

隧道效应中偏压的作用^{*}

熊 正 烨

(中山大学物理科学与工程技术学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 从隧道扫描势垒模型出发, 用量子力学计算导出隧道电流与针尖间的偏压、间距、及它们的逸出功之间的关系。偏压的作用主要是提高针尖上电子的能量, 使针尖上的电子比样品上的电子更容易穿过势垒, 从而形成隧道电流。

关键词: 扫描隧道显微镜 (STM); 隧道效应; 量子力学

中图分类号: O413.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2004) S1-0042-03

量子力学的隧道效应已经广为人知。1982 年, Binnig 和 Rohrer 依据隧道效应原理成功制造出扫描隧道显微镜 (简称 STM), 从而使人们对微观世界的认识一下子由幻想和抽象分析飞跃到对原子的直接观察和操纵。扫描隧道显微镜被国际科学界公认为 20 世纪 80 年代世界十大科技成就之一, 近 10 年来它也逐渐走进了高校的教学实验室^[1]。然而, 多年的教学实践中, 笔者发现学生对隧道扫描过程中偏压的作用难以理解, 觉得有必要撰文对此详细论述。本文从量子力学角度对偏压的作用做出解释。

1 问题的提出

扫描隧道显微镜种样品和针尖之间电子的势垒关系如图 1^[2]。

由于隧道效应电子穿过势垒由针尖流向样品, 从而形成电流, 在温度不高和低偏压下, 隧道电流 I_s 可表示为^[3]

$$I_s \propto \exp \left[-2 \frac{\sqrt{2m\phi}}{\hbar} a \right] \quad (1)$$

式中 a 是针尖到样品的距离, ϕ 是有效局域功函数, $\phi = (\phi_1 + \phi_2)/2$, ϕ_1 、 ϕ_2 分别为样品和针尖的功函数。 $\hbar$ 为 Planck 常数, m 为电子的质量。

由于 I_s 对高度变化极为敏感, 因此, STM 具有很高的纵向分辨率。由量子力学知道, 即使不加偏压, 针尖上的电子穿过势垒达到样品的概率为^[4]

$$|T|^2 \approx \frac{16E(\phi - E)}{\phi^2} \exp \left[-2 \frac{\sqrt{2m(\phi - E)}}{\hbar} a \right] \quad (2)$$

但是, 与此同时, 样品上的电子也有几乎相同

的概率穿过势垒到达针尖。也就是说, 如果不加偏压的话, 观测到的 I_s 应该为 0。偏压 V_b 对隧道电流到底有什么影响, 这正是本文要讨论的问题。

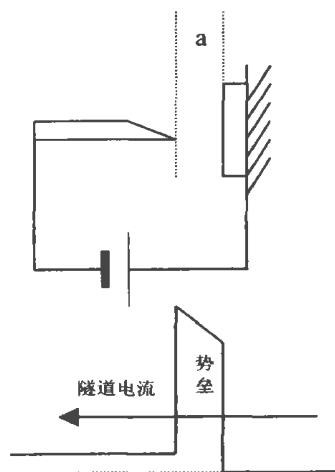


图 1 隧道扫描等效势垒图

Fig 1 The sketch of voltage between top and sample

2 对原理模型的量子力学计算

将图 1 的势垒图进一步简化得到图 2, 写出定态薛定谔方程:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = [V(x) - E] \varphi(x) \quad (3)$$

其中, 势垒的表达式为:

$$\begin{aligned} eV_b, & x < x(I \text{ 区}) \\ V(x) = \phi, & 0 < x < a (II \text{ 区}) \\ 0, & x > a (III \text{ 区}) \end{aligned}$$

显然, 3 个区波函数的解都是平面波。先考虑左边针尖上的电子穿过势垒进入样品, 3 个区内的波函

^{*} 收稿日期: 2004-04-12

作者简介: 熊正烨 (1972 年生), 男, 讲师, E-mail: stszxy@zsu.edu.cn

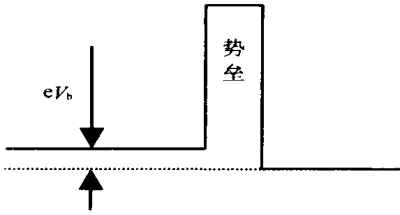


图2 简化势垒图

Fig 2 Predigestion of the sketch of voltage

数可写成如下形式:

$$\varphi_{\text{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x},$$

$$k_1^2 = 2m(E - eV_b)/\hbar^2$$

$$\varphi_{\text{II}}(x) = B_1 e^{ik_2 x} + B'_1 e^{-ik_2 x},$$

$$k_2^2 = 2m(E - \phi)/\hbar^2$$

$$\varphi_{\text{III}}(x) = C_1 e^{ik_3 x}, k_3^2 = 2mE/\hbar^2$$

由 $\varphi(x)$ 、 $\varphi'(x)$ 的连续性条件, 可算得:

$$\begin{aligned} |C_1|^2 = & \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1 + k_3)^2 k_2^2 + (k_2^2 - k_1^2)(k_2^2 - k_3^2) \sin^2(k_2 a)} \cdot \\ & |A_1|^2 \end{aligned} \quad (4a)$$

由于 $\phi \gg E > eV_b$, 因此 k_2 为虚数。令 $k_2 = ik'_2$, 则 k_2 为实数。

$$\begin{aligned} |C_1|^2 = & \frac{4k_1^2 k'^2_2}{(k_1 + k_3)^2 k'^2_2 + (k'^2_2 + k_1^2)(k'^2_2 + k_3^2) \text{sh}^2(k'_2 a)} \cdot \\ & |A_1|^2 \end{aligned} \quad (4b)$$

由于 $\text{sh}^2(k'_2 a) \approx \frac{1}{4} \exp(2k'_2 a) \gg 1$, 因此有:

$$\begin{aligned} |C_1|^2 = & \frac{16k_1^2 k'^2_2}{(k'^2_2 + k_1^2)(k'^2_2 + k_3^2)} \cdot \\ & \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E)} a\right] |A_1|^2 \end{aligned} \quad (4c)$$

即

$$|C_1|^2 = C_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E)} a\right] |A_1|^2 \quad (4d)$$

其中, $C_0 = \frac{16k_1^2 k'^2_2}{(k'^2_2 + k_1^2)(k'^2_2 + k_3^2)}$

考虑右边样品上的电子穿过势垒到针尖, 3 个区内的波函数变为:

$$\varphi_{\text{I}}(x) = A'_2 e^{-ip_1 x},$$

$$p_1^2 = 2m(E' - eV_b)/\hbar^2$$

$$\varphi_{\text{II}}(x) = B_2 e^{ip_2 x} + B'_2 e^{-ip_2 x},$$

$$p_2^2 = 2m(E' - \phi)/\hbar^2$$

$$\varphi_{\text{III}}(x) = C_2 e^{ip_3 x} + C'_2 e^{-ip_3 x},$$

$$p_3^2 = 2mE'/\hbar^2 \quad (5)$$

同理可算得:

$$\begin{aligned} |A'_2|^2 = & \frac{16p_3^2 p'^2_2}{(p'^2_2 + p_3^2)(p'^2_2 + p_1^2)} \cdot \\ & \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E')} a\right] |C'_2|^2 \end{aligned} \quad (6a)$$

即

$$\begin{aligned} |A'_2|^2 = & A_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E')} a\right] |C'_2|^2 \end{aligned} \quad (6b)$$

其中, $A_0 = \frac{16p_3^2 p'^2_2}{(p'^2_2 + p_3^2)(p'^2_2 + p_1^2)}$

由于偏压的存在, 使得 $E = E' + eV_b$; 由于 $eV_b \ll \phi$, 因此, $A_0 \approx C_0$ 。隧道电流可表示为:

$$\begin{aligned} I_s \propto & \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} - \frac{|A'_2|^2}{|C'_2|^2} \propto \\ & \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E)} a\right] - \\ & \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E')} a\right] \end{aligned} \quad (7a)$$

即

$$\begin{aligned} I_s \propto & \frac{2ame}{\hbar \sqrt{2m(\phi - E')}} V_b \cdot \\ & \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\phi - E')} a\right] \propto \\ & V_b \cdot \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\phi} a\right] \end{aligned} \quad (7b)$$

上式用了一些近似, 考虑到与 a 是指数关系和正比关系之积, 因此, 忽略正比关系是合理的; $E' \ll \phi$, 因此用 ϕ 代替 $\phi - E'$ 也是合理的。

3 总 结

从上面的推导可以看出, 保持针尖与样品间距不变时, 它们之间的隧道电流与偏压是成正比的(偏压不太大)。计算显示出: 偏压的作用主要是提高了针尖上电子的能量, 使针尖上的电子比样品上的电子更容易越过势垒, 从而形成隧道电流。

参考文献:

- [1] 熊正烨, 丘翠环, 张鸿, 等. 用扫描隧道显微镜观察纳米粉体的形貌[J]. 物理实验, 2000, 20(6): 3-5.
- [2] 张鸿海, 曹传, 师汉民, 等. 基于隧道效应的 nm 级三维轮廓仪的研究[J]. 华中理工大学学报, 1996, 24(4): 4-7.
- [3] 白春礼. 扫描隧道显微术及其应用[M]. 上海: 上海科技出版社, 1992.
- [4] 赵凯华, 罗蔚茵. 量子物理[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001.

The Effect of Voltage in Tunneling Effect

XIONG Zheng ye

(School of Physics Science and Engineering, Sun Yat sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: The relation among tunneling current, space between tip and sample, voltage between tip and sample, escaping work from tip and sample, is educed through quantum mechanics calculation using tunneling scanning potential boundaryries model. The effect of the voltage is to increase the energy of electrons in the tip, so the electrons can be more probability to go through the potential boundaryries than the ones in sample, and there is current from the sample to the tip.

Key words: scanning tunneling microscope (STM); tunneling effect; quantum mechanics