

# 表面人工低维结构的功能设计与构造

郭建东<sup>†</sup> 王恩哥 白雪冬 陈弘 郭丽伟 曹则贤  
马旭村 夏柯 杜小龙 高世武

(中国科学院物理研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100190)

**摘要** 可控地构造具有一定功能的表面人工低维结构,并且总结、理解体系微观结构对其宏观性质影响的一般规律,不仅对探索低维基本物理以及其中的新奇量子现象至关重要,更是微电子工业保持持续发展的关键前提.这方面的研究包括发展新的生长技术实现对体系形成过程的精确控制,对获得的材料做高分辨率的表征;从理论上则要理解体系的生长过程,阐明热力学、动力学的作用机理,从而指导制备技术的发展.深入研究表面人工低维结构的性质更可能导致新物理现象与原理的发现,产生全新的器件概念,进一步反馈给体系功能的设计,推动基础研究与应用探索的发展.文章简要介绍了表面物理国家重点实验室近年来在表面人工低维结构的功能设计与构造方面的研究成果.

**关键词** 表面纳米结构,量子阱,量子尺寸效应,生长动力学,电子激发态

## The function design and construction of artificial surface low-dimensional structures

GUO Jian-Dong<sup>†</sup> WANG En-Ge BAI Xue-Dong CHEN Hong GUO Li-Wei  
CAO Ze-Xian MA Xu-Cun XIA Ke DU Xiao-Long GAO Shi-Wu

(State key Laboratory for Surface Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

**Abstract** The exploration of low-dimensional physics and exotic quantum phenomena require the controlled construction of functional surface nanostructures. The study of these issues is also important for the continuous development of the microelectronic industry. This field includes the novel growth techniques to realize the precise controllability as well as high-resolution characterization of the materials. A proper understanding of the formation dynamics and kinetics promotes optimization of the fabrication methods. Moreover, studying the properties of surface low-dimensional structures in detail can lead to the discovery of new physics and concepts of functional devices. In return, this study will stimulate the development of fundamental research and applications. Here we describe the recent achievements of the State Key Laboratory for Surface Physics in the function design and controlled construction of artificial surface low-dimensional structures.

**Keywords** surface nanostructures, quantum well, quantum size effect, growth dynamics and kinetics, electron excitation states

### 1 简介

随着现代微电子工业日趋集成化和微型化,探索满足特殊需要的材料和器件结构,并研究其制备和控制过程以及其中特异的量子效应已经成为当今众多学科交叉研究的热点之一.从理论上来说,当固

体的尺度在一个/多个维度趋近其量子特征长度时,由于量子限域效应和量子涨落效应的影响,将显现出与其体相截然不同的电子结构特征.一个典型的特点就是系统的电子结构表现出类似单原子或单分

2008-05-24 收到

<sup>†</sup> 通讯联系人. Email: jdguo@aphy.iphy.ac.cn

子的分立能级 相应地,其激发、弛豫和输运等一系列过程都呈现出崭新的特征,从而使材料显示出许多奇异的电、磁、光性质.例如,电流输运将呈现不连续的量子化<sup>[1]</sup>,导体可以变成绝缘体<sup>[2]</sup>,非磁性材料可以变得具有磁性<sup>[3]</sup>,薄膜的厚度表现出特异的选择性<sup>[4,5]</sup>等.表面纳米结构的另一特点是它们的比表面积远远大于体材料,表面效应成为影响其宏观性质至关重要的因素.电子在表面的散射增强,影响到体系中电子的动力学过程,其特殊的能量、波函数、自旋等性质导致体系丰富的新性能,比如不活泼的金属(如金)构成的量子点呈现出强的催化活性<sup>[6]</sup>.另外,体系维度的降低还导致多种自由度耦合的增强,显示出强关联的性质,引起丰富的量子现象,例如巨磁阻效应<sup>[7]</sup>.在实验室中制造各种可以精确控制的人造小系统,包括清洁固体表面、薄膜、量子阱、人工微结构(量子点、线、环)、纳米管等,通过对体系维度的控制,进一步增强多种自由度之间的耦合,发现这些系统中的新奇量子现象,研究其规律和器件应用,对量子科学走向应用也至关重要.

薄膜、量子阱、量子点阵列等表面人工低维结构通常都是通过非平衡状态下的外延或者自组织生长而获得的.构造具有一定功能的表面纳米结构,实验上要发展新的技术,实现对生长过程的精确控制,并且对获得的体系做高分辨率(包括空间、时间、能量、动量等)的表征.理论上则要理解体系的生长过程,阐明热力学、动力学的作用机理,从而指导制备技术的发展.另外,深入研究表面人工低维结构的性质往往导致新物理现象与原理的发现,更重要的是,研究体系结构对其性质产生影响的一般规律也是提出新的功能材料与器件概念、实现对材料功能进行设计的重要环节.本文将简要介绍表面物理国家重点实验室(以下简称表面实验室)<sup>[8]</sup>近年来在表面人工纳米结构的功能设计与构造方面所做的探索.

## 2 表面低维结构的制备

表面实验室自成立以来一直致力于低维纳米结构、薄膜以及多层膜量子阱等新型材料制备方法的探索.其中最具代表性的是在化合物半导体薄膜方面关于 GaN 基材料和相关器件的研究,目前已发展了具有自主知识产权的在蓝宝石图形衬底上制备高质量 GaN 的工艺技术,填补了国际上无湿法技术制备蓝宝石图形衬底的空白<sup>[9-12]</sup>.采用此工艺制备的 GaN 材料的位错密度比常规平面工艺技术的位错密

度降低 1.5 个数量级,位错密度小于  $1 \times 10^8/\text{cm}^2$ ,同时也解决了晶格倾斜的问题.基于此技术研制的紫外发光二极管(LED)的输出功率比普通平面蓝宝石衬底上的器件功率至少高 2 倍.这种生长工艺还可以大大节省外延材料,降低材料制备的成本.对于规模化和产业化制备高质量的 GaN 基材料和器件有重要的社会和经济价值.此外,表面实验室还在设计新型的量子阱结构、提高发光效率上进行研究和探索,设计出了能大幅度提高量子阱发光内量子效率的量子阱结构.通过设计非对称耦合的 InGaN/GaN 宽窄量子阱结构,实现了隧穿辅助的反载流子输运,即载流子由宽阱隧穿到窄阱,窄阱成为发光中心,而宽阱成为载流子的俘获和输送中心,使量子阱结构的发光内量子效率由常规结构的 20% 提高到 50%<sup>[13]</sup>.这一结构设计已发展成能获得具有国际先进水平的蓝光 LED 外延材料的重要技术.

目前 GaN 基的蓝、绿光发光二极管日益成熟和商品化,但制备高性能白光发光二极管的现有技术复杂,制作成本高,因此人们一直致力于实现单芯片白光发光器件的研究,并从理论上预言这种器件的可行性.2006 年,表面实验室采用 InGaN 的应力调制层,实现了对 InGaN/GaN 多量子阱的应力调制和控制,成功研制出单芯片白光发光器件<sup>[14,15]</sup>.此方法不需要荧光粉,也不需要增加复杂的控制电路,制备过程与普通发光二极管相似.在常规的注入电流下(20—60mA),白光的显色指数几乎不变.图 1(a)展示了不同注入电流下发光颜色的变化.图 1(b)展示了 InGaN/GaN 有源区的透射电子显微镜(TEM)截面像.

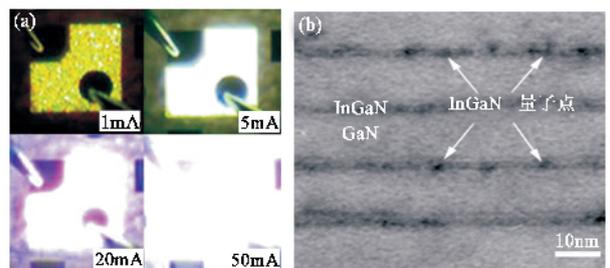


图 1 (a)不同注入电流下单芯片白光发光二极管的发光照片; (b)发光二极管 InGaN/GaN 有源区 TEM 截面图片

表面实验室在轻元素 B、C、N 及其化合物低维新纳米结构的发现、调控以及物理特性的研究方面也进行了多年的探索,建立了具有自主知识产权、功能独特的热丝和微波等离子化学气相沉积生长设备,以及结构分析、物性测试的大型仪器,为开展原

创性研究奠定了基础. 这些深入系统的工作形成了自己的特色, 得到国际学术界的广泛认可. 研究人员首次制备出外形呈多棱锥状, 顶部尺寸为纳米级, 底部为微米级, 中心是直径为几个纳米的空心管, 长度可以达到几百微米的碳纳米锥(图 2)<sup>[16]</sup>. 并提出了在氮的作用下, 管状碳纳米锥形成的层-层生长机制, 以及与手性选择的关系<sup>[17]</sup>. 由于管状碳纳米锥独特的几何结构, 它将会在扫描探针显微学、场电子发射器件、纳米加工以及生物化学等领域有广泛的应用前景. 与相同长度的碳纳米管相比, 管状石墨锥具有极其优越的(径向)机械强度和稳定性, 可以作为理想的扫描探针的针尖、纳米机械压头和场发射材料. 由于锥内的中空结构, 如果用它作为扫描探针的针尖, 并引入 X 射线就可以在获得原子级的空间分辨的同时, 还可以获得微区化学成分的信息. 另外锥内的小孔径通心管又可以作为储存和输运液态物质的纳米通道. 特别重要的是, 纳米锥的底部尺寸达到了微米量级, 它可以用今天的微加工技术直接操作, 是制作单个纳米器件非常理想的材料. 管状碳纳米锥作为一种新的碳纳米结构, 开辟了国际同行对其物性和对其他材料纳米锥结构研究的新方向.

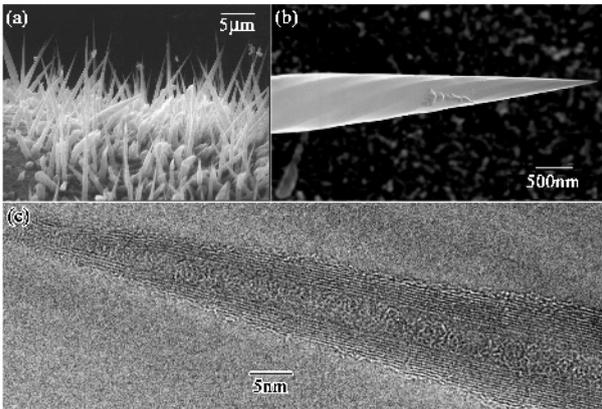


图 2 铁针上生长的大面积的碳纳米锥. 其中 (a) 和 (b) 为扫描电子显微镜像 (c) 为 TEM 像

表面实验室的研究人员还提出并实现了通过掺杂来改变纯碳纳米管物理性质的原创思想, 利用硼、氮共掺杂成功地使金属性的单壁碳纳米管转变为半导体性的单壁 BCN 纳米管. 第一性原理计算揭示了硼、氮共掺杂引入带隙的物理机制, 改变掺杂浓度可以调制其电学性质<sup>[18]</sup>. 研究人员利用改进的等离子辅助热丝化学气相沉积 (CVD) 生长技术, 首次直接合成了硼、氮共掺杂的单壁碳纳米管(即三元 BCN 共价化合物纳米管). 与以往文献中报道的多壁 BCN 纳米管不同, 新合成的 BCN 纳米管具有完整的

中空单壁管结构, 同时 B, C, N 三种元素在纳米管中的均匀分布(见图 3)<sup>[19]</sup>. 利用所合成的 BCN 单壁管样品, 进一步制成了纳米管场效应晶体管(FET)原型器件, 其单根管的开启电流在  $10^{-8}$  A 量级, 开关电流比可达到  $10^6$ . 通过对大量 FETs 的测量发现, BCN 单壁管中半导体性纳米管的比例超过 97%<sup>[18]</sup>, 而传统技术生长的单壁碳纳米管由于电学性质的不可控, 其半导体性管的比例仅为约 67%. 这项工作从实验上证明, B, N 共掺杂是解决碳纳米管电学性质不可控问题的一条有效的新途径, 为纳米管电子和光电子器件的大规模集成应用提供了一种新途径.

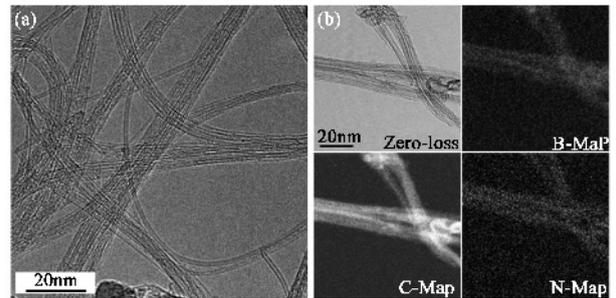


图 3 (a) BCN 单壁管的代表性 TEM 照片 (b) BCN 单壁管的能量过滤 TEM 像

最近, 氧化物半导体的应用问题引起了科学界浓厚的兴趣. ZnO 是一种直接跃迁型半导体, 室温禁带宽度为 3.37 eV. 由于其很高的自由激子结合能 (60 meV), ZnO 在制备低阈值、高效率的短波长光电子器件方面有着极为广阔的应用前景. 另外, ZnO 又是一种优异的自旋电子学材料, 可用来研制工作于室温的稀磁半导体器件. 但是纤锌矿结构的 ZnO 在 [0001] 方向没有对称面, 是一种极性材料. 晶体内部呈现出很强的自发极化电场, 并形成具有不同原子结构、电子结构以及束缚电荷性质的 Zn 极性与 O 极性两种表面, 显示出不同的物理、化学特性, 对吸附原子的作用也有显著的差别, 从而对 ZnO 的外延生长、掺杂产生重要的影响. 近年来表面实验室开展了关于 ZnO 极性表面及其异质界面的研究, 针对氧化锌的极性选择机理, 探索了衬底表面原子结构以及 ZnO 初始生长条件和薄膜极性的内在关系, 利用分子束外延技术 (MBE) 在衬底表面预处理上的独特优势, 发展了多种原创性的衬底表面、界面处理工艺, 在硅、蓝宝石、LSAT、铝酸镁、钽酸锂等多种衬底上制备出单一 Zn 极性或单一 O 极性的高质量 ZnO 薄膜, 澄清了氧化锌薄膜极性控制的物理问

题<sup>[20-21]</sup>. 为了抑制因 Si(111) 表面的活性而形成硅化物, 先在 Si(111)-(7×7) 清洁表面上低温沉积金属镁, 形成锐利的 Mg(0001)/Si(111) 界面, 然后通过氧化 Mg 膜获得 MgO(111) 单晶超薄膜, 进一步通过同质外延获得了厚度为 10nm 的 MgO(111) 膜, 从而为 Zn 极性 ZnO(0001) 膜的外延生长提供了一个良好的模板, 通过两步生长法最终制备出高质量的 ZnO 单晶薄膜<sup>[22]</sup>.

另外, 由于 MgZnO 的带隙更宽, 极性更强, 因此可以构筑 MgZnO/ZnO 异质结来制备具有高电子密度的二维电子气(2DEG). 表面实验室的研究人员克服了高 Mg 组分 MgZnO 易于发生相分离的困难, 在非平衡条件下制备得到了高质量的 Mg<sub>0.4</sub>Zn<sub>0.6</sub>O 单晶薄膜, 其带隙超高 4.0eV. 然后, 在平整的 Zn 极性和 O 极性 ZnO 薄膜上分别制备了 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O/ZnO、ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O/ZnO 异质结<sup>[23]</sup>, 为进一步研究电子浓度和迁移率跟 Mg 组分  $x$  以及界面附近薄膜应变的关系打下了良好的基础.

### 3 表面低维结构的生长动力学

对新材料、新现象的探索不仅需要要在实验上发展新的方法, 包括新原理的应用、仪器分辨率的提高以及各种功能的交叉与互补, 其规律总结、认识的提高还非常需要理论研究的帮助与指导. 表面实验室长期致力于在原子水平理解表面纳米结构的形成机理. 最近通过第一性原理计算, 研究了一些面心立方金属(110)表面上的同质外延生长过程<sup>[24-26]</sup>, 阐明了纳米晶的微观形成机理. 在此前考虑的所有原子运动中, 最引起人们注意的是吸附原子在单原子台阶边缘的下跳过程. 在这个过程中, 原子遇到一个额外的 Ehrlich-Schwoebel 势垒. 一般来说, 在低温下分子束外延技术中, 这往往会使表面上长出一些小的原子岛, 而在高温时, 岛上的沉积原子容易从台阶上掉下来跑到表面上, 从而得到光滑的薄膜. 但是所有以前的研究都忽略了一个过程: 原子的向上扩散, 即原子可以从台阶下翻到岛上去. 他们的研究则表明, 原子可以通过一个交替扩散机制轻松地爬上一个单层原子高的台阶, 从而在表面形成一些巨型的纳米晶结构, 而且这些纳米晶的侧面都有很好的选择性. 这些结果与实验上的观察完全一致.

最近, 表面实验室还把研究的体系拓展到水与固体的界面上. 水, 及水的三相变化: 冰, 液态水, 水蒸气, 对整个生态圈系统和地球环境有着不可估量

的巨大作用. 地球表面约 70% 被水覆盖, 陆地面积约 10% 是冰封冻土. 其中对冰, 水及其界面性质和相变的研究, 不仅可以加深我们对自然界最常见物质、最常见相变的理解, 而且对凝聚态物理、化学、环境科学、生物学有巨大影响. 该课题的研究已经成为相关交叉学科的研究热点, 同时因为关系到公众的切身利益, 而引起广泛关注. 从最典型的晶体二氧化硅  $\beta$ -cristobalite 的(100)和(111)两个羟基化表面出发, 继而推广到自然界最稳定的晶体二氧化硅  $\alpha$ -quartz(0001)表面上, 研究人员系统地探讨了水和羟基化二氧化硅表面的相互作用规律<sup>[27]</sup>, 发现在  $\beta$ -cristobalite 的(100)表面上可能存在一种新的二维冰结构, 如图 4 所示. 它是由非常有序的四角和八角的水环交替组成的氢键网络结构. 其中每个水分子都达到了形成 4 个氢键作用的饱和状态, 满足了冰结构的基本特征. 这些四角氢键水环沿对角线方向平行排列, 再由氢键连接就会得到有序的二维冰结构. 该结构在以前的任何表面研究中都未曾报道过, 研究人员将它命名为二维镶嵌冰(2D tessellation). 另外, 计算得到的振动谱分析还表明, 该冰结构中存在两种强弱不同的氢键类型: 四角水环内部的氢键作用要强于外部的氢键作用. 特别需要指出的是, 分子动力学模拟结果显示, 该结构可以在室温下稳定存在. 这预示着该冰结构可能会在人工降雨等应用中发挥重要作用.

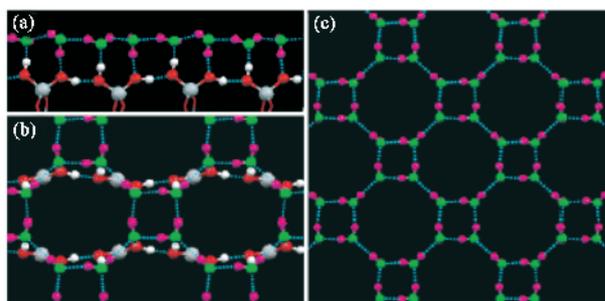


图 4 一种新的二维冰结构(二维镶嵌冰)

真实的材料体系内都存在不同程度的应力分布. 应力对材料结构性质的影响贯穿于材料的制备、加工、使用、老化等各个过程, 甚至对生命体的生长和形态发生来说, 应力也是一个决定性的因素. 应力在材料的生长过程中起着至关重要的作用. 表面实验室的研究人员利用共蒸发的方法, 制备了热失配的、微米尺度的 Ag 内核/SiO<sub>2</sub> 壳层复合结构. 配合合适的冷却速度, 可以在内核/壳层界面处产生足够的能引起表面结构失稳的应力, 获得了一系列非

常有趣的应力点阵花样. 研究发现<sup>[28-29]</sup>, 在球形表面上的应力点阵为包括适量旋错的三角铺排花样; 对格点数较少的花样, 应力花样同 Thomson 问题的解有严格的一一对应(图 5). 在锥形面上, 应力点阵表现出了神奇的 Fibonacci 螺旋花样. 到目前为止, 共获得了标记为  $3 \times 5$ ,  $5 \times 8$ ,  $8 \times 13$  和  $13 \times 21$  的左旋和右旋两种手性的 Fibonacci 螺旋花样. 比照应力点阵同自然界叶序花样对支撑面几何的依赖关系(图 6), 可以得出结论, 应力实验为叶序学的最小弹性能构型原理提供了直接的实验证据. 关于旋转抛物面上等面积圆的密堆积可能形成 Fibonacci 螺旋花样的猜想, 现在已经引起了数学家们的兴趣. 共蒸发实验还为半导体纳米线生长机理的研究提供了很好的模型体系, 目前已经观察到了金属催化颗粒从半导体胞衣中析出, 半导体材料向一端的迁移, 纳米线的生长等过程细节, 并发现了两根纳米线共用一个催化颗粒的有趣现象.

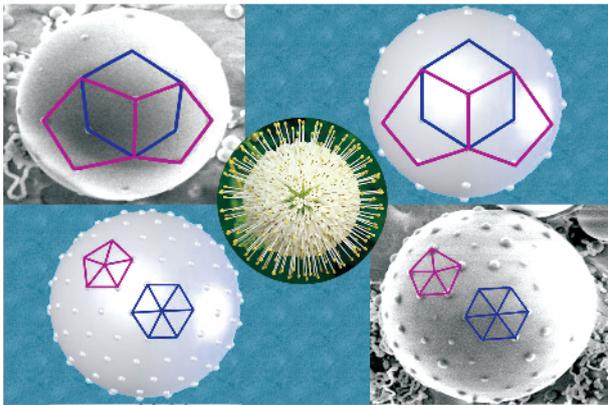


图 5 球面上的应力点阵花样同 Thomson 问题的解, 以及自然界中球形花托上的花序之间的比较

#### 4 表面低维结构中的新物理现象

对表面纳米结构的生长进行原子级精度的操控, 不仅可以为研究各种低维体系中的物理问题提供理想的平台, 更有可能导致新物理现象的发现, 从而为新材料的工业应用引入新的概念, 最终带来革命性的进步. 十余年来, 表面实验室成功地制备了尺寸完全相同、空间分布具有严格周期性的金属纳米团簇(如 In, Ga, Al, Pb, Ag 和 Co)阵列——一种几乎近于完美的二维人造晶格, 可以说对纳米点尺寸的大小的控制程度达到了名副其实的原子水平<sup>[30-32]</sup>. 研究人员还采取低温生长方法, 在 Si 衬底上制备出了具有原子级平整度且在宏观范围内均匀的 Pb 薄膜, 并实现了薄膜厚度一个原子层一个原子层变化

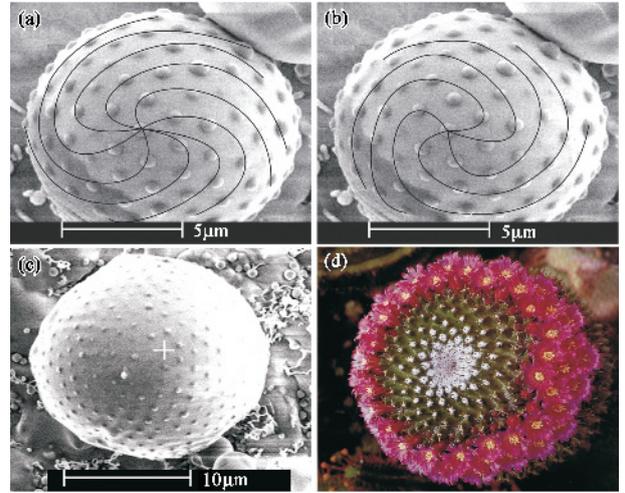


图 6 Ag 内核/SiO<sub>2</sub> 壳层微结构上由应力点阵构成的 Fibonacci 螺旋花样 (a-c), 以及仙人掌上由刺丛构成的 Fibonacci 螺旋花样 (d)

的精确控制, 从而得到了一个理想的、势阱宽度可调的一维方势阱体系. 对量子效应对 Pb 薄膜生长动力学和电子结构影响的研究表明, 量子阱态的形成对费米能级附近电子态密度和电声子耦合强度存在调制行为, 比如 Pb 薄膜超导转变温度随薄膜厚度发生振荡现象(图 7)<sup>[33]</sup>. 在此基础上, 还进一步开展了量子尺寸效应在原子尺度上调制薄膜基本性能参数的研究, 确定了 Pb 薄膜的热膨胀系数、局域功函数、摩擦力、表面扩散系数等随膜厚变化的量子振荡现象, 并从理论上给出了定性和定量的解释<sup>[34]</sup>. 另外, 表面实验室还成功地实现了利用量子尺寸效应对近藤效应的操控<sup>[35]</sup>, 这提供了一个技术上可行的调控单分子自旋的有效手段, 对开展有机分子磁性和分子自旋电子学的研究具有重要的意义. 最近, 表面实验室还研究了量子尺寸效应对薄膜的化学性质的调制作用, 观察到了表面吸附和表面氧化反应随膜厚变化时的振荡现象, 给出了金属表面化学反应活性的量子尺寸效应的直接实验证明<sup>[36]</sup>. 该研究对开展以量子受限金属薄膜为基础的表面吸附、异相催化等纳米材料的设计和应用具有重要的指导意义.

通过界面剪裁和应力匹配手段, 研究人员在 Si (111) 表面上生长出没有结构弛豫的单原子层 Al (111) 薄膜, 而且其界面也是完美的, 即不存在任何无序的浸润层和再构层<sup>[37]</sup>. 这是目前实验上可以得到的最接近理想的二维金属体系, 它的制作成功必然带来诸多新的物性发现. 例如, 利用这个界面为模板, 可以观察到由于量子尺寸效应诱导的一种 Al 的

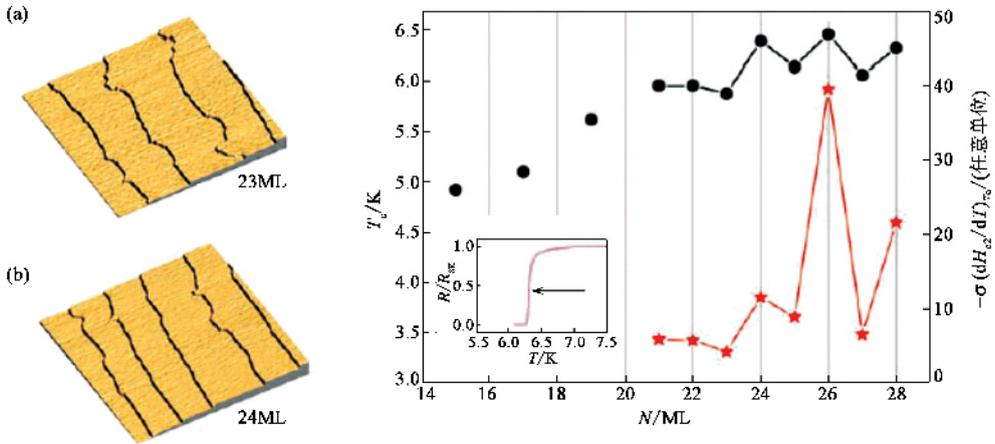


图 7 Pb 薄膜超导转变温度随薄膜厚度的振荡现象

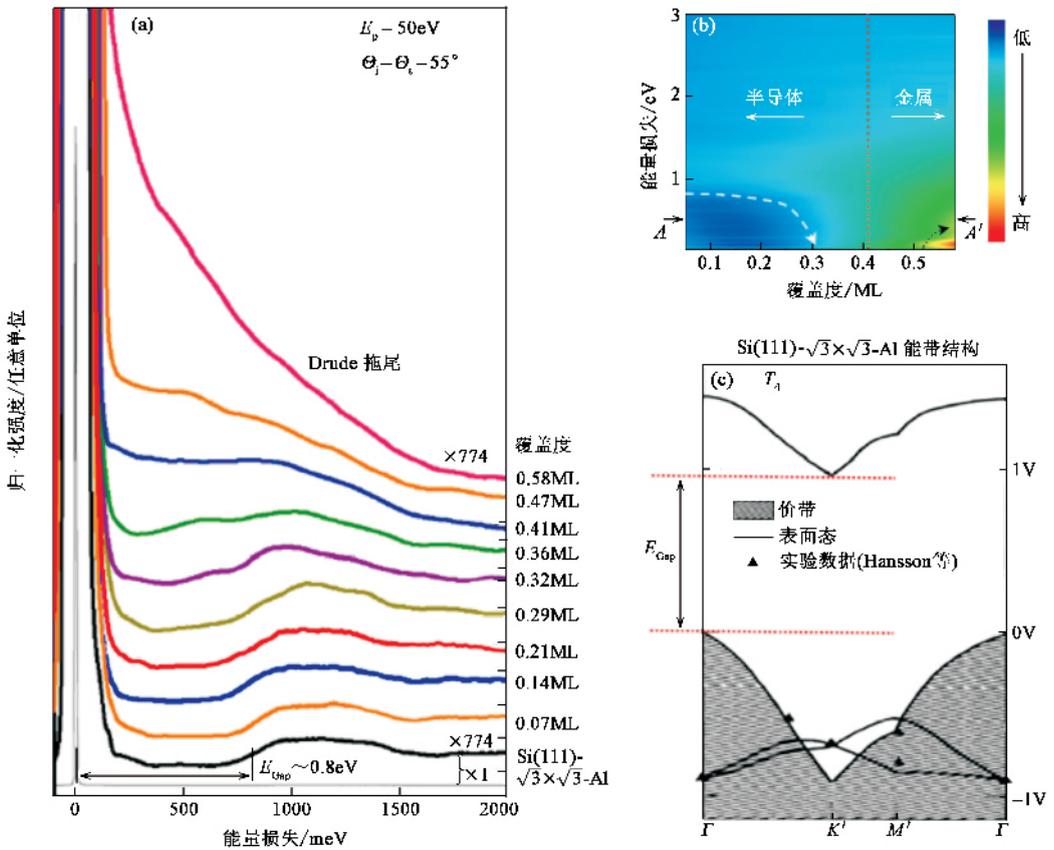


图 8 (a)不同覆盖度(对应不同的单原子层 Al 岛大小)的单原子层 Al 表面的 HREELS 谱. 表明当岛的平均尺寸增大时表面带隙从大到小连续变化的过程 (b)为 (a)中信号强度的二维图,可以更直观地看到带隙的连续变化,到约 0.3ML 时带隙区域消失

新相,在该相中,Al 的致密层和疏松层交错堆叠形成一种类似超晶格的结构<sup>[38]</sup>. 同时,在单原子层 Al 岛长大的过程中,还可以观察到 Al 岛的带隙随岛的大小的连续变化,这是一种新的、纯电子诱导的金属-绝缘体转变(图 8)<sup>[39]</sup>.

## 5 表面低维结构中的电子激发态

表面及纳米体系由于维度的降低,其中电子的集体行为将对宏观性质起到决定性的作用. 表面实验室开展了对低维体系的原子操纵理论及一维原子链体系等离子激发态性质理论的研究. 借助于扫描

隧道显微镜 (STM), 人们不仅可以在原子级分辨率的水平上观察材料的表面形貌, 还可以通过操纵单个原子和分子研究亚纳米尺度的电声耦合, 电子和能量的转移和耗散以及量子行为的振动激发等等. 研究人员对 STM 在 Cu(111) 表面上横向操纵单个 Co 原子的机制和动力学过程进行了理论研究并发现, 和以往的 STM 操纵原子和分子的实验观测不同, 在 Co/Cu(111) 这个体系中, Co 原子沿 Cu(111) 表面的横向迁移是由 Co 原子的横向受阻振动模式被直接激发而引起的. 同时在理论上可以预测, 如果在更高的温度下研究同一个系统, Co 原子迁移时感受到的势垒会趋于低得多的绝热势垒 (如图 9)<sup>[40]</sup>.

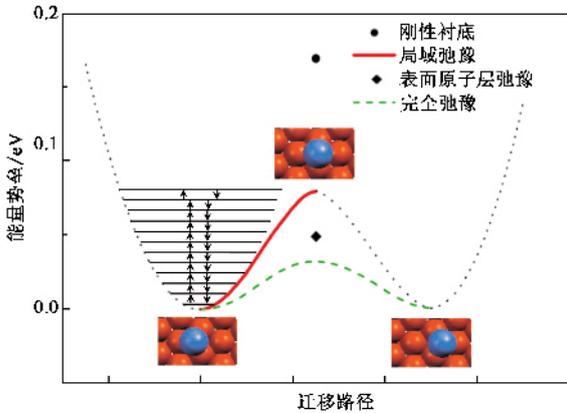


图 9 由轻推弹性带方法 (NEB) 计算得到的 Co 原子在 Cu(111) 表面上的 fcc 位置和 hcp 位置之间迁移时的势垒和路径, 四组数据反映了不同的衬底硬度情况

最近, 表面实验室在关于低维纳米体系的等离子激发态性质的研究中也取得了新进展. 在对低维受限体系下的电子激发和动力学的研究中, 基于 STM 原子操纵形成的一维原子链的人造模型系统, 研究人员首先用一维电子气模型, 对原子链集体激发态的出现和特征作出了预言, 演示了纵向的集体激发随着电子气长度的增加, 如何从单电子激发态演化到集体激发的过程 (如图 10)<sup>[41]</sup>. 随后, 为了深入理解原子尺度的等离子激发, 对一维原子链还作了精确的含时密度泛函理论计算, 验证了电子气模型计算中的纵向模式, 而在垂直于链的方向上, 还发现了两个新的横向模式: 位于原子链两端的端点模和位于链中部的中间模. 一维原子链上的这两个模式, 类似于二维体系中的表面和体的等离子模, 并会存在于任何一维有限体系 (如金属纳米线、碳纳米管等) 中, 因而具有广泛意义.

表面实验室开展的关于纳米体系量子输运理论的研究对定量理解纳米电子器件中的杂质效应具有

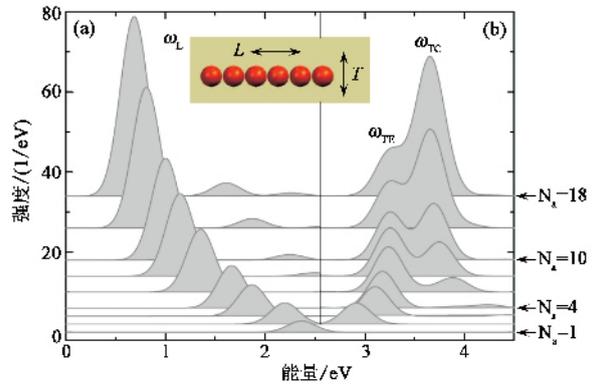


图 10 线性钠原子链的纵向 (a) 和横向 (b) 激发吸收谱. 从下至上依次为原子数 1, 2, 3, 4, 6, 8, 10, 14, 18 的原子链吸收谱

非常重要的意义. 研究人员发展了非平衡条件下处理杂质平均的基于 LMTO 的第一性原理方法, 它能够处理具有原子无序的纳米电子器件的量子输运问题. 首先推导了基于密度矩阵的非平衡顶点修正 NVC (nonequilibrium vertex correction), 进一步发展出的程序则可以从第一性原理方法出发, 自洽且高效地处理无序对非平衡量子输运的影响<sup>[42]</sup>. 当研究的器件尺度达到纳米量级时, 电子波的性质变得越来越明显, 这时与光的传播类似, 电子通过界面的输运可以用界面的透明度来描述. 研究人员用第一原理的方法系统地研究了各类金属界面, 发现 Al/Ag 界面 (111) 取向与 (100) 取向的界面透明度有两倍的差别. 这一意外的结果可以用近自由电子模型并且考虑到晶体周期势的影响来理解, 与第一原理的计算结果相符. 基于此, 研究人员提出了决定界面透射率的另一机制, 与人们常考虑的的界面上势垒和有效质量失配不同. 这一工作也提醒人们在用有效质量模型处理界面问题时要格外注意<sup>[43]</sup>.

## 6 结语

表面物理学是研究凝聚态物理问题、认识材料基本物理化学性质的重要学科, 发挥它在处理材料表面/界面以及低维结构等方面基本问题的优势, 与多学科进行广泛交叉, 拓宽研究方向, 将赋予它更加广阔的发展空间. 表面物理实验室在我国物理学科研水平迅速提高的大环境下, 面临着巨大的机遇与挑战. 一方面我们要对表面生长、分析手段进行改进与创新, 并且要大胆开展与纳米、材料等学科的交叉合作, 解决现有难题, 并探索新的物理问题, 比如经典强关联体系中由于维度降低所产生的重要影响.

另一方面,我们将面向具体的应用课题,尤其是针对目前能源、环境工程中迫切需要深入研究的水问题,致力于发展处理固-液、气-液界面相关课题的方法。

致谢 感谢中国科学院、国家自然科学基金委员会和国家科技部相关项目的资助。

### 参 考 文 献

- [ 1 ] Kane C, Fisher M. *Phys. Rev. Lett.*, 1992 68 :1220
- [ 2 ] Dowben P A. *Surf. Sci. Rep.*, 2000, 40 :151
- [ 3 ] Wildberger K, Stepanyuk V S, Lang P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1995 75 :509
- [ 4 ] Zhang Z Y, Niu Q, Shih Chih - Kang. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, 80 5381
- [ 5 ] Czoschke P, Hong Hawoong, Basile L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93 :036103
- [ 6 ] Haruta M. *Catal. Today*, 1997, 36 :153
- [ 7 ] Baibich M N, Broto J M, Fert A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 61 :2472
- [ 8 ] <http://surface.iphy.ac.cn>
- [ 9 ] 中华人民共和国专利:一种湿法腐蚀制备蓝宝石图形衬底,专利号 ZL200410038260.4.
- [ 10 ] 中华人民共和国专利:在特定的蓝宝石图形衬底上制备高质量 GaN 基材料的方法,专利号 ZL20041005857.4.
- [ 11 ] Wang J, Guo L W, Xing Z G *et al.* *J. Vac. Sci. Technol. B*, 2005, 23 :2476
- [ 12 ] Wang J, Guo L W, Jia H Q *et al.* *J. Electrochem. Soc.*, 2006, 153 :C182
- [ 13 ] Wang Y, Pei X J, Xing Z G *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 91 :061902
- [ 14 ] Wang X H, Jia H Q, Guo L W *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 91 :161912
- [ 15 ] *IOP Compound Semiconductor, Research Review*, Dec. 10, 2007
- [ 16 ] Zhang G Y, Jiang X, Wang E G. *Science*, 2003 300 :472
- [ 17 ] Zhang G Y, Bai X D, Wang E G *et al.* *Phys. Rev. B*, 2005, 71 :113411
- [ 18 ] Xu Z, Lu W G, Wang W L *et al.* *Adv. Mater.*, (in press)
- [ 19 ] Wang W L, Bai X D, Liu K H *et al.* *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, 128 :6530
- [ 20 ] Mei Z X, Du X L, Wang Y *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2005, 86 :112111
- [ 21 ] Wang Y, Du X L, Mei Z X *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2005, 87 :051901
- [ 22 ] Wang X N, Wang Y, Mei Z X *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 90 :151912
- [ 23 ] Zeng Z Q, Liu Y Z, Du X L *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 90 :081911
- [ 24 ] Mongeot F B, Zhu W G, Molle A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91 :016102
- [ 25 ] Zhu W G, Mongeot F B, Valbusa U *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92 :106102
- [ 26 ] Fichtthorn K, Scheffler M. *Nature*, 2004, 429 :617
- [ 27 ] Yang J J, Meng S, Xu L F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92 :146102
- [ 28 ] Li C R, Ji A L, Cao Z X. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 90 :164102
- [ 29 ] Li C R, Zhang X N, Cao Z X. *Science*, 2005 309 909
- [ 30 ] Li J L, Jia J F, Liang X J *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2002, 88 :066101
- [ 31 ] Li S C, Jia J F, Dou R F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93 :116103
- [ 32 ] Pan M H, Liu H, Wang J Z *et al.* *Nano Lett.*, 2005, 5 :87
- [ 33 ] Guo Y, Zhang Y F, Bao X Y *et al.* *Science*, 2004, 306 :1915
- [ 34 ] Ma L Y, Tang L, Guan Z L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 97 :266102
- [ 35 ] Fu Y S, Ji S H, Chen X *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99 :256601
- [ 36 ] Ma X C, Jiang P, Qi Y *et al.* *PNAS of USA*, 2007, 104 :9204
- [ 37 ] Jiang Y, Kim Y, Zhang S B *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2007, 91 :181902
- [ 38 ] Jiang Y, Wu K H, Tang Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2007, 76 :035409
- [ 39 ] Jiang Y, Wu K H, Ma J *et al.* *Phys. Rev. B*, 2007, 76 :235434
- [ 40 ] Liu K, Gao S W *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95 :226102
- [ 41 ] Yan J, Yuan Z, Gao S W. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98 :216602
- [ 42 ] Ke Y Q, Xia K, Guo H. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 100 :166805
- [ 43 ] Xu P X, Xia K, Zwierzycki M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96 :176602