

**Московский Ордена Ленина, Ордена Октябрьской Революции и  
Ордена Трудового Красного Знамени  
Государственный Университет имени М.В.Ломоносова**

**ФАКУЛЬТЕТ НАУК О МАТЕРИАЛАХ**

**МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ**

**ПРИМЕНЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ  
НАНОМАТЕРИАЛОВ.**

**Часть 1: МЭМС, НЭМС, наноэлектроника**

А.В. Лукашин

А.А. Елисеев

**Москва 2007**

## Применение функциональных наноматериалов

Области применения функциональных наноматериалов исключительно многообразны. Среди них можно выделить в первую очередь следующие направления:

- **Инженерия.** Создание наноэлектромеханических устройств, молекулярных и наномоторов, систем позиционирования на наноуровне и наномашин. Разработка методов нанолитографии и молекулярного дизайна.
- **Электроника.** Разработка и конструирование полевых транзисторов для ЭВМ, нанопроводов, диодов, выпрямителей, и других элементов электроники на наноуровне. Молекулярная электроника. Системы с высокой плотностью записи информации.
- **Оптика.** Создание лазеров с перестраиваемой длиной волны, люминесцентных источников излучения, точных оптических систем (микрзеркала). Разработка методов нанолитографии. Исследование квантовых точек и квантовых структур. Разработка волноводов, работающих с использованием эффектов полного внутреннего отражения и дифракции светового излучения. Фотоника (системы обработки информации на основе световодов и “фотонных кристаллов”).
- **Катализ.** Разработка катализаторов на основе наноструктурированных материалов для селективного катализа. Создание молекулярных сит и селективных адсорбентов.
- **Материаловедение.** Создание “бездефектных” наноматериалов, направленное получение наноматериалов с заданными функциональными свойствами, разработка методов самоорганизации наноструктур. Низкоразмерные наноструктуры.
- **Трибология.** Разработка и изготовление перспективных пар трения и смазочных материалов на основе наноструктур и фуллеренов. Исследование корреляции структуры наночастиц и сил трения.
- **Медицина.** Исследование функций ДНК, РНК и белковых структур. Маркеры вирусов и антител. Создание магнитных жидкостей для лечения раковых заболеваний. Разработка систем точной доставки лекарств в определенные места живого организма. Создание биосовместимых материалов.
- **Молекулярный дизайн.** Манипуляция отдельными атомами и молекулами и сборка из них новых молекул или наноструктур.

Нередко эти области пересекаются. Так, например, создание лазеров с перестраиваемой длиной волны включает в себя не только физическую часть (оптику), но также является материаловедческой, и во многом, инженерной задачей.

Стоит отметить, что среди перечисленных направлений на сегодняшний день ведущее положение занимают такие задачи как разработка наноэлектромеханических систем, нано- и

молекулярная электроника, а также создание носителей информации, которые более подробно рассматриваются в настоящей главе.

## **Наномеханизмы и наноустройства**

Основными стимулами развития нанотехнологий является возможность интегрирования различных типов наноструктур и создание наноустройств на их основе, что в свою очередь обусловлено общим стремлением к миниатюризации функциональных устройств (такая миниатюризация необходима, например, при освоении космического пространства, в информационных технологиях и т.д.). В 1981 г. прогнозы Р. Фейнмана были развиты в диссертации Э. Дрекслера, (Массачусетский технологический институт) посвященной молекулярной технологии, и в вышедшей свыше 20 лет назад книге “Машины созидания: пришествие эры нанотехнологий”. В его понимании, будущее молекулярной технологии и нанотехнологии состоит в создании функциональных структур и устройств путем их поатомной сборки с помощью программируемых роботов, а также в разработке самих молекулярных роботов, способных “строить” из атомов различные объекты. Подобные машины были названы ассемблерами или сборщиками. Конструирование таких машин предполагалось осуществлять путем формирования химических связей за счет механического сближения электронных оболочек атомов. Наноманипулятор, описанный Дрекслером, состоял из  $4 \times 10^6$  атомов, а робот, снабженный молекулярным компьютером, вспомогательными механизмами и т.д. содержал  $\sim 1 \times 10^7$  атомов. Однако, возможности отдельного робота, оказываются весьма ограничены, в связи с его малыми размерами, что, по мнению Дрекслера, требует создания наномашин, способных к самовоспроизводству – то есть размножению или репликации. В основе идей самореплицирующихся структур положена теория фон Неймана (1940 г.), согласно которой репликация является основой природных механизмов развития, а сам процесс репликации используется как в клеточной машинерии, так и при воспроизводстве живых организмов.

В то же время, сам Дрекслер описал опасность создания таких систем: выход из-под контроля процесса репликации из-за возникновения ошибки в программе отдельного робота-репликатора, может привести к техногенной катастрофе, так как нанороботы могут начать перерабатывать всю доступную им материю в самих себя (то есть неограниченно реплицироваться). При этом за два года нанороботы предположительно способны переработать всю биосферу Земли в “серую слизь” (gray goo), как была названа масса нанороботов в его книге. Идеи Дрекслера вызвали волну неприязни к нанотехнологиям со

стороны общества, и антипатию широкого круга исследователей, работающих в области нанотехнологий – к самому Э. Дрекслеру.

Между тем, эти полуфантастические прогнозы весьма далеки как от фактической реализации, так и от построения реальной модели наноробота, способного к репликации. Основными проблемами при этом являются возможность создания молекулярных компьютеров и отсутствие доступных энергетических источников и аккумуляторов энергии на наноуровне.

Можно выделить две основных тенденции в создании наноэлектромеханических систем: уменьшение размера существующих микроэлектромеханических систем и разработку принципиально новых молекулярных двигателей и молекулярных электромеханических устройств. Следует отметить также актуальность работ, посвященных разработке роботов и систем репликации на основе известных биологических систем – вирусов, бактерий и одноклеточных микроорганизмов. Их последующая комбинация с электромеханическими устройствами может помочь реализовать производство машин в нанометровом диапазоне.

Уже сегодня встречаются работы по созданию отдельных элементов наномеханизмов и нанодвигателей. В частности, описана возможность передачи вращения с одной нанотрубки на другую (по аналогии с шестеренками), создание гигагерцевого механического осциллятора из группы концентрических нанотрубок, интеграция биомолекулярных двигателей, работающих на АТФ, в механические устройства и др.

## **Микро- и наноэлектромеханические системы (МЭМС и НЭМС)**

Наиболее распространенным подходом к созданию наноэлектромеханических систем является уменьшение размера электромеханических систем, разработанных в последние десятилетия в микрометровом диапазоне. И хотя микромеханические системы формально не отвечают диапазону нанотехнологий, полезно кратко рассмотреть механические свойства микрообъектов, поскольку на сегодняшний день они достаточно полно изучены, а создание микроэлектромеханических систем является отработанным технологическим процессом. В то же время, многие особенности микромеханики, могут быть с успехом перенесены в нанодиапазон, обеспечивая, таким образом, основу для конструирования наномашин.

Для создания микроэлектромеханических устройств сегодня широко используются технологии литографии в сочетании с процессами CVD или электронно-лучевой эпитаксии. Эти технологии ранее нашли применение при сборке логических цепей на основе кремния (современные микросхемы, процессоры и т.д.), в связи с чем была развита обширная

инфраструктура производства, которая сделала возможным разработку и массовое внедрение в промышленное производство механических устройств, имеющих компоненты с микрометровыми размерами.

Микро- и нанoeлектромеханические системы предполагают механический ответ на приложенный электрический потенциал или возникновение электрического сигнала как результата механической деформации. Основными преимуществами НЭМС является миниатюризация и возможность прямого интегрирования устройств с существующей микроэлектроникой.

Однако, механическое поведение машин в макро- и микромире оказывается существенно различным. В микромире отношение площади поверхности к объему объекта заметно возрастает, что приводит к значительному увеличению вклада сил трения в механическое поведение микросистем и доминированию сил трения над силами инерции. На нанoуровне эти различия выражаются еще более ярко. Так, время, затрачиваемое на гашение инерции после придания вращательного движения мячу, лежащему на поверхности стола, и молекуле фуллерена на поверхности монокристалла кремния различается на несколько порядков. В связи с этим особый интерес представляет рассмотрение характеристических величин, определяющих механическое поведение системы. Обычно, эти величины выражают соотношение эффективностей сил (или энергий) при протекании двух различных процессов. При этом для сохранения общего механического поведения системы необходимо, чтобы такие соотношения оставались постоянными вне зависимости от ее параметров. Соотношения сил, зависящие от масштаба длины, получили названия законов пропорциональной миниатюризации, к которым относятся:

*Число Коши (инерционные силы и силы упругости).*

Число Коши определяет соотношение инерционных сил и сил упругости в твёрдом теле:

$$C_a = \frac{\rho \omega^2 L^2}{E}, \quad (1)$$

где  $L$  – размер объекта,  $\omega$  – характеристическая частота колебаний,  $\rho$  – плотность материала,  $E$  – модуль Юнга. Согласно соотношению (1) частота колебаний обратно пропорциональна длине, что свидетельствует о высоких частотах собственных колебаний микро- и наносистем. С одной стороны, это приводит к ограничению рабочего диапазона НЭМС собственными частотами, а с другой – к высоким динамическим характеристикам.

*Число Фруда (инерционные силы и силы гравитации).*

Число Фруда показывает соотношение между инерционными силами и силами гравитации:

$$Fr = \frac{v^2}{gL}, \quad (2)$$

где  $L$  – размер объекта,  $v$  – скорость,  $g$  – ускорение свободного падения. Так как число Фруда обратно пропорционально длине, то эффект гравитации уменьшается при уменьшении размеров системы. Поэтому в микромире эффектом гравитации можно пренебречь.

*Число Вебера (инерционные силы и силы поверхностного натяжения).*

Число Вебера выражает соотношение инерционных сил и сил поверхностного натяжения:

$$We = \frac{\rho v^2 L^2}{\sigma_s}, \quad (3)$$

где  $L$  – размер объекта,  $v$  – скорость,  $\rho$  – плотность,  $\sigma_s$  – поверхностное натяжение. Число Вебера связывает силы поверхностного натяжения с объёмными силами. Вклад сил поверхностного натяжения в поведение системы увеличивается с уменьшением числа Вебера и, соответственно с уменьшением размера системы. Иначе говоря, при малых размерах системы поверхностные силы доминируют. Число Вебера характеризует процессы формирования капель, потоки жидкости в капиллярах и т.д.

*Число Фурье (однородность распространения тепловой энергии).*

Число Фурье определяет соотношение между накопленной энергией и распространяемой тепловой энергией:

$$Fo = \frac{\lambda \cdot t}{c_p \rho \cdot L^2}, \quad (4)$$

где  $L$  – размер объекта,  $t$  – время,  $\rho$  – плотность,  $c_p$  – удельная теплоемкость,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности. Число Фурье характеризует однородность распространения тепла в системе. При  $Fo < 1$  тело имеет однородную температуру и градиента температур не возникает. Уменьшение размера системы приводит к значительному ускорению процесса переноса тепловой энергии для постоянного числа Фурье, а следовательно однородное распределение температуры достигается за очень короткое время, что делает возможным использование тепловых или температурно-контролируемых процессов (например, теплового расширения) в микро- или наномеханике.

*Число Рейнольдса.*

Число Рейнольдса характеризует соотношение между инерционными силами и вязкостью (силами трения) в потоке жидкости:

$$Re = \frac{vL}{\nu}, \quad (5)$$

где  $L$  –размер объекта,  $v$  – скорость,  $\nu=\eta/\rho$  – кинематическая вязкость. Число Рейнолдса определяет режим потока жидкости вокруг некоторого препятствия: в общем случае течение остается ламинарным, пока число Рейнолдса не превосходит некоторого критического значения, а при дальнейшем увеличении  $Re$  поток становится турбулентным. Считается, что для вязкой жидкости при  $Re < 4$  реализуется ламинарный поток, при  $4 < Re < 40$  происходит формирование попутного вихревого потока, при  $40 < Re < 300$  возникает периодический вихревой поток, при  $5 \times 10^3 < Re < 2 \times 10^5$  – нерегулярный попутный поток и отделение граничного слоя, а при  $Re > 2 \times 10^5$  появляется турбулентный след. Для микро- и нанообъектов их размеры оказываются определяющим фактором, что приводит к появлению турбулентности только в случае очень малой кинематической вязкости. Обычно, в микро- и наномеханике инерционными силами пренебрегают, то есть нелинейная составляющая в уравнении Навье-Стокса обращается в ноль и решение существенно упрощается.

### **Микро- и нанотрибология**

Согласно законам пропорциональной миниатюризации, на микро- и наноуровне поверхностные силы доминируют над объемными. В связи с этим при разработке микромеханических систем большое значение следует уделять трению и износу движущихся частей. Надо отметить, что ввиду малой массы микро- и наномеханических элементов они обладают малой инерцией, что ведет к высоким динамическим характеристикам (скорости отклика) и высокой рабочей частоте собственных колебаний. Трение приводит не только к энергетическим потерям и снижению общего КПД механических устройств, но и к износу, который негативно воздействует на их функциональное поведение и ведет к быстрому старению и поломке элементов. Иначе говоря, трение определяет не только эффективность работы устройства, но и его долговечность.

Обычно под трением понимают механическое сопротивление, возникающее при относительном перемещении двух соприкасающихся тел в плоскости их касания. Сила трения является совокупным эффектом, возникающим в результате упругости, адгезии, вязкости, капиллярных сил, химических особенностей, фононного и электростатического взаимодействий и т.д. На величину трения влияет тип взаимодействующих материалов и состояние их поверхности. В зависимости от условий может преобладать то или другое явление. Таким образом, трение - это взаимодействие контактных областей поверхностей, а следовательно, оно воздействует только на поверхностный слой материала, практически не затрагивая его объем.

В зависимости от масштаба, на котором изучают трение, выделяют макро-, микро- и нанотрибологию. Каждый из разделов трибологии исследует трение в соответствующем

масштабе. Так в макротрибологии трение исследуют на уровне больших объектов и не рассматривают особенностей строения вещества. Основным соотношением макротрибологии является закон Амонтона-Кулона:

$$F_{\text{тр}} = kN, \quad (6)$$

где  $k$  – безразмерный коэффициент трения,  $N$  – нормальная реакция. Коэффициент трения несет всю информацию о взаимодействующих поверхностях и зависит от температуры, влажности, скорости скольжения и др. В макротрибологии сила трения не зависит от площади контакта двух тел, а саму площадь контакта считают равной геометрической площади контактирующих объектов. При этом величина макроскопической силы трения является усредненной силой трения отдельных микроконтактов, которая может сильно варьироваться в широких пределах.

Микротрибология исследует взаимодействие элементарных микроконтактов. В отличие от макротрибологии, применяющей представления и терминологию теории сплошных сред, в данном случае используются более фундаментальные понятия, основанные на взаимодействиях отдельных атомов. Во многих моделях процессов трения на микроуровне рассматривают взаимодействие выступа с некоторой поверхностью. В связи с этим, основным экспериментальным методом микротрибологии стала сканирующая зондовая микроскопия (соответствующая методика носит название метода латеральных сил). Острие зонда позволяет “почувствовать” трение на чрезвычайно малой контактной площадке, состоящей из одного или нескольких атомов.

Выделяют жидкое и сухое трение, причем жидкое трение реализуется в большинстве реальных систем (трение является жидким даже тогда, когда на поверхности твердых тел образуется молекулярная пленка жидкости). В качестве сухого трения можно рассматривать процессы трения в вакууме или трение с большой нормальной нагрузкой, что приводит к вытеснению жидкости из-под зонда.

Трение является диссипативной силой, то есть при скольжении поверхностей друг по другу происходит рассеяние механической энергии, а каждый из эффектов, приводящих к трению, имеет свой механизм диссипации энергии. В качестве таких механизмов в случае сухого трения выделяют атомарные вибрации, рассеивающие энергию в виде фононных колебаний; разрушение атомарных связей в микронеровностях; разрыв адгезионных связей, возникающих между выступами соприкасающихся поверхностей; возбуждение электрон-дырочной пары (эффективность такого процесса значительно ниже эффективности фононного рассеяния).

Жидкое трение существенно зависит от толщины слоя жидкости. Мономолекулярный слой жидкости фактически не влияет на механизмы диссипации энергии и этот процесс



можно рассматривать в приближении сухого трения. Увеличение количества жидкости на поверхности приводит к блокированию рассеяния энергии по фононному каналу, а преобладающим становится расход энергии на преодоление вязкости жидкого слоя. Для более толстых пленок основную роль играют капиллярные эффекты.

В микротрибологии зависимость силы трения от нормальной приложенной нагрузки вычисляется по формуле Баудена-Табора:

$$F_{\text{тр}} = \tau A_c, \quad (7)$$

где  $\tau$  – касательное напряжение,  $A_c$  – реальная площадь элементарного контакта. Эта площадь зависит от степени взаимной упругой деформации контактирующих участков поверхностей. Площадь такого контакта может быть получена решением задачи Герца. Тогда:

$$F_{\text{тр}} = \tau \pi \cdot \left( \frac{RN}{K} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (8)$$

где  $R$  – радиус кривизны выступа или зонда,  $N$  – нормальная сила,  $K$  – эффективный модуль Юнга, вычисляемый по формуле:

$$\frac{1}{K} = \frac{3}{4} \left( \frac{1-\mu^2}{E} + \frac{1-\mu'^2}{E'} \right), \quad (9)$$

где  $E, E'$  – модули Юнга,  $\mu, \mu'$  – коэффициенты Пуассона соответствующих материалов. Для учета адгезионных взаимодействий в твердых телах используют модель Маугиса.

В случае жидкого трения к нормальной силе необходимо прибавить адгезионную составляющую, связанную с наличием капиллярных взаимодействий. Эта сила дополнительно притягивает друг к другу соприкасающиеся поверхности и рассчитывается по уравнению:

$$F_c = 4\pi\gamma R, \quad (10)$$

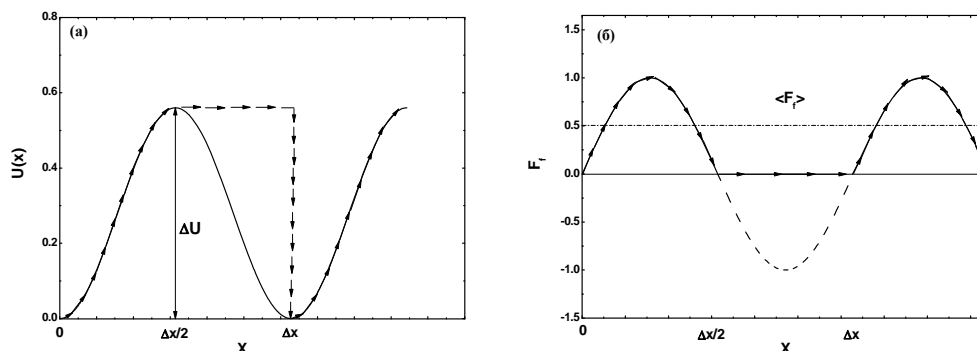
где  $\gamma$  – коэффициент поверхностного натяжения. Модель Баудена-Табора хорошо подтверждена на опыте.

Одной из основных особенностей микротрибологии является эффект прилипания-скольжения, заключающийся в неравномерности движения одной поверхности относительно другой. В некоторый момент выступы поверхностей слипаются в результате адгезии или капиллярных сил, и для их последующего отрыва необходима преобладающая сила. Затем выступ перескакивает к другой точке и т.д. Эффект прилипания-скольжения существенно зависит от скорости движения. Так, при достижении некоторой критической скорости скольжения эффект пропадает и сила трения становится регулярной.

Задачей нанотрибологии является объяснение трения на уровне взаимодействия отдельных атомов. Модель трения на наноуровне рассматривает движение отдельного атома скользящей поверхности в поле потенциальных сил, создаваемых периодическим потенциалом атомов другой поверхности (рис 1):

$$U(x) = -U_0 \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right),$$

где  $a$  – период решетки.



**Рис. 1.** Потенциальная энергия (а) и траектория зонда (б) в зависимости от траектории движения атома скользящей поверхности.

При этом неконсервативность системы достигается введением “искусственной” потери энергии системы при движении атома из верхнего энергетического состояния в нижнее (рис 1). Тогда мгновенная сила трения в каждой точке траектории атома составляет:

$$F_{\text{тр}}(x) = \frac{\partial U(x)}{\partial x}, \text{ при } 0 < x < \frac{\Delta x}{2} \quad (11)$$

$$F_{\text{тр}}(x) = 0, \text{ при } \frac{\Delta x}{2} < x < \Delta x \quad (12)$$

Ввиду упругой фиксации атома в твердом теле потерянная энергия передается вглубь тела в виде фононных колебаний и впоследствии диссипируется. Среднее значение моментальной силы трения на всей траектории движения считают равным силе трения в нанотрибологии.

Экспериментальное определение нанотрения методом атомно-силовой микроскопии в режиме регистрации латеральных сил показывает интенсивный эффект прилипания-скольжения. Для качественного понимания нанотрения обычно рассматривают модель движения *упругого* зонда в поле потенциальных сил, создаваемых периодическим потенциалом атомов сканируемой поверхности. При движении зонда с увеличением потенциальной энергии (в область с высоким потенциалом) зонд испытывает сопротивление образца, соответствующее силе трения. При этом зонд отклоняется и как бы “прилипает” к

поверхности. Достигнув максимума потенциала, зонд срывается и начинает колебательные движения в направлении сканирования, которые постепенно затухают, а накопленная энергия диссипируется. Усреднение колебаний зонда позволяет наблюдать скачкообразный характер его движения, что соответствует эффекту прилипания-скольжения. Сила трения при этом имеет пилообразный профиль. В двумерной модели движение имеет некоторые особенности. Зонд движется не только вдоль направления сканирования, но еще и ходит из стороны в сторону, что связано с отклонением зонда от потенциальных максимумов к минимуму энергии.

### **Наномеханика и износ наномеханизмов**

По сравнению с макромеханикой в микро- и наносистемах обычно применяется сухое трение. Для смазочных материалов на наноуровне сила поверхностного натяжения оказывается настолько велика, что существенно снижает эффективность работы механических элементов. Поэтому в качестве подшипников скольжения в МЭМС и НЭМС используют подшипники сухого трения, которые в некоторых случаях покрывают молекулярными смазочными пленками для уменьшения трения и износа. При этом характеристики пленки и контактной поверхности становятся основными факторами, определяющими силы трения. Однако, в связи с трудностью получения идеально гладких поверхностей технология применения молекулярных смазочных пленок находится пока в стадии разработки и редко используется при создании микро- и наномашин.

Износ материала при длительном трении обуславливается высокой локальностью нагрузок на контактирующих шероховатостях рабочих поверхностей, что приводит к пластическим деформациям, адгезии или к формированию трещин на поверхности контактирующего материала. Выделяют следующие механизмы износа:

- адгезия (слипание)
- абразивный износ
- эрозия
- усталость.

Характерной особенностью микромира является значительный вклад межмолекулярных и межатомных взаимодействий (микрообъекты стремятся к слипанию для уменьшения их общей поверхностной энергии). Адгезионные взаимодействия возникают как результат межмолекулярных сил или перераспределения химических связей в точке контакта. Так, при контакте двух материалов, имеющих большее адгезионное сходство или химическую растворимость, происходит взаимное проникновение контактирующих материалов и образование химических связей в точке контакта, что приводит к

значительному износу контактирующих поверхностей. В связи с этим при проектировании наномашин следует избегать контактов химически однородных поверхностей. Обычно, для предотвращения слипания отдельных элементов нано- и микромашин, их покрывают специальными “неклеящими” составами.

При абразивном износе, материал стирается из-за неровности поверхностей материалов или из-за присутствия твердых частиц между взаимодействующими поверхностями. При этом более твердый материал удаляет верхний слой с более мягкого материала во время их контакта. Поскольку поверхность металлических материалов покрыта оксидной плёнкой, высокие локальные нагрузки могут привести к ее разрыву и дальнейшему окислению поверхности металла. Процесс последовательного окисления с разрушением поверхностного слоя называют эрозией.

Усталость материала – это изменение его механических и физических в результате действия циклически изменяющихся во времени напряжений и деформаций. Разрушение материала при усталости сопровождается появлением микротрещин, а затем их ростом и появлением макротрещин.

Таким образом, на сегодняшний день известно, что трение приводит к возникновению гармонических осцилляций кристаллической решетки, которые затухая преобразуют механическую энергию в тепловую. Трение зависит от материала и пропорционально фактической а не кажущейся области контакта. К тому же сила трения пропорциональна степени необратимости деформаций, и в частности зависит от адгезионного средства материалов. Значительного уменьшения сил трения можно достичь увеличивая химическую инертность материала. Так, сухое трение с использованием таких материалов как тефлон, может оказаться значительно меньше жидкого трения, что объясняется высоким фактическим контактом между поверхностями в случае жидкого трения и возрастанием вклада адгезионного трения.

### **Преобразование энергии**

Цель создания микро- и наномеханических устройств заключается в получении силы, способной производить механическое перемещение объектов. Механические устройства, преобразующие энергию в управляемое движение, получили название актюаторов. На сегодняшний день известно большое количество способов преобразования доступной электрической энергии в механическую. По сравнению с традиционно используемым в макроскопических масштабах электромагнитным методом, в нанотехнологии существует возможность использования и других принципов, которые не имело смысла использовать по функциональным или по ценовым характеристикам в макротехнологии. Следовательно, в

первую очередь, необходимо провести оценку эффективности различных принципов получения механической энергии на наноуровне.

Известно, что сила, производимая той или иной системой, а также развиваемая мощность прямо пропорциональна потере ее потенциальной энергии. В связи с этим плотность энергии имеет важное значение для оценки максимальной эффективности наноустройств. В свою очередь, любое преобразование энергии связано с потерями, а полезная энергия пропорциональна коэффициенту полезного действия  $\eta$ . Мощность системы обратно пропорциональна времени, затрачиваемому на получение и преобразование энергии, и характерному для каждого конкретного принципа (табл. 1):

$$P = \frac{dW}{ds} \frac{ds}{dt} \sim \eta \frac{\Delta W}{\tau}. \quad (13)$$

Выбор принципа активации (получения механического отклика) проводят с учетом их максимальной эффективности, мощности и быстродействия наноустройств. Для потенциальных полей, энергия однородной системы пропорциональна ее объему, и, следовательно, увеличивается с ростом размера объекта пропорционально  $R^3$ . Однако, в случаях использования непотенциальных полей плотность энергии может зависеть от размера, что приводит к отклонению показателя степени от 3. Сила развиваемая в процессе преобразования энергии определяется соотношением:

$$F = \eta \frac{dW}{ds}, \quad (14)$$

а соответствующий показатель степени в уравнении, выражающем зависимость силы от размера, уменьшается на 1. В общем случае связь между силой и масштабом системы может быть описана соотношением  $F \sim R^n$ . Анализ этой зависимости для различных методов активации позволяет предположить возможность изменения их эффективности при переходе от макро- к микродиапазону.

*Таблица 1. Типичные значения плотности энергии, показатели степени в уравнении, выражающем зависимость силы от масштаба системы, времена отклика и коэффициенты полезного действия различных принципов преобразования энергии микромеханических устройств.*

Метод активации	Плотность энергии, Вт·с/м <sup>3</sup>	Показатель степени для $F \sim R^n$	Время отклика, $\tau$ [мс]	КПД, %
Электростатический	$10^4$	2	$\ll \tau_{\text{мех}}$	0,5
Электромагнитный	$10^5$	от 2 до 4	$\ll \tau_{\text{мех}}$	$<0,01$
Пьезоэлектрический	$2 \cdot 10^5$	2	$\ll \tau_{\text{мех}}$	0,3
Памяти формы	$3,5 \cdot 10^5$	2	$<50$	0,01

Термопневматический	$<5 \cdot 10^5$	2	10	0,1
Биметаллический	$10^6$	2	$<50$	$10^{-4}$
Молекулярный	$2 \cdot 10^7$	-	$\ll \tau_{\text{мех}}$	0,5
Биологическое преобразование энергии	$6 \cdot 10^7$	-	$<50$	0,6

Действительно в микро- и наносистемах вместо электромагнитного принципа преобразования энергии, используемого повсеместно в макроэлектронике, часто используют пьезоэлектрический или электростатический эффекты.

В дальнейшем мы рассмотрим основные принципы действия микро- и наноактюаторов, основанных на различных принципах преобразования энергии.

### Электростатические актюаторы

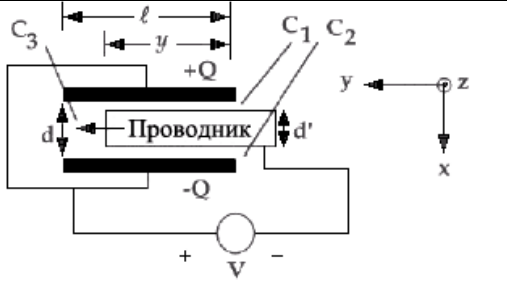
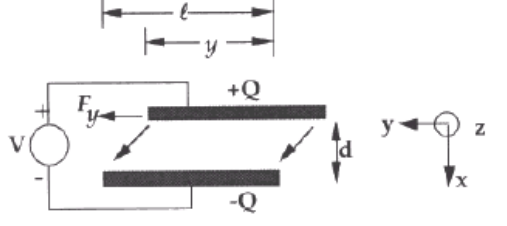
Принцип работы электростатических актюаторов основан на взаимном притяжении заряженных элементов электромеханических систем. Основным способом реализации электростатических актюаторов являются системы на основе плоскопараллельных конденсаторов (табл. 2). Энергию плоского конденсатора рассчитывают по формуле:

$$W = \frac{CU^2}{2}, \quad (15)$$

где  $C$  – емкость,  $U$  – напряжение между обкладками конденсатора.

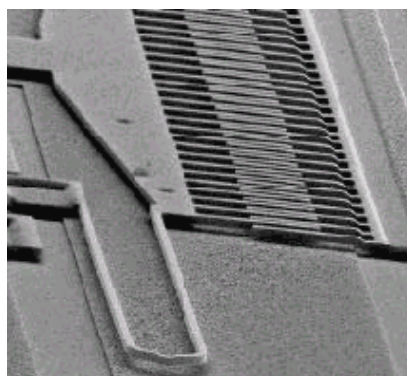
Таблица 2. Варианты реализации электростатических актюаторов на основе плоскопараллельных конденсаторов:

Метод активации	Схема реализации актюатора	Емкость конденсатора и действующая сила
Перпендикулярное движение		$C = \frac{\epsilon_0 S}{x^2}, \quad F(x) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 S}{x^2} U^2$
С сердечником из диэлектрика		$C = \frac{\epsilon_0(1-y)z}{d} + \frac{\epsilon_D y z}{d},$ $F(y) = \frac{1}{2} \frac{(\epsilon_D - \epsilon_0) z}{d} U^2$

С сердечником из проводника		$F(y) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 z d'}{d(d-d')} U^2$
Боковое движение		$C = \frac{\epsilon_0 y z}{d}, \quad F(y) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 z}{d} U^2$

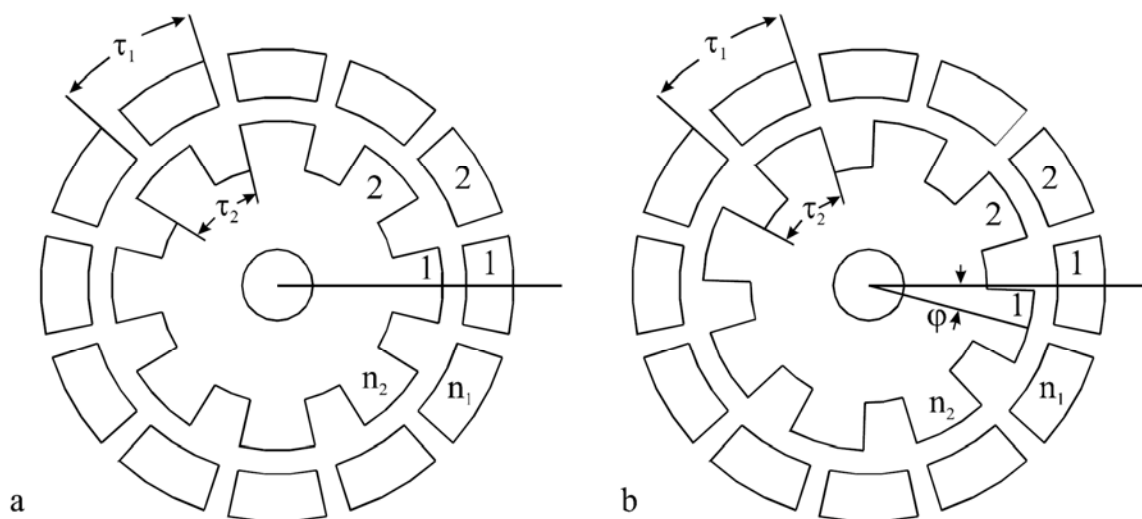
Однако, для генерации значительных сил притяжения необходима высокая емкость конденсаторов, что может быть реализовано только увеличением площади взаимодействующих пластин. Такого увеличения площади достигают созданием гребневых микродвигателей, имеющих большое количество встречностержневых проводящих полос (рис 2). При этом увеличение емкости пропорционально количеству стержней, а КПД такого двигателя достигает 50%.

Следует отметить, что при использовании принципа электростатической активации сила, действующая на электроды, всегда является силой притяжения вне зависимости от полярности или разности потенциалов. В связи с этим движение элемента в двух направлениях будет требовать приложения двух фаз. Реализация двигателя роторного типа возможна только при наличии трех фаз. Схема трехфазного роторного двигателя на основе 12-сегментного статора и 8-сегментного ротора представлена на рис. 3.



**Рис.2.** Гребневый микродвигатель.

Вращение ротора достигается последовательным приложением потенциала на сегменты 1, 2 и 3. Сегменты ротора последовательно притягиваются к электродам статора, а движение происходит из-за нерегулярности расположения взаимодействующих сегментов ротора и статора. Аналогичный принцип иногда применяют в линейных двигателях.



**Рис. 3.** Схема трехфазного роторного двигателя на основе 12-сегментного статора и 8-сегментного ротора. (а) приложение потенциала на сегментах 1, (б) на сегментах 2.

Основными преимуществами использования электростатического принципа активации являются высокая эффективность механизмов (высокий КПД), легкость реализации и низкие силы трения между элементами.

### Магнитные актюаторы

Принцип создания электромагнитного преобразователя энергии на наноуровне был привнесен из макроэлектроники. К классу магнитных микро- и наноактюаторов относят как электромагнитные, так и магнестрикционные актюаторы. Основным компонентом большинства магнитных актюаторов является тонкая пленка ферромагнетика (никеля или пермаллоя) на консольных балках или балках кручения. Для создания магнитного слоя обычно используют электрохимическое осаждение. Механизм электромагнитной активации иллюстрирует рис. 4. Механическая сила возникает в результате притяжения или отталкивания ферромагнитного слоя во внешнем магнитном поле. Под действием последнего ферромагнетик намагничивается, а его магнитный момент взаимодействуя с  $H_{\text{внеш}}$ , создает вращающий момент и изгибает балку.

Проблема магнитных актюаторов на микро- и наноуровне заключается в создании обмоток электромагнитов, а также в большом количестве ограничений, накладываемых на рабочий материал ферромагнетика (которые связаны как с микрообработкой материала, так и с наличием суперпарамагнитного предела). В связи с этим магнитные актюаторы имеют низкие КПД и потребляют большое количество энергии. Тем не менее этот тип активации может быть использован в случаях применения внешнего магнитного поля.



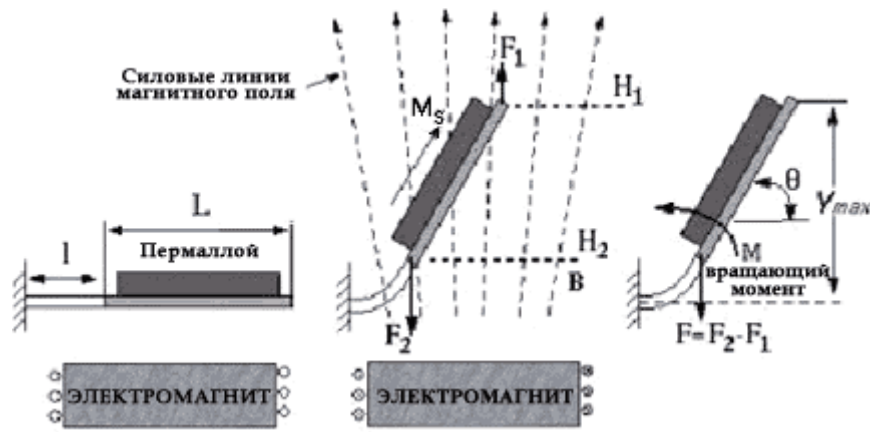


Рис 4. Механизм магнитной активации.

### Пьезоэлектрические актюаторы

Одним из основных по распространенности типов микро- и наноэлектромеханических устройств являются пьезоэлектрические актюаторы. В основе их создания лежит как прямой, так и обратных пьезоэлектрический эффект. Прямой эффект состоит в появлении электрических зарядов разного знака на противоположных концах пьезоэлектрика при механической деформации

$$D_i = d_{ik} \sigma_k + \varepsilon(d)_{ik} E_i, \quad (16)$$

где  $D_i$  – вектор электрической поляризации,  $E_i$  – напряжённость электрического поля,  $\sigma_k$  – механическое напряжение,  $d_{ik}$  – пьезоэлектрические коэффициенты,  $\varepsilon(d)_{ik}$  – коэффициенты диэлектрической проницаемости.

Обратный пьезоэлектрический эффект состоит в деформации пьезоэлектрика под действием внешнего электрического поля:

$$\varepsilon_k = d_{ik} E_i + S(E)_{ik} \sigma_k, \quad (17)$$

где  $\varepsilon_k$  – относительная деформация,  $S(E)_{ik}$  – коэффициенты упругой деформации.

На сегодняшний день известен широкий круг пьезоэлектрических материалов с различной степенью асимметрии кристаллической решетки, что позволяет подобрать необходимые пьезоэлектрические коэффициенты для конкретной области применения. Кроме того, стало возможным создавать пьезоэлектрическую керамику поляризацией некоторых сегнетоэлектрических материалов. Это обуславливает многообразие систем активации на основе пьезоэлектрических устройств.

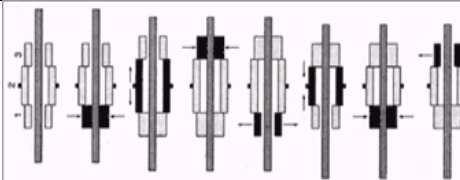
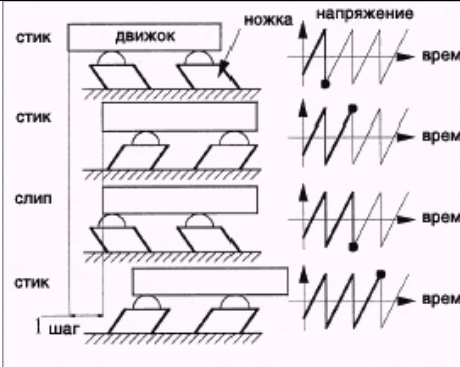
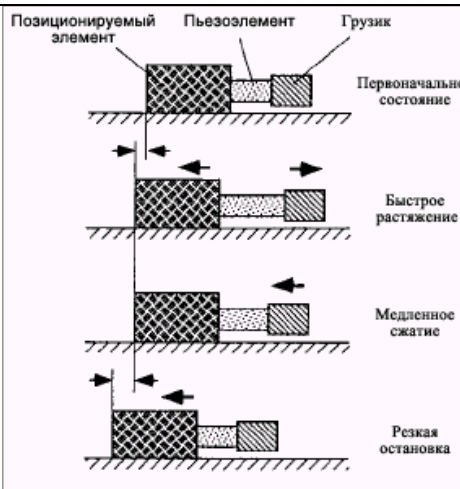
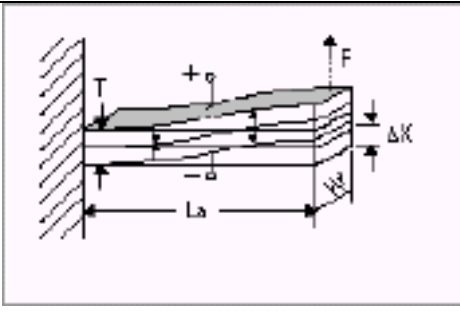
Из-за малого изменения параметра решетки под действием разности потенциалов пьезоэлектрические актюаторы позволяют точно управлять перемещением нанообъектов, что нашло широкое применение в различных устройствах позиционирования. В частности пьезоактивация используется в сканирующей зондовой микроскопии для получения сверхвысокого разрешения (предел разрешения нанопозиционирующих устройств в

настоящее время составляет  $10^{-12}$  м). Однако, вследствие малых перемещений достижимый диапазон управления достаточно мал, что требует разработки альтернативных систем позиционирования, таких как пьезоэлектрические биморфные актюаторы или многослойные пьезоэлектрические актюаторы. Характерной чертой проявления пьезоэлектрического эффекта является переход от растяжения к сжатию при переключении полярности, что эффективно используют в различных типах активации.

Единственным ограничением применимости принципа пьезоэлектрической активации является возможность диэлектрического пробоя или короткого замыкания при приложении высокого напряжения, что накладывает определенные ограничения на толщину слоя пьезоэлектрика.

Таблица 3. Схемы пьезоэлектрических микро- и наноактюаторов, основанных на прямом пьезоэффекте.

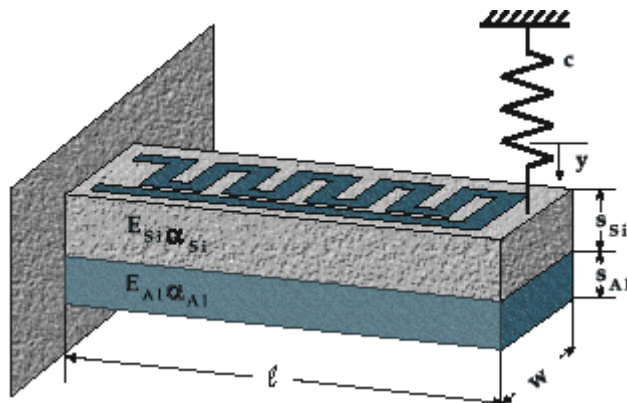
Тип актюатора, принцип действия, основные преимущества и недостатки	Конструкция актюатора
<p><b>Блочные актюаторы</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> пластины пьезоэлектрика и проводника располагают последовательно, расширение происходит за счет разности потенциала между пластинами проводника.</p> <p><i>Преимущества:</i> простота реализации, высокое разрешение, высокая скорость отклика, высокая выходная мощность, низкое потребление энергии.</p> <p><i>Недостатки:</i> низкая степень деформации, гистерезис перемещения.</p> <p>Актюаторы этого типа получили широкое практическое применение (в частности в устройствах нанопозиционирования).</p>	
<p><b>Двигатели вращения стоячей волны (ультразвуковые)</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> пьезоэлектрик используется для получения вибрации, вращающей ротор.</p> <p><i>Преимущества:</i> простота реализации</p> <p><i>Недостатки:</i> низкая выходная мощность, низкое разрешение, низкий КПД.</p>	
<p><b>Двигатели вращения бегущей волны (ультразвуковые)</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> ротор подвергается сжатию в направлении, противоположном статору, образуя движение, обратное направлению волны.</p> <p><i>Преимущества:</i> высокое разрешение, высокая выходная мощность.</p> <p><i>Недостатки:</i> сложность реализации</p> <p>Актюаторы используют в устройствах автофокусировки.</p>	

<p><b>Шаговые двигатели с червячной передачей</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> передвижение происходит за счет последовательно использования 3-х пьезоэлектриков.</p> <p><i>Преимущества:</i> неограниченное перемещение, высокое разрешение, скорость до 2мм/с</p> <p><i>Недостатки:</i> сложность реализации, высокая цена, невысокая боковая нагрузка</p>	
<p><b>Двигатель "стик-слип".</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> пьезоэлектрические ножки с подвижной верхней частью используют для пошагового перемещения движка, резкий перепад напряжения позволяет деформировать пьезоэлемент, тогда как положение движка не изменяется ввиду его инерции.</p> <p><i>Преимущества:</i> высокая скорость линейного движения</p> <p><i>Недостатки:</i> низкое разрешение</p>	
<p><b>Двигатель с ударным механизмом.</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> в двигателе этого типа используют трение покоя и силу удара, которая возникает из-за резкой деформации пьезоэлемента. На первой стадии движения пьезоэлемент быстро растягивают, генерируя большую "реактивную" силу позиционируемого элемента, превышающую силу трения покоя. Затем пьезоэлемент медленно сжимают, и резко останавливают, что позволяет использовать инерцию груза и дополнительно передвинуть позиционируемый элемент.</p> <p><i>Преимущества:</i> высокая скорость линейного движения, простота реализации</p> <p><i>Недостатки:</i> низкое разрешение, низкий КПД</p>	
<p><b>Пьезоэлектрические биморфные актюаторы.</b></p> <p><i>Принцип действия:</i> деформация балки за счет разности параметров ячейки двух пьезоэлектриков (один – в растянутом, другой – в сжатом состояниях).</p> <p><i>Преимущества:</i> высокая общая деформация, низкая стоимость, малое потребление энергии</p> <p><i>Недостатки:</i> небольшая выходная мощность, медленное действие, низкий КПД</p> <p>Находят широкое применение в микрзеркалах, микроманипуляторах, дозаторах, насосах, клапанах, датчиках расхода жидкости и газа и т.д.</p>	

## Тепловые актюаторы

Тепловые актюаторы основаны на эффектах теплового расширения или деформации контакта двух материалов (часто – пары металл-диэлектрик) за счет различия в коэффициентах теплового расширения (рис.5). Обычно нагревание элементов производят, пропуская через них электрический ток. Тепловые актюаторы могут создавать достаточно большие силы, однако эффективность использования энергии оказывается весьма мала.

Увеличении разницы коэффициентов теплового расширения материалов позволяет несколько увеличить КПД, однако общая эффективность этих устройств обычно не превышает 0,1%. Увеличения КПД можно достичь с использованием в качестве рабочего тела газов или жидкостей, имеющих значительно больший коэффициент теплового расширения, чем твёрдые тела, что используется в термопневматических микроактюаторах.



**Рис. 5.** Схема устройства теплового актюатора.

Преимущества тепловых микро- и наноактюаторов заключаются в простоте их производства и возможности применения широкого круга материалов. А к недостаткам относят низкие КПД и необходимость охлаждения для возвращения актюатора в исходное положение, что значительно ограничивает быстродействие этих устройств.

### Гидравлические актюаторы

Принцип гидравлической активации основывается на передаче энергии потока жидкости микро- или нанотурбинам. Этот тип актюаторов считается одним из наиболее перспективных для использования в медицине. Основной особенностью гидравлического метода активации является возможность передачи энергии с макро- на микро- и даже на наноуровень последовательным уменьшением диаметра капилляра, что позволяет достигать довольно больших мощностей микромашин. Гидравлические актюаторы могут иметь большой КПД в связи с малыми затратами на трение. Тем не менее изготовление этого типа актюаторов является весьма сложной задачей, в связи с чем обычно они имеют довольно большие размеры.

### Сенсорные НЭМС

Основой целого ряда чувствительных устройств на наноуровне являются различные типы кантилеверов (балка, закрепленная в какой либо точке и находящаяся в состоянии равновесия). При этом собственная частота колебаний кантилевера зависит от соотношения его длины и толщины. Самое простое сенсорное устройство состоит из совокупности кантилеверов, имеющих разное отношение длины к ширине. Колебание кантилеверов может

возбуждаться любым из рассмотренных ранее методов (например, пьезоэлектрически), а систему регистрации частоты колебаний можно реализовать с использованием оптического отражения. Нужно отметить, что регистрация частоты колебаний кантилевера оптическими методами оказывается затруднена при переходе с микро- на наноуровень. Это связано с наличием дифракционного предела, то есть невозможности отражения света от объекта размер которого меньше длины волны излучения. Для точной регистрации движения в МЭМС и НЭМС используются емкостные датчики. В частности, именно такая система реализована в МЭМ акселерометрах используемых в настоящее время в системах активации подушек безопасности. Собственная частота кантилевера определяется соотношением:

$$\omega \sim \left( \frac{E}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{L^2},$$

где  $E$  – модуль Юнга,  $\rho$  – плотность материала,  $d$  – толщина балки,  $L$  – длина балки.

Использование специальных покрытий кантилевера материалами, обладающими отличным от материала балки коэффициентом термического расширения, позволяет фиксировать изменение частоты колебаний кантилевера в зависимости от температуры среды (из-за напряжений, создаваемых в плоскости контакта балки и покрытия). Чувствительность такого устройства лежит в области микроградусов, что позволяет использовать их в качестве инфракрасных сенсоров. Подобную схему можно применить и для создания детекторов постоянных магнитных полей. В этом случае балку покрывают материалом, проявляющим эффект магнетострикции. Под действием внешнего магнитного поля происходит изгиб балансира и изменение его резонансной частоты. Такие устройства могут детектировать магнитные поля вплоть до  $10^{-5}$  G (гаусс) [ $10^{-9}$  T (тесла)].

Еще одно применение наноэлектромеханических устройств обуславливается их малой эффективной массой, что делает резонансную частоту кантилевера чрезвычайно чувствительной к малым изменениям массы. Так, используя малые кантилеверы, можно провести “взвешивание” отдельной адсорбированной молекулы.

Уравнение движения груза массой  $M$  на упругой балке с учетом сопротивления среды (пропорционально скорости  $\frac{dx}{dt}$  осциллирующей массы  $M$ ) выражается уравнением

$$M \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + Kx = 0, \quad (17)$$

где  $K$  – константа упругости.

Решение этого уравнения для малого фактора затухания  $b$  приводит к соотношению

$$X(\omega) = A e^{\frac{-bt}{2M}} \cos(\omega t + \sigma), \quad (18)$$

в котором частота колебаний

$$\omega = \left[ \frac{K}{M} - \left( \frac{b}{2M} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (19)$$

Полученное выражение описывает систему, осциллирующую с фиксированной частотой и экспоненциально убывающей во времени амплитудой колебаний. Для осциллирующей балки главным источником торможения является сопротивление воздуха, которое пропорционально ее поверхности. Так как поверхность наноразмерного кантилевера очень мала, фактор затухания также оказывается малой величиной (такие кантилеверы фактически не рассеивают энергию).

Если к затухающему гармоническому осциллятору приложить внешнюю осциллирующую силу  $F_0 \cos(\omega't)$  то при равенстве частоты внешней силы и собственной частоты осциллятора будет наблюдаться резонанс. Увеличение амплитуды при резонансе зависит от фактора затухания. Следует отметить, что меньшему фактору затухания соответствует более узкий пик резонанса и большее увеличение амплитуды. Фактор добротности для резонанса задается соотношением:  $Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega}$ , где  $\Delta\omega$  – полуширина линии резонанса, а  $\omega_0$  – резонансная частота. Фактор добротности характеризует отношение потенциальной энергии колебания к энергии рассеянной за 1 цикл. Таким образом, величина  $1/Q$  является мерой диссипации энергии. Наноразмерные кантилеверы фактически не рассеивают энергию, а следовательно очень чувствительны к внешнему тушению колебаний. Высокодобротные устройства также характеризуются низким термомеханическим шумом. Для высокодобротных электрических устройств величина  $Q$  имеет порядок нескольких сотен, в то время как НЭМС обладают в 1000 раз большими значениями добротности. Одним из основных практических применений сенсоров на основе кантилеверов (в частности кантилеверов со специальными пьезоэлектрическими, магнитными и т.д. покрытиями) является сканирующая зондовая микроскопия.

### **Технологии производства МЭМС и НЭМС**

В настоящее время существует несколько базовых технологий производства МЭМС и НЭМС:

- технология объемной микрообработки (включает сухое травление и жидкое химическое анизотропное травление),
- поверхностная микрообработка (осаждение пленок, литография),

- LIGA -технология (технология формирования объёмных структур с использованием синхронного излучения, LIGA - аббревиатура немецких слов: lithographie - литография, galvanofornung - гальванообработка, abformung — прессование)
- SIGA технология (Silicon LIGA),
- MUMPs процесс (Multiuser MEMS process).

Все перечисленные технологии позволяют создавать большое количество устройств одновременно и получили широкое распространение в полупроводниковой технике. В то же время, для внедрения линий производства микро- и нанозлектромеханических систем необходимы значительные затраты, связанные с требованиями высокой точности и разработки автоматизированных методов контроля качества получаемых устройств. В связи с этим в последнее время большое значение приобрели этапы проектирования и моделирования микро- и наноустройств. При создании наномоторов перечисленными выше методами серьезные проблемы возникают из-за их малых размеров и еще более малых воздушных зазоров, что для большинства актюаторов приводит к крайне малому сроку службы из-за попадания в них частиц пыли и возникновения поверхностных дефектов.

### **Материалы для МЭМС и НЭМС**

К материалам, используемым в микро- и нанотехнологии, предъявляются весьма жесткие требования, включающие их высокую химическую чистоту и устойчивость к внешним воздействиям, а при использовании комбинаций различных материалов – их химическую, кристаллохимическую и механическую совместимость. При проектировании и создании наноустройств выделяют две группы используемых материалов:

- Конструкционные материалы, необходимые для формирования вспомогательных элементов: стекло, монокристаллический, поликристаллический и пористый кремний, диоксид и нитрид кремния, алюминий, вольфрам, никель, медь, золото, углерод;
- Функциональные материалы, выполняющие функции источников движения, механизмов передачи движения, сенсорных и активирующих сред: пермаллой, кварц, оксид цинка, пьезокерамика, полупроводники  $A^{III}B^V$ ,  $A^{IV}B^{VI}$ .

### **Молекулярные актюаторы**

Другой принцип механической активации связан с использованием молекулярных систем, способных к механическому перемещению под действием внешних факторов, таких как УФ-излучение, температура, рН среды, и т.д. Примером молекулярного актюатора является молекула азобензола (рис. 6). Поскольку цис-форма азобензола не является термически стабильной, слабое нагревание вызывает переход в транс-форму. Эта проблема

может быть решена с помощью электрохимического восстановления цис-изомера до гидроазобензола, и последовательным переходом в транс-изомер окислением.

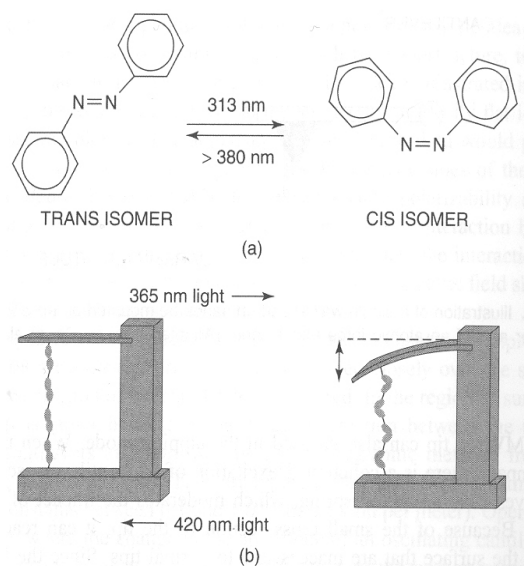
Использование фотоизомеризации полиазобензола под действием света с длиной волны 365 нм позволяет создать механическое напряжение и движение кантилевера в системе, представленной на рис. 6. Воздействие на цис-изомер светом с длиной волны более 380 нм вызывает возвращение полимерной цепи в обычную транс-форму. Освещением полимера переменными импульсами света с длинами волн 420 и 365 нм можно осуществлять осцилляцию кантилевера. Это первая демонстрация искусственной одномолекулярной машины, преобразующей энергию света в физическую работу.

Возможность использования отдельных молекул для преобразования энергии послужило первым стимулом к поиску биологических систем, предназначенных для получения механической энергии на наноуровне. Действительно, для достижения высокой эффективности работы искусственно созданных машин человек во многом копирует устройство природных объектов. А так как в ходе длительной эволюции каждая деталь природных механизмов была отточена до совершенства, эффективность природных процессов очень высока. К примеру, коэффициент полезного действия (КПД) биологических моторов близок к ста процентам, в то время как КПД используемых в каждом доме динамиков и ламп накаливания, созданных человеком, не превышает 5%.

### Молекулярные моторы

Биологические молекулярные моторы – это созданные природой наномашин, превращающие химическую энергию в механическую работу. Эффективность, т.е. КПД таких моторов, во многих случаях близка к ста процентам.

Размер биомоторов составляет от нескольких нанометров до нескольких микрон. В большинстве своем это белковые машины, ферменты и катализаторы, такие как кинезин, миозин, аденозинтрифосфат (АТФ) синтетаза и другие. Миллионы миозиновых двигателей обеспечивают сокращение мышц, заставляя сердце биться, линейные моторы



**Рис. 6.** (а) Цис-транс изомеризация азобензола, индуцированная УФ-излучением; (б) молекулярный актюатор, основанный на изомеризации полиазобензола под действием УФ-излучения.



транспортируют вещества в клетки мозга. В каждой клетке, передвигаясь вдоль спирали ДНК, работают различные моторы-роторы.

Сложная организация живой клетки оказывается возможной исключительно благодаря осуществляемому в ней транспорту, например, передвижению вакуолей с питательными веществами вдоль микротрубок. Для перемещения некоторых клеточных составляющих путем диффузии требуется несколько дней, в то время как такое движение с помощью кинезина осуществляется за несколько минут. Считается, что в клетках действует не меньше полусотни переносящих или передвигающих груз молекул. Некоторые основные принципы их работы стали известны благодаря уже ставшим классическими работам по изучению физиологии и биохимии мышц. Как уже было отмечено выше, все эти механизмы работают по одному и тому же фундаментальному принципу — катализатор (часто аденозинтрифосфат - АТФ), взаимодействуя с молекулой «мотора», переводит ее в метастабильное, механически-ограниченное состояние, последующая релаксация которого совершает полезную работу. Таким образом, происходит преобразование химической (или электрической) энергии в механическую энергию гибкой молекулы, которая в результате оказывается способной хватать и перехватывать “руками” своих химических связей некое гибкое длинное внутриклеточное волокно (микротрубку, актиновое волокно или спираль ДНК) и в результате ползти по нему вместе с грузом.

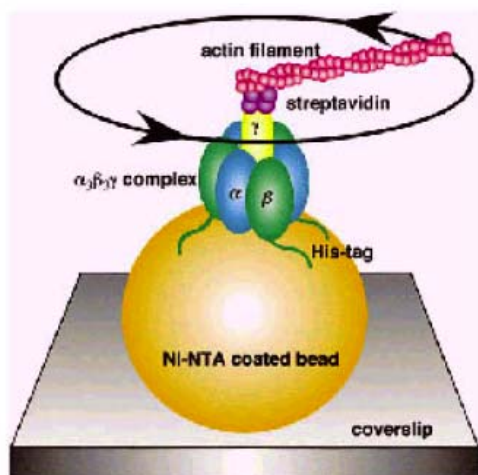
По-видимому, природа “изобрела” этот принцип давным-давно, еще на заре возникновения жизни, во времена одноклеточных организмов и постепенно расширила сферу его применения на все виды внутри- и межклеточных движений. Далее мы рассмотрим основные типы моторов, действующих в живых клетках.

### **АТФ синтетаза**

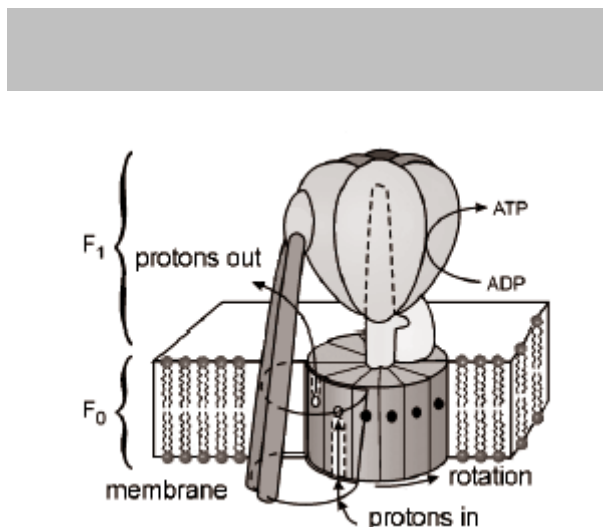
АТФ синтетаза - фермент, предназначенный для синтеза или гидролиза молекул АТФ, а также для переноса протонов ( $H^+$ ) через мембрану клетки, чем обеспечивает стабильный внутриклеточный рН цитоплазмы. Он преобразует энергию, запасенную в протонном градиенте, в химическую энергию. За объяснения его функционирования внутри клетки Е. Скоу, П. Бойер и Дж. Уолкер (J. C. Skou, P. Boyer и J. Walker) получили Нобелевскую премию в 1997 году. Интересно, что при гидролизе АТФ одна из частей энзима совершает вращательное движение.

АТФ-синтетаза состоит из двух отдельных частей:  $F_0$ , гидрофобной части, связанной с мембраной и ответственной за транспорт протонов, и  $F_1$ , гидрофильной части, ответственной за синтез и гидролиз АТФ (рис.7). По мере того как протоны протекают через  $F_0$  часть энзима, центральный сектор с присоединенным актиновым хвостом ( $\gamma$ -субъединица)  $F_1$ -

АТФазы вращается по часовой стрелке, и идет синтез АТФ. Гидролиз АТФ происходит при вращении  $\gamma$ -субъединицы против часовой стрелки; при этом направление протекания протонов меняется на обратное. По эффективности работы и развиваемой силе АТФ синтетаза существенно превосходит все известные в природе молекулярные моторы.



Kinoshita et al. 1998



**Рис. 7.** Строение фермента АТФ-синтетаза.

К. Киношита (К. Kinoshita) с соавторами удалось наблюдать вращение АТФ синтетазы при навешивании флуоресцирующего элемента на конечный участок вращающегося сегмента. Типичная сила, продуцируемая такой молекулярной турбиной составляет около 1 пкН, а мощность – порядка 1 аВт ( $1 \cdot 10^{-18}$ ).

### Флагеллярные моторы бактерий

Бактерии вынуждены передвигаться в поисках лучших условий для жизни и размножения. Модель работы флагеллярного мотора бактерий была предложена в 1978 году А.Н. Глаголевым и В.П. Скулачевым. Согласно этой модели вращение жгутика (неподвижной спирали - флагеллы) объясняется работой “ротормотора”, расположенного на клеточной мембране. Так же как и в АТФ-синтетазе движущей силой для флагеллярных моторов бактерий является градиент протонов или ионов  $\text{Na}^+$  на внешней мембране бактерии. Скорость вращения такого мотора может достигать тысяч оборотов в секунду. В целом, механизм вращения флагеллярного мотора очень сложен (его считают одним из самых сложных известных механизмов в клетках), и до сих пор подробно не изучен. Однако известно, что во вращении оказываются задействованы несколько сотен молекул белков, образующих на один оборот до 16 различных последовательностей комплексов и химических связей.

Сравнительный анализ различных видов подвижных бактерий показывает, что устройство двигателя у них во многом сходно, у близких видов вплоть до идентичности структурных белков и организации генетического аппарата. Таким образом, можно предположить, что однажды возникшие в природе “удачные” инженерные решения сохраняются и продолжают успешно функционировать внутри живых организмов, несмотря на сложные, зачастую приводящие к вымиранию большинства видов пути макроэволюции.

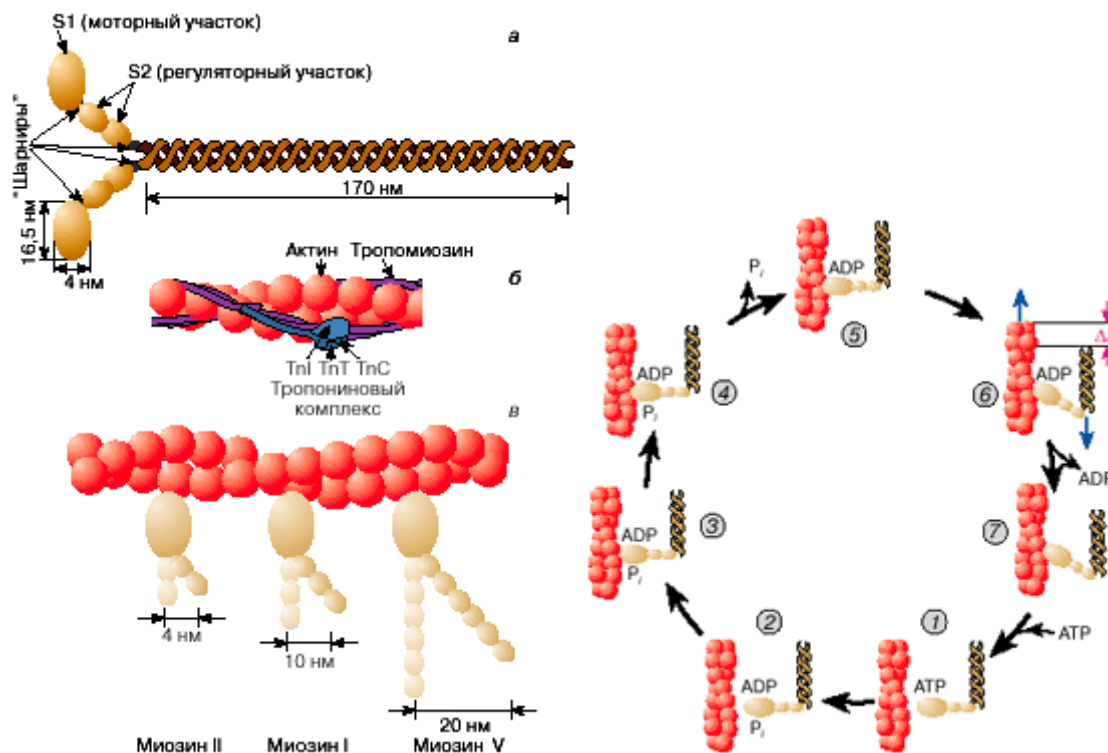
### **Миозин, кинезин и диенин**

Научное исследование самого известного молекулярного мотора – миозина, движущей силы мышц, началось еще 400 лет назад, но как и у многих биологических объектов, механизм его работы до конца не ясен до сих пор. Хотя миозин является самым изученным среди подобных ему белков-переносчиков (другими известными белками этого класса являются кинезин и диенин), в последнее время было открыто большое количество похожих на него белков с аналогичными свойствами. Например, в клетках дрожжей найдено шесть белков, похожих на кинезин, а в клетках мышечной ткани обнаружено более двух десятков подобных белков.

Итак, миозин, диенин и кинезин - белки, ответственные за “линейное” перемещение, и способные преобразовывать энергию, получаемую при гидролизе АТФ (до АДФ и неорганического фосфата) в механическую работу. Помимо сокращения мышечных волокон, белки этого семейства отвечают и за движение спермы, и за перенос питательных веществ в клетках мозга.

Открытие АТФазной активности миозина было сделано в 1939 году В.А. Энгельгардтом и М.Н. Любимовой. Ими было также показано, что добавление АТР к белковому препарату, состоящему из нитей миозина, влияет на его механические свойства. Миозин состоит из линейного участка, образованного двойной димерной спиралью и двух глобульных головок. Последовательное взаимодействие головок белка с поверхностью, по которой он движется (в случае миозина с волокном актина или микротрубочкой в случае кинезина), и АТФ приводит к тому, что молекула как бы шагает по поверхности, поворачиваясь на каждом шаге вокруг одной из головок, вероятно, используя белковый “хвост” в качестве рычага. В случае кинезина один шаг димерного комплекса приводит к его смещению вдоль микротрубочки на расстояние  $\Delta l = 8$  нм. Запуск “шагания” в случае миозина происходит в результате вызванного нервными импульсами изменения концентрации ионов кальция в клетке. Длина шага  $\Delta l$  в точности соответствует размеру двух мономерных глобул  $\alpha$ - и  $\beta$ -тубулина, элементарных белковых звеньев, из которых построена микротрубочка. Двигаясь вдоль микротрубочек, молекула может тянуть за собой

сравнительно крупные субклеточные частицы. Тянущая сила, которая вызывает движение молекул миозина вдоль нитей актина, возникает за счет структурных изменений, происходящих в каталитическом центре миозина после гидролиза молекулы АТФ.



**Рис. 8.** «Движение» миозина вдоль волокон мышц.

“Шагающее” движение миозина вдоль актиновых волокон, из которых состоят мышцы, удалось наблюдать визуально путем привязывания активного флуоресцирующего центра к концу димерной спирали (рис.8). “Шаг” движения для миозина составляет 4-5 нм. Было установлено, что в растворе актин и миозин образуют, так называемый, актомиозиновый комплекс. При отсутствии актина миозин плохо гидролизует АТФ. В присутствии актина АТФазная активность миозина возрастает приблизительно в 200 раз.

В мышечных волокнах молекулы миозина собраны в жгуты, из которых выступает множество миозиновых мостиков в сторону нитей актина. Во время сокращения мышцы лишь 10–15% мостиков одновременно находится в контакте с окружающими их нитями актина и взаимодействует с АТФ. Таким образом, большую часть времени молекула миозина в жгуте не выполняет работу, перемещаясь, однако, вместе с остальными молекулами миозинового жгута. Длина “шага” такой совокупности миозиновых молекул составляет 35–40 нм, что многократно превышает размер шага индивидуальной молекулы.

Естественно, число моторных белков не ограничивается названными примерами. Одних только аналогов миозина в клетках различных организмов насчитывается свыше 80 видов. Хотя такие сложные молекулы вряд ли будет возможно воспроизвести в лаборатории

в ближайшие годы, они являются замечательным источником вдохновения для исследователей, создающих искусственные молекулярные моторы.

### **Искусственно создаваемые молекулярные моторы**

В течение уже многих лет исследователи интересуются возможностью имитации движения человеческих мышц. Фантазия человека подсказывает, что “приручение” биологических моторов позволит значительно увеличить возможности преобразования энергии, добиться более щадящих и эффективных методов лечения многих болезней. Таким образом, за последнее десятилетие было создано большое количество различных молекулярных систем, потенциально пригодных для использования в наноразмерных устройствах. Прежде чем перейти к описанию конкретных искусственных наномоторов следует подытожить информацию о работе биомолекулярных моторов и сравнить их с устройствами, созданными человеком. Все известные биомоторы запускаются химическим превращением (обычно топливом является АТФ) и выполняют разнообразные функции внутри и вне клетки, часто перемещаясь на большие расстояния, значительно превышающие их собственный размер. В отличие от них искусственно созданные машины могут двигаться только внутри некоторой молекулы или некоторой небольшой фиксированной системы атомов. В качестве топлива для них могут использоваться электроны, фотоны и различные реагенты. Конкретных областей применения для искусственных молекулярных моторов пока не придумано.

### **Интеграция биологических молекулярных агрегатов в устройства**

Самым простым способом использовать достижения природы в области преобразования энергии могло бы быть комбинирование известных биологических моторов с искусственно созданными наноразмерными устройствами. Одним из наиболее привлекательных в этом смысле моторов является АТФсинтетаза – описано уже 4 попытки использовать ее вращение (к сожалению, все они оказались не очень удачны). Другим примером является создание в Корнелльском университете биомолекулярного мотора с микроскопическим металлическим пропеллером размером всего 750 нм и диаметром 150 нм. Мотор, работающий за счет ферментативного окисления аденозинтрифосфорной кислоты, вращает пропеллер из никеля со скоростью восемь оборотов в минуту. К сожалению, полученное устройство пока не может работать внутри клетки, а управлять таким мотором пока практически невозможно.

## Ротаксаны и катенаны

Одним из наиболее красивых примеров молекулярных моторов являются моторы, созданные на основе ротаксанов и катенанов.

Ротаксаны – это химические соединения, построенные из циклической и пронизывающей ее линейной молекул так, что объемные группы на концах линейной молекулы препятствуют разобщению системы. Компоненты ротаксанов (линейная и циклическая молекулы) связаны чисто механически без участия химической связи. Этот способ соединения молекул называется топологической связью. К химическим соединениям с подобной связью относятся также катенаны (лат. catena - цепь), в которых циклические макромолекулы соединены подобно звеньям цепи. На линейной части молекулы ротаксана может присутствовать одна или несколько “станций”, фиксирующих путем химических (обычно, водородных) связей макроциклическую часть ротаксана в определенном положении. Плотность состояний на каждой из “станций” в молекуле ротаксана зависит напрямую от расстояния между отдельными “станциями” и от химических взаимодействий, осуществляемых с циклической частью молекулы на каждой из них. В случаях, когда заселенность “станций” может быть изменена путем различных внешних воздействий (химических, электрохимических или фотохимических), появляется возможность создать устройство, вдоль которого может происходить управляемое движение в одном или двух направлениях.

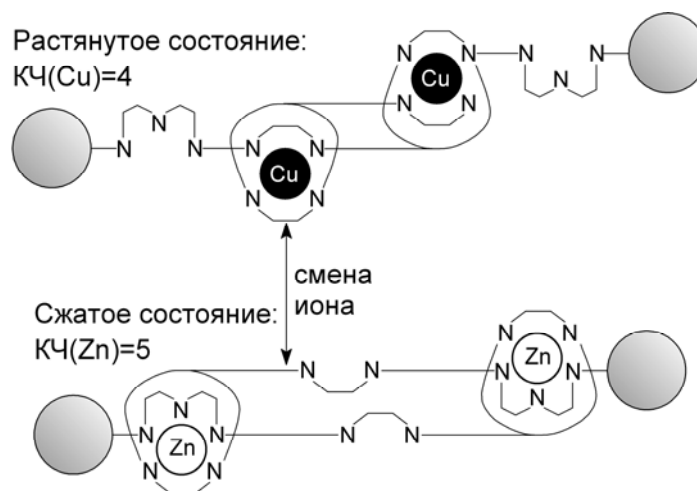
### Химически-индуцированное движение в ротаксанах

Впервые идея использовать ротаксаны в нанотехнологических устройствах была реализована итальянскими учеными. Более известными, однако, являются работы британского профессора Дэвида Ли (D.A. Leigh). Полученный им ротаксан содержит пептидный макроцикл, в “нулевом” положении привязанный к сукцинимидной группе (первой “станции”) сильными водородными связями. Второй “станцией” является фенольная группа – слабый акцептор и слабый донор водородных связей, преобразуемая в сильный акцептор водородных связей при превращении в фенолят-анион. Акцепторные свойства фенолят-аниона, таким образом, являются движущей силой перемещения макроцикла. Процесс перемещения макроцикла зависит от природы сольвента и реализуется лишь в полярных растворителях с водородными связями, в то время как природа основной “нити” и ее длина не оказывают существенного влияния на процесс движения.

Искусственным аналогом деятельности фермента является работа молекулярного мотора, состоящего из порфиринового комплекса с магнием и гликольурильной группы, формирующих своеобразную полость. Необходимый для активации комплекса

*t*-бутилпиридин может координировать его только вне полости. Таким образом, реакции окисления, катализируемые комплексом, могут проходить также только вне полости. Когда описанный комплекс попадает на полимерную нить из полибутадиена, он катализирует эпексидирование полибутадиена гипохлоридом натрия, таким образом, параллельно передвигаясь вдоль полимерной нити.

Красивым примером химически индуцированного движения является работа группы профессора Ж. Саважа (J.P. Sauvage). По аналогии с механизмом сокращения мышц, созданный им комплекс был назван молекулярной мышцей. Молекулярная мышца состоит из двух участков, каждый из которых содержит кольцевую группу и участок нити. В растянутом положении комплекс находится в Cu (I) форме, координируясь четырьмя атомами азота молекулы фенантролина. Замещение ионов меди (I) на ионы цинка (II) с координационным числом, равным пяти, приводит к сокращению длины комплекса. Таким образом, растяжение или сокращение молекулярной мышцы на 18 Å может быть произведено заменой иона в ротаксане (рис.9). Отрицательной чертой такого молекулярного устройства является долгое время отклика и необходимость использования дополнительных реагентов.



**Рис.9.** Растяжение и сокращение молекулярной мышцы.

### Фотоиндуцированное движение в ротаксанах

Использование цис-транс-изомеризации в азобензольной группе дало возможность управлять движением в ротаксанах с помощью фотонов. Было показано, что поглощение световой энергии транс-изомером приводит к переходу в цис-положение. Последующее нагревание цис-изомера опять ведет к образованию стабильного транс-изомера, самопроизвольное превращение которого оказывается невозможным в результате стерических затруднений. Последующее развитие этой идеи привело к созданию ротаксанов,

дающих преимущественно цис- или транс-изомеризацию азобензольной группы в зависимости от длины волны облучения (365 и 436 нм, соответственно). Аналогичным образом были созданы молекулярные моторы на основе ротаксанов, содержащих цис-транс-изомеризующуюся фумаридную группу.

Были также получены ротаксаны, в которых перемещение между “станциями” управлялось наносекундным лазерным импульсом. Макроцикл, зафиксированный четырьмя водородными связями с сукцинамидной “станцией”, под воздействием световой энергии переходил на нафтиламидную “станцию”, ставшую в форме радикала сильным акцептором водородной связи. После возбуждения лазерным импульсом переход от сукцинамидной к нафталимидной “станции” занимает около 1 мкс. Рекомбинация заряда в течении 100 мкс приводит к возвращению макроцикла в исходную позицию. В результате за одну десятитысячную секунды происходит передвижение макроцикла примерно на 15 Å. Оказывается, что подобной системой легко управлять и электрохимически. Однако такой процесс оказывается примерно в 50 раз более медленным, чем запускаемый фотохимически.

#### Более точный контроль направления движения

В отличие от ротаксанов, использование катенанов позволяет создавать устройства, способные к движению по кругу, что в перспективе может позволить создавать молекулярные роторы на основе катенанов (рис.10). Разработанный в группе профессора Дэвида Ли (D.A. Leigh) молекулярный мотор состоит из двух маленьких колец, способных двигаться по большому 63-членному кольцу.

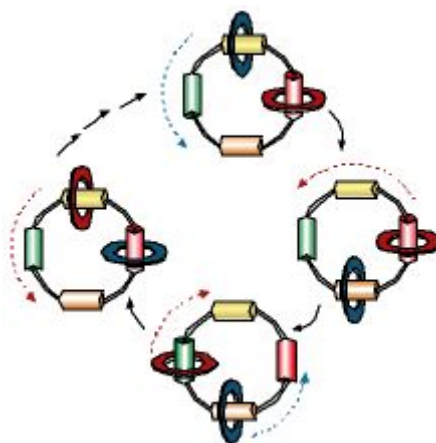


Рис. 10. Молекулярные моторы на основе катенанов.

Водородные взаимодействия привязывают каждое из малых колец к одной из четырех возможных химических “станций”. Каждое из малых колец блокирует возможность передвижения другого, позволяя таким образом добиться вращения системы в выбранном



направлении. Топливом для этого движения может являться как свет, так и тепло и химические взаимодействия.

Предшественником этой системы является молекулярный мотор на основе катенана из двух звеньев, в котором направленность перемещения малого кольца задавалась разницей констант и скоростей перемещения в различных направлениях (рис.11).

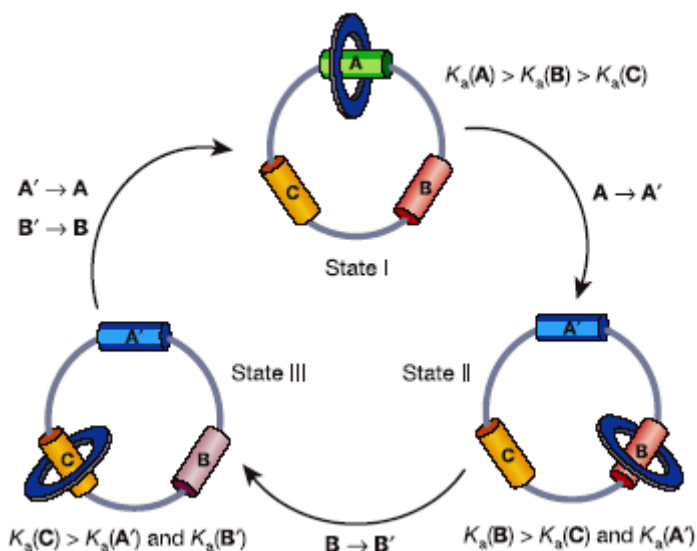


Рис. 11. Молекулярный мотор на основе катенана из двух звеньев.

### Нанولیфт

Интересной молекулярной системой, построенной на принципах топологической связи, является нанولیфт. Он состоит из двух молекул: молекулы-платформы и молекулы-шахты, по форме напоминающей табурет (рис. 12). Плоская молекула-платформа соединена с тремя богатыми кислородом макроциклами (кольцами). Шахта же имеет плоскую крышу и стоит на трёх вертикальных прутиках, каждый из которых пронизывает одно из колец. В исходном положении они находятся в нижней части лифта. На находящихся в верхней части опор лифта азотсодержащих группах в кислой среде образуется положительный заряд, притягивающий кольцевые группы по краям платформы, а с ними и саму платформу, благодаря поляризации атомов кислорода в них. Таким образом, платформа может перемещаться вверх-вниз за счет энергии химических реакций с участием кислот. Лифт удастся привести в действие изменением pH среды. Размеры всей конструкции — 2,5 нм в высоту и 3,5 нм в ширину. При добавлении в окружающую среду основания азотная группа теряет заряд, и кольца начинают притягиваться атомами, расположенными в нижней части ног-опор, что приводит к опусканию платформы в нижнее положение. К сожалению, скорость перемещения участков платформы вдоль ножек шахты не одинакова: фиксация на

двух из трех ножек происходит достаточно быстро, в то время как окончательная установка лифта на третьей ножке занимает около недели.



**Рис. 12.** Строение молекулярного лифта.

Для практического использования созданной молекулярной системы необходимо научиться управлять наномеханизмом с помощью световой или электрической энергии, а не изменением кислотности среды. Научившись закреплять нанолифты на некоторой поверхности, можно было бы придавать таким поверхностям определенные свойства. Например, они могли бы отбирать из окружающей среды молекулы определенного типа, захватывая их затем в “шахту лифта”, и отдавать их при изменении свойств внешней среды или, наоборот, захватывать в объем, ограниченный данной поверхностью.

### **Устройства на основе алкенов**

По мнению некоторых исследователей, дальнейшее совершенствование молекулярных моторов должно идти по пути создания хиральных переключателей на основе длинноцепочечных алкенов. Преимуществом таких систем является возможность почти полного контроля вращательного движения молекул – поворота на  $180^\circ$  вокруг двойной связи в результате взаимных превращений цис- и трансизомеров, или поворота на  $360^\circ$  вокруг центральной двойной связи.

Примером таких моторов является молекула, состоящая из двух шестичленных колец, соединенных двойной связью. Стерические затруднения и конформационные особенности молекулы дают возможность осуществлять однонаправленное вращение вокруг центральной двойной связи. К сожалению, такое вращение является слишком медленным при комнатной температуре. Для решения этой проблемы проводятся исследования аналогичных соединений, в которых шестичленные циклы заменены пятичленными. Ожидается, что при меньшей стерической заполненности молекулы, движение будет происходить более быстро,

чем в случае шестичленных циклов. Для увеличения избирательности вращения в о-положение относительно двойной связи осуществляют привязку метильной группы.

Существуют работы по изучению движения таких моторов, привязанных при помощи дополнительных функциональных групп к золотым или стеклянным поверхностям, а также к наночастицам золота.

В заключение хотелось бы еще раз подчеркнуть совершенство созданных природой биомоторов по сравнению с искусственно сконструированными человеком. Это в первую очередь высокие КПД, способность к передвижению различных грузов на большие расстояния и возможность самовоспроизведения. Однако, с точки зрения применения в механических наноразмерных структурах искусственные моторы имеют перспективы создания управляемых устройств. Тем не менее, в обоих случаях не представляется возможным создать непрерывный ряд положений (например, с поворотом на  $10^\circ$ ,  $15^\circ$ ,  $20^\circ$ , и т.д.), необходимый, в частности, для работы наноманипулятора. Как для искусственных, так и для существующих в природе наномоторов существует ограниченное число устойчивых положений (например, дискретность работы АТФазного мотора -  $120^\circ$ ). Кроме того, сила, производимая одним биомотором, очень невелика, и реальное использование молекулярных машин даже в наноустройствах возможно только после организации групповой одновременной работы нескольких молекулярных моторов. Поэтому, как сказал создатель первого фотохимически управляемого искусственного молекулярного мотора Фред Броуер: “The main reason for doing this kind of research is that it is a challenge.”

## **Нанoeлектроника**

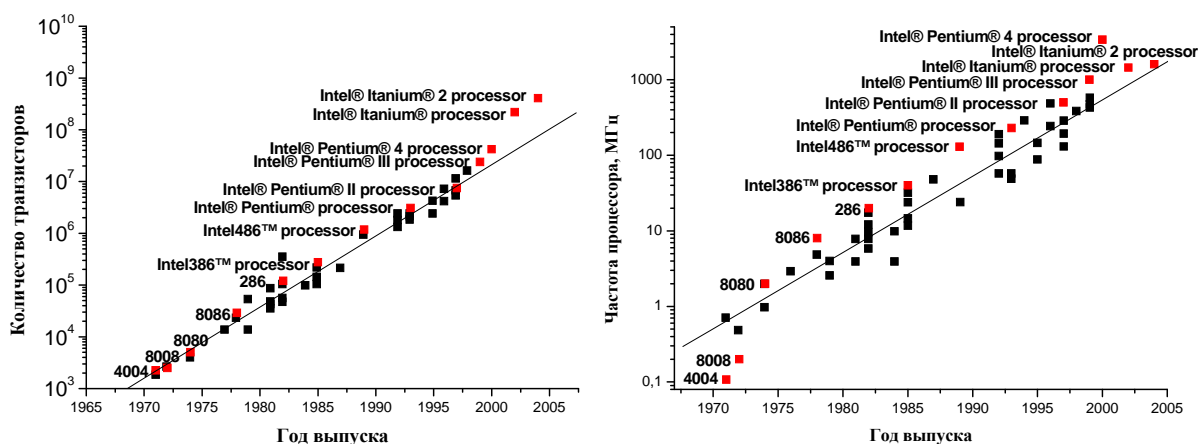
*“...Закон Мура будет работать по крайней мере еще 10 лет,  
но для этого придется как следует поработать.”*

*Gordon Moore, Intel*

Широкое распространение современных информационных технологий требует непрерывного совершенствования вычислительной техники. Например, развитие сетевых технологий (до 100 млн. новых пользователей в мире ежегодно) приводит к значительному росту объема передаваемой и обрабатываемой информации. До сих пор продолжает выполняться закон Меткалфа – интенсивность использования ресурсов любой сети (в частности сети Интернет) пропорционально квадрату числа пользователей, что во многом определяет необходимость дальнейшего развития информационных технологий (ИТ). Нужно отметить и научную важность усовершенствования ИТ: так, вычислительная техника,

обладающая большими скоростями обработки и объемом обрабатываемых данных, позволяет значительно расширить круг задач, решаемых методами математического моделирования.

На протяжении последних 40 лет развитие полупроводниковой техники подчиняется закономерности, сформулированной одним из основателей фирмы Intel Гордоном Муром и впоследствии получившей название закона Мура: плотность транзисторов в интегральных схемах, и, соответственно, производительность микропроцессоров удваивается каждые два года. Таким образом, количество элементов в процессоре возрастает экспоненциально, так за период с 1971 г. по 2001 г. количество транзисторов выросло с 2,3 тыс. (микропроцессор 4004) до 42 млн. (Pentium 4), т.е. более чем в 18 тысяч раз. Соответствие развития количества элементов в микропроцессоре закону Мура наглядно показано на рис. 13. Видно что, реальный рост количества транзисторов в процессорах, выпускавшихся за последние 30 лет, хорошо соответствует намеченной Муром закономерности. Помимо увеличения плотности транзисторов в процессоре наблюдается экспоненциальный рост частоты процессоров.



**Рис. 13.** Временной рост количества выпускаемых транзисторов и их тактовой частоты.

До настоящего времени быстрое развитие вычислительной техники увеличивалось за счет увеличения плотности размещения транзисторов, т.е. уменьшения их размеров. В настоящее время наибольшее распространение имеют 130- (2001 г.) и 90- нанометровая (2003 г.) технологии изготовления процессоров, где соответствующий размер характеризует минимальный размер элемента маски, используемой в процессе литографии. Обычно этот размер отвечает расстоянию “сток-исток” в транзисторе. Интересно отметить, что уменьшение размеров элементов маски ниже длины волны видимого и УФ-излучения привело к необходимости использования коротковолновых источников излучения, таких как рентгеновские источники или синхротронное излучение. Сегодня, синхротронное излучение

нашло свое применение в технологии создания микропроцессоров. В настоящее время созданы прототипы и разрабатываются технологические процессы создания микросхем на основе 20-нм технологии. К 2007 году предполагается начало производства микросхем по 45 нм технологии, а в 2009 – 32 нм. Однако при дальнейшем уменьшении размеров элементов микропроцессора производители столкнутся с новыми проблемами. Достаточно быстрое уменьшение размеров полупроводниковых транзисторов приведет к тому, что через 15 лет (по данным ITRS international technology roadmap for semiconductors) размер транзистора достигнет того предела, что он не сможет работать. Для оценки перспектив развития полупроводниковой вычислительной техники и современной технологии изготовления рассмотрим базовый элемент современной микроэлектроники – транзистор, получаемый методом литографии.

### Современные транзисторы

Основой современной вычислительной техники является транзистор, открытый в 1947 г. Д. Бардином, У. Браттейном и В. Шокли. Среди транзисторов можно выделить два основных типа – биполярный (1947г.) и полевой (70-е гг.) транзистор, которые отличаются друг от друга количеством различных носителей заряда. За последние 30 лет развитие вычислительной техники связано с применением полевых транзисторов структуры “металл-оксид-полупроводник” (МОП-транзисторы или MOSFET – в зарубежной терминологии). Структура МОП-транзистора остается фактически неизменной с момента открытия, изменению подлежат лишь материалы элементов транзистора и его размеры. Так любой МОП-транзистор состоит из проводящих стока и истока (проводник), между которыми находится канал (полупроводник), управляемый затвором, отделенным от канала тонким слоем диэлектрика. На рис. 14 представлена схема МОП-транзистора.

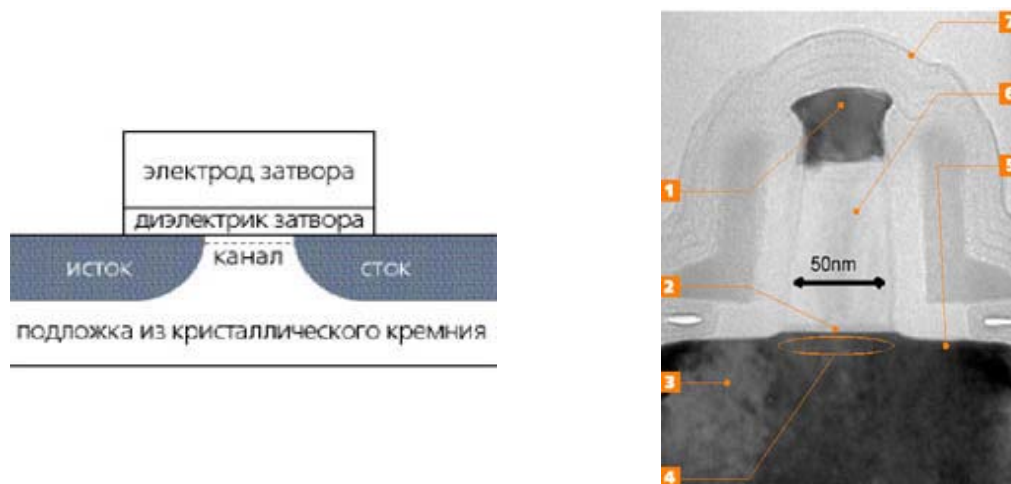


Рис. 14. Схема МОП-транзистора.

В последнее время для автоматизации изготовления микропроцессоров с высокой плотностью транзисторов используется технология литографии. На поверхности кремния формируют сток и исток с зазором между ними, выполняющим роль канала. Поверх канала наносят тонкий слой диэлектрика или формируют оксидный слой путем окисления кремния. На слой диэлектрика напыляют затвор из проводящего материала. Сток и исток соединяют с другими транзисторами напыленными металлическими контактами, после чего вся поверхность покрывается слоем диэлектрика (оксид или нитрид кремния) для защиты от внешней среды. В различных технологиях используются различные материалы для изготовления элементов транзистора, но в целом технология изготовления схожа для всех современных процессоров.

При уменьшении размеров транзисторов повышаются требования к маскам для нанолитографии, к чистоте исходного полупроводникового кристалла (его бездефектности) и условиям, в которых происходит напыление транзистора на монокристалл полупроводника. Однако, помимо технологических трудностей, связанных с формированием транзисторов на кристалле и проблемами создания соответствующих масок для литографии, существуют принципиальные ограничения, наиболее значимыми из которых являются квантовое ограничение и проблема тепловыделения на транзисторе.

### ***Проявление квантовых эффектов***

Постоянное уменьшение размеров транзистора постепенно приводит к необходимости создания частей транзистора, характерные размеры которых (напр. длина канала) сравнимы с толщиной нескольких атомарных слоев. Так, для 65 нм технологии длина канала составляет 35 нм, что соответствует всего 70 параметрам решетки кремния.

Поскольку при последовательном уменьшении размера элементов все сильнее проявляются квантовые эффекты, возникает проблема переноса заряда путем туннелирования электрона через потенциальный барьер (“закрытый” канал).

Кроме того, при уменьшении размера канала уменьшается количество основных носителей заряда, что также накладывает ограничения на развитие полупроводниковой вычислительной техники.

Если длина канала еще может быть уменьшена, то для диэлектрика затвора возможности уменьшения уже сейчас фактически исчерпаны. Так в 90 нм технологии, толщина диэлектрика составляет всего 1,2 нм, что приводит к утечке за счет туннелирования и, как следствие, увеличению потерь энергии и тепловыделению. Для замены диоксида кремния необходимо найти диэлектрик с большой диэлектрической проницаемостью, который должен быть совместим с кремниевой технологией (иметь низкий параметр рассогласования с кристаллической решеткой кремния).

### ***Проблема плотности энергии и теплоотвода***

В связи с увеличением используемой плотности размещения транзисторов, в последнее время наблюдается значительное увеличение энергии, которая также подчиняется экспоненциальному закону. Дальнейшее увеличение плотности энергии может воспрепятствовать выполнению закона Мура. В связи с этим возникает проблема теплоотвода рассеянной энергии.

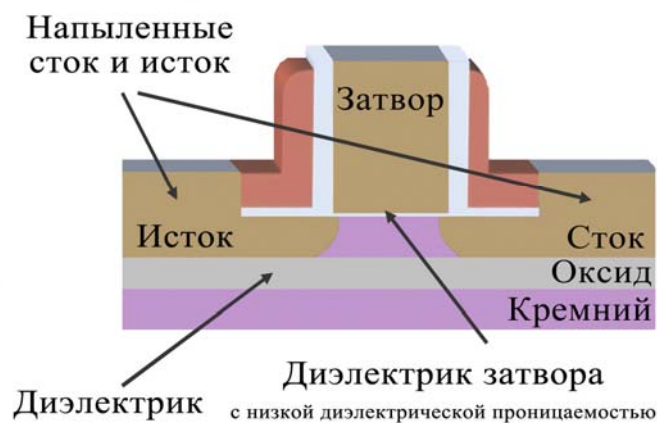
На настоящий момент для теплоотвода используется воздушное охлаждение, однако применимость этого метода ограничена, особенно в мобильных (переносных) компьютерах.

### ***Дефекты и ошибки***

Несмотря на высокие исходные требования к бездефектности исходного кристалла, они постоянно продолжают расти. Кроме того, постоянно увеличиваются требования устойчивости к так называемым мягким ошибкам – появлению носителей заряда в канале за счет ионизирующего  $\alpha$ -излучения.

В настоящее время увеличение быстродействия процессора происходит в результате:

- увеличения количества транзисторов за счет уменьшения их размеров;
- подбора новых материалов для исходного монокристалла и диэлектрика затвора;
- изменения геометрии транзистора, например отделение канала от основного кристалла полупроводника слоем оксида (silicon-on-insulator) позволяет повысить частоту переключения транзистора вплоть до 1 ТГц (рис. 15).



**Рис. 15.** Устройство террагерцевого транзистора.

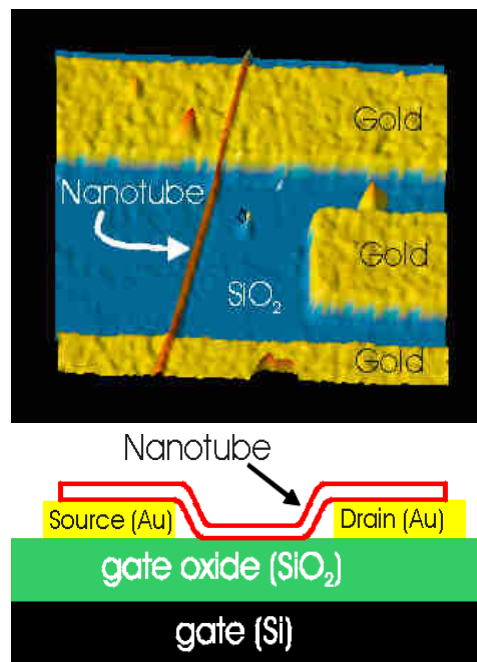
Однако эти способы позволяют только отодвинуть границы выполнения закона Мура, но не полностью исключить их. Следует отметить, что, несмотря на малый размер современных транзисторов, для проведения элементарных итераций используются законы “классической физики”, где не проявляются квантовые эффекты, однако, для дальнейшего развития вычислительной техники необходимы принципиально новые решения. Наибольший

интерес представляют молекулярная электроника, схемы на основе углеродных нанотрубок и квантовые компьютеры.

### *Транзисторы на основе углеродных нанотрубок*

Помимо уникального строения и механических свойств, углеродные нанотрубки обладают специфическими электронными свойствами. Так в зависимости от хиральности структуры они могут проявлять как металлические, так и полупроводниковые свойства.

Наиболее простым решением является использование нанотрубки, обладающей полупроводниковыми свойствами, в качестве канала в полевом транзисторе. На рис. 16. изображена подобная система, состоящая из нанесенных на оксидную пленку проводящих истока, стока и соединяющей их углеродной нанотрубки. В качестве затвора в этой схеме предлагается использовать слой проводящего кремния. При комнатной температуре система ведет себя как обычный полевой транзистор, однако при понижении температуры до 4К он приобретает характеристики одноэлектронного транзистора. Описанный подход позволяет значительно уменьшить толщину канала, но размер транзистора будет изменен лишь незначительно из-за использования нанолитографии при создании проводящих частей. В



**Рис.16.** Транзистор на основе углеродных нанотрубок.

связи с этим большой интерес представляет подход, основанный на переходе “металл-полупроводник” в пределах одной углеродной нанотрубки, или создание p-n перехода в точке контакта двух углеродных нанотрубок с разной хиральностью. Поскольку тип проводимости зависит от структуры нанотрубки, для создания в трубке n-p перехода необходимо изменение ее хиральности на определенном участке. Такое изменение возможно благодаря наличию дефектов в виде 5- и 7-членных колец. На рис. 17 показаны некоторые из подобных дефектов, обеспечивающих как изменение вектора хиральности, так и позволяющих менять диаметр нанотрубки. При этом две части трубки, обладающие различными атомарной и электронной структурами образуют переход “металл-металл”, “металл-полупроводник” или “полупроводник-полупроводник”. Именно эти переходы могут быть использованы в будущем для дальнейшего уменьшения компонент транзистора. Так в частности углеродная нанотрубка с переходом “металл-полупроводник” обладает свойствами молекулярного диода. Помимо диода возможно создание p-n переходов, необходимых для конструирования более сложных систем, таких как логические элементы.



Кроме изменения типа проводимости в пределах одной нанотрубки, возможно создание перехода в области контакта двух углеродных нанотрубок.

В настоящее время на нанотрубках созданы диоды, транзисторы и простейшие логические схемы, что доказывает возможность их применения в электронике. Однако, при создании более сложных систем возникают следующие проблемы:

-полученные стандартными методами углеродные нанотрубки представляют смесь как “металлических” нанотрубок, так и ”полупроводниковых”, которые практически невозможно разделить;

-последовательные операции с углеродными нанотрубками производятся с помощью атомно-силового микроскопа, технические решения массового производства схем на основе углеродных нанотрубок отсутствуют.

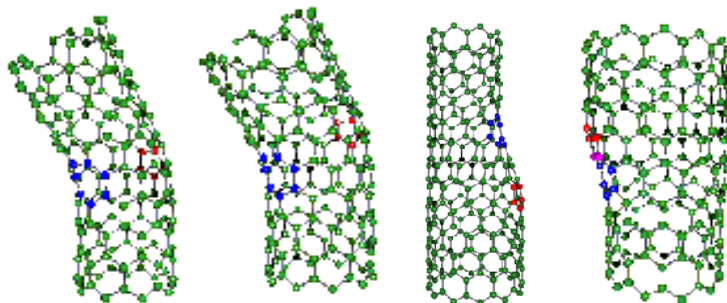


Рис. 17. Дефекты в углеродных нанотрубках.

### Квантовые компьютеры

Несмотря на проявление квантовых свойств при применении углеродных нанотрубок, предполагается что общая архитектура процессоров на их основе и используемые алгоритмы решения задач не отличаются от используемых в современной полупроводниковой вычислительной технике. Такой подход также имеет предел развития из-за ограничения минимальных размеров элемента процессора и линейного роста производительности в зависимости от количества транзисторов в процессоре. Совершенно иной подход реализуется в так называемых квантовых компьютерах.

#### *Принципы квантового компьютера (КК)*

В отличие от современного микропроцессора в квантовом компьютере едичным носителем информации является квантовая ячейка или кубит (от англ. qubit – quantum bit). Разница между битом и кубитом заключается в том, что последний не находится в состоянии 0 или 1 (“нет” или “да”), а представляет когерентную суперпозицию квантовых состояний всей системы (обычно записывается как  $a|0\rangle + b|1\rangle$ ). Подобное состояние не имеет аналогов в классической физике и является чистым квантово-механическим эффектом. Основное достоинство квантового компьютера состоит в т.н. квантовом параллелизме, то

есть вычисление происходит одновременно по  $2^N$  ( $N$ - количество кубитов) состояниям, тогда как в обычном компьютере требуется  $2^N$  последовательных операций. Таким образом, в отличие от современной электроники производительность квантового компьютера растет не линейно, а экспоненциально с увеличением количества элементов. Считается, что квантовый компьютер, состоящий из 1000 кубитов, будет заведомо превосходить по производительности любые современные компьютеры (в настоящее время производительности современного персонального компьютера хватает для моделирования системы, состоящей из примерно 50 кубитов).

### *Алгоритмы квантового компьютера*

Несмотря на потенциальные возможности квантового компьютера, они не могут быть реализованы в рамках классических алгоритмов вычислений, то есть количество шагов, требуемых для решения определенной задачи с помощью классического и квантового компьютеров с использованием одного и того же алгоритма, будет одинаковым. Таким образом, для увеличения быстродействия квантового компьютера необходима разработка специальных так называемых квантовых алгоритмов. Несмотря на то, что на квантовом компьютере можно ускоренно решать далеко не все задачи, его применение может экспоненциально ускорить решение таких задач, как факторизация больших чисел (разложение числа на множители, алгоритм Шора) и поиск в неупорядоченном массиве данных (алгоритм Гровера). Так, например, факторизация  $N$ -значного числа по квантовому алгоритму Шора выполняется за времена, пропорциональные  $N^3$ , в то время как для решения с использованием классического алгоритма требуется количество шагов, экспоненциально зависящего от  $N$ . Факторизация больших чисел применяется при расшифровке закодированных сообщений.

Таким образом, единственным, но значительным преимуществом КК является значительное ускорение решения задач, в которых количество шагов при использовании классических алгоритмов экспоненциально зависит от количества компонент исследуемой системы. В то же время можно выделить следующий принципиальный недостаток - невозможность оптимизации некоторых алгоритмов при переходе к квантовым вычислениям.

Несмотря на то, что принцип работы квантового компьютера и квантовые алгоритмы уже известны, внедрение их даже в виде опытных моделей сильно затруднено по ряду причин:

- на данный момент не существует технологии, позволяющей создавать устойчивую систему из достаточного для конкуренции с полупроводниковой вычислительной техники количества кубитов;

- не существует дешевых и надежных способов задания и считывания состояния совокупности кубитов;

- не существует способа копирования кубитов, т.е. т.н. “квантовой памяти”.

Но несмотря на все трудности конструирования квантовых компьютеров некоторые прообразы подобных систем уже существуют. В качестве перспективных систем для квантовых алгоритмов на настоящий момент рассматриваются следующие:

- цепочка ионов в ловушке
- сверхпроводниковые структуры (кольца)
- ядерные спины в органических молекулах
- полупроводники, допированные атомами со спином  $\frac{1}{2}$

### **Материалы для квантового компьютера**

#### *Цепочка атомов или ионов*

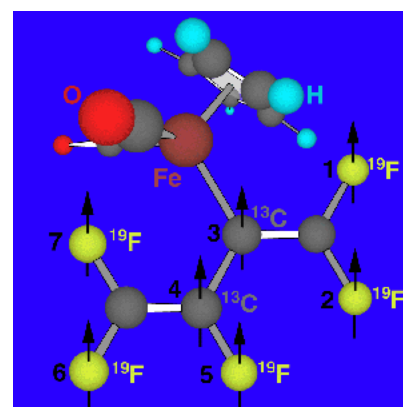
Первый предложенный метод создания системы кубитов основан на образовании в ловушке (ею является переменное электромагнитное поле) цепочки ионов, колеблющихся с одинаковой частотой. Для возбуждения отдельных ионов применяется лазер, который также используют и для считывания состояния системы,. Предполагается, что подобная система применима для квантовых вычислений, однако количество полученных кубитов в такой цепочке и малое время жизни подобной системы на настоящий момент не позволяют проводить каких либо вычислений.

#### *Сверхпроводниковые квантовые компьютеры*

Помимо цепочек ионов в ловушке система кубитов может быть реализована в виде колец из сверхпроводника. Если в сверхпроводящем контуре движение электронов по часовой стрелке принять за 0, а против часовой – за 1, то возможно создание системы, в которой состояние каждого электрона не будет определяемо одним числом (0 или 1), а являться суперпозицией состояний всей системы. Реализация подобного метода затруднена из-за низких температур (ниже температуры перехода системы в сверхпроводящее состояние) и высоких требований к точности измерения (использование SQUID-магнетометров). На настоящий момент создание более чем одного кубита в сверхпроводнике не реализовано.

#### *Ансамблевые ЯМР-квантовые компьютеры*

В качестве квантовых ячеек можно использовать атомы со спином, равным  $1/2$ , находящиеся в одной молекуле. Идея была предложена в 1997 году и в том же году реализована на двухкубитовой системе атомов водорода в молекуле 2,3-



**Рис. 18.** 7-и кубитовый квантовый компьютер

дибромотиофена и трехкубитовой системе в молекуле трихлорэтилена (1 атом водорода и 2 атома изотопно чистого  $^{13}\text{C}$ ). В 2001 г. была создана система, состоящая из 7 кубитов, на основе молекулы (пентафторбутadiен-2-ил)циклопентадиенилдикарбонила железа (5 атомов фтора и 2 атома  $^{13}\text{C}$ , рис. 18), и впервые реализован алгоритм Шора – число 15 было разложено на простые множители 5 и 3. В отличие от рассмотренных ранее, метод не требует применения низких температур или высокого вакуума. Однако, для реализации такого вычисления, помимо высокочистого вещества-носителя квантовых ячеек, требуются достаточно дорогие и громоздкие установки для управления системой за счет эффекта ядерного магнитного резонанса. Кроме того, развитие такого подхода ограничено из-за экспоненциального спада сигнала с увеличением количества квантовых ячеек и, как следствие, невозможности создания системы, содержащей более 30 квантовых ячеек.

#### *Допированные полупроводники*

Более перспективным является применение т.н. твердотельных ЯМР-квантовых компьютеров. Так в 1998 г. в качестве кубитов было предложено использовать слой атомов  $^{31}\text{P}$  (ядерный спин 1/2) в приповерхностном слое полупроводника (бездефектный изотопно-чистый кремний). Атомы фосфора находятся на расстоянии  $\sim 20$  нм друг от друга. На поверхность полупроводника нанесен диэлектрик (диоксид кремния) и затворы двух типов, одни находятся точно над примесным атомом, другие над линией, соединяющей два атома фосфора.

Использование атомов фосфора в качестве квантовых ячеек создает ряд преимуществ по сравнению с другими квантовыми системами:

- большое время декогерентизации (decoherence time,  $10^{18}$  секунд при температуре  $< 0,1$  К),
- кубит может управляться переменным магнитным полем (ЯМР),
- наличие дополнительных затворов между атомами фосфора позволяют как изолировать атомы фосфора друг от друга (однокубитовые операции), так и осуществлять двухкубитовые операции,
- технология изготовления бездефектных кристаллов кремния, слоя изолятора на полупроводнике и затворов освоена на промышленном уровне.

Использование этого метода открывает путь к созданию компьютеров с практически неограниченным количеством кубитов на базе освоенной полупроводниковой технологии, однако система обладает несколькими недостатками: низкие температуры использования, необходимость изотопно чистого кремния и фосфора, равномерное распределение атомов фосфора (на данный момент достигается только при использовании сканирующего туннельного микроскопа) и использование переменного магнитного поля для приведения системы в исходное состояние.

### *Перспективы развития*

Реализация квантовых алгоритмов на практике может значительно изменить представление о вычислительной технике, моделировании таких сложных систем как атомы и молекулы, кодировке и расшифровке сообщений и других сферах применения. Но в силу того, что не все вычисления подлежат ускорению, а создание системы из 400 млн. кубитов (процессор 2003г. содержит 410 млн. транзисторов) не представляется возможным, квантовые компьютеры скорее всего будут использоваться совместно с классическими (интегрированы в них). Кроме того, на данный момент введение системы в исходное состояние, считывание конечного состояния системы и обработка полученных результатов производится с помощью полупроводниковой вычислительной техники, из-за отработанной системы ввода-вывода.

Таким образом, даже при создании квантовых компьютеров на большом количестве кубитов они не в скором времени смогут полностью вытеснить полупроводниковую вычислительную технику, тем более что на данный момент наиболее сложным вычислением, проведенным на квантовом компьютере, является разложение 2-значных чисел по алгоритму Шора.