

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до практичних занять з дисципліни
СУЧАСНІ НАПРЯМИ НАНОТЕХНОЛОГІЙ

Для магістрів спеціальностей Радіоприладобудівного факультету:

8.050801 “Мікро- та наноелектроніка”,

8.050901 “Радіотехніка”,

8.091001 “Виробництво електронних засобів”,

8.092402 “Інформаційні мережі зв’язку”

денної і заочної форм навчання

Методичні вказівки до практичних занять з дисципліни “Сучасні напрями нанотехнологій” для магістрів спеціальностей Радіо-приладобудівного факультету:

8.050801 “Мікро- та наноелектроніка”,

8.050901 “Радіотехніка”,

8.091001 “Виробництво електронних засобів”,

8.092402 “Інформаційні мережі зв’язку”

денної і заочної форм навчання / Укл.: Погосов В.В., Бабіч А.В.,
Коротун А.В., – Запоріжжя: ЗНТУ, 2010. – 26 с.

Укладачі:

В.В. Погосов, проф, д-р фіз.-матем. наук.

А.В. Бабіч, асист.

А.В.Коротун, асист.

Рецензент: В.П. Курбацький, доц., канд.фіз.-матем.наук

Відповідальний за випуск: Г.В. Сніжної, доц., канд.фіз.-матем.наук

Затверджено

на засіданні кафедри

“Мікро- та наноелектроніка”

Протокол №7

від 01.07.2010 р.

ЗМІСТ

1	Мета практикуму	4
2	Методичні вказівки	4
3	Теорія	5
3.1	Основні співвідношення	5
3.2	Класифікація наноструктур	6
3.3	Одновимірні ями	9
4	Задачі	15
5	Запитання і завдання для самостійної роботи	22
	Перелік посилань	25

1 МЕТА ПРАКТИКУМУ

Мета практикуму – поглиблення і розширення теоретичних знань у галузі фізики низькорозмірних структур; формування у студентів навичок орієнтування в потоці науково-технічної інформації та використання фізичних законів в своїй галузі техніки з метою застосування сучасних, найбільш ефективних методів розрахунку і засобів обчислювальної техніки; розвинення навичок користування спеціальною науковою і довідковою літературою, а також діючими стандартами. Розвиток наноелектроніки і нанотехнологій пов'язаний з успіхами багатьох наукових напрямків теоретичної й експериментальної фізики. Досвід, набутий під час практичних занять, може бути використаний студентом у подальшій роботі над дипломним проектом і в майбутній інженерній діяльності. В результаті вивчення дисципліни студент повинен знати:

- основні фізичні явища в системі малорозмірних об'єктів;
- фундаментальні закони природи;
- методи сучасної теоретичної фізики;
- методи фізичних досліджень;
- внутрішні зв'язки між окремими розділами науки;
- основні числові значення фізичних величин у природі й техніці;

та вміти:

- проводити розрахунки характеристик одноелектронних приладів;
- використовувати фізичні моделі для вирішення практичних задач.

2 МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

Нині накопичено значний досвід у розробці приладів, дія яких ґрунтується на квантово-механічних принципах. Укладаючи атоми в декілька шарів, створюють штучні кристали. Такі структури мають нанометрові розміри. Електрони в цих структурах поведуться як квантові об'єкти. Вивчення цих структур не лише відкриває но-

ві сторінки електронної інженерії, а й супроводжується відкриттями фундаментального характеру.

3 ТЕОРІЯ

3.1 Основні співвідношення

У класичній фізиці траєкторії руху електронів, як і всіх інших частинок, можна розрахувати за допомогою рівнянь Ньютона. Електрони мають масу спокою m_e і елементарний негативний заряд $(-e)$. У просторі, де діє електромагнітне поле, вони рухаються прискорено, а поза дією поля рух рівномірний і прямолінійний. У будь-якому разі, задаючи початкову координату та імпульс, можна обчислити траєкторію. Так, за допомогою класичних рівнянь руху розраховують електронні траєкторії, наприклад, у кінескопі або магнетроні.

У квантовій механіці накладають обмеження на точність, з якою можна задати початкову координату та імпульс частинки. Якщо координата частинки відома з точністю Δx , то імпульс p частинки можна визначити не точніше, ніж

$$\Delta p \geq \hbar / \Delta x. \quad (3.1)$$

Це – співвідношення невизначеності Гейзенберга, з якого випливає, що якщо координату електрона x задати точно, то невизначеність імпульсу Δp буде значною.

Якщо в деякий момент часу квантова частинка перебувала в обмеженій області простору, то надалі неможливо достовірно передбачити її місцеположення. Можна говорити про розподіл частинки в просторі і про ймовірність цього розподілу. Величину, що описує цей розподіл, називають ψ -функцією або хвильовою функцією. Вона дає статистичний опис ймовірності окремого електрона. Інтенсивність цієї функції $|\psi|^2$ визначає ймовірність знайти частинку в тій чи іншій області, тобто, ймовірність знайти частинку в інтервалі Δx дорівнює $|\psi|^2 \Delta x$. Якщо електрон рухається в обмеженій області, то його енергія має дискретні значення, тобто спектр енергій є квантованим.

Визначимо дозволені рівні енергії електрона, що перебуває в потенціальній ямі. Якісний підхід ґрунтується на використанні постулатів Бора. При цьому в потенціальній ямі дозволені лише ті траєкторії, для яких імпульс частинки p_n і ширина ями L пов'язані співвідношенням

$$p_n a = \pi \hbar n, \quad (3.2)$$

де n – номер квантового стану. Визначивши звідси дозволені значення імпульсу, знайдемо рівні енергії в потенціальній ямі:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m_e} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} n^2. \quad (3.3)$$

Характерно, що мінімальна енергія частинки, що знаходиться в ямі, не може дорівнювати нулю. Завжди є так звана енергія нульових коливань. Енергія першого рівня згідно з виразом (3.19) дорівнює

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2}, \quad (3.4)$$

що для ідеальної квантової ями завширшки 5 нм дає $E_1 = 0,02$ еВ. Оскільки в кристалі, наприклад, напівпровідника ефективна маса m^* приблизно вдесятеро менша за масу вільного електрона, то для реальної квантової ями $E_1 = 0,2$ еВ.

3.2 Класифікація наноструктур

Гетероструктура – напівпровідникова структура, що утворюється в результаті контакту двох напівпровідників різних за хімічним складом та фізичними властивостями. Основний елемент гетероструктури – гетероперехід, що являє собою контакт двох хімічно різних матеріалів, при якому кристалічна ґратка одного матеріалу без порушення періодичності іншого переходить у кристалічну ґратку іншого матеріалу. На гетеропереході відбувається стрибкоподібна зміна властивостей матеріалу: ефективної маси, ширини забороненої зони, положення країв валентної зони та зони провідності, пружних

та фононних характеристик тощо. Майже з кожною з перелічених властивостей пов'язані конкретні застосування гетероструктур. При переході до нанорозмірної шкали стрибки зон на гетеропереходах можна використовувати для обмеження руху носіїв заряду й у цьому випадку визначальну роль будуть відігравати розмірні квантові ефекти, тобто матиме місце розмірне квантування. Розглянемо систематику квантово-розмірних гетероструктур:

- квантові ями (quantum wells, QWs);
- квантові дроти (quantum wires та quantum well wires, QWWs);
- квантові точки (quantum dots, QDs);
- надгратниці (superlattices, SLs);
- двох та трьохбар'єрні резонансно-тунельні структури (double- and triple-barrier resonance-tunneling structures);
- поодинокі квантова яма (single quantum well, SQW);
- подвійна квантова яма (double quantum well);
- антиточки (antidots);
- дельта-леговані структури (δ -doped structures);
- квантові мікрорезонатори (quantum microcavities);
- фотонні кристали (photonic crystals);
- гетероструктури (heterostructures);
- порожнисті напівпровідникові матеріали;
- фулерени, нанокластери, нанотрубки, наноконтакти . . .

Розрізняють такі квантові стани в наноструктурах: розмірно-квантовані стани вільних носіїв та екситонів; підзони та мінізони; розмірно-квантовані оптичні фонони, інтерфейсні фонони, акустичні фонони з “ламаним” спектром (folded acoustic phonons); двовірний магнітний полярон; композитні ферміони та краєві стани в квантовому ефекті Холла . . .

Реалізувати просторове обмеження руху електрона у напівпровіднику можна, виходячи з того факту, що енергетичний спектр напівпровідників складається з дозволених і заборонених енергетичних зон. Ці зони сформовані з дискретних рівнів атомів, які утворюють кристал. Найвищу енергетичну зону називають *зоною провідності*. Нижче від зони провідності розміщена *валентна зона*, а між ними

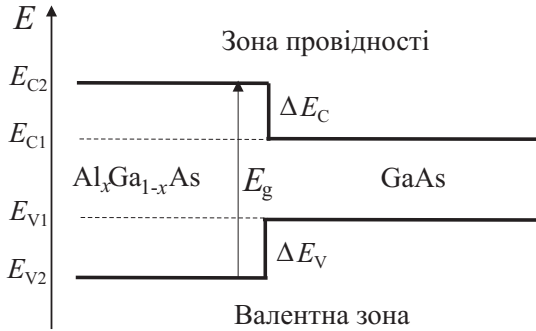


Рисунок 3.1 – Енергетичні зони на гетероструктурі. E_C та E_V – межі зони провідності і валентної зони, E_g – ширина забороненої зони. Електрон з енергією, меншою за E_{C2} , може перебувати лише праворуч від межі

лежить *заборонена зона* енергій. Ширина забороненої зони E_g для напівпровідників, які використовують на практиці, може змінюватись у межах від близьких до нуля значень ($\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$) до 5 еВ (алмаз).

Якщо привести в контакт два напівпровідники з різними забороненими зонами, то отримаємо гетероструктуру (рис. 3.1). Для електронів, які рухаються у вузькозонному напівпровіднику і мають меншу енергію, межа відіграватиме роль потенціального бар'єра. Саме на тонких плівках бісмуту і напівпровідника InSb вперше спостерігалися ефекти розмірного квантування. Два гетеропереходи обмежують рух електрона з двох боків і утворюють потенціальну яму.

Розглянемо докладніше межу поділу в напівпровідниковій гетероструктурі, коли шар одного напівпровідникового матеріалу вирощується безпосередньо на шарі іншого напівпровідникового матеріалу. При цьому енергетичні рівні E_C та E_V змінюються (плавно або стрибком) на межах поділу цих матеріалів. Жодна теорія не може передбачити просторову залежність рівнів E_C та E_V для кожного конкретного випадку.

Розглянемо гетероперехід між $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ та GaAs . Ці напівпровідники мають однакові сталі кристалічної ґратки (тобто одна-

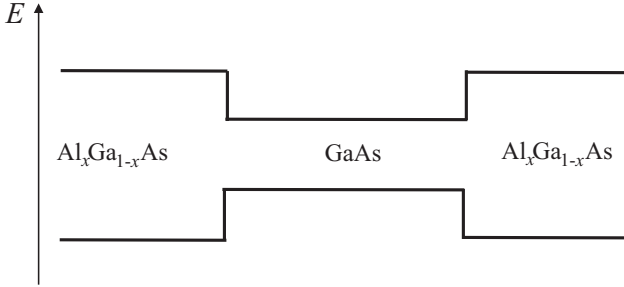


Рисунок 3.2 – Утворення квантової ями у структурі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

кові відстані між атомами), але різні енергетичні щільності. Якщо шар $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ вирощено на шарі GaAs , то на зонній діаграмі цього гетеропереходу утворюються “сходи” ΔE_C і ΔE_V , зображені на рис. 3.1. Найпростіший підхід до визначення ΔE_C і ΔE_V ґрунтується на використанні електронної спорідненості матеріалів (правило Андерсона): $\Delta E_V = 0,04 \text{ eV}$.

Якщо два шари $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ вирощено на протилежних базових поверхнях шару GaAs , то на зонній діаграмі цієї гетероструктури утворюється вищезгадана квантова яма (рис. 3.2). Квантова яма у зоні провідності діє як захоплювач електронів, а квантова яма у валентній зоні діє як захоплювач дірок. Якщо квантові ями стають досить вузькими (завширшки не більш як 10 нм), то відбувається квантування (тобто дискретизація) відповідних енергетичних рівнів захоплення носіїв заряду.

Розглянемо одновимірні задачі (рух уздовж осі x) й оберемо найпростіші залежності потенціальної енергії від відстані.

3.3 Одновимірна яма

Рух частинки маси спокою M описують рівнянням Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (3.5)$$

Для *дискретного спектра* енергія має бути меншою від потенціальної енергії на нескінченності, тобто має виконуватися співвідношення $E < V_0$. Тоді стаціонарне рівняння Шредінгера для області II (рис. 3.3) має вигляд

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad (3.6)$$

де $\psi'' \equiv \nabla^2\psi = d^2\psi(x)/dx^2$, а

$$k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}. \quad (3.7)$$

Загальний розв'язок рівняння (3.6) має вигляд

$$\psi_2 = A_2 \sin(kx + \delta), \quad (3.8)$$

де A_2 і δ – довільні сталі.

В областях I і III рівняння Шредінгера можна подати у формі

$$\psi'' - \kappa^2\psi = 0, \quad (3.9)$$

де

$$\kappa = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{|p|}{\hbar}. \quad (3.10)$$

Розв'язок рівняння (3.9) (потенціальний бар'єр)

$$\psi_{1,3} = A_{1,3}e^{\kappa x} + B_{1,3}e^{-\kappa x}, \quad (3.11)$$

($A_{1,3}$ і $B_{1,3}$ – довільні сталі) містить дві частини: експоненціальну спадну та експоненціально висхідну (рис. 3.3, б).

Власні значення для енергії частинки знаходимо з граничних умов, за якими експоненціально висхідний розв'язок має обернутися на нуль. Для цього покладемо в I області $A_1 = A$ і $B_1 = 0$ і в III області $A_3 = 0$ і $B_3 = Be^{\kappa L}$. Тоді матимемо

$$\psi_1 = Ae^{\kappa x} = Ae^{-\kappa|x|}, \quad x < 0, \quad (3.12)$$

$$\psi_3 = Be^{-\kappa(x-L)}, \quad x > L. \quad (3.13)$$

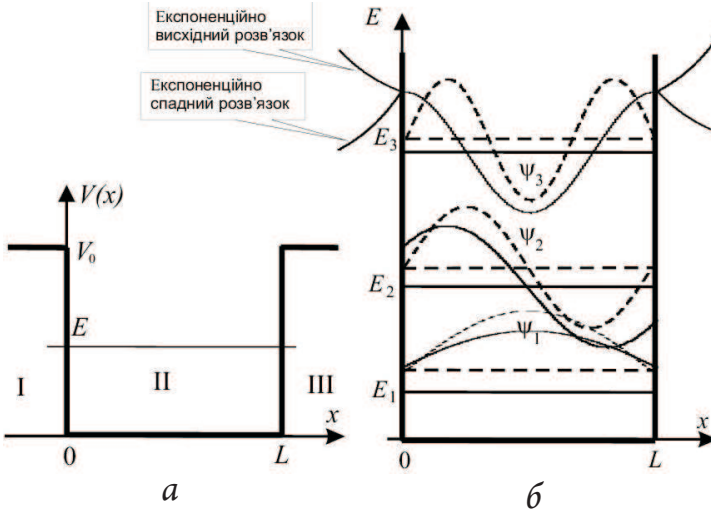


Рисунок 3.3 – Рух частинки в потенціальній ямі (а). Схематичне розміщення енергетичних рівнів та власні функції частинки в ямі скінченної глибини (суцільні лінії) та у нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі (штрихові лінії) (б)

“Зшиваючи” хвильові функції ψ_1 і ψ_2 в точці $x = 0$, а також ψ_2 і ψ_3 в точці $x = L$ (під “зшиванням” слід розуміти прирівнювання хвильових функцій та їх похідних в заданих точках), отримаємо

$$\operatorname{tg} \delta = k/\kappa; \quad (3.14)$$

$$\operatorname{tg}(kL + \delta) = -k/\kappa. \quad (3.15)$$

Рівності (3.14) і (3.15) можна звести до вигляду

$$\sin \delta = k/k_0; \quad \sin(kL + \delta) = -k/k_0, \quad (3.16)$$

де $k_0 = \sqrt{2MV_0}/\hbar$, $\kappa = \sqrt{k_0^2 - k^2}$.

Виключаючи з рівняння (3.16) величину δ , для обчислення власних значень дістанемо рівняння

$$k_n L = n\pi - 2 \arcsin(k_n/k_0), \quad (3.17)$$

де $n = 1, 2, 3, \dots$ – цілі позитивні числа. Оскільки величина $k > 0$, а аргумент $k/k_0 < 1$, завжди можемо вважати, що $\arcsin(k_n/k_0)$ лежить у межах від 0 до $\pi/2$. У загальному випадку рівняння (3.17) можна розв'язати графічно.

Розглянемо спочатку випадок $V_0 \gg E$, тобто коли потенціальна яма обмежена нескінченно високими потенціальними стінками ($k_n/k_0 = 0$). Тоді з рівняння (3.17) знаходимо

$$k_n = n\pi/L. \quad (3.18)$$

Звідси для енергії E_n (власні значення) і для відповідної хвильової функції (власні функції) отримаємо

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m_e} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} n^2 \quad (3.19)$$

і

$$\psi_n = A_n \sin(\pi n x / L). \quad (3.20)$$

У цьому разі фаза δ згідно з (3.16) обертається на нуль, а вираз для хвильової функції (3.20) дійсний всередині потенціальної ями. У потенціальному бар'єрі ψ_n перетворюється на нуль при $\kappa \rightarrow 0$. Коефіцієнт A_n можна визначити з умови нормування

$$\int_0^L \psi_n^2 dx = A_n^2 L / 2 = 1. \quad (3.21)$$

Звідси знаходимо власні функції

$$\int_0^L \psi_{n'} \psi_n dx = 0, \quad n' \neq n, \quad (3.22)$$

які задовольняють також умові ортонормованості. У цьому неважко впевнитись.

Розв'язки хвильового рівняння зображені на рис. 3.3 б. Вони подібні до відомих розв'язків для коливань струни, що утворюють стійні

хвилі. Випадок $n = 1$ відповідає основному тону, випадок $n = 2$ – першій гармоніці і т. д.

Зазначимо, що для дійсних хвильових функцій густина струму завжди дорівнює нулю. Цей результат цілком природний, оскільки коливання є стійними хвилями, які не можуть утворювати потоки частинок.

Неперервний спектр розглянемо на прикладі вільного руху частинок. У найпростішому одновимірному випадку, коли на всьому інтервалі змінення координати x ($-\infty < x < \infty$) потенціальна енергія обертається на нуль ($V = 0$), рівняння Шредінгера має вигляд (3.6), (3.7). Розв'язок його

$$\psi = Ae^{-ikx} + Be^{-ikx}. \quad (3.23)$$

Звідси видно, що розв'язок $Ae^{-i(\omega t - kx)}$ описує рух хвилі в одному напрямку осі x , а $Be^{-i(\omega t + kx)}$ – у протилежному. Тут хвильове число k може набувати як позитивного, так і негативного значення. Тоді один перший розв'язок може описати обидва випадки.

Обмежуючись однією хвилею, що біжить у напрямку x або проти нього, для стаціонарної частини хвильової функції дістанемо

$$\psi = Ae^{ikx}. \quad (3.24)$$

Неважко упевнитися, що інтеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \rightarrow \infty$$

(розходиться), і тому стандартний спосіб нормування потребує перегляду.

У методі Борна замість граничних умов на хвильову функцію накладається умова періодичності. Наприклад, в одновимірному випадку, вводячи довжину періодичності Борна L (яку, зрештою, можна вибрати скільки завгодно великою, оскільки вона тим або іншим

способом виключається з кінцевого результату), треба на хвильову функцію накласти умову періодичності

$$\psi(x) = \psi(x + L) \quad (3.25)$$

або

$$Ae^{ikx} = Ae^{ik(x+L)},$$

звідки

$$e^{ikL} = 1 \Rightarrow k = 2\pi n/L = p/\hbar. \quad (3.26)$$

Квантове число n може набувати як *позитивних*, так і *негативних* значення, *включаючи нуль*, тобто

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (3.27)$$

Тоді для спектра енергії (вільний рух) згідно (3.18) отримаємо

$$E_n = \frac{p_n^2}{2M} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} n^2. \quad (3.28)$$

Якщо припустити, що частинка перебуває на відрізьку $(-L/2 < x < L/2)$, то використовуючи умови нормування, знаходимо

$$\psi_n = L^{-1/2} \exp\{i2\pi nx/L\}. \quad (3.29)$$

Легко довести, що хвильові функції не лише є нормованими, а й задовольняють умову ортонормованості, в чому неважко впевнитися через безпосереднє інтегрування

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{n'} \psi_n dx &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \exp\{i2\pi(n - n')x/L\} dx = \\ &= \frac{\sin\{\pi(n - n')\}}{\pi(n - n')} = \delta_{nn'}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Отже, вводячи штучно довжину періодичності, ми робимо неперервний спектр дискретним. Однак, якщо в кінцевому результаті довжину L , що не має особливого фізичного сенсу, наближати до нескінченності, то дискретний спектр стає неперервним.

4 ЗАДАЧІ

4.1 Розв'язати задачу (рис. 3.3 *a*) для різних ефективних мас електронів під бар'єрами m_{e1} та у ямі m_{e2} (значення ефективних мас можна знайти, наприклад, у книзі [7]). Задача стосується гетероструктур (див. рис. 3.1 і 3.2).

Вказівка: використати граничну умову

$$\frac{\psi'_1(x)}{m_{e1}} \Big|_{x=0, L} = \frac{\psi'_2(x)}{m_{e2}} \Big|_{x=0, L},$$

яка відображає умову неперервності потоку імовірності через межу ями. Нагадаємо, що для частинки $\psi'/M \sim \hat{p}\psi/M = \hat{v}\psi$, де $\hat{v}$ – оператор швидкості.

4.2 У процесі розвитку нових технологій постало питання про створення нових ефективних напівпровідникових емітерів. В експериментальних роботах показано, що струм польової емісії утворюють

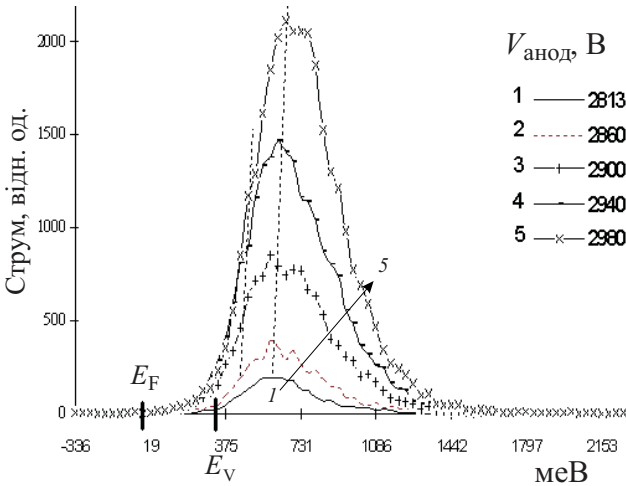


Рисунок 4.1 – Енергетичний спектр електронів при польовій емісії з площини (111) Ge для різних значень напруги [8]

електрони із валентної зони, й іноді в емісії беруть участь поверхневі стани, розміщені в забороненій і валентній зонах напівпровідника. У роботі [8] експериментально досліджено енергетичний розподіл електронів із польового емітера із монокристалу n -GaAs, вкритого тонким шаром власного оксиду, а також енергетичний розподіл електронів з площини (111) монокристалу германію при польовій емісії і залежність енергетичних спектрів від напруженості зовнішнього поля (рис. 4.1). Головний пік відповідає енергіям, нижчим від стелі валентної зони.

Дати інтерпретацію експериментам.

Розв'язання. Традиційні обчислення польової емісії [9] зводяться до розрахунку потенціального профілю всередині напівпровідника за наявності зовнішнього поля. При цьому не звертається увага на наявність вузької потенціальної ями, утвореної потенціалом зображення (що залежить від діелектричної проникності ϵ) поблизу поверхні. Компонента імпульсу електрона квантується вздовж нормалі до поверхні (вісь x), а паралельно поверхні (площина yx) спектр значень компонент імпульсу – неперервний. На рис. 4.2 зображено потенціальну схему, яка добре відповідає $T = 0$, коли напівпровідник

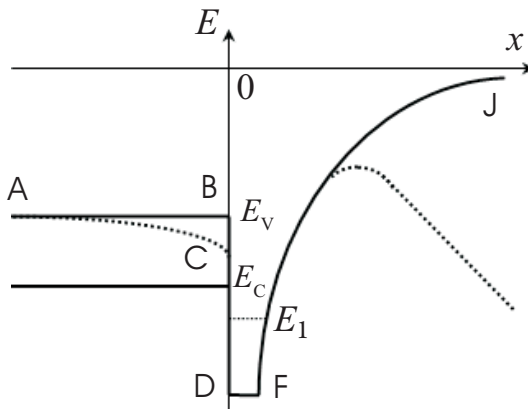


Рисунок 4.2 – Енергетична схема поблизу поверхні матеріалу

Таблиця 4.1 – Дані, які використано для розрахунків, а також результати обчислень.

Матеріал	E_C , eV	E_V , eV	ϵ	E_1 , eV	x_0, a_0
Ge	–4,00	–4,75	16,00	–6,590	0,15
GaAs	–4,07	–5,50	12,53	–6,373	0,15

перетворюється на діелектрик.

Треба чисельно розв'язати одновимірне рівняння Шредінгера з потенціалом ABDFG (випадок, коли немає поля) для германію та арсеніду галію. Потенціал зображення обрізаний на відстані x_0 від поверхні. Виявлено поверхневу підзону (табл. 4.1), дно якої лежить нижче від стелі валентної зони.

При ненульовій температурі, а також за наявності поля і загину зон потенціальний профіль ACDFJ буде сприятливішим для формування зони з дном, ще глибше розміщеним під стелею валентної зони. Отже, наявність поверхневої зони нижче від рівня Фермі й стелі валентної зони якісно пояснює зсув енергетичного спектра емітованих електронів, виявлений у роботі [8].

4.3 Поверхня тонкої монокристалічної плівки силіцію має орієнтацію (111). Визначити щільність електронних станів у такому двовимірному електронному газі. Що зміниться при орієнтації поверхні (100)? Як зміниться відповідь у попередній задачі, якщо емітером буде така плівка? Дати якісну відповідь.

4.4 Визначити енергію квантів світла для переходів електрона у ямі-кубі з 1-го рівня на 9-й, з 7-го на 8-й, з 5-го на 4-й. У яких випадках світло поглинається електроном, а в яких випромінюється? Використати модель ями з нескінченно високими стінками. Довжина ребра куба – 0,5 нм.

4.5 Кластер містить N атомів металу. Енергія іонізації масивного

металевого зразка W_0 . Визначити максимальне зарядне число $Z_{\max}$ такого кластера, якщо частота лазерного випромінення, що поглинається кластером, ν .

Розв'язок. Енергію, необхідну для багатозарядної йонізації,

$$M_n^{+Z} \Rightarrow M_n^{+(Z+1)} + e^-$$

можна розділити на два доданки: енергію W_0 , необхідну для йонізації масивного зразка, та електростатичну енергію

$$\frac{Z^2 e^2}{2R},$$

де R – радіус кластера. Відповідно, потенціал однократної йонізації нейтральної металевої сфери

$$I_1 = W_0 + \frac{e^2}{2R}, \quad R = r_s N^{\frac{1}{3}},$$

де r_s – радіус комірки Вігнера – Зейтца.

Для потенціалу йонізації I_Z металевої сфери, що має заряд $+e(Z-1)$, отримуємо

$$I_Z = W_0 + \frac{Z^2 e^2}{2R} - \frac{e^2 (Z-1)^2}{2R} = W_0 + \frac{(2Z-1) e^2}{2R}.$$

Вважаючи $\hbar\omega = I_{Z_{\max}}$, маємо

$$\hbar\omega = W_0 + \frac{(2Z_{\max}-1) e^2}{2R};$$

Звідси визначимо $Z_{\max}(\hbar\omega)$.

На рис. 4.3 наведене порівняння цього результату з експериментом.

4.6 Визначити, як зміниться спектр екситону, якщо він локалізований у кластері інертного газу радіуса R за умови слабого конфаймента: $R \gg a_{\text{exc}}$, a_{exc} – ефективний (чи борівський) радіус екситону.

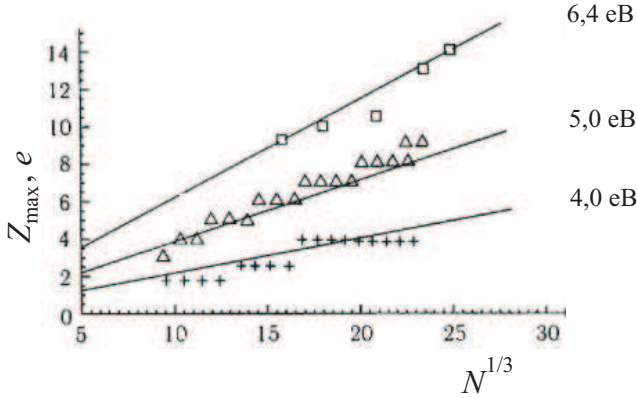


Рисунок 4.3 – Експериментальні значення максимального заряду $eZ_{\max}$ для кластерів Na [5] як функції розміру кластера для низки значень енергії квантів світла. Лінії відповідають розрахунку $Z_{\max}$

Енергія зв'язку екситону, тобто енергія, необхідна для того, щоб розірвати екситон на електрон і дірку,

$$E_{\text{exc}}^{3D} = \frac{e^4 m_{e,h}^*}{2\epsilon^2 \hbar^2} \equiv \frac{e^2}{2\epsilon a_{\text{exc}}}, \quad (4.1)$$

де

$$a_{\text{exc}} = \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 m_{e,h}^*} \quad (4.2)$$

– ефективний (чи борівський) радіус екситону; індекс 3D означає, що екситон може рухатись у будь-якому напрямку. Як і для атома Гідрогену, енергетичний спектр екситону можна записати як

$$E_n^{3D} = -E_{\text{exc}}^{3D} \frac{1}{n^2}, \quad (4.3)$$

де n – ціле число, а енергію відраховують від дна зони провідності.

Оскільки у більшості напівпровідників ефективна маса електрона приблизно на порядок менша від маси вільного електрона, з виразу

(4.1) впливає, що екситони в напівпровідниках - це досить розряджені квазічастинки. Для них енергія зв'язку в тисячі разів менша, ніж енергія зв'язку електрона в атомі Гідрогену (13,5 еВ). Ефективний радіус екситонів у напівпровідниках у сотні разів перевищує радіус Бора для атома Гідрогену. Так, для кристала GaAs енергія зв'язку $E_{\text{exc}}^{3\text{D}} = 4,2$ меВ, $a_{\text{exc}} = 15$ нм.

Розв'язання. Розмірне рівняння отримаємо, використовуючи модель ями з нескінченно високими стінками:

$$E_{\text{exc}}^{0\text{D}} = E_{\text{exc}}^{3\text{D}} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{MR^2},$$

де $E_{\text{exc}}^{0\text{D}}$ – спектр екситону в кластері; $E_{\text{exc}}^{3\text{D}}$ – спектр екситону в кластері з $R \rightarrow \infty$; другий доданок – мала поправка; $M = m_e^* + m_h^*$ – маса екситону.

4.7 Оцінити граничну товщину плівки, при якій можна спостерігати квантово-розмірні явища, якщо рухливість електронів у плівці $\mu_z = 1 \text{ м}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$.

Розв'язання. Швидкість електронів

$$v_z = \mu_z \frac{V}{L^*},$$

де V – різниця потенціалів; L^* – гранична товщина плівки. Явища квантово-розмірних явищ можна спостерігати, якщо виконується умова

$$E_{\text{min}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^{*2}} = \frac{m_e v_z^2}{2} = eV,$$

тому

$$\frac{m_e v_z^2}{2} = e \frac{v_z}{\mu_z L^*}, \quad v_z = \frac{2eL^*}{m_e \mu_z},$$

звідки

$$\frac{m_e}{2} \frac{4e^2 L^{*2}}{m_e^2 \mu_z^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^{*2}}$$

і $L^* = \sqrt{\pi \hbar \mu_z / (2e)} = 32 \text{ нм}$.

4.8 Знайти зв'язок між концентрацією електронів і рівнем Фермі для виродженого одновимірного електронного газу (металевий квантовий дріт).

4.9 В спряжених сполуках типу

$$\left(\begin{array}{cc} - & \text{C} \\ & \text{H} \end{array} \begin{array}{cc} = & \text{C} \\ = & \text{H} \end{array} - \right)_\nu$$

(з довжиною L зв'язку C — C), π -електрони атомів вуглецю делокалізовані (вільні) по всьому ланцюжку з 2ν атомів вуглецю.

Використовуючи модель одновимірної прямокутної потенціальної ями з нескінченно високими стінками, обчисліть довжину хвилі світла, що відповідає першій смузі поглинання ланцюжка.

Розв'язок. Тому що ланцюжок складається з 2ν атомів вуглецю, кількість делокалізованих електронів у потенціальній ямі $N = 2\nu$. Енергетичні рівні в такій ямі

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2,$$

де $n = 1, 2, 3, \dots$, $a = NL$ — ширина ями. Згідно з принципом Паулі на кожному рівні може знаходитися не більше двох електронів. Тому номер верхнього заповненого рівня є $N/2$, а енергія дорівнює:

$$\varepsilon_{N/2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} \left(\frac{N}{2} \right)^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e} \left(\frac{N}{2} \right)^2 \frac{1}{N^2 L^2}.$$

Відповідно енергія наступного за ним вільного рівня

$$\varepsilon_{N/2+1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e} \left(\frac{N}{2} + 1 \right)^2 \frac{1}{N^2 L^2}.$$

Енергія кванта світла, що поглинається, відповідає переходу між зайнятим та вільним рівнем

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_{N/2+1} - \varepsilon_{N/2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e} \frac{N+1}{N^2 L^2}.$$

Для першої довгохвильової смуги поглинання маємо

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar c}{\Delta\varepsilon} = \frac{4m_e c}{\pi \hbar} L^2 \frac{N^2}{N+1}.$$

5 ЗАПИТАННЯ І ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ

- 1 Що є об'єктом і метою досліджень у галузі наноелектроніки?
- 2 Чим відрізняється виробництво мікроелектромеханічних систем з практичного погляду на категорії?
- 3 У чому полягає принцип вимірень за допомогою тунельного мікроскопа? Які є види тунельних мікроскопів?
- 4 Наведіть приклади успіхів у нанотехнологіях.
- 5 Зробіть огляд енергетичних властивостей у напрямку атом – кластер – конденсоване середовище. Де діють методи фізики твердого тіла і рідини, квантової хімії (метод Хартрі–Фока)?
- 6 Сформулюйте основні співвідношення спостереження квантових ефектів у малорозмірних системах.
- 7 Яка загальна класифікація наноструктур?
- 8 Наведіть приклади гетероструктур і вкажіть їх енергетичні характеристики.
- 9 За яким принципом розділяють змінні у рівнянні Шредінгера при розрахунках енергетичного спектра частинок у потенціальних ямах різної симетрії?
- 10 У якому потенціалі спектр частинок є еквідистантним?
- 11 У чому полягає суть дифракційних, мас-спектрометричних методів і методів електронної мікроскопії для дослідження кластерів, наноматеріалів і композитів?

- 12 Опишіть експериментальні методи досліджень кластерних пучків.
- 13 Наведіть принциповий опис: мас-спектрометра, мас-аналізатора, явища фотойонізації.
- 14 Які принципи роботи скануючої тунельної і силової мікроскопії? Наведіть приклади практичного застосування.
- 15 Які існують технології вирощування квантових точок?
- 16 Як класифікують нанокристали за їхніми фізичними властивостями?
- 17 Наведіть приклади застосування кластерних пучків.
- 18 У чому суть релеєвської моделі нестійкості зарядженої краплі? Сформулюйте критерій нестійкості Релея.
- 19 У чому полягає суть позитронної діагностики?
- 20 Які відмінності характеристик екситонів у напівнескінченних матеріалах і низькорозмірних структурах?
- 21 Наведіть принципові результати експериментів з дослідження стану плівок за допомогою сканувального тунельного мікроскопа.
- 22 У чому полягає суть магічних висот острівців?
- 23 У яких випадках в енергетичному спектрі електронів виникають підзони?
- 24 Опишіть експеримент, в якому спостерігалися флуктуації енергетичних і силових характеристик металевго наноконтакту.
- 25 Наведіть якісну теорію квантування електропровідності металевго наноконтакту, спричиненого деформацією.
- 26 Наведіть якісну теорію квантування силових характеристик металевго наноконтакту, спричиненого деформацією.
- 27 Яку роль відіграють відкриті і закриті електронні підзони на характеристики металевго наноконтакту під час його деформації?
- 28 Дайте визначення класичного і квантового ефектів Холла.
- 29 Які відмінності походження цілочисельного і дробового квантових ефектів Холла?
- 30 Наведіть приклади самоорганізації в низькорозмірних системах. Зробіть якісний огляд експериментів з провідності кластерної плазми насиченої пари металу.

- 31 Сформулюйте принципи одноелектроніки: умови спостереження зарядних ефектів, квантовий опір тощо.
- 32 У чому полягає суть одноелектронного тунелювання?
- 33 Наведіть енергетичну діаграму тунельного контакту і прокоментуйте її.
- 34 Дайте визначення кулонівської блокади, кулонівських сходинок.
- 35 Наведіть приклади одноелектронних приладів на кластерах і технологію їх виготовлення. Які особливості вольт-амперних характеристик цих приладів?
- 36 У чому полягає суть квантової інформатики? Що таке “кубіт”?

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] **Шик А.Я.**, Физика низкоразмерных систем / А. Я. Шик, Л. Г. Бакуева, С. Ф. Мусихин, С. А. Рыков. Физика низкоразмерных систем. – СПб: Наука, 2001. – 160 с.
- [2] **Находкін М.Г.** Фізичні основи мікро- та наноелектроніки / М.Г. Находкін, Д.І. Шека. Фізичні основи мікро- та наноелектроніки. – Київ: КНУ ім. Т.Г. Шевченка, 2005. – 431 с.
- [3] **Погосов В.В.**, Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. Поверхность, кластеры, низкоразмерные системы / В.В. Погосов. Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. Поверхность, кластеры, низкоразмерные системы. – Москва: Физматлит, 2006. – 328 с.
- [4] **Шпак А.П.**, Введение в физику ультрадисперсных сред / А.П. Шпак, В.В. Погосов, Ю.А. Куницкий. Введение в физику ультрадисперсных сред. – Киев: Академперіодика, 2006. – 424 с.
- [5] **Погосов В.В.**, Основи нанофізики і нанотехнологій / В.В. Погосов, Г.В. Корніч, Є.В. Васютін, К. В. Пугіна, В.І. Кіпріч. Основи нанофізики і нанотехнологій. Запоріжжя: ЗНТУ, 2008. – 630 с. (електронний підручник [http://www.zntu.edu.ua/base/persons/el_txtbook/])
- [6] **Ашкрофт Н.**, Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Т.1, 2, – Москва: Мир, 1979.
- [7] **Шалимова К.В.** Физика полупроводников / К.В. Шалимова. Физика полупроводников. – Москва: Энергия, 1970. – 416 с.
- [8] Калганов В.Д. /Калганов В.Д., Милешкина Н.В., Москардини А.О., Сапронов С.А. // Радиотехн. и электроника. – 1999. – **44**. – с.100.

- [9] **Модинос А.** Авто-, термо- и вторичная эмиссионная спектроскопия / А. Модинос. Авто-, термо- и вторичная эмиссионная спектроскопия. – Москва: Наука, 1990. – 319 с.
- [10] **Непийко С.А.** Физические свойства малых металлических частиц / С.А. Непийко Физические свойства малых металлических частиц. – Киев: Наукова Думка, 1985. – 247 с.
- [11] **Петров Ю.И.** Кластеры и малые частицы / Ю.И. Петров Кластеры и малые частицы. – Москва: Наука, 1986. – 367с.
- [12] **Валиев К.А.** Квантовые компьютеры: надежды и реальность / К.А. Валиев, А.А. Кокин. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. – Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2002. – 319 с.
- [13] **Шпак А.П.** Квантові низькорозмірні системи / А.П. Шпак, Ю.А. Куницький, О.О. Коротченков, С.Ю. Смик. Квантові низькорозмірні системи. – Киев: Академперіодика, 2003. – 310 с.