

面向

21

世纪物理学丛书

表面科学中的
电子隧道效应

王琛 白春礼 编著
华中师范大学出版社

MIANXIANG ERSHIYI SHIJI WULIXUE CONGSHU

面向 21 世纪物理学丛书

BIAOMIANKEXUEZHONGDEDIANZISUIDAOXIAOYING

表面科学中的电子隧道效应

王 琛 白春礼 编著

华中师范大学出版社

1998 年·武汉

(鄂)新登字 11 号

图书在版编目(CIP)数据

表面科学中的电子隧道效应/王琛 白春礼 编著

—武汉:华中师范大学出版社,1998.12

(面向 21 世纪物理学丛书)

ISBN 7-5622-1996-6/O · 118

I. 表…

II. ①王… ②白…

III. 表面物理学-Giaever-隧道效应

IV. O484.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 38792 号

面向 21 世纪物理学丛书

表面科学中的电子隧道效应

© 王 琛 白春礼 编著

华中师范大学出版社出版发行

(武昌桂子山 邮编:430079)

新华书店湖北发行所经销

文字六〇三印刷厂印刷

责任编辑:苏 睿

责任校对:崔毅然

封面设计:罗明波

督 印:方汉江

开本:850 mm×1168 mm 1/32

版次:1998 年 12 月第 1 版

印数:1—1000

印张:6.5 字数:145 千字

1998 年 12 月第 1 次印刷

定价:18.00 元(精)

本书如有印装质量问题,可向承印厂调换。

面向二十一世纪

物理学丛书

羊公序

序 言

不论是在人生的道路上,还是在科学探索的过程中,有时候要回顾过去、审视现在并展望未来。物理学已有很长的发展历史,将来也必定还将有更大的发展。在这世纪相交之际,希望有这样的关于物理学的书:它能在整体上以较为一致的观点将迄今为止人们认为对物理学既是最重要、又是最基本的认识和问题作一个较为系统的概括;它是在科学上比较严格和比较可靠的科学专著;它在内容的选取上应力求简明,即不过于深邃和庞杂;它应是对物理学科内部的各分支学科、物理学的边沿学科以及与物理学相交叉的学科感兴趣的学者可作为学习和进一步开展研究的参考。本丛书正是为满足上述希望所作的尝试。

周光召

一九九七年九月七日

Preface

From time to time, we need to review the history, examine the present and the future perspectives. Physics has quite a long history, and is bound to have magnificent future. Standing at the turning point of the century, one will find such books on physics interesting and revealing; that the books should provide a systematic review of the mature understandings of the fundamental and important concerns in physics. The content of the book needs to be concise, without involving too much detailed derivatives and being encyclopedic. They should serve as useful reference books for the investigators engaged in branches of physics and relevant fields. The organizing of this series of books is an attempt with this goal in mind.

Zhou Guang Zhao

周光召

September 7, 1997

《面向 21 世纪物理学丛书》

顾问:周光召,Bergmann P G,孙祖训

主编:张镇九

编委(以姓氏的拼音或英文字母为序):

白春礼(北京,中国科学院)

包 钢(美国,乔治亚大学)

Bergmann P G(美国,纽约大学)

蔡 勖(华中师范大学)

Gals'tov D(俄罗斯,莫斯科大学)

Kalnins E G(新西兰,崙卡托大学)

林克椿(北京医科大学)

刘煜炎(中国科学院武汉物理和数学所)

Sabbata V(意大利,波罗尼亚大学)

桑建平(武汉大学)

孙祖训(中国原子能科学研究院)

王 琛(北京,中国科学院)

熊吟涛(武汉大学)

詹明生(中国科学院武汉物理和数学所)

张端明(华中理工大学)

张永德(中国科学技术大学)

张镇九(华中师范大学)

内 容 简 介

电子隧道效应是物理学中的重要发现之一,近年来它在表面科学研究中不断作出突出贡献。本书将从电子隧道效应的基本理论和一些经典实验结果出发,介绍有关弹性及非弹性隧道过程的主要模型,进而探讨扫描隧道显微技术(STM)中的物理机制,包括显微分析机理、隧道谱分析方法。

本书的第1章首先从电子隧道过程的基本物理图像入手,简要介绍了弹性隧道理论、非弹性隧道现象以及影响隧道谱测量结果的几个主要因素,目的在于建立分析隧道结构性质的理论基础,其中关于波函数的讨论在后续章节中还将反复出现,成为联接本书各章节的主要线索。在第2章中介绍了80年代发展起来的扫描隧道显微学的物理原理,通过引入局部电子能态密度的概念,介绍了STM的原子和电子结构检测机理,突出表现了这一微观分析手段在研究电子结构时的显著优点。在随后的三章中,我们分别介绍了利用STM研究电子密度超晶格(如电荷密度波(CDW)的精细结构)和一系列电子能态现象(如表面电子能态、单电子隧穿效应等)的主要结果以及单原子和单分子的隧道谱分析。此外,STM在纳米尺度上的表面加工和原子操纵研究也已成为纳米科技中的一个活跃领域。我们在第6章中对纳米加工和原子操纵的物理机制进行了分析。在最后的章节中我们对相关的扫描探针显微技术(SPM)以及纳米科技的发展过程和前景进行了讨论。

Abstract

This book focuses on the basic theories of electron tunneling process, and their applications in surface sciences. As it is not feasible to include a complete description of various known theories and remarkable experimental findings, we are hoping this book would familiarize the readers conceptually with the important achievements, and leave the readers to further in-depth explorations.

The book begins with an introduction of basic physical pictures of electron tunneling process, briefly discussing the elastic and inelastic tunneling phenomena, and several key factors that determine the experimental measurements. The discussion is aimed at setting up the theoretical stage for analysing tunneling structures. In particular, the discussions concerning the wave functions will repeatedly appear in the later chapters and become one of the main linkage. In the second chapter, we shift the focus to the physical principles of scanning tunneling microscopy (STM) which was invented in the early 1980s. By introducing the concept of local density of states (LDOS), the mechanisms behind the measurements of atomic and electronic properties of surfaces are demonstrated. The supreme advantages of the method as a surface analytical technique is illustrated from the analysis.

The subsequent chapters focus in three main aspects. Namely, the properties of electronic superlattices, such as charge-density waves (CDW), surface states, single electron tunneling, etc. and the detection and exploration of the characteristics of single atom/molecules. These

work bring the readers to the forefronts of the research area. The last topic in this part concerns the surface fabrications using STM. It is shown that tunneling approach could be extended beyond the scope of measurements, which is also a fascinating direction.

At the end, we present a general introduction of the family of scanning probe microscope (SPM), BEEM, AFM, NSOM and so on, as they are truly inspired by the invention of STM and become an integrated field. The discussions of future aspects will also be provided and the readers are invited to join the efforts for the future development of this exciting research field.

前 言

电子隧道现象是凝聚态物理学中的一个颇受重视并且相当活跃的分支。它的研究方法及理论是量子力学与实验科学相结合的一个优美的典范。事实上,电子隧道现象广泛存在于物质的许多电学性能中。早在本世纪初,人们就在 α 粒子衰变、氢原子电离和金属中的场发射实验中发现了这一现象。可以说,隧道效应的研究对物理学的发展作出了突出的贡献。

隧道效应在表面科学中的应用在扫描隧道显微技术 (STM) 中得到了完美的体现。经典电子隧道理论为 STM 的发展做出了重要贡献,至今仍然是分析表面电子隧道谱的主要理论手段。与此同时,STM 方法还向人们展示了更加复杂和多样的实验现象,对理论探索不断提出更高的要求。由于 STM 的研究对象是在单个原子和分子水平,是进行定量研究的理想途径,在这种情况下,需要对电子隧道过程进行更加精确的描述,对于影响该过程的各种物理和化学因素有准确认识。这些方面的探索形成了一个迅速发展的前沿领域,成为纳米科技研究活动中的主要方向之一。

本书的宗旨是简要描述电子隧道效应的基础理论并着重介绍它在表面科学中的应用。对于有重要理论和应用意义的表面电子能态、单电子效应以及表面纳米加工将进行较为深入的讨论。自然,关于这一领域的种种理论思想及令人叹服的实验例证,不可能在这里一一涉及,我们只是想引导读者了解这一领域

的基本概念以及已经取得的一些代表性研究成果,启发大家对此研究领域的兴趣。

本书的文稿打印和编排过程中得到中国科学院纳米科技青年实验室王乃新同志给予的大量帮助,裘晓辉、刘崋子、杨林静等同志也给予了许多帮助,在此表示衷心感谢。本书中介绍的部分研究成果得到中国科学院基金和国家自然科学基金的支持,在此谨表谢意。

由于作者的水平有限,疏漏之处在所难免,敬祈读者批评指正。

作 者

1997 年 10 月于北京

目 录

1 电子隧道现象	1
1.1 简要介绍	1
1.2 弹性隧道效应	2
1.2.1 稳态隧道模型	4
1.2.2 过渡哈密顿量方法	6
1.2.3 等价性讨论	9
1.3 非弹性隧道效应	10
1.3.1 吸附分子导致的非弹性隧道现象	10
1.3.2 非弹性隧道谱线分析	14
1.3.3 二步隧道过程	18
1.3.4 共振隧道现象	19
2 扫描隧道显微学	23
2.1 基本原理	23
2.1.1 Tersoff-Hamann 模型	24
2.1.2 局域能态密度介绍	27
2.2 STM 形貌图像起伏的物理本质	29
2.2.1 关于隧道跃迁矩阵的讨论	29
2.2.2 跃迁矩阵与 STM 检测灵敏度	31
2.3 隧道谱测量	34
2.3.1 扫描隧道谱方法的基本原理	34
2.3.2 固定高度法	35

2.3.3	变化高度法	37
2.4	隧道结势垒高度测量	38
2.5	针尖效应的实验研究	43
3	电子超晶格的 STM 研究	46
3.1	电荷密度波介绍	47
3.2	低维化合物结构介绍及 CDW 形成的实验证据	51
3.3	CDW 超晶格的 STM 观测	51
3.3.1	准一维晶体材料中的 CDW 超晶格	52
3.3.2	层状化合物中的二维 CDW 超晶格	56
3.4	STM 图像中表面起伏分析	65
3.4.1	Tersoff 节点模型	67
3.4.2	原子间力模型-弹性模型	68
3.4.3	势垒效应	70
4	隧道谱(STS)分析	73
4.1	隧道谱分析介绍	73
4.2	表面电子能态的 STS 研究	74
4.2.1	表面电子能态介绍	74
4.2.2	STM 与表面电子能态研究	77
4.2.3	二维电子驻波	79
4.3	单电子隧道效应	83
4.3.1	单电子隧道效应介绍	83
4.3.2	单隧道结库仑阻塞	89
4.4	隧道谱分析举例	93
4.4.1	电荷密度波能隙测量	93
4.4.2	电荷转移现象的 STS 测量	95
4.4.3	金属氧化物的 STS 分析	100

4.4.4 其它化合物的隧道谱分析	103
5 单原子/分子吸附现象的 STS 研究	104
5.1 金属吸附原子的 STM/STS 研究	105
5.2 吸附分子的 STM/STS 研究	108
5.2.1 吸附液晶分子的 STM 研究	108
5.2.2 酞菁类化合物的 STM/STS 研究	116
5.2.3 富勒烯分子的 STS 研究	116
5.3 吸附单分子膜的 STM/STS 研究	120
6 隧道效应与表面纳米加工和原子操纵	122
6.1 场发射电子现象介绍	123
6.2 低能电子与物质相互作用	127
6.3 强电场及强电流效应分析	129
6.4 入射电子的分布特征	133
7 相关的扫描探针显微技术	137
7.1 弹道电子发射显微镜	137
7.1.1 弹道电子发射显微镜基本原理	137
7.1.2 理论分析	139
7.1.3 实验结果分析	144
7.1.4 界面纳米加工	146
7.2 近场扫描光学显微镜	150
7.3 原子力显微镜	155
7.4 其它扫描探针显微技术	158
7.4.1 扫描噪声显微镜	158
7.4.2 扫描离子电导显微镜	158
7.4.3 扫描热显微镜	159
8 结束语	161

8.1 扫描探针显微术与单分子物理和化学	161
8.2 纳米电子学	163
8.3 纳米材料学	164
8.4 纳米生物学	166
8.5 纳米机械学与超微加工技术	167
参考文献	169
内容索引	187

1 电子隧道现象

1.1 简要介绍

简单地讲,电子隧道现象就是电子穿越经典条件下不可逾越的势垒。自本世纪初,将 α 粒子衰变过程成功地用隧道效应加以阐明以来,该效应就成为联结量子力学与实验研究的重要纽带之一,这一纽带广泛存在于粒子物理和固体物理的诸多学科中。随着实验技术的不断发展,隧道效应以其特有的风采,频繁出现在一次次里程碑性的发现中,如 Esaki 二极管^[1]、Josephson 效应^[2]、单电子隧道效应^[3]。同时,它还成为一些重要实验技术的基石,如场发射显微镜^[4]以及本书中将要重点涉及的扫描隧道显微镜^[5]。随着研究对象范围的逐渐扩大和研究手段的不断丰富和发展,对隧道现象的认识也逐渐深刻。同时,研究工作已不仅仅局限于探求它的理论内涵,而是已经深入到许多应用领域之中了。

就电子隧道现象的本质而言,它完全是量子力学的产物,通过对电子波函数与势函数的相互作用加以研究就可以比较完全地了解电子的运动行为。因此,对电子波函数的近似处理(如原子中的电子能态、固体中的平面波近似),以及势函数(原子中的刚性势垒、固体中的势函数)的描绘成为大量理论工作的中心议题,并且具有丰富的研究内涵^{[6]~[8]}。与此同时,隧道效应已成为

1107926