

隧道效应的转移哈密顿理论及隧道谱

陈 虞 峰

(复旦大学物理系)

本文介绍了金属-绝缘体-金属结构中隧道效应的转移哈密顿理论, 讨论了非弹性隧道效应和弹性共振隧道效应以及它们的某些实验应用. 最后简要介绍了近几年发展起来的一种新型表面分析技术——扫描隧道显微镜 (STM) 及其转移哈密顿理论给出的一些重要结果.

隧道效应是基本的量子现象之一, 即当粒子总能量小于势垒的高度时, 该粒子仍能穿透这个势垒, 其穿透几率对势垒的高度和宽度非常灵敏. 这就为我们提供了许多能有效地探测固体表面或体内性质的手段. 最近几年发展起来的扫描隧道显微镜 (STM) 能在原子尺度上对固体表面直接成象, 并可同时给出其电子结构信息.

电子隧道效应的机制是几率密度的内在光滑行为, 即使在势能 $U(x)$ 不连续(但有限)的位置也是如此. 在金属与真空界面处, 费米能级上电子的波函数在金属外部并不为零, 而是随着离开界面的距离增加而指数衰减. 如果在金属-绝缘体-金属 (MIM) 结两边加上一个偏压 V , 电子就会从一边穿透势垒进入另一边的空态, 因而在低温极限(温度 $T \rightarrow 0K$) 下, 非弹性隧道过程中电子可损失的最大能量等于两边费米能级之差 eV .

一、弹性隧道电流的黄金规则表述

下面我们将介绍用于计算 MIM 结构中隧道电流及电导率的转移哈密顿理论. 图 1 是一个典型的 MIM 结能带结构. 一般来说, 隧道穿透几率远小于 1, 即粒子被势垒反射的几率近似地等于 1. 这时, 势垒左右两边的波都不再是行波 e^{ikx} , 而是驻波 $\cos(kx)$ (见图 2), 其哈密顿量分别为 H_1 和 H_2 , 这里 k 为波矢, x 为粒子坐标. 势垒把 MIM 结分成两个近乎独立的部分, 它们之间的弱耦合可通过一个微扰哈密顿量 H^T 来处理^[1], 即

$$H = H_1 + H_2 + H^T, \quad (1)$$

物理

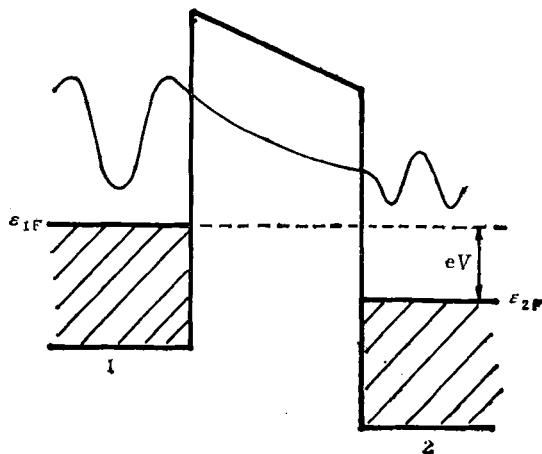


图 1 MIM 结能态结构图
稳态波函数光滑延伸, 穿透隧道结

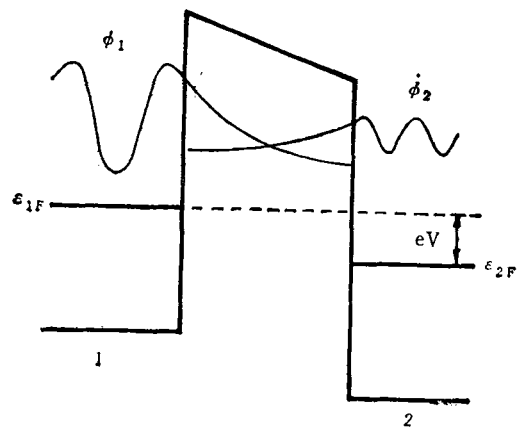


图 2
两边波函数均为驻波, 在势垒区均指数衰减

H^T 使电子从一边穿透势垒到达另一边. 假定 $\{\phi_{1m}\}$ 为左边金属和势垒区 (R_1 区) 的本征函数集, 对应能级为 ϵ_{1m} , $\{\phi_{2n}\}$ 为右边金属和势垒区 (R_2 区) 的本征函数集, 对应能级为 ϵ_{2n} . 即

$$\begin{cases} (H - \varepsilon_{1m})\phi_{1m} = 0 & \mathbf{r} \in R_1, \\ (H - \varepsilon_{2n})\phi_{2n} = 0 & \mathbf{r} \in R_2, \end{cases} \quad (2)$$

则基本的隧道过程对应于电子从单粒子轨道 ϕ_{1m} 转移到轨道 ϕ_{2n} ($i \neq j$), 对应的矩阵元为 $M_{1m,2n}$. 于是, 在独立粒子近似下, 根据黄金规则, 总弹性隧道电流为^[2]

$$I(V) = \frac{4\pi e}{\hbar} \sum_{mn} |M_{1m,2n}|^2 \{f(\varepsilon_{1m}) [1 - f(\varepsilon_{2n})] - [1 - f(\varepsilon_{1m})] f(\varepsilon_{2n})\} \cdot \delta(\varepsilon_{1m} - \varepsilon_{2n} + eV), \quad (3)$$

这里 $f(\varepsilon_{im}) = [1 + \exp(\varepsilon_{im}/k_B T)]^{-1}$ 为费米函数, 能量 ε_i 相对于费米能量 ε_{iF} . 偏压 V 产生从 1 到 2 的净电流, 其值与矩阵元 $M_{1m,2n}$ 模的平方成正比. (3) 式大括号中第一项表示从 (1m) 轨道转移到 (2n) 轨道的电子数分布, 第二项表示反向穿透的电子数分布, δ 函数表示能量守恒. 将 (3) 式推广到连续谱形式并化简可得

$$I(V) = \frac{4\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon |M(\varepsilon)|^2 \{f(\varepsilon) - f(\varepsilon + eV)\} \rho_1(\varepsilon) \rho_2(\varepsilon + eV), \quad (4)$$

其中 $\rho_1(\varepsilon)$ 和 $\rho_2(\varepsilon)$ 为两边金属的态密度, $M(\varepsilon)$ 是与能量有关的跃迁矩阵元, 它表示能量为 ε 的电子穿透势垒的几率. 由上式可见, 当偏压很小 ($V < 0.1V$) 时, I 与两边金属的态密度成正比. (4) 式对一维、二维和三维问题均适用.

二、非弹性隧道效应

考虑独立电子和谐波声子情形. 引入矩阵元 $M_{1m,2n}(\hbar\omega)$, 这是一个唯象参量, 其中 ω 为声子频率. 因为电子服从费米分布, 声子服从玻色分布, 所以与 (3) 式类似, 我们可将非弹性隧道电流的黄金法则表达为^[2]

$$I_{inel} = \frac{4\pi e}{\hbar} \sum_{mn} |M_{1m,2n}(\hbar\omega)|^2 \{ [f(\varepsilon_{1m}) - f(\varepsilon_{2n} + eV)] (N(\hbar\omega) + 1) - [1 - f(\varepsilon_{1m})] f(\varepsilon_{2n}) \} \cdot N(\hbar\omega) \cdot \delta(\varepsilon_{1m} - \varepsilon_{2n} - \hbar\omega) + [f(\varepsilon_{1m}) (1 - f(\varepsilon_{2n} + eV))$$

$$\begin{aligned} & \cdot N(\hbar\omega) - f(\varepsilon_{2n} + eV) \\ & \cdot [1 - f(\varepsilon_{1m})] \cdot [N(\hbar\omega) + 1] \\ & \cdot \delta(\varepsilon_{1m} - \varepsilon_{2n} + \hbar\omega) \}, \quad (5) \end{aligned}$$

这里 $N(\hbar\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1}$ 为玻色函数; 第一项表示电子从 (1m) 轨道转移到 (2n) 轨道同时放出一个能量为 $\hbar\omega$ 的声子过程对隧道电流的贡献; 第二项对应电子从 (2n) 到 (1m) 轨道同时吸收能量为 $\hbar\omega$ 的声子; 第三、四项意义类似. δ 函数意味着转移过程能量守恒. 同样, 将上式推广到连续谱形式, 有

$$I_{inel} = \frac{4\pi e}{\hbar} \int d\varepsilon_1 \int d\varepsilon_2 \cdot |M(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \hbar\omega)|^2 \{ [f(\varepsilon_1) - f(\varepsilon_1 + eV)] \cdot [N(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + 1 - f(\varepsilon_2 + eV)] \cdot \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \rho_1(\varepsilon_1) \rho_2(\varepsilon_2 + eV) \}. \quad (6)$$

非弹性隧道效应提供了与弹性通道互不干涉的另一条通道(或过程). 在低温极限下人们已观察到了非弹性隧道效应及有关的谱, 并对此进行了讨论. 由于吸收声子需要能量, 因此低温极限下电子在隧穿过程中只能放出声子, 即隧道电流是单方向的, 而且所有的隧穿电子几乎都来自于费密能级 $\varepsilon_{1F} = \varepsilon_{2F} + eV$. 因而仅当末态能量等于或大于 ε_{2F} 时, 这些电子才能放出能量为 $\hbar\omega$ 的声子而进入电极 2 的空态, 这就为我们提供了一个声子发射的阈值 $eV = \hbar\omega$. 当偏压大于 $\hbar\omega$ 时, 非弹性隧道电子连续地增加. 所以, 阈值对应于电导率曲线中的跳跃不连续性或微分电导率 $\frac{d^2 I}{dV^2} \sim V$ 曲线中的锐峰. 由于正负偏压都能产生声子激发, 所以电导率曲线的突变相对于 $V = 0$ 对称, 而 $d^2 I/dV^2$ 的峰相对于 $V = 0$ 反对称, 这是非弹性隧道谱的一个特点. 这个定性图象与非弹性隧道效应的黄金法则理论完全一致, 特别是在低温极限下符合程度更好.

三、共振隧道效应

如果势垒的高度或宽度与能量有关: 则这个势垒可以具有一个或多个内部共振能级. 图 3 所示的是一个一维势垒, 内部包含有一个宽

度为 W 的吸引势方势阱。图 3 中虚线表示当势垒宽度 B 为无穷大时，吸引势阱中电子的真实束缚态能级。然而，对于有限的势垒宽度 B ，方势阱中位于某个态上的电子便能在有限的寿命时间内穿透出去。当偏压正好使从一个电极出发的电子具有与共振能级相匹配的能量时，势垒穿透系数可以有数量级的增大，甚至可以接近于 1，即发生共振隧道效应，这是因为势阱中的几率幅度很大，且与入射波有很大的交叠。这时，隧道电流迅速增大并趋向于极值，因而

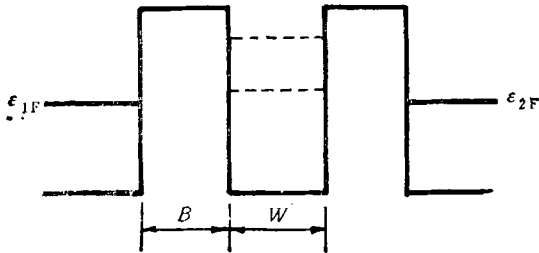


图 3 包含势阱的一维势垒

实验上这个效应可通过 dI/dV 与 V 的关系看出，如图 4 所示。图 4 是一个由 GaAs 和 $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ 组成的双势垒的 $dI/dV \sim V$ 关系图^[3]。势阱的宽度为 5nm，势垒的宽度为 8nm，势垒的高度为 0.4eV，理论计算结果表明，该系统具有两个共振态，0.16eV 和 0.57eV，显然实

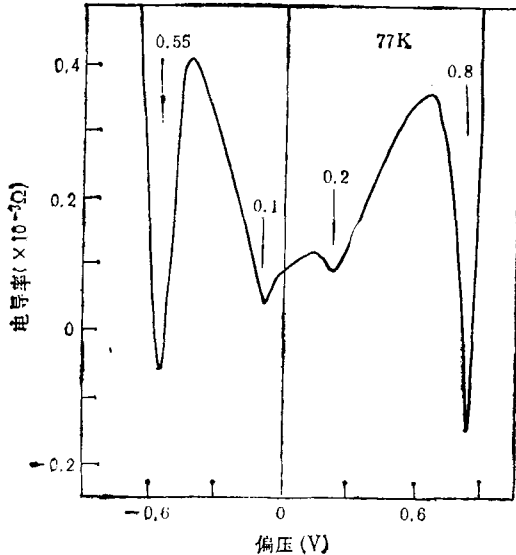


图 4 有内部共振态的势垒的隧道电导率

验结果与理论基本一致。严格说来，共振隧道效应就是局域态密度在空间和能量坐标上的强

而尖锐的峰。从(4)式可看出，在低温极限下，当偏压 eV 将费米能级 ϵ_{1F} 与局域态密度的峰值位置对齐时，这个态密度峰值将对弹性隧道电导率贡献一个尖锐的峰值。因此，共振隧道效应可用来探测与局域态密度有关的势阱^[4]。

四、扫描隧道显微镜

扫描隧道显微镜是近几年迅速发展起来的一种新型表面分析技术^[5,6]。

1. 隧道电导率

由于 STM 也是一种 MIM 结构，因而可用前面的转移哈密顿理论来计算其中的隧道电流。设电极 1 为针尖 (t)，电极 2 为样品 (S)，则低温小偏压极限下(3)式可改写为

$$I = \frac{4\pi e^2}{\hbar} V \sum_{mn} |M_{t,ms}|^2 \delta(\epsilon_{im} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{in} - \epsilon_F), \quad (7)$$

其中 ϵ_F 为费米能级，矩阵元可表示为一个积分^[7]。积分表面可选择针尖与样品之间的任一曲面。 Tersoff 和 Hamann^[8] 选择了平行于样品表面的平面，得到了隧道电导率 $\sigma = dI/dV$ 为

$$\sigma \approx 0.1 R^2 e^{2kR} \rho(\mathbf{r}_t, \epsilon_F), \quad (8)$$

其中 R 为针尖顶端的有效曲率半径，

$$k = \hbar^{-1} \sqrt{2m\phi},$$

m 为电子质量， ϕ 为针尖和样品的功函数平均值。 $\rho(\mathbf{r}, \epsilon) = \sum_n |\phi_{in}(\mathbf{r})|^2 \delta(\epsilon_{in} - \epsilon_F)$

为表面谱密度。由此可见，隧道电流或 STM 图象直接反映了针尖所在位置 ϵ_F 能级处 (当 V 不是很小时为 $\epsilon_F + eV$ 能级) 的表面局域态密度 (LDOS) 的图象，它包含了表面原子的几何和电子结构信息。

2. 扫描隧道谱 (STS)

STM 也可用于研究隧道电导率相对于偏压的特性，即空间分辨表面隧道谱或扫描隧道谱 (STS)。电导率与偏压的关系可近似地表达为^[9]

$$\frac{dI}{dV} = \rho(\mathbf{r}_t, E_F + eV) T(V), \quad (9)$$

其中 $T(V)$ 为势垒穿透系数。一般来说, T 随 V 的变化相对于 ρ 随 V 的变化可忽略, 因此 dI/dV 的结构直接反映出了样品表面的局域电子态密度结构。由于电流 I 对针尖与样品之间距离非常灵敏, 因而在采集隧道谱数据时, 必须保持针尖与样品之间距离不变。为此, Hamers 等人^[10] 在实验上采用了电流成象隧道谱 (CITS) 技术, 即在做恒流扫描获得表面形貌的过程中, 在每一个隧道谱考察位置, 暂停扫描并保持针尖位置不变, 测量该位置的 dI/dV 与 V 的关系, 然后继续固定电压做恒流扫描。CITS 技术实际上把隧道电流中的几何信息和电子态信息分离开来, 而在对表面结构成象的同时获得了相应位置上的电子态结构图象。

利用扫描隧道显微镜中的共振隧道效应研究镜象势已日益受到了人们的重视^[11]。STM 也可看成是一个 MIM 结, 其中与镜象势有关的两个现象已经得到了研究, 一个是镜象态本身, 另一个是发生在非常接近于金属与真空界面的区域中发生的穿透共振, 那里隧道电子的动量可以是实数。镜象态来自于金属表面存在的隧道电子, 或者说隧道电子被束缚于自身的

象中。虽然这些态可以长时间地存在, 但它们并不是严格的束缚态。在金属-真空-金属 (MVM) 结的真空区域中, 电子的局域化则来自于金属能带结构中存在的禁带导致的等效排斥作用^[12]。如果在某个能量范围内不存在这样的能隙, 则在金属与真空界面处只存在镜象势共振, 没有束缚态共振。这意味着在 STM 的隧道共振中束缚态共振是尖锐的, 而穿透共振是相当宽的^[2]。

- [1] E. L. Wolf, Principles of Electron Tunneling Spectroscopy, Oxford University Press, (1985), 23.
- [2] T. E. Feuchtwang, P. H. Cutler, *Phys. Scr.*, **35**(1987), 132.
- [3] L. L. Chang et al., *Appl. Phys. Lett.*, **24**(1974), 593.
- [4] E. W. Plummer, R. D. Young, *Phys. Rev. B*, **1**(1970), 2088.
- [5] 戴道宣, *物理*, **14**(1985), 235.
- [6] 汪世才, *物理*, **16**(1987), 321.
- [7] J. Bardeen, *Phys. Rev. Lett.*, **6**(1961), 57.
- [8] J. Tersoff, D. R. Hamann, *Phys. Rev. B*, **31**(1985), 805.
- [9] A. Selloni et al., *Phys. Rev. B*, **31**(1985), 2602.
- [10] R. J. Hamers et al., *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 1972.
- [11] G. Binnig et al., *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 991.
- [12] N. Garcia et al., *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 591.

1990 年第 2 期《物理》内容预告

冷核聚变现象研究(李银安); 非晶半导体的一些新进展(彭少麒); 固体表面的空电子态及其探测方法(王向东等); 分形研究中的复分形概念(丁菊仁等); 婴儿宇宙, 黑洞的后裔(敬克兴译); 稀土-过渡金属化合物结构和磁性研究简介(吴昌衡等); 白光光学图象处理的基础研究及其应用研究(方志良); 合金设计与相图(郝士明等); 相图在电解制备 Nd-Fe 合金中的应用

(上接第48页) 我们在样品冷却过程中终止溅射(例如在冷却到 200°C 时), 从 XPS 的测试结果中看到, 氧在样品表面的含量不仅没有下降, 反而上升到 11%, 这表明氧向表面扩散的过程主要在样品冷却的时候进行的^[2]。

本实验所得的清洁表面只表明, 样品表面所含的氧, 低于本仪器的可测极限, 并不表明样品中氧已除尽。只要将样品稍加热, 又可从其 XPS 谱中发现氧的峰。这些氧可来自样品内

(郑朝贵); R_2O-SiO_2 二元相图对研制矿化剂的启示(田凤仁)扫描隧道显微镜在工业上的一些应用(吴超明); 超快速过程测量的频域技术(费浩生); 低场振动样品磁强计研制(杨光等); 用倒扭摆测量金属玻璃内耗应注意的问题(李晓光等); 固体的激发态和发光(虞家琪); 核聚变研究的发展历史(朱士尧)。

部, 也可以来自设备中其它零件或真空中的余氧。由于 Nb 对氧的吸收性强, 溶解性好, 氧很容易保持在 Nb 的体内。

- [1] T. W. Hass et al., *J. Chem. Phys.*, **46**(1967), 3025.
- [2] P. H. Dawson and Wing-Cheung Tam, *Surf. Sci.*, **88**(1979), 464.
- [3] H. H. Farrell and Myron Strongin, *Surf. Sci.*, **38**(1973), 18.
- [4] J. M. Dickey, *Surf. Sci.*, **50**(1975), 515.
- [5] G. Bolbach and J. C. Blais, *Surf. Sci.*, **137**(1984), 327.