

(1993).  
[9] L.L. Boyer et al., *J. Vac. Sci. Technol. A*, **7**  
(1989), 1999.

[10] L.L. Boyer, A.Y. Wu and J.R. McNeil, eds. E.  
R. Myers and A.I. Kingon, *Proc. of mat. Res.  
Soc. Symp.*, **200**(1990), 97.

## 量子围栏——扫描隧道显微术的又一杰作

蒋平 梁励芬 董树忠

(复旦大学李政道物理学综合实验室,应用表面物理国家重点实验室,上海 200433)

介绍了一项扫描隧道显微术的最新成就。用扫描隧道显微镜操纵吸附在 Cu(111) 表面的铁原子,形成由 48 个铁原子组成的空心围栏,这一量子围栏能将所包围的表面态电子禁锢在其内部,从而可以用 STM 与 STS 同时研究禁锢电子的状态密度对空间和能量的分布。预期这一成果将在许多方面促进今后研究工作的发展。

**关键词** 量子围栏,表面态,态密度,扫描隧道显微术

### Abstract

A recent development in building quantum corrals on Cu(111) surface by using adatom sliding technique is briefly reviewed. A circular enclosure of 48 Fe adatoms on Cu(111) surface was built by M. Crommie et al. last year. The electronic structure of surface state electrons confined in such "Quantum Corrals" was studied with STM and STS. It was demonstrated that quantum states of the corrals could be resolved both spacially and spectroscopically. This new technique has opened up a long list of experimental opportunities to the researchers.

**Key words** quantum corral, surface state, density of states, scanning tunneling microscopy

扫描隧道显微术 (STM) 是一项使其创始人荣获诺贝尔物理学奖的重大成就。从一开始, STM 就成为表面科学强有力的研究手段。短短十多年来,从确定表面形貌到操纵表面原子, STM 已在许多方面发挥了巨大作用。近年来其应用更扩大到化学、生物学等其他范围,日益为科学界所瞩目。最近的一项发展又一次引起学术界的轰动,很可能由此开拓出一个全新的研究领域,显示出这一重要技术的勃勃生机。

1993 年 5 月份,位于美国加州圣荷塞阿玛丹的 IBM 研究中心的 M. Crommie 等人,在液氮温度用电子束将 0.005 单层的铁原子蒸发到清洁的 Cu(111) 表面,然后用扫描隧道显微镜操纵这些铁原子,使它们排成一个由 48 个原子组成的圈。圆圈的平均半径为  $71.3 \text{ \AA}$ , 相邻

铁原子之间的距离平均为  $9.5 \text{ \AA}$ , 因而估计每个铁原子都处在 Cu(111) 表面的空位,这样一个原子圈的作用非同小可,虽然由分立原子组成而并不连续,却能够围住圈内处于 Cu 表面的电子,从而引发出一系列引人入胜的结果。现在人们将这一铁原子圈称为量子围栏<sup>[1]</sup>。

贵金属 Cu, Ag, Au 的电子结构有一个共同的特点,就是在(111)表面存在表面电子态,其费米能量恰好位于体能带结构沿  $\Gamma$ -L (沿 [111] 方向)的禁带之中。因此处于此表面态的电子既由于功函数的束缚不能逸入真空,又由于体能带的限制而不能深入体内,便形成只能在平行于表面方向运动的二维电子气,类似于调制掺杂的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  界面。这些表面态电子的运动会受到表面台阶、吸附原子等

各种不完整性的影响,表现为由于表面二维严格周期性势场被破坏而使电子波受到散射。Crommie 等发现 Cu(111) 表面吸附的铁原子对表面态电子有很强的散射作用。假设表面只存在单个铁原子,则入射的表面态电子波与从铁原子散射的电子波之间的干涉会形成围绕铁原子的驻波,从而引起表面局域电子态密度的变化。众所周知,STM 的微分电导与表面局域态密度成比例<sup>[2]</sup>。事实上,在通常的恒流工作模式下,表面局域态密度(LDOS)相应于 STM 探测到的表观高度。STM 针尖扫描的轨迹也就相应于表面态密度的等密度面,所以从 STM 的图象就能看出表面态密度的变化。另一方面,STM 探测到的表面态密度又取决于占有态波函数模的平方。因此 STM 的拓扑象可以告诉我们表面态的电子波函数到底是什么样子。

图 1 是 Crommie 等测得的 Cu(111) 表面单个铁原子造成的表面电子态密度的变化。测量时针尖沿通过铁原子中心的直线扫描,因而图示的铁原子两边周期性表观高度的变化就对应于表面态电子的局域态密度围绕铁原子作同心圆式的振荡。图中虚线是用圆形对称散射势模拟铁原子得到的理论结果。理论拟合中所确定的分波相移表明铁原子对表面电子的散射作用的确很强。

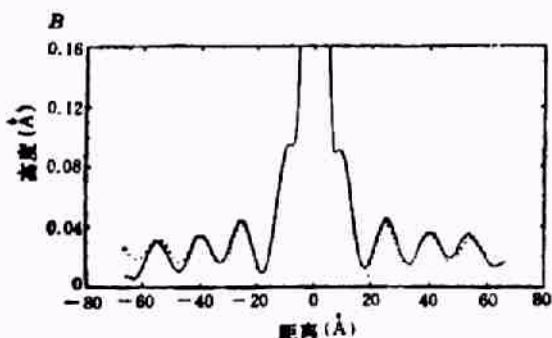


图 1 Cu(111) 表面所吸附的铁原子周围的表观高度,横坐标为到铁原子中心的距离

根据铁原子对表面电子的强散射作用,Crommie 等设想可以用铁原子做成对表面电子的量子化“禁锢”性结构,从而可以将表面电子象牲口一样圈围起来。现在他们用 48 个铁原

子做成的量子围栏确实起到了这样的作用。围栏内的电子波如传播到围栏处,就因铁原子的强烈散射而被挡了回去,从而在围栏内形成同心圆状的驻波,导致围栏内同心圆状的局域态密度起伏。图 2(a) 是由 48 个铁原子组成的

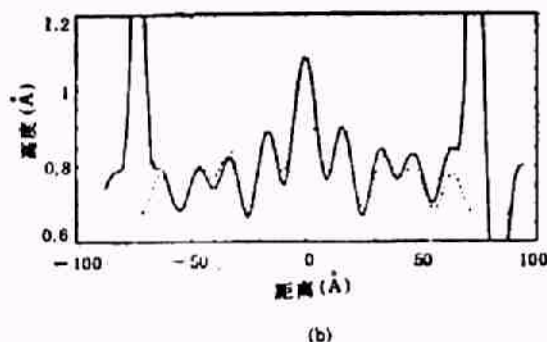
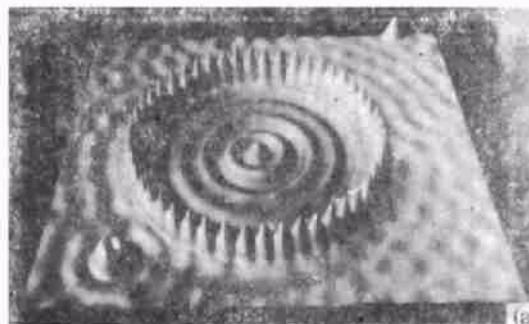


图 2 (a) 由 48 个铁原子组成的量子围栏的 STM 象; (b) 量子围栏中沿径向的 LDOS 变化,两边高峰为直径两端的铁原子

量子围栏的 STM 图象,图 2(b) 是沿这一量子围栏直径方向的 STM 扫描结果,横坐标原点为围栏圆心。LDOS 的径向振荡清晰可见。图中虚线为理论拟合结果。理论上是用一圆环形无限高势垒模拟量子围栏,可以看出理论拟合相当成功,表明这一量子围栏对表面电子的禁锢作用相当完善。尽管铁原子并非密集排列,但它们的作用却同一个连续围栏差不多,很少有电子能透过这一围栏“泄漏”出去。

虽然人们已经知道其他还有象量子点或人造原子这样的类似的量子性电子禁锢结构,并且也曾作过电流谱的研究,但量子围栏这一新结构的独特之处在于能对其中的电子气逐点测量电流,从而既能用 STS 谱测量电子态在能量上的分布,又能研究电子态在空间的分布——

STM 象。图 3 则是对围栏所在表面上不同点所作的 STS 测量结果,即微分电导和针尖与样品之间偏压的关系。最上面的一根曲线是将针

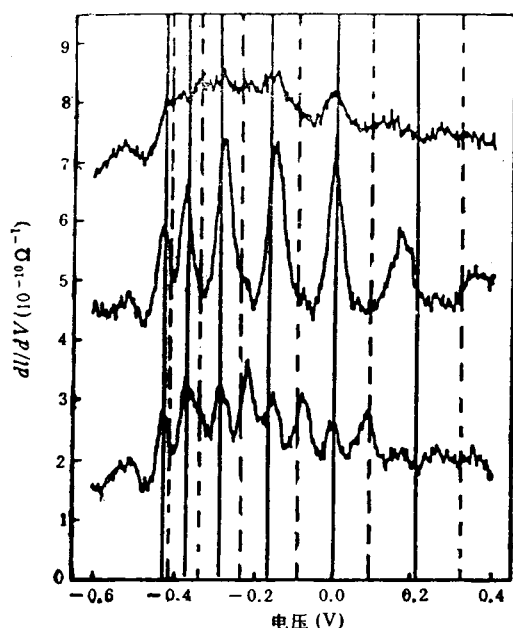


图 3 量子围栏的扫描隧道谱 (STS)  
(垂直实线代表角动量量子数  $l = 0$  的本征能量,从左至右分别对应  $E_{n,0}$ ,  $n = 1, 2, \dots, 6$ ; 虚线相应于  $l = 1$ , 从左至右分别对应  $E_{n,1}$ ,  $n = 1, 2, \dots, 6$ )

尖固定在相对围栏中心的水平距离约  $1000 \text{ \AA}$  的地方,因而感觉不到围栏的存在,没有表现出什么特色。但如针尖处于围栏所包围的区域上方,则情况就大不相同。第二根曲线是针尖处于围栏中心的结果,从图中可以明显看到六个谱峰,最下面一根曲线则是将针尖固定在相对围栏中心的水平距离约  $9 \text{ \AA}$  的地方,可以看到,除去围栏中心所具有的谱峰之外,又多出了几个谱峰。

图 3 的结果很容易根据初等量子力学给以简单的解释。取平面极坐标  $(\rho, \phi)$ ,在上述无限圆环势近似下围栏内的电子本征态  $\psi_{n,l}(\rho, \phi)$  正比于  $e^{il\phi} J_l(k_{n,l}, \rho)$ , 这里  $J_l$  为  $l$  级贝塞尔函数<sup>[3]</sup>, 本征能量为  $E_{n,l} = \hbar^2 k_{n,l}^2 / (2m^*)$ ,  $m^*$  为电子有效质量,而  $k_{n,l}$  与围栏半径的乘积为  $J_l$  的第  $n$  个零点所在。图 3 中,自左至右垂直实线依次代表  $E_{n,0}$ , 虚线依次代表  $E_{n,1}$  ( $n = 1,$

$2, \dots, 6$ ) 可以看出大多数谱峰都能从  $\psi_{n,0}$  与  $\psi_{n,1}$  的贡献得到解释。特别是围栏中心的谱峰与  $\psi_{n,0}$  极相一致。这一点很容易理解,因为原点为所有  $l \neq 0$  的贝塞尔函数的零点,在原点处,  $\psi_{n,l}$  ( $l \neq 0$ ) 对态密度没有贡献。至于针尖处于水平距栏心  $9 \text{ \AA}$  时多出现的谱峰,则可归结于  $\psi_{n,1}$  的贡献。以上分析同样可以用来解释图 2。由于 STM 观测时样品处于低温,图 1 与图 2 所反映的实际上为处于费米能量  $E_F$  的表面态电子的 LDOS 在表面上的二维分布。在上述理论模型中,只有  $\psi_{5,0}$ ,  $\psi_{4,2}$  和  $\psi_{2,7}$  的本征能量接近于  $E_F$ , 而图 2 中的虚线正是用  $J_5^2(k_{5,0}, \rho)$ ,  $J_4^2(k_{4,2}, \rho)$  和  $J_2^2(k_{2,7}, \rho)$  的线性组合所得到的拟合结果。

以上介绍的这一 STM 和 STS 应用的最新发展一经发表,立即引起科学界的极大关注, MIT 的 Kastner 认为这一成就表明“你能做任何人过去做梦也想不到的事”。在此基础上,研究人员已开出一长列新的研究课题,除了研究禁锢电子的性质外,还包括研究表面电子与吸附原子的相互作用,吸附原子自身之间的长程相互作用,在吸附原子或台阶等不完整性处表面态和体电子态之间的耦合,无缺陷表面上电子波的衰减,电子与声子之间的相互作用等;也可以用吸附原子挨个排成象体育场的形状,从而研究量子混沌动力学。当然这一技术更是在原子级上形成介观电子禁锢结构并对之进行研究的有效手段,从而会在纳米电子学等方面得到广泛应用。除此之外,显而易见的是,由于能画出电子波函数在空间和能量上的分布,我们能“看看在这种特定环境中的电子是如何求解薛定谔方程的”,因此这一发展“肯定可以用作初等量子力学的演示实验”,研究组的负责人 D. M. Eigler 如是说。

- [1] M. F. Crommie, C. P. Lutz and D. M. Eigler, *Science*, **262**(1993), 218.
- [2] G. P. Collins, *Physics Today*, November (1993), 17.
- [3] 胡嗣柱,倪光炯著数学物理方法,复旦大学出版社,(1989),327.