

扫描隧道显微镜

戴道宣

(复旦大学现代物理研究所)

近几年来，利用在真空中金属表面隧道效应的原理来设计的扫描隧道显微镜(Scanning Tunneling Microscopy, 缩写为 STM)，它真实、直观，且具有 0.1nm 量级的超高分辨率。由于它的分辨率低于元素晶体的晶格常数(一般 $<1\text{ nm}$)，因此它是研究固体表面原子结构的理想实验手段之一。1983年用它首次在实时空间内观察到Si(111)表面 7×7 的大元胞^[1]，在科学界引起强烈的反响。STM的最新进展表明，它将在原子尺度范围内帮助人们揭示表面原子的运动规律，可广泛用于研究固体表面原子结构和外来原子在表面的吸附等问题，为探讨吸附、催化和腐蚀等机理以及利用表面效应制造新型器件提供有用的信息。

一、物理基础

1. 隧道效应

粒子可穿透势垒的现象称为隧道效应。经典理论认为，动能低于势垒的电子不能穿透势垒，而根据量子理论，上述电子可部分穿过势垒，这一点早在三十年代即为实验证实，并由Fowler^[2]等给出了真空中金属表面隧道电流的理论计算。除早期在金属表面(实际为气/固界面)观测到隧道效应外，随后在固/固界面也发现有隧道效应。Esaki^[3]在高掺杂锗的p⁺-n⁺结中发现有隧道效应，Giaever^[4]用Al/15-20Å氧化铝/铅固体隧道结在液氦温度下测量超导体铅的能隙，Wolfam^[5]研制成非弹性隧道谱仪用于表面研究。直流约瑟夫森隧道效应有可能用于制造超高速计算机。1982年，Binnig^[6]等研制成功第一台扫描隧道显微镜，把隧道效应的应用推向一个新的阶段。

物理

2. 隧道电流的理论计算

下面简要介绍Fowler^[2]等提出的强电场下真空中冷金属表面电子发射的近似理论。为简化起见，只讨论一维空间。不加外电场时，真空中金属表面的阶跃势垒如图1(a)中OCG所示，外加直流电场后则变为如图1(b)中的三角

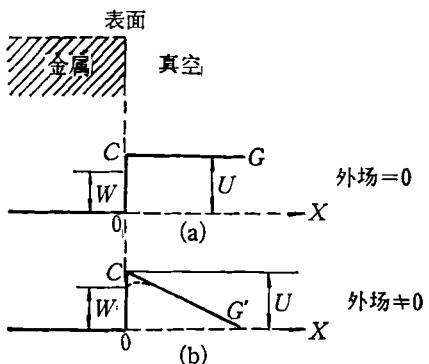


图1 真空中金属表面势垒

形势垒 OCG' ，考虑镜象力后势垒如图1(b)中虚线所示。设金属表面势垒高度为 U ，电子动能为 W ($W < U$)，计算动能为 W 的电子垂直射向金属表面时形成的隧道电流。坐标原点 O 取在金属表面/真空界面处， OX 轴垂直金属表面指向真空，金属表面两侧的薛定谔方程为

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2\psi}{dx^2} + l^2(W - U + Ex)\psi = 0, \quad (x > 0) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + l^2W\psi = 0, \quad (x < 0) \end{array} \right. \quad (1)$$

$$l^2 = 8\pi^2m/h^2, \quad \psi \text{ 为电子的波函数, } E \text{ 为电场强度, } m \text{ 和 } h \text{ 分别为电子质量和普朗克常数.}$$

利用 ψ 和 $\frac{d\psi}{dx}$ 在 $x = 0$ 处连续的边界条件，可给出单位表面上的隧道电流 I 为

$$I = \frac{q}{2\pi h} \frac{\mu^{1/2}}{(\varphi + \mu)\varphi^{1/2}} E^2 e^{-(4\varphi^{1/2}/3E)}, \quad (3)$$

式中 q 和 μ 分别为电子电荷和金属的化学势。注意到图 1(b) 中有 $\varphi = Ex$, 令 $F = \frac{4}{3}l \approx 1.025 \text{ eV}^{-1/2} \text{ Å}^{-1}$, 则

$$I \propto \frac{1}{R} \propto e^{-(Fx\varphi^{1/2})}, \quad (4)$$

式中 R 为隧道电阻。当 φ 不变时, 隧道电流 I 随真空间隙 x 的减小而指数上升。(4) 式取对数后得

$$\varphi^{1/2} = \frac{d \ln R}{dx}. \quad (5)$$

实验测得 I 和 R 随 x 的变化关系如图 2 所示^[6]。由图 2 中的 $\ln R$ 和 $\ln I$ 随 x 近似有线性关系, 可证明(4)和(5)式正确, 在图 2 中的(a)和(b)两种情况下, 由斜率算出的功函数分别为 0.6eV 和 3.2eV。图 2 中横坐标的原点有一定任意性, 只有 dx 有实际意义。

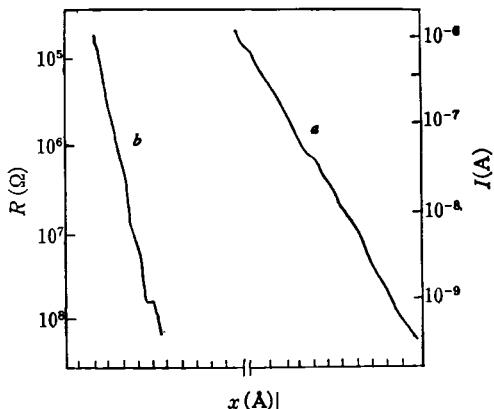


图 2 $\ln I$, $\ln R$ 与 x 的实验测量结果

二、成象原理

由图 2 可看出, 测量隧道电流的关键在于精确控制真空间隙在 0.1nm 范围内的变化, 如要测量隧道电流随样品位置的变化 (即面分布), 就更为困难, 因为任何极微小的机械振动都会使测量遭到失败。Binnig 等采用先进的低温超导磁力悬浮防震与精密压电控制相结合的技术

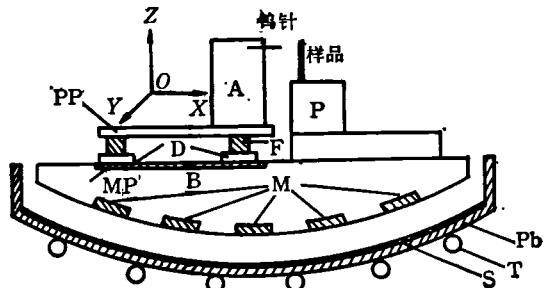


图 3 STM 的主体结构

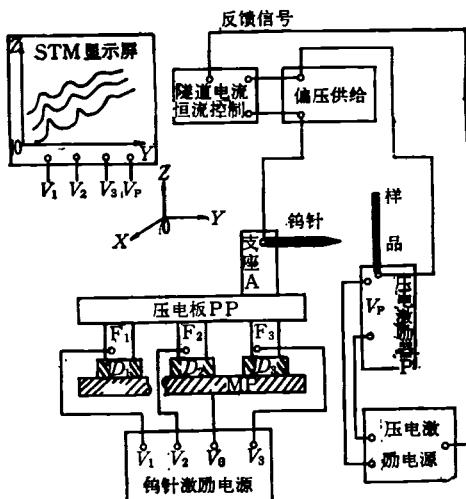


图 4 STM 成象的电学测量原理图

解决了上述困难。STM 的主体结构如图 3 所示^[6]。STM 成象的电学测量原理如图 4 所示。下面分磁力悬浮、精密压电控制和取样成象三部分作一简要说明。

1. 磁力悬浮

如图 3 所示, T 管中注入液氦后, 铅碗被冷却到转变温度以下而成为超导体, 作用于底座 B 底部强磁铁 M 上的巨大浮力使底座 B 处于悬浮状态, 而 STM 的测量探测单元均放在此底座上, 这样就从根本上解决了防震问题。图中导电膜 S 用于阻滞涡流。

2. 精密压电控制

它的作用在于控制钨针在样品表面 (XY 面) 扫描, 并及时调整钨针与样品的间距, 以保证扫描过程中隧道电流保持不变。真空隧道结由钨针与样品组成, 钨针被固定在支座 A 上。

通过由压电板 PP 和三只金属滑脚 F_1, F_2, F_3 组成的激励装置控制，钨针可在底座 B 上自由滑动，每只滑脚下方由高质量的绝缘材料 D 隔开后放在金属板 MP 上，以保证滑脚间的电绝缘。滑脚可在绝缘材料 D 上自由滑动或被加在滑脚与金属极间的电压所制动。在钨针激励电源控制下，通过压电体的伸缩与滑脚的制动，可使支座带动钨针在底座上自由滑动，从而可以方便地在 XY 面内对样品表面扫描。钨针与样品间距，则可在压电激励电源控制下由压电激励器 P 带动样品在 X 方向滑动来调节。商用 PXE5 型压电陶瓷的电致伸缩灵敏度为 2 \AA/V ，并可在任意方向移动上千埃，已能符合实验要求。

3. 取样成象

钨针与样品间的直流电压由偏压装置提供。样品表面被测点的隧道电流，经隧道电流恒流控制单元测量后输出反馈信号，由压电激励电源控制，压电激励器 P 及时调整钨针与样品的间距直到隧道电流是常数时为止，此时 P 上的压电信号送到成象显示装置，被转换成亮度信号显示在显示屏上。当钨针在样品表面完成扫描后，就可在显示屏上出现扫描隧道显微象。通过对显示屏上 Y 轴和 Z 轴定标以及对亮度信号定标，即可得到实际样品表面的扫描隧道显微照片。

三、实验进展

进展之一是用扫描隧道显微镜在液相外延生长的 GaAs(111) 小面上看到高度为几埃的台阶，如图 5 所示^[7]，而在其余的小面范围内则基本上平坦（图中未全部画出）。这是用 STM 研究晶体薄膜生长及形貌的一个实例。

在 Si(111) 表面上看到 7×7 大元胞可作为 STM 的一个重要进展^[1]，由图 6 中可明显看到两个 7×7 的菱形大元胞，其顶视图如图 7 所示。图 6 中菱形大元胞的长、短对角线长分别为 $46 \pm 1 \text{ \AA}$ 和 $29 \pm 4 \text{ \AA}$ ，与结晶学实验结果 45.56 \AA 和 26.88 \AA 基本相符。由于测量时扫

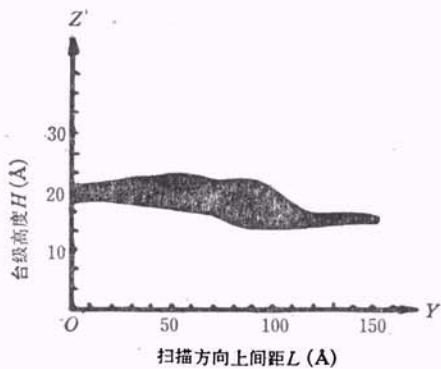


图 5 GaAs(111) 小面的台阶

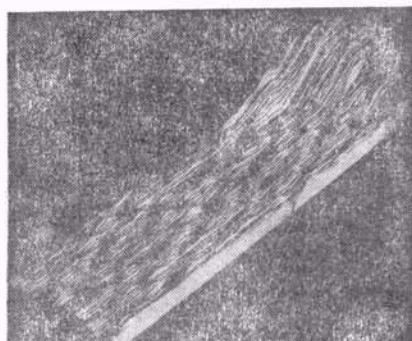


图 6 Si(111) 表面 7×7 元胞的 STM 照片

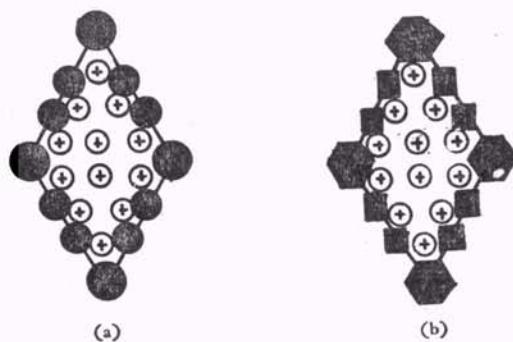


图 7 图 6 的顶视图

描沿长对角线方向进行，实验中的热漂移使短对角线长误差稍大。由图 7 可见每个“菱角”暗点周围有六个对称分布的亮点（图中加有“+”标记），即具有六度旋转对称性。仔细分析表明，亮点位置高出元胞平面约 $0.7 \pm 0.1 \text{ \AA}$ ，菱角暗点则低于元胞平面 $2.1 \pm 0.2 \text{ \AA}$ ，沿菱边和短对角线上的暗点则低于元胞平面 $0.9 \pm 0.1 \text{ \AA}$ 。由于有悬挂键的地方易于出现隧道效应，亮点

反映了顶层原子悬挂键的位置。应用 STM，可看到菱形内有 12 个顶层原子高出元胞平面，暗点处原子低于元胞平面，四个菱角处未观察到有顶层原子存在。Binnig 等对 Harrison 模型提出了修正，即去掉 Harrison 模型中菱角处的吸附原子。根据 Binnig 模型与图 7 中暗点位置比较，两者在实验误差范围 $\pm 0.5 \text{ \AA}$ 内符合甚好。由此可见，STM 用于研究复杂而又难于作理论处理的 7×7 结构也取得令人鼓舞的结果。

四、发展前景

具有三维 0.1nm 级高分辨率的扫描隧道显微镜的研制成功，为人类在原子尺度范围内研究表面原子结构和反应提供了良好的研究工具，它的最新进展已促使国内外不少实验室相继建立实验设备，正在开拓新的应用领域。当然就 STM 本身来讲，还需进一步提高精度和

稳定性。而建立微观隧道理论则显得更为紧迫，因为对与隧道机理有关的若干重要理论问题例如强电场感生脱附的影响、悬挂键能变化对隧道电流的影响、亮点或暗点位置与原子位置间的确切关系以及考虑镜象力等因素后势垒形状的变化等，目前还是一个空白，因此在定量解释 STM 的实验结果时还缺乏坚实的理论基础。

感谢王迅副教授在调研过程中的帮助。

参考文献

- [1] G. Binnig et al., *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 120.
- [2] R. H. Fowler and L. Nordheim, *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **119**(1928), 173.
- [3] L. Esaki, *Phys. Rev.*, **109**(1958), 603.
- [4] I. Giaever, *Phys. Rev. Lett.*, **5**(1960), 147.
- [5] T. Wolfram, in *Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy*, Springer Series in Solid State Sciences, Springer, Heidelberg, Vol. 4, (1978).
- [6] G. Binnig et al., *Appl. Phys. Lett.*, **40**(1982), 178.
- [7] H. J. Scheel et al., *J. Crystal Growth*, **60**(1982), 199.

(上接第231页)

求。根据前一段的发展情况，我们可以作出一些推测。在晶体完整性方面，在较大尺寸的缺陷被消除以后，要特别注意极微小缺陷的产生与控制。单晶进一步提高纯度是有一定限度的。为了解决微小缺陷及纯度，使用吸杂工艺将是完全必要的。至于使用内吸杂还是外吸杂，是使用几次等，这些都有待证明。单晶的均匀性也是重要问题，当器件尺寸接近硅原子尺寸时，杂质的统计分布将起主导作用，有人认为这是器件尺寸的极限。单晶的直径在 20cm 以后，计估直径增大速度要放慢，这是因为直径进一步增大，获得晶体完整性好的单晶就变得困难。使用的单晶，估计仍然以直拉为主。

参考文献

- [1] Electronics, **55-1**(1982), 121.
- [2] W. R. Rungan, *Silicon Semiconductor Technology*, McGraw-Hill Book Company, New York, (1965).
- [3] 万群,稀有金属, **1**(1981), 65.
- [4] T. Sugano, *J. Vac. Sci. Technol.*, **18-3**(1981), 804.
- [5] P. Butler, *Semiconductor International*, **2**(1982), 95.
- [6] R. B. Swaroop, *Solid State Technology*, **26-7**(1983), 97.
- [7] J. R. Moukowski, *Solid State Technology*, **24-7**(1981), 44.
- [8] 井上直久,研究实用化报告, **30-7**(1981), 1821.
- [9] 安部靖彦,工业稀有金属, **78**(1982), 3.
- [10] 铃木利彦,电子材料, **19-10**(1980), 107.
- [11] A. D. Weiss, *Semiconductor International*, **6**(1983), 66.
- [12] 宇佐美俊郎,电子材料, **22-8**(1983), 27.

敬告读者

本期中有关《集成电路中的物理问题》专题的文章

有崔树范等写的《硅中微缺陷及其形成过程》、钱家骏等写的《直拉硅单晶中的氧沉淀》和万群写的《集成电路对硅材料的要求》三文。