УДК 531.7.08+519.21

ИНФОРМАТИВНОСТЬ ИЗОБРАЖЕНИЙ В ЗАДАЧЕ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ИЗМЕРЕНИЯ НА ТУННЕЛЬНОМ ЭЛЕКТРОННОМ МИКРОСКОПЕ

В. П. Манолов *), Ю. П. Пытьев

(кафедра компьютерных методов физики)

В линейном приближении исследована предельная разрешающая способность измерительно-вычислительной системы на базе сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Определена последовательность классов поверхностей возрастающей размерности, в каждом из которых поверхность восстанавливается с максимальной точностью по результатам измерений на СТМ. Получены зависимости ошибки восстановления координат поверхности от отношения шум/сигнал. Найдены условия оптимальности дискретизации измерений на СТМ, обеспечивающей предельно точное восстановление измеренной поверхности.

1. Введение

Сканирующий туннельный электронный микроскоп (СТМ) был создан в Цюрихском отделении IBM в 1981 г. группой БРГВ [1]. С тех пор он себя зарекомендовал как мощное средство для изучения поверхностей.

Рассмотрим принцип действия СТМ стандартной конфигурации (рис. 1). Между иглой с очень малым радиусом кривизны острия и исследуемым образцом подано напряжение V и протекает туннельный ток I_t. Игла может перемещаться относительно поверхности в трех направлениях. Если конец иглы движется вдоль исследуемой поверхности, из-за ее неровностей будет меняться туннельный ток $I_t=I_t(x, y)$. На практике чаще используется так называемый режим линии постоянного тока, при котором игла движется в плоскости $0xy$ и по направлению $0z$ так, что значение туннельного тока остается постоянным: $I_t=\text{const}$. При этом регистрируются z-координаты иглы $\tilde{\xi}$ над некоторой сеткой на плоскости $0xy$. Траектория, описываемая концом иглы, называется линией постоянного тока. В работе рассматривается задача оценивания реальной поверхности образца $\xi(x, y)$, $0\leqslant x\leqslant x_0$, $0\leqslant y\leqslant y_0$ по результатам измерений на туннельном микроскопе либо значений I_t (задача (*)), либо $\tilde{\xi}$ (задача (**)).

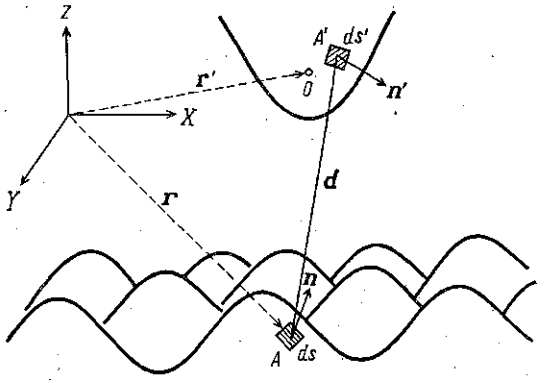

Рис. 1. Схема стандартной конфигурации СТМ

*) Болгария.

2. Модель измерения

Решение задачи восстановления реальной поверхности образца по результатам измерений на СТМ в общем виде затруднительно, так как требует решения обратной задачи для системы трехмерных уравнений Шрёдингера и Пуассона. Поэтому после создания СТМ были рассмотрены упрощенные модели задачи. При решении задачи моделирования СТМ в рамках приближения свободных электронов была использована теория рассеяния [2, 3].

В настоящей работе применяется квазиклассическое приближение. Предположим, что между иглой и поверхностью образца поддерживается постоянный потенциал V. Для металлов при нормальных температурах можно считать, что все уровни в зоне проводимости ниже E_f будут заполненными, а выше — пустыми. Из-за этого туннельный ток формируется электронами, находящимися в тонкой зоне ниже E_f толщиной eV.

Рассмотрим ситуацию, показанную на рис. 1. Обозначим через $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$ векторы нормалей к двум поверхностям в точках соответственно A и A', $\mathbf{d}$ — вектор, соединяющий A и A'; φ и ϑ — углы между $\mathbf{d}$ и $\mathbf{n}$, $\mathbf{d}$ и $\mathbf{n}'$ соответственно.

Пусть $k_0=(2m\Phi)^{0,5}/\hbar$, где Φ — высота барьера с учетом поправки потенциала сил зеркального отражения [4]. В квазиклассическом приближении (ККП), когда игла находится достаточно далеко от исследуемой поверхности,

$$|\mathbf{d}| \geqslant 10k_0^{-1}, \tag{1}$$

будем считать, что туннельный ток в системе игла—образец равняется сумме токов между элементарными площадками ds и ds', когда A, A' пробегают по всей поверхности иглы и образца. Вероятность туннелирования в приближении ВКБ дается выражением [5]

$$p_t=\exp\{-2k_0|\mathbf{d}|\}.$$

В модели ККП для плотности туннельного тока j_t, протекающего между площадками ds и ds', получаем

$$\mathbf{j}_t=I_0\cdot\mathbf{n}_d\cdot\exp\{-2k_0|\mathbf{d}|\}, \tag{2}$$

где

$$I_0=\int\limits_{E_f-eV}^{E_f}\nu_s(\varepsilon)\,\nu_t(\varepsilon)\,i(\varepsilon)\,d\varepsilon \tag{3}$$

и ν_s, ν_t обозначают поверхностные плотности электронных состояний при энергии ε соответственно в точках A и A'. Выражения (2), (3) написаны в предположении о независимости величины $i(\varepsilon)$ от угла выхода электрона.

Чтобы вычислить весь туннельный ток перехода, надо проинтегрировать (2) по поверхностям иглы и образца для заданного положения иглы. При этом для упрощения I_0 и k_0 будем считать константами.

Пусть z-проекция среднего расстояния вершины иглы до исследуемого участка образца равняется D_0. Напишем выражение для полного туннельного тока в принятой модели:

$$I_t(\mathbf{r}')=I_0\int\limits_S\int\limits_{S'}ds\cdot ds'\cdot\cos\varphi\cdot\cos\vartheta\cdot\exp\{-2k_0(\mathbf{r})|\mathbf{r}_t+\mathbf{r}'-\mathbf{r}|\}/|\mathbf{r}_t+\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2; \tag{4}$$

здесь S — область образца, S' — область иглы, $\mathbf{r}$ — координаты площадки образца ds; $\mathbf{r}'$ — координаты центра иглы O; $\mathbf{r}_t$ — координаты площадки ds' на игле относительно ее центра.

Выражение (4) можно преобразовать к виду

$$I_t(\mathbf{r}') = I_0 \iint\limits_{-\infty}^{\infty} C_1 \frac{D_0 + R_0 + \nabla(\xi(\rho)) \cdot (\rho - \rho')}{d_m^2 (d_m + R_0)} \exp\{-2k_0(\rho') d_m\} dx\, dy, \qquad (5)$$

где

$$d_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \{[D_0 + R_0 - \xi(\rho) + \tilde{\xi}(\rho')]^2 + (\rho' - \rho)^2\}^{1/2} - R_0,$$

$$\rho = (x, y), \ \rho' = (x', y').$$

Здесь вершина иглы моделируется полусферой радиуса R_0, $C_1(\rho, \rho', D_0)$ зависит от конкретной используемой иглы, слабо меняясь в области, где $\exp\{\cdot\}$ существенно отличается от 0.

Выражение (5) определяет модель измерения туннельного тока [*].

Дальше исследуем работу прибора для наглядности в двумерном случае. Двумерный вариант равенства (5) имеет вид

$$I_t(x') = C_d \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{D_0 + R + (x - x')(d\xi/dx)}{(R + d_m)\, d_m} \exp\{-2k_0 d_m\} dx, \qquad (6)$$

$$d_m(x, x') = \{[D_0 + R - \xi(x) + \xi(x')]^2 + (x - x')^2\}^{1/2} - R.$$

При сравнении результатов этой модели с результатами [4] для небольших ξ и линии постоянного тока были обнаружены сходные зависимости отношений максимальных значений $\tilde{\xi}$ и ξ от R_0, D_0. При сравнении с экспериментальными данными группы БРГВ и [2] для иглы из вольфрама и поверхности из золота (100) (2×1), (3×1) наблюдается близость модельных (5) *) и экспериментальных максимальных значений $\tilde{\xi}$:

	Модель	Эксперимент
(2×1)	0,38 Å	0,45 Å
(3×1)	1,22 Å	1,40 Å

Приведенные результаты свидетельствуют о достаточно хорошем согласии модели с экспериментом, что позволяет использовать ее для исследования информативности измерения на СТМ.

Рассмотрим теперь случай, когда исследуемая поверхность мало отличается от плоскости, так что можно разложить $\exp\{\cdot\}$ в (6) в ряд по степеням $(\xi - \tilde{\xi})$ и учесть только линейный член. Это приближение справедливо для образца, шероховатость которого удовлетворяет условию

$$|\xi| \ll k_0^{-1}. \qquad (7)$$

Введем обозначение $d_{m0}(x, x') = d_m|_{\xi = \tilde{\xi} = 0}$. Если выполняются условия (1) и (7), получим

$$I_t(x') = C_{d1} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{(D_0 + R) \exp\{-2k_0 d_{m0}\}}{(d_{m0} + R)\, d_{m0}} \{1 + K(x - x') \cdot \xi(x)\} dx, \qquad (8)$$

где K — сложное рациональное выражение.

*) Для поверхности золота при этом использована модель [3].

Если обратная связь идеальна, она должна путем изменения $\tilde{\xi}$ обеспечить постоянство тока вдоль траектории иглы:

$$I_t(x') = I_{t0} = I_t|_{\xi=\tilde{\xi}=0}. \tag{9}$$

Из (6) и (9) получается зависимость $\tilde{\xi}(x') = f(\xi(x), x')$ при условиях (1), (7), которая соответствует модели измерения (**):

$$\tilde{\xi}(x') = C_{d2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{(D_0 + R)\exp\{-2k_0 d_{m0}\}}{(d_{m0} + R)\, d_{m0}} \cdot K(x - x') \cdot \xi(x)\, dx. \tag{10}$$

Зависимости (8), (10) — линейные интегральные уравнения с ядрами, мало отличающимися от $\mathrm{const}\cdot\exp\{-kd_{m0}\}$. Будем считать, что подынтегральная функция отлична от нуля в области от $-L_e/2$ до $L_e/2$, где $L_e \cong 3[(R+D_0)/k_0]^{0,5}$. Как принято в технике, L_e будем называть шириной аппаратной функции.

Следуя работе [5], рассмотрим задачу о нахождении $\xi(\cdot)$ при известном $Y_i(\cdot)$ (I_t или $\tilde{\xi}$). Схема измерения записывается в виде

$$y_i(x') = b_i + \int\limits_{-L_e/2}^{L_e/2} dx\, A_i(x, x') \cdot \xi(x) + \nu(x'), \quad i = 1, 2, \tag{11}$$

$$A_1(x, x') = C_{d1} \frac{(D_0 + R)\exp\{-k_0 d_{m0}\}}{(d_{m0} + R)\, d_{m0}} K(x - x'), \quad b_1 = I_{t0},$$

$$A_2(x, x') = C_{d2} \frac{(D_0 + R)\exp\{-k_0 d_{m0}\}}{(d_{m0} + R)\, d_{m0}} K(x - x'), \quad b_2 = 0.$$

Измерение проводится с ошибкой ν, иногда весьма значительной, возникающей из-за несовершенства двигателей иглы, шума усилителей туннельного тока, температурного дрейфа и случайных вибраций, погрешности дискретизации y_i и x'.

К этому нужно добавить неточность формул (8), (10) вследствие принятых приближений.

Как правило, исследователь может оценить погрешность измерения на своей конкретной экспериментальной установке, и мы будем считать ее известной и заданной посредством ковариационного оператора Σ. Идея определения информативности измерения на СТМ сводится к выяснению того, насколько последнее позволяет уточнить априорные данные об исследуемой поверхности. Априорная информация о поверхности может быть разного типа. Зададим модель поверхности в виде случайной функции с известными первыми двумя моментами: средним значением $E\xi = 0$ и ковариационным оператором F. Для нашей цели ограничимся моделью с диагональным ковариационным оператором $F = \varphi^2 I$, согласно которой значения ξ в соседних точках некоррелированы. При этом не вводится никаких априорных ограничений на гладкость поверхности. Для моделирования измерений на СТМ положим $\Sigma = \sigma^2 I$. Таким образом, мы задали модель $[A, F, \Sigma]$ [6] схемы измерения (11).

Дискретный вариант схемы (11) имеет вид равенства

$$y = A\xi + b + \nu, \tag{12}$$

где $y, b, \nu \in \mathfrak{R}_n$, $\xi \in \mathfrak{R}_N$, A — матрица $n \times N$. Для заданного шага дискретизации Δ и определенной длины L строки сканирования $N = (L + L_e)/\Delta$; $n = L/\Delta$.

Размерность области измерения n меньше размерности N просканированной области, поэтому точное восстановление ξ в тех же точках невозможно даже при погрешности $\nu=0$. В таких случаях иногда прибегают к восстановлению поверхности в более редких точках. Мы рассмотрим вопрос о предельных возможностях восстановления по данным измерения на СТМ. Речь идет о характеристиках поверхности, которые могут быть восстановлены с гарантированной точностью по результатам измерений. Для этого обратимся к понятию базиса модели [7]. Так называется ортонормированный базис $\{e_1, ..., e_N\}$ пространства $\mathfrak{R}_N \ni \xi$, состоящий из собственных векторов оператора $A^*\Sigma^{-1}A+F^{-1}$, определяющего оценку среднеквадратичной погрешности,

$$(A^*\Sigma^{-1}A+F^{-1})\,e_p=\delta_p^2 e_p, \quad p=1, \ldots, N, \tag{13}$$

$$\delta_1^2 \geqslant \delta_2^2 \geqslant \ldots \geqslant \delta_N^2. \tag{14}$$

Этот базис обладает следующим экстремальным свойством: в каждом из линейных пространств

$$\mathfrak{L}(e_1) \subset \mathfrak{L}(e_1, e_2) \subset \ldots \subset \mathfrak{L}(e_1, e_2, \ldots, e_R)=\mathfrak{R}_N \tag{15}$$

шум будет не больше, чем в любом другом подпространстве $\mathfrak{R}_N$ той же или большей размерности *). Иначе говоря, если Π_k — ортогональный проектор на $\mathfrak{L}(e_1, ..., e_k)$, то «$k$-мерная часть» $\Pi_k\xi$ поверхности ξ может быть восстановлена точнее любой другой «k-мерной части» ξ [7].

Определим искомые характеристики поверхности ξ в виде $U\xi$, где U — линейный оператор, задающий преобразование поверхности ξ как вектора из $\mathfrak{R}_N$. Оператор R' и вектор b', минимизирующие среднеквадратичную погрешность $E\|R(y-b)-U\xi\|^2$, даются равенствами [7]

$$R'=UFA^*(AFA^*+\Sigma)^{-1}, \quad b'=0. \tag{16}$$

Оцениванию $U\xi$ посредством $R'y$ будет сопутствовать среднеквадратичная погрешность

$$E\,\|R'y-U\xi\|^2=\operatorname{tr}(UF-UFA^*(AFA^*+\Sigma)^{-1}AFU^*)=\operatorname{tr}(U(A^*\Sigma^{-1}A+ \\ +F^{-1})^{-1}U^*), \tag{17}$$

и задача состоит в том, чтобы оценить как можно точнее возможно более «полную часть ξ», выбрав должным образом оператор U. Положив $U \equiv \Pi_k$, мы гарантируем наиболее точное восстановление «k-мерной части» поверхности $\Pi_k\xi$ по сравнению с любой ее «k-мерной частью». Так как

$$E\,\|\Pi_k(FA^*(AFA^*+\Sigma)^{-1}y-\xi)\|^2=\sum_{p=1}^{k}\delta_p^{-2}, \tag{18}$$

то вопрос о выборе размерности k может быть решен следующим образом. Поскольку в рассматриваемой модели поверхности $F=\varphi^2\cdot I=\operatorname{diag}(\varphi^2, ..., \varphi^2)$, где φ^2 — среднеквадратичное уклонение координат искомой поверхности от плоскости $\xi=0$, то в равенстве (13)

$$\delta_p^2=\varphi^{-2}+\alpha_p^2/\sigma^2, \quad k=1, \ldots, N,$$

где $\alpha_1^2 \geqslant \ldots \geqslant \alpha_N^2$ — собственные значения оператора A^*A, и соответственно в (18)

*) $\mathfrak{L}(e_1 \ldots e_k)$ — линейная оболочка векторов $e_1 \ldots e_k$.

$$\sum_{p=1}^{k} \delta_p^{-2} = \sum_{p=1}^{k} \varphi^2 \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{\beta^2 + \alpha_p^2}\right). \tag{19}$$

Здесь $\sum_{p=1}^{k} \varphi^2 = k\varphi^2$ — среднеквадратичная погрешность, отвечающая оцениванию $\Pi_k\xi$ плоскостью $\xi=0$, вычитаемое в (19) определяет увеличение точности оценивания, обусловленное измерениями на СТМ, $\beta^2=\sigma^2/\varphi^2$ — отношение «шум/сигнал». При этом каждое слагаемое δ_p^{-2} равно среднеквадратичной ошибке оценивания координаты (e_p, ξ) восстанавливаемой части $\Pi_k\xi = \sum_{1}^{k} e_p (e_p, \xi)$ поверхности. Поскольку $\alpha^2/(\beta^2+\alpha^2)$ — монотонно возрастающая функция от $\alpha^2 \geqslant 0$, с увеличением p точность оценивания p-й координаты (e_p, ξ) уменьшается и если считать, что эффективно оцениваются лишь те координаты, для которых $\alpha_p^2/(\beta^2 + \alpha_p^2) \geqslant \mu$, $0 < \mu < 1$, то размерность k проектора Π_k определяется из условия

$$k = \max (p,\ \alpha_p^2 \geqslant \mu (1-\mu)^{-1} \beta^2).$$

Для примера рассмотрим результаты при $k_0=0{,}5$ Å^{-1}, $R=2$ Å, $D_0=4$ Å. Выберем $\Delta=1$ Å, $N=45$. Дискретизованная аппаратная функция, определенная в выражении (11), показана на рис. 2. На рис. 3, *б* приведен график зависимости $h=1-\alpha_p^2/(\beta^2+\alpha_p^2)$ от p для различных значений отношения «шум/сигнал» $\beta^2=\sigma^2/\varphi^2$. Величина $1-\alpha_p^2(\beta^2+\alpha_p^2)$ равна относительной «погрешности оценивания p-й гармоники» (ξ, e_p) поверхности ξ при значении отношения «шум/сигнал», равном β^2. Эти зависимости позволяют легко оценить реальную разрешающую способность СТМ. Например, с относительной погрешностью «не хуже 0,5» могут быть восстановлены 10 гармоник, если $\beta^2=0{,}0025$, а при $\beta^2=0{,}25$ — всего лишь 5.

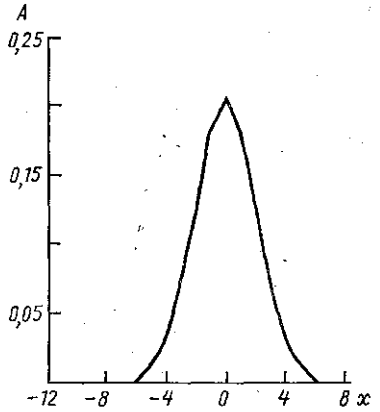

Рис. 2. Нормированная аппаратная функция $A(x, x') = A(x-x')$

Разумеется, этот результат зависит от характера дискретизации данных сканирования. На рис. 3, *а* приведены те же результаты для другой плотности точек сканирования, соответствующей шагу измерений $\Delta=1{,}5$ Å ($N=30$). Нетрудно заметить различия двух графиков. Но различие между результатами, отвечающими шагам 1 Å и 0,5 Å, несущественно, и это говорит о том, что при шаге дискретизации $\Delta=1$ Å графики на рис. 3, *б* характеризуют предельные свойства принятой модели СТМ.

В вычислительном эксперименте задавались произвольные формы поверхности ξ и разные уровни измерительной погрешности. Значения

$\tilde{\xi}$ и I_t находились из зависимостей (6), шум учитывался путем добавления нормально распределенной случайной величины.

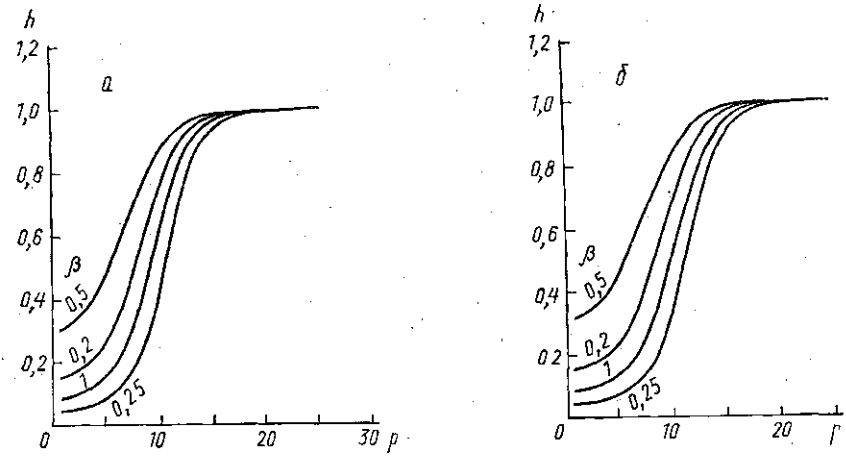

Рис. 3. Семейства зависимостей погрешности восстановления координат поверхности h от p для различных отношений шум/сигнал $\beta=0{,}05$, 0,1; 0,2 и 0,5 при шаге сканирования 1,5 Å (*а*) и 1,0 Å (*б*)

На рис. 4 показаны результаты, иллюстрирующие предельные возможности измерительно-вычислительной системы на базе СТМ при вос-

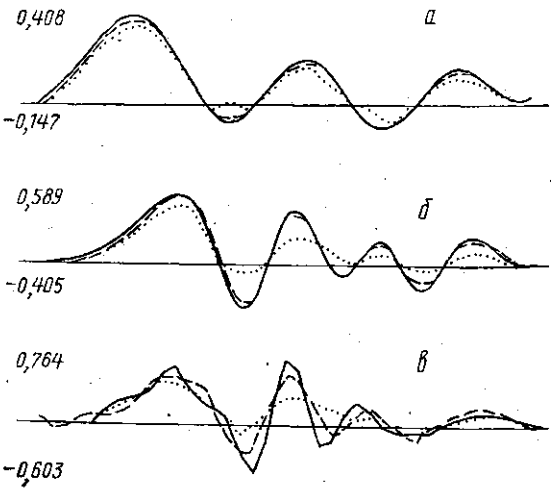

Рис. 4. Восстановление поверхностей, принадлежащих линейной оболочке первых 5 (*а*); первых 10 (*б*); первых 15 (*в*) векторов базиса модели. Сплошной линией изображена задаваемая поверхность, точечной — линия постоянного тока в нелинейной модели (6) с добавлением шума ($\beta=0{,}1$), штриховой — восстановленная поверхность

становлении поверхностей, состоящих из линейных комбинаций первых 5 (рис. 4, *а*), 10 (4, *б*), 15 (4, *в*) векторов базиса модели. Отношение шум/сигнал задавалось одинаково: $\beta=0{,}1$.

При известном отношении шум/сигнал β и заданной исследователем величине относительной погрешности восстановленного сигнала h_0 реконструированная часть поверхности будет состоять из первых k векторов базиса модели, где k удовлетворяет условию

$$\sum_{i=1}^{k} 1-\alpha_i^2/(\beta^2+\alpha^2) \leqslant h_0 < \sum_{i=1}^{k+1} 1-\alpha_{i+1}^2/(\beta^2+\alpha^2). \qquad (20)$$

ЛИТЕРАТУРА

[1] Binning G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E.//J. Appl. Phys. Lett. 1982. 40. P. 178; Phys. Rev. Lett. 1982. 49. P. 57. [2] Garsia N., Ocal C., Flores F.//Phys. Rev. Lett. 1983. 50. P. 2002. [3] Stoll E., Baratoff A., Selloni A., Carnevali P.//J. Phys. C.: Solid State Phys. 1984. 17. P. 3073. [4] Tersoff J., Hamann D. R.//Phys. Rev. Lett. 1983. 50. P. 1998. [5] Туннельные явления в твердых телах/Под ред. Э. Бурштейна, С. Лундквиста. М., 1973. [6] Пытьев Ю. П. Математические методы интерпретации эксперимента. М., 1988. [7] Пытьев Ю. П. Методы анализа и интерпретации эксперимента. М., 1990.

Поступила в редакцию
03.02.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1993. Т. 34, № 6

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.17

МНОГОСТУПЕНЧАТАЯ ЭМИССИЯ γ-КВАНТОВ В РЕАКЦИИ ЗАХВАТА НЕЙТРОНА ЯДРОМ ПРИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ

Ф. А. Живописцев, В. А. Иванов, Хурэлсух Сэр-Одын *)

(НИИЯФ)

Обсуждаются возможности описания неравновесного γ-спектра в реакции (n, γ) при $\mathscr{E}_n = 14{,}1$ МэВ в рамках квантовой модели статистических многоступенчатых компаунд-процессов (СМКП) и статистических многоступенчатых прямых процессов (СМПП). Показано, что можно достигнуть согласованного описания экспериментальных данных для реакций (n, γ) при $\mathscr{E}_n = 14{,}1$ МэВ на ядрах ^{93}Nb, ^{133}Cs при учете вкладов 1СПП, 2 СПП, СМПК и равновесной γ-эмиссии.

1. Введение

Теоретическое исследование неравновесного γ-спектра, полученного в реакции (n, γ) при средних энергиях ($\mathscr{E}_n > 10$ МэВ), в ряде работ [1—3] проводилось в рамках феноменологической экситонной модели (ЭМ) предравновесного распада. Однако даже в случае удовлетворительного количественного описания экспериментальных данных в рамках ЭМ вопрос о ее физической интерпретации в большой степени остается открытым, поскольку ЭМ присущи следующие основные недостатки [4]:

1) неопределенность величины единого усредненного квадрата матричного элемента внутриядерного перехода ($\overline{V}^2$) (свободный параметр) и плотности одночастичных состояний (g) при одновременном рассмотрении статистических многоступенчатых прямых процессов (СМПП) и компаунд-процессов (СМКП);

2) некорректное применение принципа детального баланса, использование ненаблюдаемой величины сечения обратной реакции возбужденного ядра;

3) невозможность последовательного учета одноступенчатой прямой реакции, отсюда и неопределенность подгоняемого под эксперимент начального числа экситонов (N_0), в частности, для реакции (n, γ) $N_0 = 1$ либо 3. Выбор $N_0 = 1$ противоречит понятию сечения поглощения, определяемого через мнимую часть оптического потенциала. Поэтому ЭМ в настоящее время служит в основном для ориентировки и

*) Монголия.