

广东省高教厅科学研究著作出版基金资助出版

电子隧穿原理

舒启清 著

科学出版社

1998

内 容 简 介

本书全面记述了量子力学中的电子隧穿势垒效应研究工作的发展过程,介绍了电子隧穿的基本理论以及在各种隧道结中的具体处理方法、实验结果和应用。本书力求反映近年来电子隧穿研究工作的最新进展。

本书可供物理学、化学和生物学等专业大学高年级学生、研究生和科研工作者使用。

图书在版编目(CIP)数据

电子隧穿原理/舒启清著.--北京:科学出版社,1998.5

ISBN 7-03-006394-5

I. 电… I. 舒… II. Giaever 隧道效应 IV. 0482.41

中国版本图书馆CIP数据核字(97)第25293号

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1998年7月第一版 开本:850×1168 1/32

1998年7月第一次印刷 印张:6 3/8

印数:1-1100

字数:160 000

定价:13.00元

53.8.92

2

前 言

量子力学所预言的电子或其它微观粒子隧道贯穿（简称隧穿）势垒的现象是粒子波动性最引人注目的表现之一。对电子隧穿的研究可追溯到量子力学建立的初期。电子隧穿研究的进展依赖于技术的进步。现代技术使人们能够制作纯度很高的材料和十分精巧的仪器，从而能够探测微观世界在原子尺度水平上发生的各种现象。例如，现在人们能够移动单个原子和观察单个电子的运动过程。因为电子常常处于被势垒约束或限制的状态，所以凡涉及发生在微观领域的各种过程，研究人员自然要考虑电子隧穿发生的可能性。因此，电子隧穿势垒是原子尺度上发生的所有自然现象，包括生命现象中的一个基本过程，也是迄今被人们最广泛地分析和研究的电子运动过程之一。

众所周知，几乎每一本量子力学教科书都要讲述电子隧穿势垒的原理。学习过量子力学的人都基本了解电子隧穿势垒的物理涵义。但是，经过 70 多年对电子隧穿势垒的广泛研究，对电子隧穿的认识和应用已形成了电子隧道谱学这门新学科。它所包含的理论和内容之丰富是一般非专业人员难于想象的。例如，对广泛用于处理实际电子隧穿问题的转移哈密顿法熟悉的研究人员就不多，而知晓邻近电子隧穿以及隧道结发光等由电子隧穿引起的这些现象的人就更少了。然而，据作者所知，迄今国内还没有一本全面介绍电子隧道谱学的书籍。本书的目的就是让那些在自己工作领域中涉及电子隧穿或对它感兴趣的人们，系统地了解这门学科的基本内容和最新发展，从而对他们各自专业领域内的研究和开发工作有所帮助。

全书共有八章，其中的某些章节也包含作者的一些研究结果。

第一章介绍研究电子隧穿的主要历史过程；第二章介绍电子隧穿的理论模型，着重讨论转移哈密顿法，并对一维矩形势垒隧穿问题给出了用矩阵表示的一般解法。第三章介绍了各种正常态隧道结中的电子隧穿及其伴随现象。由于受助隧穿是各种隧道谱的基础，本章的重点是受助隧穿的原理及其应用。第四章介绍电子隧穿在超导电性研究中的应用。本章除介绍约瑟夫森效应外，还较详细地讨论了强耦合超导体和临近效应，特别是有效声子谱和临近效应电子隧道谱，这将有助于加深人们对电子隧穿在超导电性研究中的重要性的了解和认识。第五章介绍非弹性电子隧道谱的原理、实验技术和应用。第六章介绍隧道结发光现象，这是一个鲜为人知但充满奥秘的领域。研究隧道结的发光机制的意义不仅在于它的应用前景，而且在于可以认识表面等离激元和表面极化激元这两种固体界面上的元激发的运动规律。第七章介绍扫描隧道显微镜。虽然目前这方面的文献和著作很多，但本章是从它实际上是一种金属-绝缘层-导体（半导体）隧道结的观点出发，讨论它的产生背景和工作原理。对于原子力显微镜，介绍了它的一种新的“轻敲”工作模式。第八章介绍隧穿时间的研究现状。这是一个涉及量子力学的基本原理、迄今尚有许多问题需要解决的领域。本书没有介绍介观体系中的电子隧穿现象，例如库仑阻塞和不连续电阻涨落等。近年来介观物理这个凝聚态物理新兴领域内的研究发展很快，感兴趣的读者可参考这方面文献和专著。

本书是作者 10 多年来在电子隧穿领域内学习和工作的心得和收获。因此，作者要特别感谢已故的张恩虬教授以及 P. K. Hansma 教授，是他们引导作者进入了这个研究领域。

限于作者的学术水平，书中不妥和错误之处在所难免，敬请读者给予批评指正。

舒启清

1997 年 7 月 30 日于深圳大学

目 录

前言

第一章 导论..... (1)

1.1 隧穿的概念 (1)

1.2 隧穿的早期应用 (3)

1.3 隧道谱学的产生和发展 (8)

参考文献 (11)

第二章 基本理论 (13)

2.1 稳态法..... (13)

2.2 转移哈密顿法..... (16)

2.3 一维矩形势垒..... (20)

2.4 共振隧穿..... (23)

2.5 稳态法与转移哈密顿法等效..... (25)

2.6 WKB 近似法 (27)

参考文献 (32)

第三章 正常态隧道结隧穿 (33)

3.1 引言..... (33)

3.2 金属-绝缘层-金属结 (35)

3.2.1 I - V 特性 (35)

3.2.2 镜像力效应 (40)

3.3 金属-绝缘层-半导体结 (44)

3.4 肖脱基势垒结..... (46)

3.5 pn 结 (隧道二极管) (48)

3.6 受助隧穿..... (51)

3.6.1 声子发射..... (52)

3.6.2 分子振动..... (56)

3.6.3 磁振子 (56)

3.6.4 表面和体积等离子激元 (56)

3.6.5	光子发射	(57)
3.6.6	自旋倒逆	(57)
3.6.7	电子态跃迁	(59)
	参考文献	(62)
第四章	超导态隧穿	(64)
4.1	引言	(64)
4.2	超导电性	(67)
4.3	准粒子隧穿	(68)
4.3.1	NIS 结	(69)
4.3.2	SIS 结	(71)
4.4	电子对隧穿	(74)
4.5	约瑟夫森效应	(75)
4.6	强耦合超导体	(82)
4.6.1	Eliashberg 方程	(82)
4.6.2	有效声子谱 $\alpha^2(\Omega)F(\Omega)$	(84)
4.7	邻近效应	(88)
4.7.1	邻近效应 C-I-NS 结	(89)
4.7.2	邻近效应电子隧道谱	(90)
4.8	高 T_c 超导体	(93)
	参考文献	(94)
第五章	非弹性电子隧道谱	(96)
5.1	引言	(96)
5.2	谱的特征	(98)
5.2.1	优势	(98)
5.2.2	缺点	(101)
5.3	实验技术	(102)
5.3.1	结的制作	(102)
5.3.2	谱的测量	(104)
5.4	理论	(106)
5.4.1	SM 模型	(106)

5.4.2	KSH 模型	(109)
5.4.3	短程模型	(111)
5.5	应用	(112)
5.5.1	生物化学物质的检测和鉴别	(112)
5.5.2	电子辐照损伤	(113)
5.5.3	催化	(115)
5.5.4	铝和铝合金的腐蚀	(116)
	参考文献	(120)
第六章	隧道结发光	(121)
6.1	现象	(121)
6.2	表面等离极化激元	(122)
6.2.1	表面等离极化激元存在的条件	(122)
6.2.2	快模式和慢模式	(125)
6.2.3	表面粗糙度	(126)
6.3	两步过程	(127)
6.4	理论图像	(127)
6.5	发光的产生和特征	(129)
6.5.1	随机粗糙结	(129)
6.5.2	金属小颗粒结	(134)
6.5.3	全息光栅结	(135)
6.5.4	半圆棱镜结	(137)
6.6	发光的奥秘	(141)
	参考文献	(142)
第七章	扫描隧道显微镜	(144)
7.1	发明背景和工作原理	(144)
7.2	结构和工作模式	(146)
7.3	理论	(150)
7.4	其它的扫描探针显微镜	(154)
7.4.1	原子力显微镜	(154)
7.4.2	磁力显微镜	(156)

7.4.3	弹道电子发射显微术	(157)
7.5	应用	(159)
7.5.1	表面科学	(159)
7.5.2	凝聚态物理学	(161)
7.5.3	生物学	(163)
7.5.4	电化学	(163)
7.5.5	微细工艺与技术	(163)
	参考文献	(165)
第八章	隧穿时间	(167)
8.1	量子力学中的时间	(167)
8.2	理论模型	(169)
8.2.1	波包散射法	(169)
8.2.2	运动路径法	(172)
8.2.3	时钟法	(174)
8.2.4	几个关系式	(176)
8.2.5	理论隧穿时间的数量级	(177)
8.3	实验	(177)
8.4	结束语	(178)
	参考文献	(179)
附录	隧道结的制作技术	(180)
A.1	基片	(180)
A.2	电极薄膜	(181)
A.2.1	热蒸发法	(181)
A.2.2	其它成膜方法	(182)
A.3	箔电极	(183)
A.4	自然氧化成隧穿势垒	(183)
A.4.1	自然生长氧化物势垒	(184)
A.4.2	等离子体氧化势垒	(185)
A.5	人工淀积隧穿势垒	(186)
A.5.1	完全氧化金属覆盖层	(187)

A. 5. 2 直接淀积	(187)
A. 5. 3 多靶溅射	(188)
A. 6 基底层温度	(188)
A. 7 膜厚测量	(189)
A. 8 结的表征	(190)
参考文献	(190)

第一章 导 论

微观粒子隧道贯穿势垒(microscopic-particle tunneling through barrier)是量子力学描写微观粒子运动所得到的直接结果. 隧穿的研究和应用相当早,从量子力学一建立就开始了. 关于隧穿的研究和应用大致可以划分成两个时期:第一时期从量子力学建立到第二次世界大战后的 50 年代初. 由于受材料制造水平的限制,在这一时期主要是用隧穿解释各种微观的物理学、化学和生物学现象;第二时期从 50 年代中至今. 在这一时期人们有目的地使用人造结构来研究隧穿现象,并以此为基础制作隧穿器件和装置.

1.1 隧穿的概念

当电子或其它微观粒子(例如质子和中子等)从势垒的一边入射时,即使它们不具有足够的动能从势垒顶部翻越过势垒,它们仍然能够在势垒入射的一边消失而在势垒的另一边出现. 这种现象形象地称之为微观粒子隧道贯穿通过势垒或隧穿势垒. 但要注意:在一般情况下只有当势垒宽度与微观粒子的德布洛意波长可比拟时,隧穿势垒的现象才显著得可以被观测到.

微观粒子隧穿势垒是粒子波动性的一种表现. 根据量子力学的基本原理,表示微观粒子状态的波函数将延展到整个空间,它们在那些势能有限不连续点处也是光滑连续的. 因此,虽然粒子的动能小于势垒的高度,它们仍然可以出现在按照经典力学是禁戒的势垒区域内并穿过势垒区,于是隧穿势垒现象就发生了. 必须强调的是隧穿过程遵从能量守恒和动量(或准动量)守恒定律.

隧穿的理论处理将在第二章讨论,在这里我们仅给出最常用

1107671

· 1 ·

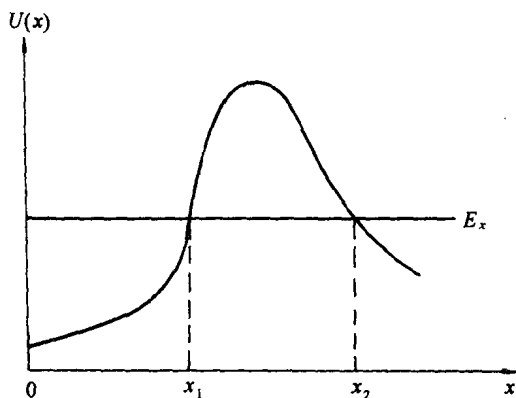


图 1.1 任意势垒 $U(x)$ 的隧穿示意图. 在经典转折点 x_1 和 x_2 之间, 粒子能量 $E_x < U(x)$

的结果. 当粒子的能量 E_x 小于势垒能量 $U(x)$ 时, 从求解薛定谔方程得到的粒子波函数 $\psi(x)$ 和 $\psi(x)\psi^*(x)$ 的统计解释可知, 粒子隧穿通过经典力学禁戒的势垒区的概率在势垒区具有指数衰减的特征. 在许多情况下, 对于如图 1.1 所示的任意势垒可以相当精确地求得这个概率的表示式如下:

$$T = g \exp(-2K) \quad (1.1)$$

$$K = \int_{x_1(E_x)}^{x_2(E_x)} \kappa(x, E_x) dx, \quad \kappa(x, E_x) = \left\{ \frac{2m[U(x) - E_x]}{\hbar^2} \right\}^{1/2} \quad (1.2)$$

在采用 WKB 近似方法时前因子 g 的值取 1, 对于矩形势垒有

$$g = \frac{16kq\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)(q^2 + \kappa^2)} \quad (1.3)$$

其中 E_x 是动能, x_1 和 x_2 是 $E_x = U(x)$ 的点, 即所谓经典转折点 (经典允许区与经典禁戒区的交界点), T 称为隧穿系数, 它可以认为是从左边入射的粒子波 e^{ikx} 所携带的概率流 $\hbar k/m$ 中通过势垒 $U(x) > E_x$ 区域的份额, 它是一个很小的分数; 而概率流的定义为

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (1.4)$$

势垒区域和势垒右边的波函数分别具有 Qe^{ikx} 和 Pe^{iax} 的形式, 这里 Q 和 P 是常数.

1.2 隧穿的早期应用

量子力学本身是在 1923 年至 1927 年间建立起来的. 对微观粒子隧穿现象的研究几乎是与量子力学的建立同时开始的. 研究得最深入和应用得最广泛的是电子隧穿现象. 早在 1922 年, Lilienfeld 就观测到了电子从金属到真空的隧穿现象^[1]. 此后, 随着量子力学的建立, 隧穿的原理被系统的阐述并用于研究各种各样的物理问题. 到了 1928 年, 基于隧穿的原理, 当时的许多理论物理学家就相信外加高电场的作用将使势垒畸变, 导致势垒高度降低或变窄, 促成电子隧穿明显发生. 这里有三个用隧穿原理解释在原子尺度上物质的结构和行为的例子. 第一个例子是 Oppenheimer 把处于激发态氢原子的自动离化归因为电子隧道贯穿效应^[2]. 对于图 1.2 所示的一个在场 $F=V/L$ 作用下位于 $x=0$ 处的氢原子, 他引进两个电子态: 波峰在核附近的“局域原子态” ψ_L 和“自由电子态” ψ_F , 并假定电子在经典转折点 $x=b$ 和边界 $x=L/2$ 之间振荡. 如果场是弱场, Oppenheimer 证明电子从与场无关的态 ψ_L 跃迁到均匀场的本征态 ψ_F 的速率可用黄金规则(golden rule)计算得到

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho_F(E) \quad (1.5)$$

其中 $|M|^2 = |\langle \psi_F | H^T(x) | \psi_L \rangle|^2$, $H^T(x) = -eFx$ 是微扰哈密顿量. 应该指出, Oppenheimer 的这种处理方法后来发展成处理隧穿时广泛应用的转移哈密顿法.

第二个例子是 Fowler 和 Nordheim 借助电子隧穿解释在外场作用下电子从冷金属的发射现象^[3]. 这种现象早在 1922 年就被 Lilienfeld 观测到过, 但在这以前一直没有得到解释^[1]. 他们假设金属表面存在如图 1.3 所示的三角形势垒, 在(1.2)式中代入电子的

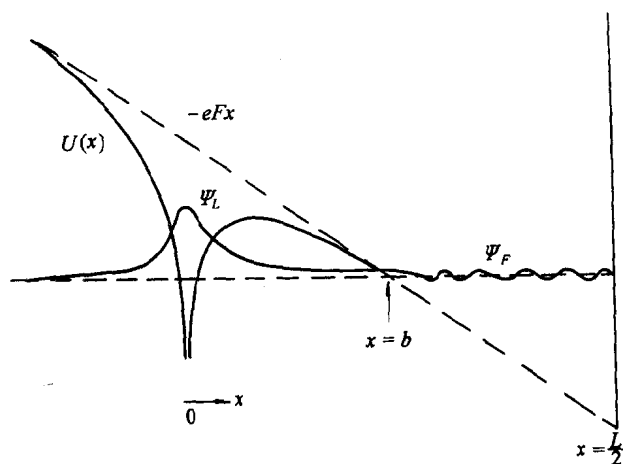


图 1.2 强电场使束缚氢原子周围电子的库仑势阱发生畸变,于是电子隧穿通过库伦势垒导致氢原子场离化

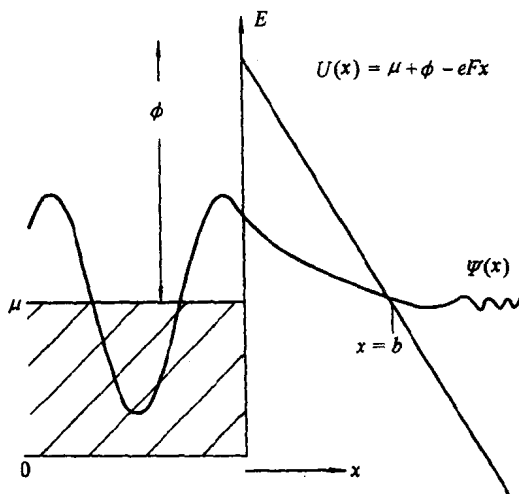


图 1.3 电子隧穿从金属表面冷发射, 外场使表面势垒畸变成三角势垒

费米能 $E_x = E_f$, 得

$$2K = 2 \int_0^b (2m/\hbar^2)^{1/2} (\phi - eFx) dx = \frac{8\pi \sqrt{2m}\phi^{3/2}}{3heF} \quad (1.6)$$

其中 ϕ 是金属的功函数, F 是场强, $b = \phi/eF$ 是经典转折点. 因为 k 空间中每个状态可容纳两个电子, 电子的群速度 $v_x = \hbar^{-1} \partial E / \partial k_x$, 从电流密度公式

$$J_x = \frac{2e}{(2\pi)^3} \iiint D(E_x) f(E) \left(\frac{1}{\hbar} \right) \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right) dk_x dk_y dk_z \quad (1.7)$$

和费米函数

$$f(E) = \left[1 + \exp \left(\frac{E - E_f}{k_B T} \right) \right]^{-1} \quad (1.8)$$

并用(1.1)和(1.6)式,最后可得

$$J_x = \frac{4 \sqrt{E_f \phi}}{(E_f + \phi)} \frac{e^3 F^2}{8\pi \hbar \phi} \exp \left(- \frac{8\pi \sqrt{2m} \phi^{3/2}}{3\hbar e F} \right) \quad (1.9)$$

(1.9)式显示 $\ln(J_x/F^2)$ 与 $1/F$ 呈直线关系.

第三个例子是 Gamow, Gurney 和 Condon 把某些重核的自然衰变发射 α 粒子的现象作为隧穿过程来处理^[4~5]. 他们假设核中衰变前 α 粒子位于一个能量为 E 的亚稳态. 参看图 1.4, 如果取隧穿势垒为 $U(r) = (Z-2)2e^2/r, r > R$ (R 是核半径), 使用(1.2)式得到

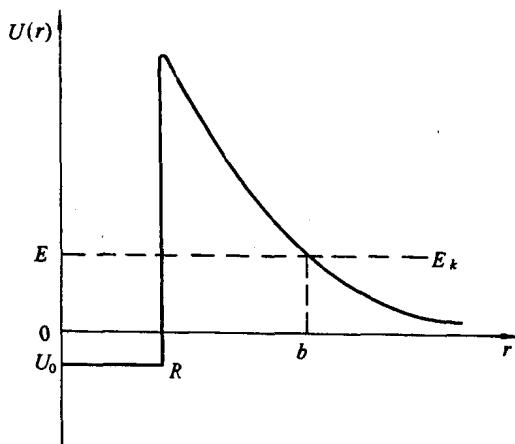


图 1.4 粒子衰变的隧穿模型

$$K = \left[\frac{2m_a}{\hbar^2} (Z-2) 2e^2 \right]^{1/2} \int_R^b \left[\frac{1}{r} - \frac{E}{(Z-2) 2e^2} \right]^{1/2} dr \quad (1.10)$$

其中 $b = (Z-2) 2e^2 / E$, m_a 是 α 粒子的质量, Z 是原子序数. 经过计算得 α 粒子的寿命的倒数为 $1/r_a = A \exp(-2K)$, A 是常数, 它很好地解释了重核衰变发射 α 粒子和元素的人工嬗变实验结果, 也有助于对量子力学隧穿原理的理解. 现以铀核为例. 已知它的半径为 10^{-14}m , 包围着它的势垒高度 27MeV , 而它发射的 α 粒子的能量仅 4MeV , 小于势垒高度. 这种现象只有用 α 粒子隧道贯穿通过势垒才能解释. 理论计算表明 α 粒子隧穿通过铀核势垒的概率仅 10^{-38} . α 粒子以 10^7m/s 的速度在尺寸为 10^{-14}m 铀核势阱内运动, 那么它势垒碰撞频率为 $10^{21}/\text{s}$. 因此, 铀核衰变发射单个 α 粒子的平均时间间隔为 $10^{38}/10^{21} = 10^{17} \text{s}$, 即 3×10^9 年! 这是一个很大的数, 但铀的半衰期的确是几十亿年. 作为比较, 让我们考虑半衰期为 10^{-4}s 的 RaC' . RaC' 核的 α 粒子能量比铀核的大一倍, 为 8MeV , 包围它的势垒也比铀核的低. 通过类似于对铀核的理论计算, 我们得到 RaC' 核发射 α 粒子的概率为 10^{-17} . 因此, RaC' 发射 α 粒子的平均时间间隔减少为 $10^{17}/10^{21} = 10^{-4} \text{s}$, 事实如此. 这种巨大的差别正是由 α 粒子隧穿所引起的, 也反映出粒子隧穿概率对粒子能量和势垒高度有很强烈的依赖关系.

在上述的三个例子中, 隧穿的理论模型都成功地解释了实验结果, 这是早期量子力学理论的巨大胜利. 紧接着, 物理学家们力图理解两个接触导体之间的电子输运特性. 1930 年, Frenkel 认为金属接触电阻与温度无关的异常特性, 可以借助发生在一个很窄的真空间隙之间的隧道贯穿来说明, 因为隧穿效应与温度无关^[6]. Holm 和 Meissner 在 1932 和 1933 年对金属接触电阻的仔细测量证明了 Frenkel 的上述解释^[7~8]. 1932 年, Wilson, Frenkel, Joffe 和 Nordheim 用电子隧穿解释金属半导体接触整流器的特性^[9~11]. 他们用这种方法导出的整流器理论特性曾被接受了很长一段时间, 直到最终发现该理论所预期的整流方向是错误的以后才被抛弃. 在量子力学建立后不长的一段时间内, 学术界存在过一种试图用

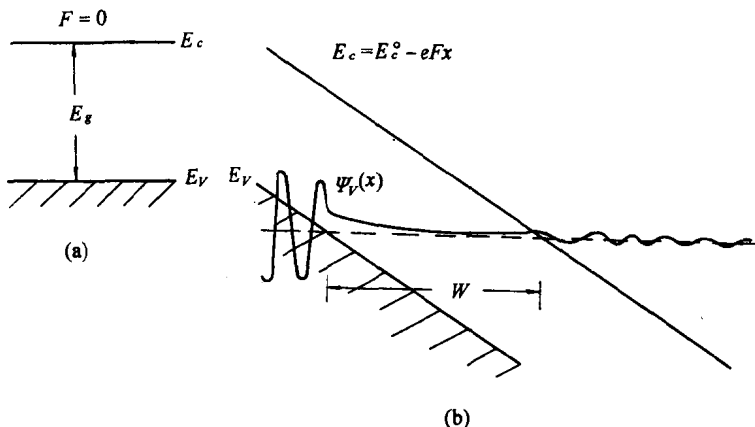


图 1.5 (a)固体的能带结构示意图;(b)外电场使能带发生倾斜,电子可以从价带隧穿进入导带

隧穿来解释一切反常效应的倾向. 由于受当时材料科学发展水平的限制,在许多情况下还不能通过实验观测证明隧道贯穿是否真正发生,前述的金属半导体接触整流器的特性分析就是一个例子. 现在已经知道,在许多情形下半导体和金属接触时在界面形成的势垒层太厚,因此隧穿事实上不可能被观测到. 到了 1933 年,Zener 在固体能带论的基础上用带间隧穿(interband tunneling)解释高电场作用下的介电击穿现象^[12]. 如图 1.5 所示,高电场的作用使固体的能带倾斜,这时价带的电子无需获得能量也可以借助隧穿通过禁带进入导带. 当时是难于从实验上检验 Zener 的理论解释的. 事实上,因为高场作用下的固体会产生电子空穴对,即使现在也很难判断发生击穿时的电流是由电子空穴对的隧道贯穿,或是由电子的隧穿引起的. 1937 年,Muller 用电子隧穿解释了场离子显微镜中高场作用下探针表面的离子化现象^[13]. 此后,从 30 年代末到 40 年代末的一段时期,由于第二次世界大战的影响,对隧穿的理论 and 实验研究没有取得明显的进展.