

# 扫描 隧道显微学 引论

[美] 陈成钧 著

华中一 朱昂如 金晓峰 译

中国职工出版社

-4742.9  
C-2:1

# 扫描隧道显微学引论

[美] 陈成钩 著  
华中一 朱昂如 金晓峰 译

中国轻工业出版社

## 图书在版编目(CIP)数据

扫描隧道显微学引论/(美)陈成钧著;华中一等译。  
北京:中国轻工业出版社,1996.4

ISBN 7-5019-1889-9

I. 扫… II. ①陈… ②华… III. 扫描隧道显微镜—显微  
镜学—概论 IV. TH742.9

中国版本图书馆CIP数据核字(96)第11483号

责任编辑 缪丽雯

\*

中国轻工业出版社出版

(北京市东长安街6号)

新华出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

各地新华书店经售

\*

850×1168 毫米 1/32 印张:15.75 字数:363 千字

1996年12月 第1版第1次印刷

印数:1--1000 定价: 38.00 元

著作权合同登记图字: 01—96—0042 号

## 内 容 提 要

扫描隧道显微术是目前唯一具有原子级分辨率的实空间成像技术，其测量过程不会对表面造成任何损伤。至今它已发展成一个大家族(扫描探针显微术)，用于测定广泛的物理、化学和生物性质，并成为纳米测试的关键技术。发明者曾荣获1986年诺贝尔物理奖。本书是国际上第一本有关扫描隧道显微学的专著，包括扫描隧道显微学的历史及概貌、成像原理、仪器及部件，以及扫描隧道电子谱、原子力显微镜和若干应用实例。内容翔实丰富、深入浅出，有独到之处。可作为高等学校有关专业的教材以及表面科学、薄膜物理、介观物理、电化学、微电子学、分子生物学等领域研究人员的参考用书。

## 序　　言

自从扫描隧道显微镜(STM)在实空间观察到Si (111)的7×7结构(Binning, Rohrer, Gerber和Weibel, 1983)而初次登场以来, 已经十多年了。已经证明, 这个新的仪器对于在凝聚态物理、化学和生物学方面的很多学科来说, 是一种极其有力的工具。STM能够真正解决每一种导电的固体表面在原子尺度上的局域电子结构, 因而可以揭示它的局域原子结构。STM的一种拓展, 即原子力显微镜(AFM), 甚至可以使绝缘表面的局域原子结构成像。STM和AFM可在不同环境下成像的能力, 以及对样品无损伤、无干扰的优点, 使它们有可能连续地观察过程。举例来说, 已经用AFM实时地观察到一个活细胞被病毒感染的全过程(Haeberle等, 1992)。

STM的领域已得到迅速而持续的发展, 使人感到是科学的一个新的分支。六次国际STM会议的论文增长数表明了在此领域内日益增长的兴趣:

年份	日期	地　点	论文数
1986	7月14日~18日	西班牙 Santiago	59
1987	7月20日~24日	美国 Oxnard	110
1988	7月4日~8日	美国 Oxford	157
1989	7月9日~14日	日本 Oarai	213
1990	7月23日~27日	美国 Baltimore	357
1991	8月12日~16日	瑞士 Interlaken	580

同样地, STM在商业方面也以惊人的速度发展着。1991

年夏，有30多个公司制造和发售STM及其零件。很多一开始就从事STM和AFM的公司已经看到他们的业务正在迅速地扩展着。近年来的Digital Instruments, Park Scientific Instruments, WA Technology, Angstrom Technology, TopoMetrix和RHK Technology就是这类公司中典型的几个。类似地，很多科学仪器的大制造商已把他们的商品范围扩大到STM。在他们中间有Vacuum Generator, Newport Instruments, Omicron Vacuumphysik GmbH, Leica, JEOL, Nikon和Seiko等。还有些其他的公司供应STM的部件和配件，如压电元件、步进器和针尖。由于STM和AFM在科学和商业的圈子里被广泛赞许，它们将在可预见的将来成为光学显微镜和电子显微镜之外全世界实验室里的又一重要仪器。

对现代科学来说，十年是一个很长很长的时期。在这个时间内将有数以万计的事件开始发展。就像Ziman在《固体理论原理》一书中所说的：“今天的发现将成为明天任一研究者的知识。在下一周的末了，将包含在任一研究生课程中。在一个月内，将在大学生课表中引起一片喧嚷。到明年，我相信它将成为如此平常的一件事，以至于可以假定为任何学生都知道的东西。”但在过去十年内STM领域多产的活动中，在有关这题目的出版物中还留下一个明显的空缺。已经出版了几部收集STM方面评述性文章的集子(如Behm, Garcia, Rohrer编的《STM与有关方法》，Kluwer, 1990; Guentherodt, Wiesendanger编的《STM》，卷1~3, Springer Verlag, 1991~1992, 以及其他几种)，一本叫《扫描力显微镜》的教科书(Oxford University Press, 1991)也已经出现。但无论如何，一本与STM相关的专著或教科书尚付缺如。

我们已经看到STM在微电子和化学工业方面作为过程控制和诊断方面的潜力正逐步成为现实。对一本STM方面

的基础参考书和教科书的需求是十分明显的。这本书的目的就是满足这种需求。

在计划和撰写本书各章的反复过程中,我遇到一系列未曾料到的困难。第一,一本专著或教科书必须表现一种有逻辑性的序列,举例来说,要从类似于标准的大学物理课程那样的常识背景开始。然而,在已经发表的STM文献中,有很多的不一致和不连续性。要做到一种逻辑上相关的表述,这些材料必先仔细地消化,甚多的空隙必须加以填补。第二个未曾料到的困难是由于下列事实而蹦出来的: STM领域天生就是交叉科学。STM的根,深埋于量子力学、固体物理、化学物理、电子物理、机械工程和控制论之中。要以一种综合和相关的形式组织必要的信息提供给各种阶层的读者,是一项非凡的任务。最后,STM的领域发展得如此迅速,以至于一部艰苦写就的专著或教科书也许在它出版之日就显得过时了。根据这些考虑,在这本书内我根据自己的知识和判断,只挑选了那些属于基础的、不可缺少的而且具有长远价值的题目。

本书由以下各部分组成:第一章,综述,叙述了基本事实、概念和简史。这一章写成普通物理的水平,可以作为一个独立单元来读。最后一节,历史的评论,是STM概念中不可或缺的部分。作为一本教科书的引论部分,不能企图写成STM的有权威性的和全面的历史。虽然如此,我还是尽力使它能保证历史事实的可靠性和确切性。此外,为了进行广泛的文献研究,我还请教了几位在STM及其有关方面的重要科学家。

本书的第一部分是STM和AFM中大部分属于基础物理的系统性描述,从一个单一的出发点,即与时间有关的微扰理论,也就是Bardeen近似的修改本。用于隧道现象的Bardeen近似是理解经典隧道结实验的微扰理论。对于在

STM和AFM方面的原子尺度现象，对原始的Bardeen近似作修正这是必要的。这个近似对于隧道电流、原子引力和一些针尖与样品的相互作用都可提供概念上的理解和分析方面的预测。所有的主要推导都全部详细地给出，使它适合于作为一本教科书和参考书。要理解这第一部分，希望对基本量子力学和基本固体物理有一定的熟悉程度。举例来说，假定读者已经知道的基础量子力学相当于Landau – Lifshitz《非相对论量子力学》的前7章，基础固体物理相当于Ashcroft – Mermin《固体物理》的前10章。

本书的第二部分涉及STM仪器和应用方面的基本物理定律，有若干具体的工作实例。希望读者已经懂得在物理、化学、材料科学或相关的工程学科等系的大学本科生标准课表中经常教到的有关材料。我已经努力使每一章有独立性，使每章都只需稍微参考其他章节就可被看懂。压电效应和压电陶瓷，并不经常在大学中教到，就从基本概念讲起。对于理解STM的运作所必需的控制论基础，在正文和一个附录中向物理学家或化学家们描述。如同在第一部分中一样，所有主要的推导被详细地给出，对于专门的应用，则假定读者对他有兴趣的专门领域(如物理、化学、电化学、生物化学或各种工程科学)已具备初步的知识。

附录包含了那些在一般理科或工科大学生课表中非标准部分的一些题目。它们在通常的教科书中相对地难于找到。理解这些附录，读者被假定为具有一般理科或工科专业本科生的程度。

这本导论式的书，在篇幅和成熟程度方面都只是中等的，它并不企图成为最佳的STM专著。特别是本书的第一部分，并不企图成为所有已发表的STM理论的全面评述。更加成熟的理论工作，如直接基于第一性原理(first principle)数字计算的工作，就不在这本导论之内。由于它适度的范围，

这本书也不想覆盖STM的所有应用。倒不如说，所讲的这些应用实际上作为例证的。有几部收集有关STM应用的极好的评述性文章的集子已经或即将出版。对STM在各种科技领域的应用的详尽描述，需要一部丛书，至少每年加一卷。此外，这本书并不覆盖STM的很多分支，只有简介AFM的一章除外。在书末附上的参考文献也不代表现有STM文献的目录，而是一张对理解STM和AFM中包含的基础物理具有长远价值的参考文献单子。一些相关领域的参考文献也包括在内，主要是为了理解STM和AFM的基本过程。

本书初稿成于1991年。为了保证它内容安排得好，有合理的真实性和准确性，本书的手稿曾送给很多同行科学家评阅，这大部分是由牛津大学出版社安排的。我非常感谢这些评阅者化了大量时间来仔细审查，并写了评阅报告或在手稿上加眉批，提供了大量有价值的意见和建议。这些意见大大地帮助我改正了某些漏列、不确切和不连贯之处，也改进了描述的体裁。在这些评阅人中，有(以字母为序)：A. Baratoff博士(IBM Zurich Laboratory), I.P. Batra博士(IBM Almaden Laboratory), A. Briggs教授(University of Oxford), S. Chiang博士(IBM Almaden Laboratory), R. Feenstra博士(IBM Yorktown Laboratory), N. Garcia教授(Universidad Autonoma de Madrid), R. J. Hamers教授(University of Wisconsin, Madison), J. B. Pethica教授(University of Oxford), C.F. Quate教授(Stanford University), H. Rohrer博士(IBM Zurich Laboratory), W. Sacks教授(University Pierre et Marie Curie), 郑天佐教授(Pennsylvania State University), R.D. Young博士(National Institute of Standard and Technology)。还有一些共事的科学家(也以字母为序)评阅了本书一些专门的

部分: N. Amer博士(IBM Yorktown Laboratory, 第15章), R. Borroff先生(Burleigh Instrument Inc., 第12章), F.J. Himsel博士(IBM Yorktown Laboratory, 第3章), R.I. Kaufman先生(IBM Yorktown Laboratory, 第11章), V. Moruzzi博士(IBM Yorktown Laboratory, 第3章), C. Near先生(Morgan Matroc Inc., Vernitron Division, 第9章), E. O'Sullivan博士(IBM Yorktown Laboratory, 有关电化学的章节), R. Petrucci先生(Staveley Sensors Inc., EBL Division, 第9章), D. Rath博士(IBM Yorktown Laboratory, 有关电化学的章节), C. Teague博士(National Institute of Standard and Technology, 第1章)。在做完了所有的修订之后, 我觉得这本书对读者来说要比原来的稿子好, 因而我对延迟它们的印刷并无遗憾。

我还要感谢牛津大学出版社在物理科学方面的高级编辑J. Robbins先生和A. Lekhwani小姐在出版方面的协助, 特别是手稿的艰苦的评阅过程。我也特别感谢IBM公司Yorktown实验室的Elizabeth McAuliffe, 是她发展了Book-Master软件使我得以准备可供照像排版的手稿, 这是印刷之前评阅过程所必需的。很多同事提供了STM和AFM像的原件, 使我在本书内高质量印刷部分汇编了30幅壮观的图像, 在每页下面我都有感谢。

最后, 我愿意承认, 尽管有了如此广泛的评阅和修订, 本书仍然并非完美, 也不是一种定论。特别是在如此活跃的STM和AFM领域内, 每天都出现新的概念和新的测法。我期望在未来的年月中能作出实质性的进展。当然, 我也希望能够出新的版本。我渴望从读者那儿听到任何意见和建议, 他们将帮助本书未来的版本能更加有用、更加真实和更加确切。正像歌德在《浮士德》中所说的那样:

往往经过多年坚忍，  
那作品才呈现完整。  
闪光只为炫耀一瞬，  
真品方能后世永存。

陈成钧

1992年10月

在纽约州Yorktown Heights

## 中文版序言

扫描隧道显微学在中国，如同其他国家一样，正处于蓬勃发展的和被广泛应用的阶段。因此在本书的中文译本问世之际，我感到特别高兴。我首先要衷心感谢复旦大学的华中一教授在组织翻译和联系出版上所作的不懈努力。特别是华教授选择了擅长于印刷灰度图片的中国轻工业出版社来负责出版事宜，使这本书增光不少。

本书的英文版在1993年出版以来，不少读者仔细地阅读了全书，提出了宝贵的意见并指出了书中的错误之处。在英文版1994年第二次印刷时，大部分已得到更正。一些最近发现的误印将在此书第三次印刷时更正。在中文版出版之时，我们已将这些更正包括在内。

最后，感谢华中一、朱昂如和金晓峰三位教授的精心翻译。华教授还仔细校阅了全稿。牛津大学出版社的Jeffery Robbins先生也在版权转让的过程中给予不少的帮助，在此一并致谢。

陈成钧(C. Julian Chen)  
IBM公司Thomas J. Watson研究中心

# 目 录

<b>第一章 综述</b> .....	(1)
第一节 螺蛳壳里的扫描隧道显微镜 .....	(1)
第二节 隧穿: 基本模型 .....	(3)
第三节 按原子尺度探测电子结构 .....	(10)
一、 半导体 .....	(12)
二、 金属 .....	(19)
三、 有机分子 .....	(20)
四、 层状材料 .....	(21)
第四节 空间分辨的隧道谱 .....	(22)
第五节 侧向分辨率: 早期理论 .....	(28)
一、 Stoll公式 .....	(28)
二、 s-波针尖模型 .....	(30)
第六节 STM中原子分辨率的起源 .....	(34)
第七节 针尖-样品相互作用效应 .....	(39)
第八节 历史话题 .....	(41)
一、 个别原子的成像 .....	(42)
二、 金属-真空-金属隧穿 .....	(46)

## 第一部分 成 像 机 理

<b>第二章 原子尺度的隧穿</b> .....	(57)
第一节 引言 .....	(57)
第二节 微扰逼近法 .....	(59)
第三节 镜像力 .....	(60)
第四节 方势垒问题 .....	(63)

一、 表观势垒高度.....	(66)
二、 测不准原理的考虑.....	(67)
第五节 修改的Bardeen方法.....	(68)
一、 跃迁几率.....	(69)
二、 修改的Bardeen积分.....	(72)
三、 误差估计.....	(73)
四、 波函数校正.....	(74)
五、 与精确解的比较.....	(75)
第六节 镜像力对隧穿的影响.....	(77)
<b>第三章 隧穿矩阵元.....</b>	<b>(79)</b>
第一节 引言.....	(79)
第二节 针尖波函数.....	(80)
第三节 格林函数与针尖波函数.....	(82)
第四节 求导规则: 个案.....	(84)
第五节 求导规则: 通例.....	(87)
第六节 一种直观的解释.....	(91)
<b>第四章 表面的波函数.....</b>	<b>(93)</b>
第一节 表面波函数的类型.....	(93)
第二节 凝胶模型.....	(94)
第三节 表面态的概念.....	(100)
第四节 场发射谱.....	(103)
第五节 光电发射研究.....	(106)
第六节 原子束衍射.....	(109)
一、 Esbjerg-Nørskov近似.....	(111)
二、 Harris和Liebsch方法.....	(112)
三、 原子电荷叠加.....	(113)
第七节 第一性原理的理论研究.....	(114)
一、 密度泛函形式.....	(114)
二、 固体体内的电子结构.....	(116)

三、表面电子结构	(118)
<b>第五章 晶体表面成像</b>	(122)
第一节 STM像的类型	(122)
第二节 具有一维起伏的表面	(124)
一、主要布洛赫波近似	(124)
二、形貌像	(126)
第三节 具有四方对称性的表面	(129)
第四节 具有六角或三角对称性的表面	(132)
第五节 起伏反转	(137)
第六节 s波针尖模型	(142)
<b>第六章 原子态的成像</b>	(147)
第一节 Slater原子波函数	(147)
第二节 STM看到的原子态轮廓	(149)
一、表观半径与表观曲率	(150)
二、与实验的比较	(153)
第三节 Na原子针尖模型	(154)
第四节 表面的像：独立轨道近似	(156)
一、傅里叶系数的一般表达式	(157)
二、应用于Si(111)- $2\times 1$ 的像	(161)
三、应用于密堆积金属表面	(163)
<b>第七章 原子力与隧穿</b>	(167)
第一节 STM中原子力效应	(167)
第二节 作为隧道现象的吸引原子力	(169)
一、互作用的三种体制	(171)
二、范德瓦耳斯力	(171)
三、作为隧穿矩阵元的共振能	(174)
四、修改的Bardeen积分的计算	(177)
五、斥力	(180)
第三节 吸引的原子力与隧道电导	(181)

<b>第八章 针尖与样品的互作用</b>	(189)
第一节 样品波函数的局部修饰	(189)
一、动量空间的观点	(190)
二、测不准原理与扫描隧道谱	(191)
第二节 针尖与样品表面的形变	(192)
一、起伏幅度的力学放大	(192)
二、Pethica机理	(194)
三、引力的起伏及其效应	(195)
四、短距离时STM的稳定性	(197)
五、隧道势垒测量中的力	(200)

## 第二部分 测量设备

<b>第九章 压电扫描器</b>	(206)
第一节 压电效应	(206)
第二节 锆钛酸铅陶瓷	(210)
第三节 三脚架扫描器	(214)
第四节 双压电晶片	(215)
第五节 管形扫描器	(217)
第六节 原位测试与标定	(222)
第七节 共振频率	(226)
第八节 退极化压电元件的再极化	(227)
<b>第十章 振动隔离</b>	(229)
第一节 基本概念	(229)
第二节 环境振动	(234)
第三节 悬挂弹簧	(236)
一、二级系统的分析	(236)
二、弹簧的选择	(237)
三、涡流阻尼器	(239)
第四节 平板—弹性体堆垛系统	(240)

第五节 气动系统	(241)
<b>第十一章 电子仪器与控制</b>	(243)
第一节 电流放大器	(243)
一、热噪声与散粒噪声	(244)
二、频率响应	(246)
三、颤噪效应	(248)
四、对数放大器	(249)
第二节 反馈电路	(250)
一、稳态响应	(251)
二、瞬态响应	(253)
第三节 计算机接口	(258)
一、自动化逼近	(259)
<b>第十二章 粗调定位器与STM设计</b>	(261)
第一节 “小爬虫”	(261)
第二节 杠杆运动——缩尺器	(263)
第三节 单管STM	(265)
第四节 弹簧运动缩尺器	(267)
第五节 惯性步进器	(268)
第六节 “尺蠖”	(270)
<b>第十三章 针尖的处理</b>	(273)
第一节 引言	(273)
第二节 电化学法腐蚀针尖	(274)
第三节 非原位针尖处理	(278)
一、退火	(278)
二、场蒸发与可控淀积	(280)
三、用电场退火	(281)
四、原子的金属离子发射	(282)
第四节 原位针尖处理	(284)
一、高电场处理	(284)