



Введение

В своей технологической деятельности человечество до настоящего времени использует материалы данные изначально, либо созданные искусственно, но создание их ограничено молекулярным уровнем. Нанотехнологии претендуют на новый уровень создания материалов и устройств, оперируя во многих случаях отдельными атомами. Независимая объединенная комиссия Королевской академии наук Великобритании и Королевской академии инженерных наук предложила следующие определения нанонауки и нанотехнологии. Нанонаука есть изучение явлений и свойств материи на атомном, молекулярном и макромолекулярном уровне в случае, когда эти свойства значительно отличаются от таковых при большем пространственном масштабе. Нанотехнологией является конструирование, создание и применение структур, приборов и систем путем оперирования их формой и размерами на нанометровом уровне.

Изделия нанотехники и, в частности, наноэлектроники находятся на переднем рубеже достижений человечества. Уже сейчас значимость нанонауки как для прикладных задач, так и для фундаментальных исследований выступает на первое место, потеснив позиции космических исследований и исследований структуры материи. В ближайшем будущем предвидится бурное развитие этой области знаний, что предполагает возможность для нее вместе с физикой сложных нелинейных динамических систем и квантовой физикой занять ведущее место в процессе познания мира.

Одна из основных задач нанотехнологии в области электроники состоит в создании больших систем элементов, способных преобразовывать и запоминать информацию. Такими элементами обычно являются участки твердого тела с различным типом проводимости и линиями связи. Однако прогресс наноэлектроники не исключает возможности использования для ее целей органических материалов, сложных биологических молекул, таких, как

протеины и нуклеиновые кислоты, и даже элементов биологических объектов.

Впервые некоторые концепции нанотехнологии были провозглашены Р. Фейнманом в его лекции «Внизу много места» (“There’s many rooms in the bottom”) в 1959 г. Он рассмотрел принципиальную возможность манипулирования материей на атомном уровне, включая исследование и контроль в нанометровом диапазоне. Сам термин «нанотехнология» впервые был применен исследователем из Токийского университета Norio Taniguchi в 1974 г. при рассмотрении возможностей использования конструкционных материалов на нанометровом уровне. В то время основным стимулом разработок в этой области, как отчасти и сегодня, было развитие нанoeлектроники. Отметим, что нанометрового уровня в литографии фирма IBM достигла еще в 1970 г., начав выпуск микросхем с разрешением 40—70 нм. В 1981 г. был создан микроскоп, позволяющий исследовать отдельные атомы, а в 1985 г. была создана технология, позволяющая измерять объекты диаметром в 1 нм. Тем самым сформировались начальные условия для реализации и исследования наноразмерных объектов. Так, уже в 1998 г. был создан транзистор на основе нанотехнологий.

Наибольший интерес в нанометровом диапазоне вызывает его нижняя граница от 100 нм и ниже вплоть до атомного уровня (0,2 нм), поскольку в этом диапазоне свойства веществ могут значительно отличаться от их свойств в макрообразцах. Это связано с двумя обстоятельствами. Во-первых, возрастает роль поверхности и поверхностных эффектов, во-вторых, начинают проявляться различные квантовые эффекты. Квантовые эффекты приводят к значительным изменениям оптических, электрических и магнитных свойств веществ.

Перед нанотехнологией открываются фантастические перспективы во многих областях техники, биологии, медицины. При этом одной из важнейших областей применения нанотехнологий, во многом стимулирующей ее развитие, является электроника (в более широком плане — электроника, оптоэлектроника и компьютерная техника).

Так, в области электроники и оптоэлектроники в ближайшей перспективе рассматривается возможность расширения параметров радиолокационных систем за счет применения фа-

зированных антенных решеток с малошумящими СВЧ-транзисторами на основе наноструктур и волоконно-оптических линий связи с повышенной пропускной способностью с использованием фотоприемников и инжекционных лазеров на структурах с квантовыми точками; совершенствования тепловизионных обзорно-прицельных систем на основе использования матричных фотоприемных устройств, изготовленных на базе нанотехнологий и отличающихся высоким температурным разрешением; создания мощных экономичных инжекционных лазеров на основе наноструктур для накачки твердотельных лазеров, используемых в фемтосекундных системах.

В области компьютерной техники применение нанотехнологий в принципе позволяет конструировать системы, состоящие из тысяч центральных процессоров с параметрами лучше современных, и располагать такие системы на площади менее одного квадратного миллиметра. При этом параметры человеческого мозга будут превышены по числу элементов в 1000 раз, по быстродействию в 10^9 раз, по плотности упаковки в 10^9 раз.

Для увеличения чувствительности, снижения уровня шумов, уменьшения теплового заселения рабочих энергетических уровней в используемых материалах и средах многие из микроэлектронных и наноэлектронных приборов и систем требуют при своей работе криогенного охлаждения. Необходимость охлаждения до низких температур является препятствием в широком практическом использовании таких элементов и приборов на их основе. Однако в наноструктурах столь глубокое охлаждение может быть полезным, так как оно существенно снижает скорость как взаимной диффузии, так и самодиффузии компонентов рабочего вещества. Из-за крайне малых размеров наноэлектронных устройств существует опасность их диффузионной деструкции при изготовлении и эксплуатации. В настоящее время вопросы обеспечения стабильности наноструктур и уменьшения их диффузионной деградации до конца не решены.

Все сказанное обуславливает необходимость подготовки квалифицированных специалистов по наноэлектронике. В то же время создание учебной литературы в этой области наталкивается на определенные трудности, поскольку конкретные технологические приемы, использующиеся при изготовлении изделий наноэлектроники, непрерывно и чрезвычайно быст-

ро развиваются и совершенствуются. Поэтому в данной книге значительная часть материала посвящена физическим основам функционирования наноэлектронных приборов. Конкретные цифры, характеризующие технологию или параметры существующих и разрабатываемых приборов, при этом являются в значительной мере условными и, вероятно, быстро устареют.

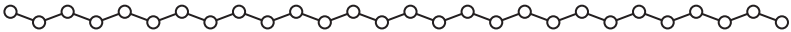
Поскольку существующие программы подготовки студентов не предполагают знания ими квантовой механики, физики твердого тела и электроники в объеме, достаточном для понимания принципов действия многих наноэлектронных приборов, в учебном пособии даются ссылки на соответствующую литературу и излагаются также основные принципы действия полупроводниковых электронных приборов.

Содержание учебного пособия в целом соответствует программе обучения по направлениям 210600 «Нанотехнология», 152200 «Наноинженерия», 210100 «Электроника и наноэлектроника» и специальностям 202000 «Нанотехнологии в электронике» и 073800 «Наноматериалы». Кроме того, материалы пособия могут быть использованы в качестве существенного дополнения, отражающего последние научно-технические достижения в области электроники, при изучении дисциплин «Электроника», «Физические основы микроэлектроники» и смежным с ними курсов для направления подготовки 210000 «Электронная техника, радиотехника и связь», в частности 210300 «Радиотехника».

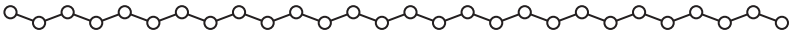
Работа между авторами распределилась следующим образом: главы 1—3 написаны И. М. Агеевым, главы 4—7 написаны Г. Г. Шишкиным, глава 8 написана авторами совместно.

Р а з д е л

1



ФИЗИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ





ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

1.1. Основные положения квантовой механики, используемые в наноэлектронике

Нанотехника и наноэлектроника имеют дело с объектами, характерные размеры которых относятся к нанометровому диапазону. Свойства таких объектов (к ним относятся, в частности атомы, молекулы и другие микрочастицы) описываются квантовой механикой (см. например, [26]). Процессы, происходящие в микромире, почти полностью лежат за пределами чувственных восприятий, и поэтому понятия квантовой теории лишены наглядности, присущей классической физике.

В основе квантовой механики лежит представление о том, что поведение микрообъектов (микрочастиц) описывается *функцией состояния* — волновой функцией, или Ψ -функцией.

Волновая функция зависит от пространственных координат q_i и от времени. Квадрат модуля волновой функции $|\Psi_{q_i}(t)|^2$ пропорционален вероятности обнаружения соответствующих значений q_i в момент времени t при измерении, т. е. при взаимодействии микрообъекта с макроскопическим прибором. Изменение во времени состояния объекта можно определить, решая дифференциальное *волновое уравнение Шредингера* для Ψ -функции или используя операторный метод, предложенный В. Гейзенбергом.

Идею *дуализма*, т. е. сочетания в одном квантовом объекте корпускулярных и волновых свойств, впервые высказал Луи де Бройль, который предположил, что частице с полной энергией E (включающей и релятивистский член — энергию покоя m_0c^2) и импульсом \vec{p} может быть поставлена в соответствие волна,

длина которой λ и частота ω связаны с энергией и импульсом соотношениями

$$E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}, \lambda = h/p, \quad (1.1)$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h — постоянная Планка, \vec{k} — волновой вектор, равный по модулю $\frac{2\pi}{\lambda}$.

Из квантовой теории следует ряд принципов, имеющих основополагающее значение для наноэлектроники. Первый из них — *квантование*. Его сущность состоит в том, что некоторые физические величины, описывающие микрообъект, в определенных условиях принимают только *дискретные значения*. Так, например, квантуется энергия электрона при его движении в области пространства, размер которой сравним с длиной волны де Бройля для этой частицы. Квантование энергии электрона означает, что она может иметь только лишь некоторый дискретный набор значений. Каждому из этих значений сопоставляют энергетический уровень, соответствующий данному стационарному состоянию. Находясь в стационарном состоянии, электрон не излучает фотоны. Излучение происходит только при переходе из одного состояния в другое.

Фундаментальным законом квантовой механики является *принцип неопределенности Гейзенберга*, заключающийся в том, что существуют пары сопряженных величин, характеризующих параметры частиц, которые не могут быть определены с произвольной точностью одновременно. Например, нельзя одновременно измерить положение частицы и ее импульс, проекции момента импульса на две взаимоперпендикулярных оси, а также энергию частицы в возбужденном состоянии и время жизни в этом состоянии. И дело, естественно, не в качестве измерительной аппаратуры, а в принципиальной невозможности таких операций. Математически принцип неопределенности можно выразить в виде неравенств

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad (1.2)$$

где Δx , Δp_x , ΔE , Δt — неопределенность, т. е. интервал значений, координаты, проекции импульса, энергии и времени.

Еще один фундаментальный принцип квантовой механики, а именно *принцип тождественности одинаковых микрочастиц*, в сочетании с наличием у них собственного механического

момента (*спина*), приводит к важным статистическим закономерностям квантовой физики [26]. Это прежде всего принцип запрета Паули, состоящий в том, что взаимодействующие между собой одинаковые *частицы с полуцелым спином — фермионы* (к ним относятся электроны, протоны, нейтроны и др.) — не могут находиться в совершенно одинаковых квантовых состояниях. Например, в атоме может существовать только два электрона с одинаковой энергией и одним и тем же значением момента импульса и его проекции на какое-либо направление. Этих электронов два, поскольку они могут иметь только две различных проекции спина (см. п. 1.2., формула (1.27)).

Таким образом, в соответствии с принципами неопределенности Гейзенберга и запрета Паули в ячейке фазового пространства объемом $\Delta x \Delta p_x \Delta y \Delta p_y \Delta z \Delta p_z = \hbar^3$, где $\Delta x \Delta y \Delta z$ — объем в физическом пространстве, а $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$ — объем в пространстве импульсов, также может находиться не более двух электронов с разными спинами.

Для рассмотрения движения частицы в потенциальном поле, не зависящем от времени, используется *стационарное уравнение Шредингера*, которое имеет вид

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x, y, z)] \psi = 0, \quad (1.3)$$

где m и E — масса и полная энергия частицы, $U(x)$ — потенциальная энергия, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа.

Дифференциальное уравнение (1.3) записано относительно пространственной части волновой функции $\psi(x, y, z)$. Временная ее часть представляет в стационарном случае гармоническую функцию, квадрат модуля которой равен единице:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = e^{-i \omega t}, \quad (1.4)$$

Поскольку для стационарных задач, которые рассматриваются в этой книге, важна только пространственная часть волновой функции, то ее мы и будем рассматривать в дальнейшем. На волновую функцию налагаются очевидные с точки зрения физики условия: она должна быть однозначной и непрерывной вместе со своей первой производной.

Зная волновую функцию, можно найти не только вероятность нахождения частицы в данной точке пространства, но и

средние значения величин, зависящих от координат. Расчетный аппарат квантовой механики дополняется *операторными методами*. *Оператор* в самом общем виде — это правило, по которому одному математическому объекту, в нашем случае — функции, ставится в соответствие другой объект, т. е. другая функция. Примерами операторов могут служить арифметические действия, дифференцирование, интегрирование и др. В квантовой механике различным физическим величинам сопоставляются *линейные самосопряженные (эрмитовы) операторы*.

Известно, что для оператора существуют особые функции ψ_i , которые называются *собственными*. Они отличаются тем, что при действии на них данного оператора \hat{R} функция не меняется по существу, а лишь умножается на некоторое число c_{iR} , которое называется *собственным значением* для этой функции:

$$\hat{R}\psi_i = c_{iR}\psi_i. \quad (1.5)$$

Если собственные функции взять в качестве базиса, то матрица собственных значений оператора в этом базисе будет иметь простой диагональный вид. Существенной особенностью используемых в квантовой механике самосопряженных операторов является то, что их собственные значения суть *действительные числа*.

Физическая интерпретация всего изложенного состоит в следующем. Каждой динамической переменной (физической величине) соответствует оператор. Волновая функция ψ состояния системы может быть разложена по собственным функциям ψ_i этого оператора аналогично тому, как вектор может быть разложен по координатам, причем коэффициенты разложения играют роль координат вектора в пространстве базисных функций. Таким образом, волновая функция содержит в себе возможность нахождения системы в любом состоянии, соответствующем определенной базисной функции. При измерении (взаимодействии с макрообъектом) реализуется определенное состояние системы ψ_i с вероятностью, равной квадрату модуля соответствующего коэффициента разложения, с которой собственная функция оператора ψ_i , соответствующая этому состоянию, входит в разложение волновой функции ψ состояния системы. При этом измеренное значение физической величины, которую представляет этот оператор \hat{R} , равно собственному значению C_{iR} с той же вероятностью.

Важное обстоятельство, на которое следует обратить внимание, состоит в том, что операторы не обязательно подчиняются коммутативному закону. Другими словами, результат действия произведения операторов, которое определяется как последовательное применение операторов к функции, иногда зависит от последовательности применения операторов. Это же, как известно, справедливо и для матриц, с помощью которых можно представлять операторы. Таким образом, если имеются два оператора (или матрицы) \hat{R} и \hat{S} , то $\hat{R}\hat{S}$ не обязательно равно $\hat{S}\hat{R}$.

Если операторы коммутируют, т. е. $\hat{R}\hat{S} - \hat{S}\hat{R} = 0$, то они имеют общий набор собственных функций и переменные, соответствующие этим операторам, можно измерить одновременно. Для некоторых операторов (например, для операторов координаты и импульса) это не выполняется.

Для определения вида оператора какой-либо физической величины используют принцип соответствия. Квантовая механика, являясь более общей теорией, включает в себя классическую механику как предельный случай. При этом все соотношения между динамическими переменными в квантовой механике должны оставаться такими же, как и в классической механике, например, связь операторов кинетической энергии и импульса имеет классический вид:

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (1.6)$$

В соответствии с классическими формулами определяется связь операторов импульса и момента импульса как векторное произведение радиуса-вектора на вектор импульса, т. е. $\vec{l} = [\vec{r} \times \vec{p}]$. Проекция момента импульса на оси имеют также классический вид:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \\ \hat{l}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \\ \hat{l}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Таким образом, можно определить некоторые исходные операторы, а затем по формулам классической механики построить все остальные необходимые операторы.

В качестве исходных выбирают операторы координаты и импульса. Оператор координаты \hat{r} , как и всякий оператор, отве-

чающий независимой переменной, сводится к умножению на эту переменную:

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z. \quad (1.8)$$

Оператор импульса постулируется следующим образом:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.9)$$

Для обоснования такого выбора оператора импульса воспользуемся трехмерным уравнением Шредингера (1.3) для свободной частицы (при $U = 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = E\psi. \quad (1.10)$$

С другой стороны, согласно формуле (1.6) можно также написать

$$\frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \psi = E\psi. \quad (1.11)$$

Отсюда следует, что оператор квадрата импульса имеет вид:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta, \quad (1.12)$$

что согласуется с соотношениями (1.9).

1.2. Момент импульса и спин

При рассмотрении многих разделов наноэлектроники, в частности, посвященных спинтронике и квантовым компьютерам, необходимо использовать понятия момента импульса и спина частиц.

Совокупность операторов $\hat{l} = \{\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z\}$, определяемых соотношениями (1.7), представляет оператор момента импульса. Оператор квадрата модуля момента импульса определяется очевидным выражением

$$|\hat{l}|^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2. \quad (1.13)$$

Операторы проекций момента импульса попарно не коммутируют, т. е. они не могут одновременно иметь определенные значения. В то же время каждый из операторов проекций момента импульса коммутирует с оператором $|\hat{l}|^2$.

[. . .]