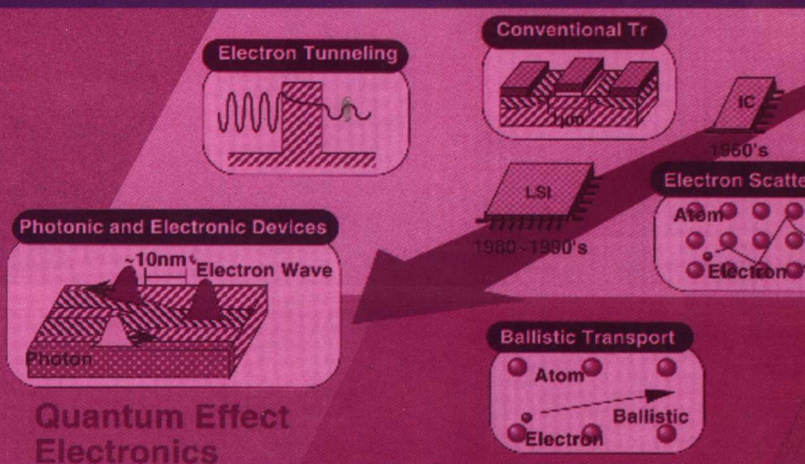
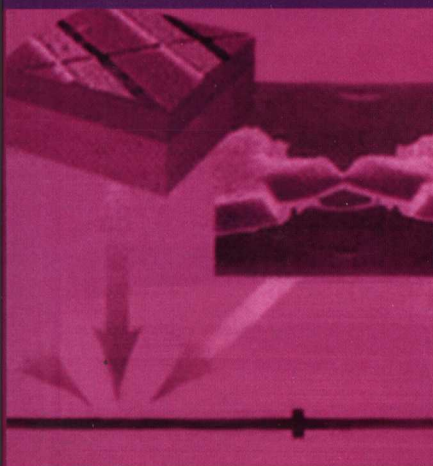


纳电子学丛书

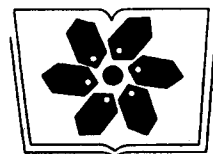
纳电子学 导论

蒋建飞 编 著



科学出版社

www.sciencep.com



中国科学院科学出版基金资助出版

纳电子学丛书

纳电子学导论

蒋建飞 编著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书较系统地概述了纳米科学和技术的最重要的分支——纳电子学。全书共7章。第1章为时空尺度和输运范围,第2章为纳米结构和低维性,第3章为纳米结构中的介观现象,第4章为单电子器件和电路,第5章为纳米MOS器件和电路,第6章为分子器件和电路,第7章为未来可能的发展。

本书可以作为电子科学技术、物理学、计算机科学、化学、生物学、材料科学等交叉学科中从事纳米科学技术学习和研究的本科生、硕士研究生、博士研究生的教材或参考书,也可作为纳米科学技术和相关学科的科学、工程师、教师的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

纳电子学导论/蒋建飞编著. —北京:科学出版社,2006

(纳电子学丛书)

ISBN 7-03-015685-4

I. 纳… II. 蒋… III. 纳米材料:电子材料-研究 IV. TN04

中国版本图书馆CIP数据核字(2005)第062508号

责任编辑:巴建芬 潘继敏/责任校对:钟 洋

责任印制:钱玉芬/封面设计:耕者设计工作室

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双 青 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006年1月第 一 版 开本:B5 (720×1000)

2006年1月第一次印刷 印张:27

印数:1—3 500

字数:530 000

定价:54.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换(环伟))

前 言

20 多年来, 纳米电子科学技术的研究取得了重大的进展. 从传统的自上而下的制造观出发, 科学家和工程师利用 20 世纪 70 年代发展起来的分子束外延 (MBE) 技术、金属有机化学气相淀积 (MOCVD)、化学束外延 (CBE) 等实现了原子和分子层级超薄膜晶体生长; 电子束 (EB) 和聚焦离子束 (FIB) 技术等已经成功地刻蚀出纳米级图形. 科学家和工程师们借此不断减小固体的维度来制备量子点、量子线、量子网络, 研制各种纳米电子器件更加自如. 他们已经研制成功室温工作的硅基单电子晶体管和 10 nm 量级栅长纳米 MOS 晶体管. 这个事实告示人们, 纳米 ULSI 已经到来, 不再是纸上谈兵.

就著名物理学家费恩曼自下而上的原子组装观而言, 20 世纪 80 年代扫描隧道显微镜 (STM) 的发明及随之发展成为大家族的扫描探针显微镜 (SPM, 它包括了扫描隧道显微镜、原子力显微镜 (AFM)、磁力显微镜 (MFM)、静电力显微镜 (EFM)、摩擦力显微镜 (LFM)、扫描隧道电位仪 (STP)、弹道电子发射显微镜 (BEEM)、扫描离子电导显微镜 (SICM)、扫描热显微镜 (STHM)、光子扫描隧道显微镜 (PSTM) 等), 使科学家和工程师们人工测控单个原子和 DNA 变成了现实. 近年实现的量子栅栏和量子幻影向世人展示了量子世界生动的场景, 并对纳米电子科学技术带来了巨大推动力. 化学家把碳气化并用钴和镍处理后得到的纳米碳管是一个长的分子串, 其本身就是一维量子线, 科学家已经证实切下这一分子串的任何一段, 都可以观测到库仑阻塞、库仑振荡和栅控效应.

诺贝尔物理奖得主、美国哥伦比亚大学教授施特默指出: 毫无疑问, 21 世纪是纳米技术世纪. 以越来越小的晶体管为基础的电子技术, 仍将是这一技术的发展动力, 我们现在已经着手量子计算机的研究工作. 它的计算部件就是由单个电子组成的, 它完全按照一种全新的原理工作. 今后 10 年, 纳米技术在科学界将是进展最大的一个领域, 化学家、物理学家、电子工程师以及生物学家将在这个领域内进行合作. 物理学家们研究的范围大到天体, 小到原子. 化学家们则把原子合成为更大的单位, 即分子. 生物学家们观察自然现象并把物体分解成越来越小的部分. 电子工程师在制造越来越小的晶体管方面进行尝试. 所有这些技术水平要求高的实验都汇集在纳米技术上. 这将对研究机构和大学产生重大影响, 学科之间的界限在消失, 这为我们的研究人员扩大视野提供了良机.

在以上的背景下, 科学家和工程师们加快了纳米科学技术, 特别是纳米电子科学技术学 (纳电子学) 的研究. 这一领域的研究者和学习者都迫切需要系统地了

解这一正在不断发展和形成的新兴学科的研究内容、基本原理和实验方法。与此交叉的介观物理学、纳米化学、纳米生物学和纳米材料学等各行各业的相关研究者和学习者也都希望有系统论述这一领域的专门著作。这些正是出版“纳电子学丛书”的动机。

作者期望系统地论述“纳电子学”的想法始于15年前在日本横滨国立大学任客座教授期间。当时国外这一领域基础研究的大量专著和单电子学研究极大地吸引了作者。多年来，作者在这一领域从事基础理论和实验课题的研究和教学，长期坚持大量研读这一领域的权威文献和专著，以坚韧的毅力完成了“纳电子学丛书”初稿的编著，并逐步定稿出版。首先出版的是《纳电子学导论》，它是对这一领域的综合论述。随后陆续出版的将是主要纳电子器件的器件物理、电路原理和模拟方法。

虽然对本丛书书稿历经多次修改和校正，但由于涉及的范围实在广泛，文献繁多，而且发展又日新月异，不少分支作者也未能经历研究实践，所以在取材和阐述上会有很大的局限性；在对发展前景的评述上也会受到作者研究经历和喜爱左右，未必都能抓住关键；再加上作者水平所限，书中一定会出现不少错误与不妥之处，恳请广大读者批评指正。

在本丛书开始出版之际，作者首先要特别感谢李志坚院士和沈天慧院士积极推荐本丛书出版，感谢他们对确立全书编著大纲的宝贵指导。

作者要衷心感谢中国科学院科学出版基金的资助。深切感谢科学出版社的编辑，他们为本丛书的出版已经付出和将要付出的大量心血和精力，保证了本丛书的出版质量。

作者要真诚地感谢蔡琪玉副教授和我们的学生沈波博士、郭靖博士、童明照、黄萍、程子川、乐嘉勇博士研究生、杨涛博士研究生、尹友博士、吕明、胡潮红博士、周松博士、程嘉博士研究生、汪阳博士研究生等为本丛书的素材收集提供了最热心的帮助。在和他们相处的时间内，雷打不动的多年定期的师生“纳电子学学术研讨会”从另一个侧面为本丛书提供了支持。最后还要感谢蒋惠玲博士和蒋惠敏在本丛书编著过程中所给予的热心帮助。

在本丛书编著过程中，作者参阅了大量文献和专著，吸取了有创意的观点，在此对这些作者表示真切的谢意。

蒋建飞

2005年6月于上海

目 录

前言

第 1 章 时空尺度和输运范围	1
1.1 引言	1
1.2 纳米尺度	2
1.3 介观尺度	3
1.3.1 空间尺度	5
1.3.2 时间尺度和时间(频率)范围	17
1.3.3 回旋加速器频率和半径	18
1.4 电子输运范围	19
1.4.1 量子 and 介观输运范围	19
1.4.2 经典输运范围	20
参考文献	21
第 2 章 纳米结构和低维性	22
2.1 2D 纳米结构	22
2.2 1D 纳米结构	26
2.3 0D 纳米结构	31
2.4 低维性和态密度	35
2.4.1 低维性	35
2.4.2 态密度	36
参考文献	50
第 3 章 纳米结构中的介观现象	51
3.1 Bloch 定理和有效质量	51
3.1.1 Bloch 定理	51
3.1.2 准动量和有效质量	54
3.2 电导量子化	57
3.3 热导量子化	61
3.4 单电子现象	64
3.4.1 库仑阻塞	65
3.4.2 库仑台阶	67
3.4.3 单电子振荡	69
3.4.4 单库柏对振荡	71

3.4.5 关联效应	72
3.5 人造原子	76
3.5.1 2D 人造原子	77
3.5.2 0D 人造原子	78
3.5.3 量子化能量	82
3.6 量子环	84
3.6.1 Aharonov-Bohm 效应	84
3.6.2 1D 介观金属环中的永久电流	87
3.6.3 2D 介观金属圆柱壳中的永久电流	88
3.7 量子围栏和量子阴影	89
3.8 普适电导涨落	98
参考文献	99
第4章 单电子器件和电路	101
4.1 纳米器件	101
4.2 单电子研究简史	105
4.3 性能的理论极限	112
4.4 测控条件和电源影响	113
4.4.1 测控条件	113
4.4.2 电源影响	114
4.5 理论背景	115
4.5.1 正统理论	115
4.5.2 超正统理论	119
4.6 单电子隧道结	121
4.7 单电子箱	123
4.8 单电子晶体管	125
4.8.1 电容耦合单电子晶体管	125
4.8.2 电阻耦合单电子晶体管	147
4.9 单电子陷阱	153
4.10 单电子旋转门和单电子泵	155
4.11 单电子振荡器	156
4.12 单电子电路概论	158
4.13 单电子计量学电路	159
4.13.1 超高灵敏度静电计	159
4.13.2 单电子能谱仪	160
4.13.3 标准直流电流仪	161
4.13.4 标准温度计	162

4.13.5	标准电阻器	162
4.13.6	红外辐射探测	163
4.14	单电子逻辑电路	164
4.14.1	单电子电压态逻辑	164
4.14.2	单电子电荷态逻辑	167
4.14.3	实用化的困难	168
参考文献		170
第5章	纳米 MOS 器件和电路	185
5.1	实验型纳米 MOS 器件	185
5.1.1	常规纳米 MOSFET	185
5.1.2	单栅全耗尽衬底纳米 CMOSFET	193
5.1.3	双栅全耗尽衬底纳米 CMOSFET	195
5.1.4	三栅全耗尽衬底纳米 CMOSFET	196
5.1.5	垂直沟道型纳米 CMOSFET	197
5.2	按比例缩小法则	198
5.2.1	摩尔定律	198
5.2.2	按比例缩小法则理论	201
5.2.3	按比例缩小法则的限制	206
5.3	纳米 MOS 电路设计分析中的器件模型	219
5.3.1	纳米 MOS 器件传统模型的比较	219
5.3.2	BSIM-4 模型的描述	223
5.4	纳米 MOS 逻辑电路	271
5.4.1	标准 CMOS 型	272
5.4.2	非标准 CMOS 型	274
5.4.3	负载驱动能力和阈值电压变化	282
5.5	纳米 MOS 模拟电路	285
5.5.1	RF CMOS 管	285
5.5.2	RF 集成系统	292
5.5.3	纳米 CMOS 低噪声放大器	294
5.5.4	纳米 CMOS 混频器	298
5.5.5	纳米 CMOS 振荡器	300
参考文献		302
第6章	分子器件和电路	311
6.1	发展背景和前景	311
6.1.1	背景	312
6.1.2	发展前景	314
6.1.3	里程碑式的关键技术	316

6.2 分子器件	325
6.2.1 构象变化型单分子晶体管	325
6.2.2 单电子传输型单分子晶体管	325
6.2.3 内部机械运动型单分子晶体管	328
6.2.4 电势调制型单分子晶体管	331
6.2.5 其他可能的单分子器件	331
6.3 聚亚苯基分子逻辑电路	367
6.3.1 聚亚苯基分子二极管逻辑电路	367
6.3.2 聚亚苯基分子晶体管逻辑电路	379
6.4 交叉纳米线电路	380
6.5 碳基纳米电路	382
6.5.1 碳纳米管电路	382
6.5.2 C ₆₀ 机电型电路	384
6.6 卟啉纳米电路	385
参考文献	386
第7章 未来可能的发展	395
7.1 纳米 CMOS 器件的发展极限	395
7.2 自展开神经网络	396
7.2.1 单电子神经键	396
7.2.2 自由生长神经网络	398
7.2.3 随机分布神经网络	402
7.3 混合型纳米 ULSI	405
7.3.1 功能型混合集成	405
7.3.2 结构和功能型的混合集成	407
参考文献	420

第 1 章 时空尺度和输运范围

1.1 引言

近 20 多年来,纳米科学与技术学(纳米学)这个科学术语及其内涵引起了世人的普遍关注,它有可能掀起人类认知上的新突破、技术上的新飞跃和工业上的新革命. 这是一个综合性的交叉学科,它的发展和深入研究,必将给人类的生存和发展产生巨大的影响. 然而,我们也必须清楚地看到,要想在单分子和单原子尺度上实现这一目标,并使之完全实用化,必须经历极其艰难困苦的路程,需要长时间的研究努力. 虽然现代高科技飞速的发展,有可能缩短这个历程,但仍存在许多根本性的问题,包括正确的哲学观、科学观、理论体系和具体的技术难题. 然而,从传统微米芯片不断向小型化推进的角度来看,如果我们接受公认的纳米上限是 100 nm 尺度,则在 2000 年微芯片研究者就制成了这样的纳米 MOS 器件. 现在市面上主要 CMOS 集成电路中器件的栅极宽度已低于 50 nm,真正进入了第一代纳米芯片的时代^[1].

正如微米科学和技术的最重要的分支是微电子学一样,纳米科学和技术的最重要的分支则为纳电子学. 从人类传统概念的自上而下的制造观而言,纳电子学是微电子学继续向微小世界,更微小世界不断发展的自然延伸;而从著名物理学家费恩曼(Richard P. Feynman)的自下而上的原子组装观^[2]而言,它又是在全新概念上用单个原子和单个分子的组装来构建纳米结构、纳米器件,纳米电路和纳米集成系统的新领域.

纳电子学是在特征长度为 0.1~100 nm 的纳米器件中探测、识别与控制单个量子(如单个电子、单个电子对、单个光子、单个磁通量子、单个原子和单个分子);少数几个量子或量子波的运动规律;研究原子、分子人工组装和自组装而成的器件;研究在人造原子(量子点)、量子线和量子点阵内,单个量子、少数几个量子或量子波所表现的特征和功能. 用于信息的产生、传递和转换的器件,电路和系统及其在信息科学技术中应用的学科,也可以称其为介观电子学.

物理学、化学、生物学和工程学的深入发展为纳电子学的创建提供了坚实的基础. 物理学是通过凝聚态物理中的金属、半导体、超导体和绝缘体不断减小其维度而得的 2D、1D 和 0D 纳米结构(nano-structure)中所呈现的介观效应为纳电子学提供基础的. 化学是通过原子学、分子学、超分子结构学为纳电子学提供基础的. 生物学是通过自然系统到细胞、到蛋白质的发展研究为纳电子学提供基础的. 工程学是通过不断创新,改进微米尺度加工技术,纳米尺度加工技术中所用的精密仪器、仪

表、设备为纳电子学的发展提供测控和制造工具的. 图 1.1.1 示出了它们之间的关系.

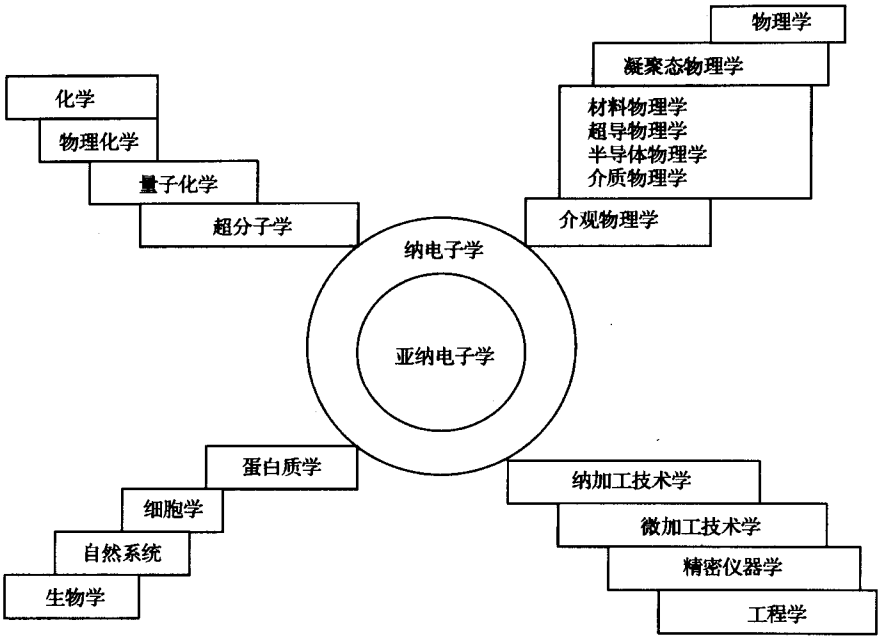


图 1.1.1 纳电子学的创建依赖于介观物
理学、超分子结构学、蛋白质学和纳米制造学

1.2 纳米尺度

基于不同的发展阶段和研究角度,作者把特征尺寸为 $0.1\sim 1.0\text{ nm}$ 的纳电子器件称为亚纳米器件,它实质上是原子和分子尺度的电子器件,相应的电子学为亚纳电子学. $1.0\sim 10\text{ nm}$ 的纳电子器件称为纳米器件,主要属于量子点(本书以后称为人造原子)、量子线等人造量子结构的电子器件和纳米 MOS 器件等,相应的电子学为纳电子学. 而把 $10\sim 100\text{ nm}$ 的纳电子器件称为准纳米器件,主要是指共振隧道效应器件、自旋器件和单磁通量子器件等,相应的电子学为准纳电子学. 单电子学在亚纳电子学、纳电子学、准纳电子学中均能实现,仅是允许的工作温度不同^[3]. 这里所说的器件工作的特征长度是指有源区的几何长度,如纳米 MOS 器件的沟道长度、单电子器件的库仑岛尺度等.

提出以上纳米尺度(nano-scale)的概念,是基于 20 世纪下半叶以来由微米尺度器件为基础的微电子学发展史和对未来发展预测的启示. 1947 年第一只晶体管划时代的发明开创了微米尺度电子器件的纪元,它的特征长度基区宽度为 $50.8\text{ }\mu\text{m}$,用我们的话来说是一种准微米器件(特征长度在 $100\sim 10\text{ }\mu\text{m}$). 随后以金属-

绝缘体-半导体场效应晶体管(metal-oxide-semiconductor field effect transistor, MOSFET)为核心,不断地经历着小规模集成电路、中规模集成电路、大规模集成电路和超大规模集成电路的发展. 每个芯片上集成的器件数越来越多,单个器件的特征尺寸,即沟道长度越来越短,其间经历了 $10\mu\text{m}$ 以上, $10\sim 1.0\mu\text{m}$, $1.0\sim 0.1\mu\text{m}$,并以很快的速度进入了亚 100 nm 的尺度.

1.3 介观尺度

为了更好地描述纳米器件中的电子输运,需要引入若干物理特征长度和界定输运范围. 首先列出结果,随后进行具体描述. 这些物理特征长度包括 de Broglie 波长 λ , 或取 Fermi 波长 λ_F ; 平均自由程(mean free path) $\mathcal{L}_e$, 也称为弹性散射长度(elastic scattering length); 能量弛豫长度(energy relaxation length) $\mathcal{L}_E$, 或称为非弹性散射长度(inelastic scattering length) $\mathcal{L}_i$, 热扩散长度(thermal diffusion length) $\mathcal{L}_T$, 相位相干长度(phase coherence length) $\mathcal{L}_\phi$, 或称退相位长度(dephasing length)和相位弛豫长度(phase relaxation length)等. 如果以一维(one dimensionality, 1D)纳米器件为例, 这些物理特征长度与纳米器件中电子传输方向上的有源区长度(如 L_x)进行相对大小的比较,可以界定电子输运是量子还是经典范围,如表 1.3.1 所示. 图 1.3.1 还给出了纳米器件中特征长度的间隔和纳米尺度范围. 其中线段上标记 L 的表示纳米尺度的范围, 线段上标记 λ 的表示 de Broglie 波长间隔, 线段上标记 $\mathcal{L}_e$ 的表示平均自由程间隔, 线段上标记 $\mathcal{L}_E$ 的表示能量弛豫长度间隔, 线段上标记 $\mathcal{L}_\phi$ 的表示相位相干长度间隔. 作为实例,各特征长度线上的椭圆点表示半导体 Si 纳米器件中电子迁移率为 $10^4\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, 温度为 77 K 时特征长度的计算值.

表 1.3.1 纳米器件中电子输运范围

电子输运范围	纳米器件的有源区长度和物理特征长度的相对关系
量子	$L_x \sim \lambda_F$: 微观 $L_x \leq \mathcal{L}_\phi$: 介观
经典	$L_x > \mathcal{L}_\phi$: 宏观 $\mathcal{L}_e \geq L_x$: 经典弹道范围 $\mathcal{L}_E \geq L_x \geq \mathcal{L}_e, \mathcal{L}_\phi$: 经典准弹道范围 $L_y, L_x \sim \mathcal{L}_e$: 反映垂直尺寸效应, 器件的电阻强烈依赖于侧面边界的性质 $L_y, L_x \sim \mathcal{L}_E$: 器件边界提供了一个附加的能量弛豫通道, 垂直尺寸效应控制了非平衡电子的平均能量

从表 1.3.1 可见, 条件 $L_x \sim \lambda_F$ 和 $L_x \leq \mathcal{L}_\phi$ 表明电子在纳米器件中的运动空间已被局限在电子作为微观粒子固有的量子力学特征: 波动性起支配作用的范围内和临界范围内. 根据我们所描述的纳米尺度, 不难看出, 这种纳米器件也可以称为介

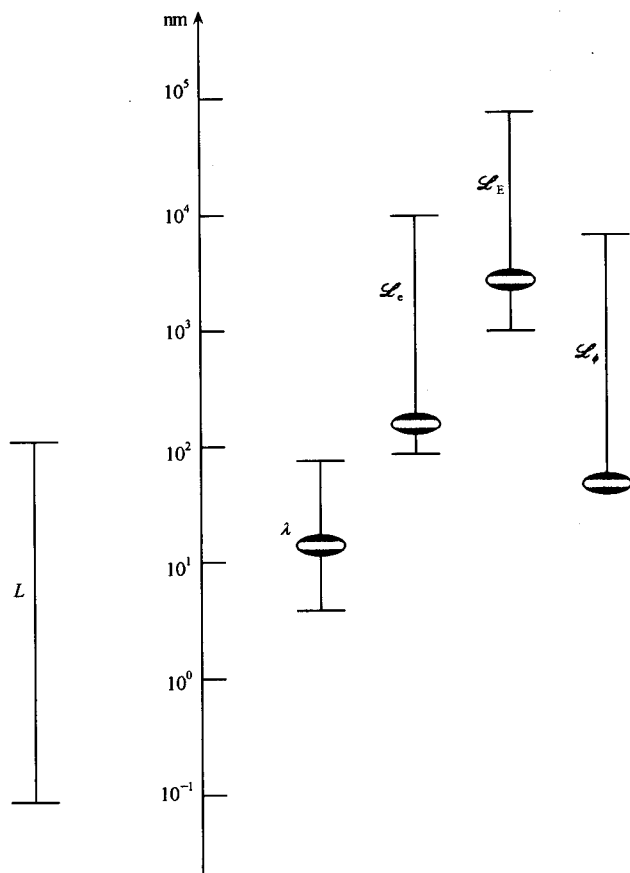


图 1.3.1 纳米器件中物理特征长度的间隔和纳米尺度范围

观器件,特别是在室温下更是如此.显然,称其为介观器件主要是因为对于这种尺度的器件既不能看成宏观客体,也不能看成微观客体,而是一种介观客体,也有人称为中观客体.为此,在本书中,一般情况下不再区分纳米器件和介观器件.

用维度来描述纳米器件或介观器件,不仅可以清晰表述其物理特征,而且更加接近工程的实现.介观器件常被称为介观体系或者介观系统.介观系统中各种物理效应常称为介观现象,论述介观现象的理论为介观物理.介观系统可以是人造量子系统,也可以是天然量子系统.从纳电子学角度而言,我们主要关心人造量子系统 (artificial quantum systems),所谓人造量子系统是指通过设置人造势场和人造边界条件来控制微观粒子(电子、光子、原子和声子等)量子运动的系统.设置人造势场和人造边界条件也称为约束量子.常见的有约束电子、约束光子、约束原子和约束声子等.纳电子学主要关心约束电子.

今天,纳米科学和技术的发展使我们有可能构建各种介观系统.包括人造原子 (artificial atom) 或量子点 (quantum dot) 和量子点接触 (quantum point

connect)、量子线 (quantum wire)、量子管 quantum tube)、量子环 (quantum ring)、量子平面 (quantum plane)、量子固体 (quantum solid state) 和介观隧道结 (mesoscopic tunneling junction) 等. 在用量子理论描述这些结构时, 我们将它们归纳为四大量子系统, 它们分别为 2D 量子系统 (量子平面或量子阱)、1D 量子系统 (量子线、量子管和量子环等)、0D 量子系统 (人造原子和人造原子网络或量子点接触、量子点、量子点网络) 和量子隧道结系统. 量子隧道结又分为宏观隧道结和介观隧道结两类. 宏观隧道结是指结面积大至具有宏观尺度的隧道结, 介观隧道结是指结面积小至具有介观尺度的隧道结. 两者的主要区别在于介观隧道结呈现库仑阻塞效应, 它是单电子器件的物理基础. 宏观隧道结的量子阱也为 2D 电子系统, 而介观隧道结的库仑岛一般则为 0D 电子系统.

为了从不同角度理解纳米器件和介观系统的界定方式和输运特征, 我们进一步描述表 1.3.1 和图 1.3.1 提到的特征长度和电子输运范围.

1.3.1 空间尺度

空间尺度包括 de Broglie 波长和 Fermi 波长, 几何长度和维度, 平均自由程和散射长度, 热扩散距离和相位相干长度等.

1.3.1.1 de Broglie 波长和 Fermi 波长

为了描述 de Broglie 波长, 必须首先简述微观粒子的波粒二象性.

光子、电子、质子、中子、原子和分子等统称为微观粒子. 静止质量 m_0 不为零的粒子又称为实物粒子. 以上列出的微观粒子除光子的静止质量为零外, 其他均不为零, 所以均是实物粒子.

历史上微观粒子的波粒二象性物理图像的揭示分为两个阶段: 首先是 1905 年 Einstein 对传统概念下光的波动性提出挑战, 认为光不仅具有波动性, 而且具有粒子性. 其次是 1923 年 de Broglie 同样冲破传统概念, 逆 Einstein 概念而行, 提出了实物粒子不仅具有粒子性, 还具有波动性. 由此使得波粒二象性成为所有微观粒子基本物理图像.

首先看光的波粒二象性. 众所周知, 电动力学的基本方程 Maxwell 方程很好地描述了光的波动性, 并得到如反射、衍射、折射和干涉等现象的证实. 对于光是否具有粒子性, Einstein 给出肯定的回答: 光不仅具有波动性, 而且具有粒子性. 他认为电磁辐射不仅是在被发射和吸收时以能量 $E=h\nu$ 的光子出现, 而且以速度 c 在空间传播. 应用这一观点, 他成功地解释了光电效应: 当光照到金属表面时, 能量为 $h\nu$ 的光子被电子吸收, 电子把这能量的一部分用来克服金属表面对它的吸力, 另外一部分则成为电子离开金属表面以后的动能. 这种经光照以后逸出金属表面的电子称为光电子.

根据能量守恒定律可以写出

$$E = h\nu = W_0 + m_e v^2/2 \quad (1.3.1)$$

式中 m_e 是电子质量; ν 是光波的频率; $h = 6.6262 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ 是 Planck 常量; v 是电子逸出金属表面以后的运动速度; W_0 为电子逸出金属表面所需做的功.

如果金属中电子所吸收的光子能量 $h\nu$ 小于逸出功 W_0 , 则电子就无法从金属表面逸出, 因而就不会有光电子产生. 光波的频率决定了光子的能量, 而光的强度则由光子数决定. 光波的频率越高、光子数越多, 则产生的光电子也越多. 这样, Einstein 不但解释了光电效应的实验事实, 而且还揭示了光的粒子性.

光子不但具有确定的能量 E , 而且具有动量 p . 由相对论可以知道, 以速度为 v 运动的粒子, 其能量为

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.3.2)$$

注意到光子的速度 $v = c$, 则由上式可知, 光子的静止质量等于零; 再依据相对论中能量和动量的关系式

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 p^2 \quad (1.3.3)$$

可得光子能量 E 和动量 p 之间有关系

$$E = cp \quad (1.3.4)$$

所以光子的能量 E 和动量 p 分别为

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.3.5a)$$

$\hbar = h/2\pi$ 是约化 Planck 常量; $\omega = 2\pi\nu$ 为光波的角频率.

$$p = \frac{h\nu}{c} \mathbf{n} = \frac{h}{\lambda_\gamma} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad (1.3.5b)$$

式中 $\mathbf{n}$ 表示沿光子运动方向的单位矢量; $\mathbf{k}$ 为波矢, 它与光波的频率 ν 和波长 λ_γ 的关系为

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi\nu}{c} \mathbf{n} = \frac{2\pi}{\lambda_\gamma} \mathbf{n} \quad (1.3.6)$$

方程(1.3.5)把光的两重性质: 波动性和粒子性联系在一起, 即能量和动量是描述光的粒子性的, 而频率和波长则是描述光的波动性的.

其次来看实物粒子的波粒二象性, 正如前述, de Broglie 首先提出了实物粒子也应具有波粒二象性的特征. 他认为反映光波粒二象性的方程(1.3.5)也可以用在实物粒子中, 即有

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.3.7a)$$

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad (1.3.7b)$$

式(1.3.7)被称为 de Broglie 方程, 而

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{k} \quad (1.3.8)$$

则为 de Broglie 波长.

假定自由粒子的能量为 E , 粒子的速度远小于光速, 则 $E = p^2/2m$, 由式(1.3.8)可得自由粒子的 de Broglie 波长为

$$\lambda_0 = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (1.3.9)$$

为了有一个数量级概念, 考虑非相对论电子, 或者近似说自由电子 e 由电位差 $V = 150\text{V}$ 进行加速, 则电子能量为 $E = eV$, 其 de Broglie 波长, 或电子波长为

$$\lambda_0 = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \approx \sqrt{\frac{150}{V}} = \frac{12.25}{\sqrt{V}} (\text{\AA})$$

由此可见, 当用 150V 电势差加速电子时, de Broglie 波长约为 0.1 nm , 而电位差达到 10000 V 时, de Broglie 波长只有 0.0122 nm 了.

特别使我们感兴趣的是在凝聚态物质中电子的 de Broglie 波长. 在凝聚态物质(如半导体)中的电子要用称之为有效质量 m^* 的量来表征, 这个有效质量一般要比自由电子的质量小, 它的引进是有重要意义的. 这样, 在半导体中电子的 de Broglie 波长 λ 要比自由电子的 de Broglie 波长 λ_0 更长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m^*E}} = \lambda_0 \sqrt{\frac{m_0}{m^*}} \quad (1.3.10)$$

图 1.3.2 示出了凝聚态物质中电子的 de Broglie 波长 λ 作为有效质量 m^*/m_0 函数的关系, λ 也被称为电子波长. 曲线上的点 1、2、3 和 4 分别代表半导体 InSb、GaAs、GaN 和 SiC 中电子的 de Broglie 波长. 它们所对应的有效质量 m^*/m_0 分别为 0.014 、 0.067 、 0.172 和 0.41 . 可以指出, 在典型的半导体中, 当环境温度 $T =$

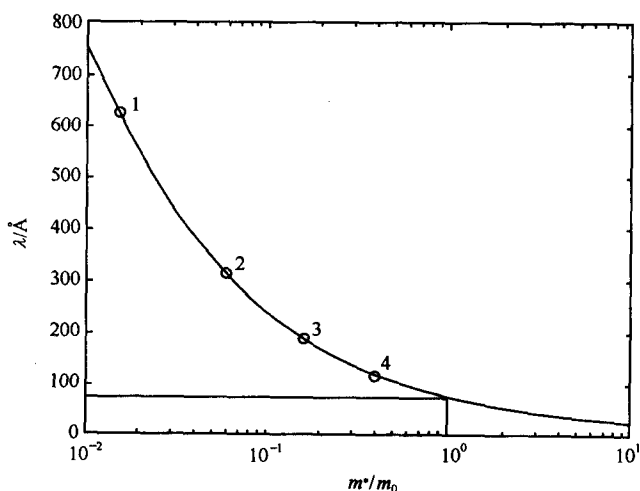


图 1.3.2 在凝聚态物质中, 室温下电子 de Broglie 波长随有效质量的变化关系^[4]

300K 时,带有热能 $E = k_B T$ 的电子,其有效质量范围为 $0.01 \sim 1.0 m_0$,而 de Broglie 波长为 $7.3 \sim 73.0 \text{ nm}$,这里 $k_B = 1.38062 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ 是 Boltzmann 常量.如果温度下降到 3K,则 de Broglie 波长将会增大一个数量级.从这些数据可以看出,半导体中电子 de Broglie 波长已经可以与现代纳米制造技术构建的纳米结构和器件的特征尺寸相比较,这正是介观器件物理必须使用量子理论描述的原因.

应该指出,基于微观粒子波粒二象性物理图像,可以推演出量子力学的三个重要基本特征:描述方式的概率性、物理量的离散性或量子性以及物理量的测不准关系或不确定性关系.

de Broglie 波长 λ 虽然是电子波动性的主要特征,但是在纳米器件中,研究者更关心的是与之相当的 Fermi 波长 λ_F ,并把它作为纳米器件中电子的波长.众所周知,电子是具有自旋为 $1/2$ 的微观粒子,遵循泡利不相容原理,不可能有两个电子占据同一状态.因此,正如在固体中一样,介观系统中的电子被排列在所有可能的能量状态上,第一个电子处在最低的能量状态,下一个电子处在比较高的能态上,当所有的电子排列好以后,最后一个电子将处在最高能态上.而这个最高的能量称为 Fermi 能量 E_F ,Fermi 波长 λ_F 和 E_F 之间的关系为

$$\lambda_F = h / \sqrt{2m^* E_F} = \sqrt{2\pi/n_s} \quad (1.3.11)$$

从电子输运的角度而言,处在或者接近 Fermi 能量 E_F 的那些电子是最重要的.所以可由 Fermi 波长 λ_F 作为纳米器件中电子量子输运代表性的特征长度.当电子的面密度 n_s 为 $5 \times 10^{11} / \text{cm}^2$ 时, λ_F 约为 35 nm .

不受任何外力作用的自由粒子是动量和能量都不随位置和时间变化的一个特殊力学体系,而与之相联系的物质波,其频率和波长都是恒定的,因而它实际上是一种平面波,可以表示为

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \cos \left[2\pi \left(\frac{\mathbf{r}}{\lambda} \cdot \mathbf{n} - \nu t \right) \right] = A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

写成复数的形式为

$$\psi = A e^{i\phi} = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1.3.12)$$

将式(1.3.7)代入式(1.3.12),可得

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (1.3.13)$$

这个与自由粒子相联系的波被称为 de Broglie 波,即为自由粒子的波函数,与经典力学中的平面波不同之处在于,这里的 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 必须取复数形式. A 是自由粒子的 de Broglie 波的恒定振幅, $\mathbf{k}$ 是自由粒子的 de Broglie 波的波矢, ω 是和自由粒子的能量相联系的 de Broglie 波的角频率,而 $\phi = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$ 是它的相位.

1.3.1.2 几何长度和维度

介观系统中的几何长度 L 可以决定系统的维度,从而确定电子运动的路线.