний для тонких и ультратонких пленок металлов с различной электронной и кристаллографической структурой в зависимости от соответствующих параметров электронной структуры материалов формируемой пленки и подложки, начиная уже с субмонослойных покрытий. При формировании пленок толщина пленки может быть оценена с точностью до нескольких десятых монослоя и контролируема исходя из наблюдаемого спектра квантовых состояний по их энергии и количеству. Для ультратонких пленок, когда зависимость от толщины изменений энергий квантовых состояний является ступенчатой, момент формирования сплошного равномерного покрытия с данной толщиной (выраженной в монослоях) определяется по максимуму интенсивности пиков соответствующих квантовых состояний.

Использование спектров квантовых состояний для определения толщины ультратонких пленок и анализ

зависимости энергий квантовых состояний от особенностей электронной структуры подложки и пленки могут быть распространены и на низкоразмерные структуры другого типа и различной размерности. Так, например, использование их при формировании квантовых полосок (в частности, на ступенчатых поверхностях монокристаллов [17]) позволяет определить размерные параметры данных квантовых полосок по двум направлениям — толщины и ширины, т.е. использовать уже эффекты двойного размерного квантования, каждое из которых по отдельности определяется закономерностями, описанными выше, а их совокупность может давать контролируемую модификацию свойств формируемых нанообъектов.

7. Заключение

В работе показано, каким образом происходят формирование электронного спектра квантовых состояний в квазидвумерных системах (тонких пленках благородных металлов) и модификация формируемых спектров квантовых состояний, т.е. изменение их энергетического положения в зависимости от величины размерного ограничения волновых функций (т.е. толщины формируемых слоев). Показаны необходимые условия формирования спектров квантовых состояний, а также представлены примеры различных систем, где формирование спектров квантовых состояний проявляется наглядным образом. Выявлены тенденции формирования спектров и закономерности соответствия между энергиями квантовых состояний и размерными параметрами системы. Показано, что при толщинах слоев менее шести-восьми монослоев изменения энергий квантовых состояний происходят ступенчатым образом. Каждой толщине соответствуют свои, вполне определенные энергии квантовых состояний. Этот факт может быть использован для прецизионной оценки толщины напыляемых слоев. С другой стороны, с помощью максимума интенсивности соответствующих квантовых состояний можно реализовать точную индикацию момента формирования сплошной, максимально совершенной пленки. Показана зависимость спектров квантовых состояний от особенностей электронной структуры как материала самой пленки, так и параметров электронной структуры подложки, наличия и положения локальной энергетической щели запрещенных состояний. Представлены различные модели оценки энергии квантовых состояний и показана применимость расширенной фазовой модели для ультратонких слоев металлов. Представленные закономерности формирования спектров квантовых состояний и их зависимость от толщин слоев, т.е. параметров размерного ограничения волновых функций в одном из координатных направлений, могут быть целиком использованы для других низкоразмерных систем, характеризующихся ограничением размеров как в одном, так и нескольких координатных направлениях. Использование

представленных закономерностей и понятий позволит более точно оценивать особенности электронной структуры формируемых низкоразмерных систем, а следовательно, и изменение их свойств при изменении их размеров.

Список литературы

- [1] T.-C. Chiang. *Surf. Sci. Rep.* **39**, 181 (2000).
- [2] F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J. Mankey, R.F. Willis. *Adv. Phys.* **47**, 511 (1998).
- [3] Z.Q. Qiu, N.V. Smith. *J. Phys.: Cond. Matter* **14**, R 169 (2002).
- [4] А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков. *Физика низкоразмерных систем*. Наука, СПб. (2001).
- [5] A. Varykhalov, A.M. Shikin, W. Gudat, P. Moras, C. Grazioli, C. Carbone. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 247 601 (2005).
- [6] A.M. Shikin, D.V. Vyalikh, Yu.S. Dedkov, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk, E. Weschke, G. Kaindl. *Phys. Rev. B* **62**, R 2303 (2000).
- [7] N.V. Smith. *Phys. Rev. B* **32**, 3549 (1985).
- [8] N.V. Smith, N.B. Brookes, Y. Chang, P.D. Johnson. *Phys. Rev. B* **49**, 332 (1994).
- [9] T. Miller, A. Samsavar, G.E. Franklin, T.-C. Chiang. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1404 (1988).
- [10] M.A. Miller, T. Miller, T.-C. Chiang. *Phys. Rev. B* **41**, 5214 (1990).
- [11] J.J. Paggel, T. Miller, T.-C. Chiang. *Science* **283**, 1709 (1999).
- [12] A.M. Shikin, D.V. Vyalikh, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk. *Surf. Sci.* **478**, 135 (2001).
- [13] A.M. Shikin, O. Rader, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk, W. Gudat. *Phys. Rev. B* **65**, 075 403 (2002).
- [14] A.M. Shikin, M.B. Visman, G.G. Vladimirov, V.K. Adamchuk, O. Rader. *Surf. Sci.* **600**, 2681 (2006).
- [15] J.E. Ortega, F.J. Himpsel, G.J. Mankey, R.F. Willis. *Phys. Rev. B* **47**, 1540 (1993).
- [16] M. Gruene, T. Pelzer, K. Wandelt, L.T. Steinberger. *J. Electr. Spectr. Relat. Phenom.* **98–99**, 121 (1999).
- [17] A.M. Shikin, A. Varykhalov, V.K. Adamchuk, A. Ionov, S.N. Bozhko, W. Gudat, O. Rader. *J. Electr. Spectr. Relat. Phenom.* **144–145**, 341 (2005).