

STM 针尖和外电场在 Si(111)- 7×7 表面 单原子操纵中的作用*

李群祥¹⁾²⁾ 杨金龙¹⁾²⁾ 丁长庚²⁾ 汪克林²⁾ 李家明³⁾⁴⁾

¹⁾(中国科学技术大学选键化学开放实验室, 合肥 230026)

²⁾(中国科学技术大学基础物理中心, 合肥 230026)

³⁾(清华大学单原子分子测控科学中心, 北京 100084)

⁴⁾(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1998 年 10 月 26 日收到)

利用第一性原理的离散变分局域密度泛函方法, 采用团簇模型($\text{Si}_{34}\text{H}_{36}\text{-W}_{11}$)来模拟 STM 操纵 Si(111)- 7×7 表面顶角吸附原子的过程. 通过分析在进行原子操纵过程中体系的能量与电子云密度分布来研究针尖和外电场的作用. 结果表明, 当针尖与样品间距离较近时, 利用两者间有较强的相互作用, 能有效地降低脱出能的能垒高度. 外电场对体系脱出能的影响与其大小及极性有关, 当样品上所加正偏压增强时, 脱出能曲线高度单调下降, 而外电场极性为负时, 反而稍有增高. 仅考虑针尖和样品之间的静态电子相互作用及静电场的作用, 尚不能使被操纵原子脱离样品表面. 最后讨论了在 Si(111)- 7×7 表面上进行原子操纵的其他机理.

PACC: 6116P; 6820

1 引 言

自 1982 年 Binnig 和 Rohrer^[1]研制出世界上第一台扫描隧道显微镜 (STM) 以来, 它已被广泛地应用于研究各种样品表面的形貌和电子结构. 近年来 STM 还成为对各种不同表面进行原子加工的唯一工具^[2,3], 其中在硅表面的原子操纵已引起了人们的极大兴趣. 众所周知, 硅是半导体工业和微电子工业的基础, 若能够对其表面进行原子操纵, 乃至生产所需的原子器件和人工结构, 其意义是显而易见的.

原子操纵根据被操纵原子的运动方向可分为两类情况, 即平行样品表面的推动 (拖动) 和垂直于样品表面的搬迁. 感兴趣的是 Si(111)- 7×7 表面自身原子的后一种操纵方式, 在实验上常用的工作方式是将针尖固定在被操纵原子上方的某一高度, 利用针尖与样品间的相互作用, 并在两电极之间加偏压或脉冲, 实现原子在垂直该样品方向的操纵. Lyo 等人^[4]将钨针尖置于 Si(111)- 7×7 表面上方约 0.3 nm 处, 在样品上加 1—3 V 的正

* 中国科学院九五重大科学基金, 国家攀登计划及国家自然科学基金 (批准号: 19604016) 资助的课题.

E-mail: Liqun@mail.ustc.edu.cn.

电压脉冲,实现了在该表面拔出单个和多个硅原子到钨针尖上去.当针尖和样品 Si(111)-7×7 表面之间距离为约 1 nm,通过外加正负电压脉冲(约 6 V),Kobayashi^[5], Uchida^[6]和 Huang^[7]等人实现了从样品拔出单个和多个硅原子.其研究结果表明原子操纵过程为被操纵原子先跑到针尖上,然后在某种条件下,离开针尖表面重新回到样品表面.庞世瑾等人^[8,9]利用小偏压大隧道电流成功地对 Si(111)-7×7 表面的多原子操纵.从这些原子操纵的实验条件看,针尖和外电场在实现原子操纵过程中起着很重要的作用.但各个实验条件不同,如针尖和样品间的距离,外加偏压的大小和方向等,所以针尖和电场在原子操纵中的具体机理仍是一个值得深入探讨的重要课题.

与此同时,人们针对原子操纵机理作了一些理论工作.Lang^[10]利用凝胶模型计算了单个 Si 吸附原子在两个近邻电极间的运动情况.先计算电子在两电极间的势能,再求得原子处在这两电极间时原子核的作用力,从而得到势能曲线,其计算结果表明,势能降低的最重要原因是由于两电极接近时的化学相互作用,同时外加正偏压有助于势垒进一步下降.吸附原子在二电极间的运动本身所带电荷与其在二电极间所处的位置密切相关,净电荷量不超过十分之几个单位电荷.Kabayashi^[11,12]等人基于凝胶模型,利用 Recursion-Transfer Matrix 方法计算了铝针尖与 Si(111)表面间的表面原子和单个吸附硅原子的转移过程.当针尖与样品距离较大时(约 0.6 nm),正负极性的外电场能单调地降低体系的能垒.但针尖与样品距离较近时(约 0.4 nm),只有正偏压的外电场能使单调降低势垒高度,而小的负偏压不但不能使之降低反而增高.值得指出的是,文献中绝大部分理论工作都集中于吸附原子在样品与针尖两电极间的转移机理.虽然实验上早就实现了 Si(111)-7×7 表面的单原子操纵,但由于体系的复杂性,至今还没有较好的理论解释,其操纵机理需要进一步的深入研究.

本文着重讨论在 Si(111)-7×7 表面垂直方向进行原子搬迁过程中针尖与外电场所起的作用.对此,我们采用离散变分法,用团簇模型来模拟钨针尖与 Si(111)-7×7 表面构成的体系,计算了拔出单个顶角吸附硅原子过程中体系能量和电子云分布.给出了主要的计算结果,并对 Si 表面的单原子操作机理加以讨论.

2 计算模型与方法

对 Si(111)-7×7 表面的几何构型描述已有好几种模型,本文采用已被公认的 DAS 模型^[13],由于单胞太大,尚无法计算,在此取一团簇($\text{Si}_{36}\text{H}_{34}$)来模拟该表面.具体团簇模型是这样构造的,以顶角吸附硅原子(即被操纵原子)为圆心,取出一个半径约为 14 Bohr 的半球形的硅原子团簇,其中团簇周边被打断的每一个硅键用一个氢原子来饱和, Si—H 键长取为 0.145 nm,为 Si 和 H 原子共价半径之和.一般地,较远的周围原子对被拔出原子的影响不是太大,而且外电场和隧道电流效应也局限于一个小的区域,这样采用团簇模型就可以较好地描述实际的样品表面.而钨针尖取 W(111)面的 W_{11} 团簇模型来模拟,其中针尖顶端为单个钨原子,对此针尖模型我们已作过较详细的理论研究^[14].将针尖置于样品被拔硅原子正上方,可以很方便地改变彼此间的距离,整个计算模型如图 1.图中上半部分的大空心球为针尖钨原子,下边小实心黑球为硅表面原子,单个大一点的黑球是顶角

吸附硅原子(即被操纵原子),而小空心球是用来饱和断键的氢原子.体系具有较低的Cs点群对称性,一共有49类不等价原子,其中有22类不等价硅原子,19类氢原子,8类钨原子.

采用的理论方法是离散变分局域密度泛函方法(DV-LDF),它已被广泛地应用于团簇物理学中电子结构的研究,是分子轨道理论计算方法的一种,具有密度泛函理论的优越性和离散变分数值计算的高效性^[15-17].这里仅给出本文的计算特点.

(1) 体系中电子遵循 Kohn-Sham 方程

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + V_{\text{ex-corr}}(r) \right] \psi_i = \epsilon_i \psi_i. \quad (1)$$

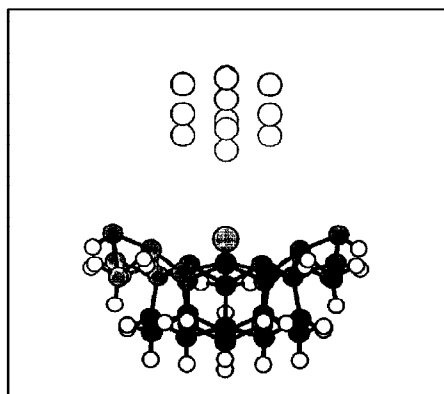


图1 计算团簇模型 上半部分为针尖(W₁₁),下边是Si(111)-7×7表面(Si₃₆H₃₄),小的实心黑球为硅表面原子,单个大一点的黑球是顶端吸附硅原子(即被操纵原子),而小空心球为用来饱和断键的氢原子

哈密顿量第一项为动能,第二项为外加偏压产生的电势及核所产生的Coulomb势,第三项为电子间的Coulomb势,第四项为交换关联势.外电势以匀强电场的形式加入到哈密顿量中,通过自洽计算可得不同偏压情况下的本征态(ψ_i)与本征值(ϵ_i).

(2) 团簇的结合能(E_b)定义为团簇总能量与团簇中原子处于的自由原子状态时能量总和之差,可以通过计算结合能来研究原子操纵过程中体系能量的相对变化.

(3) 为了更加清楚地描述体系的能量随被操纵原子高度的变化,可定义一个原子脱出能

$$E_{\text{esc}}(Z) = E_b(Z) - E_b(0). \quad (2)$$

式中, $E_b(Z)$ 和 $E_b(0)$ 分别为表面被操纵原子

离开表面高度为 Z 时和该原子处于表面平衡位置时体系的结合能,而脱出能的正负表示为被操纵原子从平衡位置拉至离表面距离为 Z 时,体系吸收或放出的能量.

(4) 在计算过程中作了冻结芯轨道处理,其中钨原子取它的5d,6s价轨道为基函数,硅原子取3s,3p和3d轨道,而用来饱和的氢原子取1s轨道为基函数.电荷分布的初值输入分别取 $5d^{5.0}6s^{1.0}$, $3s^{2.0}3p^{1.9}3d^{0.1}$ 和 $1s^{1.0}$.电子的本征态 ψ_i 和本征值 ϵ_i 的自洽迭代求解过程,是以体系电荷密度是否收敛为判据,在计算过程中每个原子的抽样点数目为600,自洽计算中的收敛精度优于 $10^{-5} e$.

3 计算结果与讨论

为了让计算模型与实际情形更接近些,首先对没有针尖情形下样品团簇的几何结构进行了优化.在优化过程中,将用来饱和的氢原子及与之相连的硅原子的几何位置全部固定下来,而其他剩余的硅原子可以自由跑动.优化结果表明,用Dmol程序包^[18]优化后的几何结构与原始的结构相差不大,两者比较,原子挪动的最大位移约为0.01 nm.以后的

所有计算除改变被操纵原子的高度外,其他原子的坐标均保持此构型.即没有考虑该原子离开硅表面不同高度时样品表面原子的弛豫.

首先计算 Si(111)-7×7 表示顶角吸附原子拔离表面不同高度时体系的结合能,再按前面定义的脱出能,可以得到在原子操纵过程中体系能量随被操纵原子高度的变化情况.图 2 中曲线 A 给出了没有针尖情形下,脱出能 E_{esc} 与被拔原子离开硅表面高度的变化情况,此时将顶角吸附硅原子完全脱离样品表面需要吸收约 6.12 eV 的能量.而图 2 中曲线 B 和 C 是指有针尖时,针尖与样品距离分别为 12 和 9 Bohr,脱出能随被操纵原子离开样品表面距离的变化.这里针尖与样品间的距离定义为被操纵原子处于表面平衡位置与针尖顶端钨原子间的距离.从图中可知,当针尖位于被拔原子正上方 12 和 9 Bohr 时,脱出能曲线高度分别为 3.85 和 1.30 eV. Kobayashi 等人^[12]利

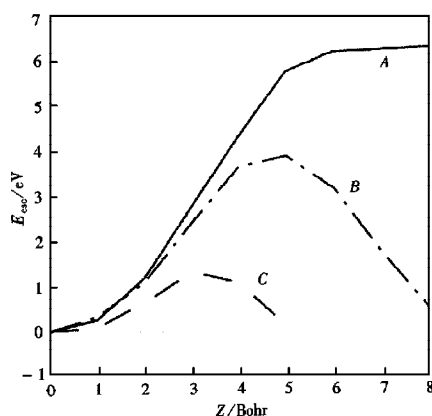


图 2 体系脱出能 (E_{esc}) 与被操纵原子拔离表面不同高度 (Z) 的关系曲线. 曲线 A 为没有针尖的情形, 曲线 B, C 表示针尖与样品表面间距离分别为 12 和 9 Bohr 情形

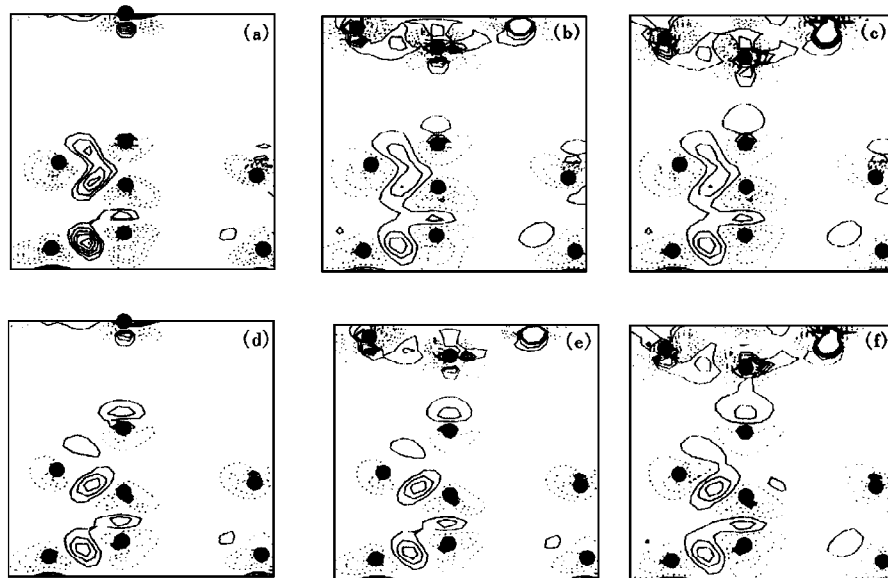


图 3 体系的电荷密度差分图. (a), (b) 和 (c) 表示被操纵原子处于平衡位置, (d), (e) 和 (f) 表示被操纵原子离开表面 2 Bohr, 针尖与样品间距离分别为 12, 9 和 8 Bohr

用 Recursion-Transfer Matrix 方法计算得到的结果是针尖与样品距离 11 和 8 Bohr 时体系的激活势垒高度分别为 3.6 和 1.3 eV. 两者的数值结果还是相当吻合的, 但值得指出的

是,除两者计算方法不同外,针尖的成分与模型也不相同,我们的团簇模型是顶端为单个钨原子的针尖,而后者是用凝胶电极上吸附 3 个铝原子的针尖进行计算.比较没有针尖时的曲线 A 与有针尖时的曲线 B, C 这两种情况,计算结果表明,由于针尖的影响,脱出能曲线高度可以显著降低,而且随着针尖与样品距离的减小,被操纵原子脱离硅表面所需吸收的能量单调减小.这也是 Lyo^[4]和庞世瑾等人^[8,9]利用针尖与样品表面距离较近时实现 Si(111)- 7×7 表面单原子和多原子操纵的机理之一.

图 1 结果同时表明,若单纯依靠改变针尖与样品的距离并不能让被拔硅原子自动地脱离 Si(111)- 7×7 表面,这与金属表面的原子操纵情形大不一样. Koetter^[19,20]和王福合^[21]等人在研究了钨针尖与铝表面间的原子操纵问题.他们的研究结论表明,当针尖与样品间距离较近时,从 Al(111)表面拔出一个铝原子的势垒消失,即被操纵原子在针尖的作用下自动离开表面跑向针尖.其原因是针尖与样品较近时,两者间形成较强的化学键,这样只需利用针尖效应就可以实现在 Al(111)表面的单原子操纵.造成这种差异主要原因是金属和半导体原子间形成的化学键不同,一个为金属键,另一个为共价键.与金属表面相比,半导体表面的原子操纵有一些不同的特点:操纵硅原子需要切断三个较强的共价键,难度较大;半导体的隧道电流较小.但 Si(111)- 7×7 表面相当稳定,可以在室温下进行原子操纵,同时加工后的原子结构在室温下稳定.理论计算结果表明,仅靠针尖与样品间的相互作用不足以切断该原子与表面原子间三个较强的化学键,这与已有的实验和理论结果一致,也说明在半导体表面进行原子操纵要比金属表面的原子加工难得多,其操纵机理也更复杂些.

为了更清楚地看出针尖与 Si(111)- 7×7 表面的相互作用,图 4(a), (b)和(c)给出针尖位于样品上方高度分别为 12, 9 和 8Bohr 时,被操纵原子处于硅表面平衡位置,体系的电荷密度差分图.所有图示所在平面为通过被操纵原子和针尖顶端钨原子的(110)面.在此电子云差分图定义为将体系中的电子云密度减去中性自由原子在相应处处于晶格位置的电子云密度的叠加.一般地,通过电子云差分图的计算可以清楚地看出体系原子间的成键情况.当针尖与样品间的距离较大时(约 0.6 nm),此时的电子云密度差分图显示钨针尖与样品硅表面之间没有明显的电荷积累,两者的相互作用不大.而针尖与样品间距离较近为 9 和 8Bohr 时,被操纵原子的顶端有向针尖原子突起的曲线,这表明针尖与样品间存在较明显的相互作用.图 3 的(d), (e)和(f)给出被操纵原子位于样品表面高度为 2Bohr 处,针尖与样品间的距离分别为 12, 9 和 8Bohr 时体系的电荷密度差分图.由图可知,随着被操纵原子离开样品表面一定距离时,针尖和该原子间的电子云密度增加,两者形成较强的化学键,电子云的分布呈极性形成电偶极子,这与硅表面的电偶极层相互作用,从而使体系的能量降低.当然被操纵原子与样品间距离过于接近时,针尖原子与被操纵原子之间的原子核排斥力迅速增加,可使体系的能量升高.

在半导体表面进行原子操纵过程中,一般在针尖和样品间加上一个外电场或脉冲,所以有必要考虑外电场的作用,在计算过程中没有计及隧道电流等其他效应,即只讨论了静电场的作用.图 4 和图 5 分别给出了在样品上加正负偏压时,体系脱出能随被操纵原子脱离高度的变化情况,图中曲线 A 为未加外电场情形,曲线 B, C 表示外电偏压分别为 +4 和 +8 伏,针尖与样品间距离均为 9Bohr.从计算结果很清楚地看出,在原子操纵过程中,

不同极性的外电场对体系脱出能的影响不同. 当样品处于正偏压情形下, 随外电场的增强, 体系的脱出能曲线高度呈单调下降. 由图 4 可知, 当偏压为 +4, +8 V 时, 脱出能高度由未加外电场时的 1.30 eV 分别降为 1.00 和 0.68 eV. 样品偏压极性为负时, 由图 5 可知, 外电场不仅不能使脱出能高度降低, 反而稍有增高, 分别为 1.40 和 1.49 eV, 这与 Kobayashi 等人^[12]的计算结果相符, 对此作简单的讨论. 表 1 给出不同情形下, 被操纵原子的净电荷量(初始电荷数减去自洽计算后各轨道电荷数之和). 结果显示被操纵原子在

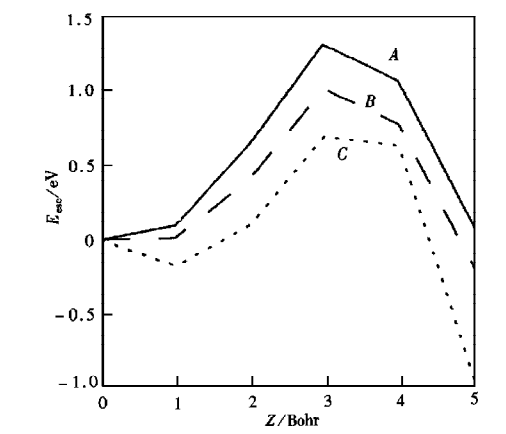


图 4 当样品处于正偏压时, 体系脱出能 (E_{esc}) 与外电场大小的关系曲线. 曲线 A、B 和 C 表示偏压分别为 0.0、4.0 和 8.0 V, 针尖与样品间距离均为 9.0 Bohr, Z 为被操纵原子离开表面的距离

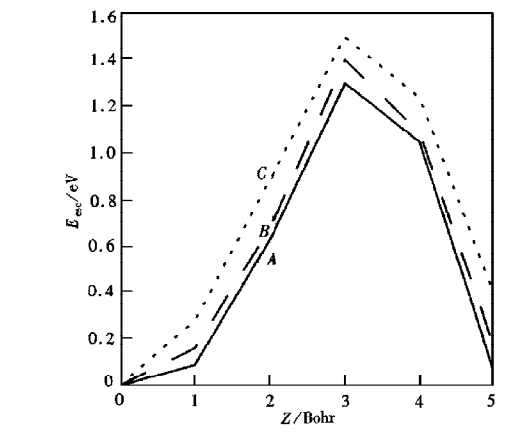


图 5 当样品处于正偏压时, 体系脱出能 (E_{esc}) 与外电场大小的关系曲线. 曲线 A、B 和 C 表示偏压分别为 0.0、-4.0 和 -8.0 V, 针尖与样品间距离均为 9.0 Bohr, Z 为被操纵原子离开表面的距离

不同情况下其极化程度较小, 大约得失十分之一电子电量, 而且该原子所带净电荷量与所在拔离高度有关. Lang^[10]用凝胶模型计算吸附原子的转移问题时, 发现该原子的离子形成并不明显, 得到与本文一致的结果. 当样品处于正偏压时, 被操纵原子和样品间极化场与外电场极性一致, 有利于体系的能量降低, 而负外电场极性却与之相反, 使体系的能量稍有增加. 由于被操纵原子的极化程度较小, 所以外电场的效果不太明显.

表 1 不同条件下被操纵原子在不同拔离高度所带净电荷量(e)						
偏压/V	$z=0.0$	$z=1.0$	$z=2.0$	$z=3.0$	$z=4.0$	$z=5.0$
0.0	0.08	0.08	0.12	0.13	0.01	-0.12
+4.0	0.06	0.09	0.13	0.15	0.05	-0.10
+8.0	0.06	0.10	0.15	0.17	0.05	-0.09
-4.0	0.07	0.07	0.10	0.11	0.00	-0.14
-8.0	0.08	0.06	0.09	0.09	-0.03	-0.16

由上述讨论可知, 在针尖和电场的静态作用下尚不能使单个 Si 原子克服隧道势垒而脱离 Si(111)-7×7 表面的束缚, 然而实验上早就实现了在该表面的单原子和多原子的操纵^[4-6,9], 这意味着在半导体表面进行原子操纵还存在其他机理, 在此作简要地讨论. 一

一般而言,根据 STM 针尖到样品的距离分两类情况.当针尖与样品距离为 0.4 nm 或更短时^[2],隧道电流增大,两者电子云部分重叠,彼此的相互作用增强,这样针尖与样品间的化学相互作用有利于单原子操纵.但在这种小距离情形下,除引起样品表面的化学键断裂外,常常还伴随着结构性缺陷,相变等.而距离大于 0.6 nm 时^[6,7],在原子操纵过程中起主要作用的是场致蒸发(脱附)机理.场致蒸发(脱附)现象是场离子显微镜(FIM)中的一种基本物理过程,Tsong 等人^[22,23]把该理论加以修改并应用到 STM 场合,它已成为针尖与样品距离较大时进行垂直于表面原子搬迁的一种重要机制.其中,FIM 与 STM 中的电场阈值差别很大,前者阈值约为 $30\text{--}50\text{ V/nm}$,而后者小得多,约 $6\text{--}10\text{ V/nm}$.造成这种差别的原因是由于 STM 中两个电极很近,在原子操纵过程中必须考虑彼此间的相互作用,而 FIM 中仅考虑针尖一个电极.

利用 STM 进行半导体表面原子操纵实验中,针尖与样品间外加偏压,在原子尺度的面积内,通过隧道结的电子数约为 10^{12} 个电子每秒.这么大的隧道电流可导致针尖和样品温度升高,使其发生热膨胀,缩短两者之间的距离,从而降低隧道势垒高度,有利于原子操纵.Ukrainsev 等人^[24]利用纳秒激光脉冲加热的机理在 STM 实验中实现了对 Si(001)- 2×1 表面的单原子操纵.同时在原子操纵过程中,人们发现其机理和隧道电子引起的非弹性散射造成吸附原子(分子)的电子态或振动态激发有关.在 Ni(110)表面操纵 Xe 原子实现‘单原子开关’实验中^[2],得到原子转移概率与 $I^{4.9\pm 0.2}$ 成正比,这就是一个典型的多级振动激发过程^[26,27].尤其在利用大隧道电流密度进行原子操纵过程中^[4,9,25],这种机理具有更复杂的作用.当吸附在表面上的原子或分子中电子的振动态有较长的寿命时,非弹性隧道电子散射可以导致一系列的振动激发,使相当的能量局域在某一个键上,从而导致键断裂.这一机理在 Ni 表面 Xe 原子的搬迁和 Si(001)- 2×1 表面吸附 H 的脱附过程中起着非常重要的作用^[2,25,28,29].

由上述讨论可知,在 Si(111)- 7×7 表面进行单原子操纵机理应包括:(1)针尖与被操纵原子及衬底间的相互作用;(2)场致蒸发(脱附);(3)局域电场对隧道势垒形状的影响;(4)隧道电流引起的热膨胀;(5)非弹性隧道电子散射导致的电子态激发或振动激发等.但研究结果还不能确定究竟是那种机制起主导作用,需要理论上进一步的深入研究.

4 结 论

利用 DV-LDF,用团簇模型($\text{Si}_{36}\text{H}_{34}\text{-W}_{11}$)模拟 STM 钨针尖对 Si(111)- 7×7 表面进行单原子操纵过程,着重研究了针尖和静电场的作用.主要结论如下:

(1) 当针尖与硅表面接近时,能有效地降低脱出能曲线的高度,即被操纵原子拔出时所需吸收的热量变小.但仅仅依靠改变针尖与样品之间的距离,并不能使被操纵原子自动脱离硅表面,这与已有的实验结果相符.

(2) 若针尖与样品距离较大约为 0.6 nm 时,它们之间的相互作用较小,当两者距离减至 0.45 nm 或更短时,则针尖与样品间的相互作用较明显.这说明实验过程中可通过将针尖向样品靠拢,利用两者的相互作用,有利于原子操纵.

(3) 外电场对体系脱出能的影响与其极性有关.样品处于正偏压时,外电场可以降低

脱出能的高度,但负偏压的影响不大,使之稍有增高.体系中被操纵原子的极化程度不大,其净电荷量约为十分之几个单位电荷,且与其在针尖和样品间的位置有关.

(4) 仅考虑针尖及静电场的作用尚不能使中心吸附原子脱离硅表面.

潘必才博士提供了 Si(111)- 7×7 单胞的几何构型,王福合博士参与了有益的讨论,中国高性能计算中心(合肥)和中国科学技术大学数学系 SC and CG 实验室提供了部分计算条件,在此一并感谢.

- [1] G. Binnig, H. Rohrer, *Helv. Phys. Acta*, **55**(1982), 726.
- [2] D. M. Eigler, E. K. Schweizer, *Nature*, **344**(1990), 524.
- [3] R. S. Becker, J. A. Golovchenko, B. S. Swartzentruber, *Nature*, **325**(1987), 419.
- [4] I. W. Lyo, Ph. Avouris, *Science*, **253**(1991), 173.
- [5] A. Kobayashi, F. Grey, R. S. Williams, M. Aono, *Science*, **259**(1993), 1724.
- [6] H. Uchida, D. H. Huang, F. Grey, M. Aono, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 2040.
- [7] D. H. Huang, H. Uchida, M. Aono, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **B12**(1992), 297.
- [8] 庞世瑾, 刘宁, 电子显微学报, **15**(1996), 99 [Shi-jin Pang, Ning Liu, *J. Chin. Electr. Microsc. Soc.*, **15**(1996), 99 (in Chinese)].
- [9] Q. J. Gu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **66**(1995), 1747.
- [10] N. D. Lang, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 13599.
- [11] N. Kobayashi, K. Hirose, M. Tsukada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **35**(1996), 3710.
- [12] N. Kobayashi, K. Hirose, M. Tsukada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **36**(1997), 3791.
- [13] K. Takayanagi, Y. Tanishiro *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A3**(1985), 1502.
- [14] 李群祥, 杨金龙, 汪克林, 侯建国, 李家明, 物理学报, **47**(1998), 445 [Qun-xiang Li, Jin-long Yang, Ke-lin Wang, *et al.*, *Acta Physica Sinica*, **47**(1998), 445 (in Chinese)].
- [15] D. E. Ellis, G. A. Benesh, E. Byrom, *Phys. Rev.*, **B20**(1979), 1198.
- [16] B. Delley *et al.*, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 2132.
- [17] J. L. Yang *et al.*, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 4275.
- [18] Dmol, v960, Biosym Technologies, San Diego, CA. 1996.
- [19] E. Koetter, D. Drakova, G. Doyen, *Surf. Sci.*, **331—333**(1995), 679.
- [20] E. Koetter, D. Drakova, G. Doyen, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 16595.
- [21] 王福合, 杨金龙, 李家明, 物理学报, **47**(1998), 1827 [Fu-he Wang, Jin-long Yang, Jia-ming Li, *Acta Physica Sinica*, **47**(1998), 1827 (in Chinese)].
- [22] T. T. Tsong, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 13703.
- [23] N. M. Miskovsky, C. M. Wei, T. T. Tsong, *Phys. Rev. Lett.*, **69**(1992), 2427.
- [24] V. A. Ukraintsev, J. T. Yates, Jr. *J. Appl. Phys.*, **80**(1996), 2561.
- [25] T.-C. Shen, C. Wang, G. C. Abeln *et al.*, *Science*, **268**(1995), 1590.
- [26] S. W. Gao, M. Persson, B. I. Lundqvist, *Solid State Commun.* **84**(1992), 271.
- [27] B. N. Persson, A. Baratoff, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 339.
- [28] R. E. Walkup, D. M. Newns, Ph. Avouris, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 1858.
- [29] S. W. Gao, M. Persson, B. I. Lundqvist, *Phys. Rev.*, **B55**(1997), 4825.

ROLES OF STM TIP AND EXTERNAL ELECTRIC FIELD IN THE SINGLE ATOM MANIPULATION ON Si(111)- 7×7 SURFACE *

LI QUN-XIANG¹⁾²⁾ YANG JIN-LONG¹⁾²⁾ DING CHANG-GENG²⁾ WANG KE-LIN²⁾ LI JIA-MING³⁾⁴⁾

¹⁾ (Open Laboratory of Bond Selective Chemistry, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

²⁾ (Center for Fundamental Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

³⁾ (Center of Atomic and Molecular Sciences, Physics Department, Tsinghua University, Beijing 100084)

⁴⁾ (Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

(Received 26 October 1998)

ABSTRACT

The roles of STM tungsten tip and external static electric field in single corner silicon adatom extracting from Si(111)- 7×7 surface are studied using discrete variational-local density functional (DV-LDF) method with cluster models. The binding energy and the different charge density distribution of the system are calculated under various conditions. The results show that, the activation barrier decreasing is a chemical effect due to the proximity of the electrodes. The effect of external electric field depends on its polarity. A monotonous decrease in the activation barrier is seen for positive bias case, while a small increasing is seen for negative bias case. The single corner silicon adatom cannot transfer from the sample surface if only considering the role of the static interaction among the tip, external electric field and sample surface. The mechanisms of atomic manipulation on semiconductor surfaces are discussed.

PACC: 6116P; 6820

* Project supported partly by the Science Foundation for the Great Significant in the ninth "Five-Year Projects" from Chinese Academy of Sciences, by the National Climbing Program and by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19604016).