

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 7 (108) ✧ 2009

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ПРИКЛАДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Журнал выпускается при научно-методическом руководстве Отделения нанотехнологий
и информационных технологий Российской Академии наук

Журнал включен в перечень научных и научно-технических изданий ВАК России
и в базу данных Российского индекса научного цитирования

Главный редактор
Мальцев П. П.

Зам. гл. редактора
Лучинин В. В.

Редакционный совет:

Аристов В. В.
Асеев А. Л.
Гапонов С. В.
Каляев И. А.
Квардаков В. В.
Климов Д. М.
Ковальчук М. В.
Нарайкин О. С.
Никитов С. А.
Сауров А. Н.
Сигов А. С.
Чаплыгин Ю. А.
Шевченко В. Я.

Редакционная коллегия:

Абрамов И. И.
Андреевский Р. А.
Антонов Б. И.
Арсентьева И. С.
Астахов М. В.
Быков В. А.
Волчихин В. И.
Горнев Е. С.
Градецкий В. Г.
Гурович Б. А.
Захаревич В. Г.
Кальнов В. А.
Карякин А. А.
Колобов Ю. Р.
Кузин А. Ю.
Мокров Е. А.
Норенков И. П.
Панич А. Е.
Панфилов Ю. В.
Петросянец К. О.
Петрунин В. Ф.
Путилов А. В.
Пятышев Е. Н.
Серебряников С. В.
Сухопаров А. И.
Телец В. А.
Тимошенко С. П.
Тодуа П. А.
Шубарев В. А.

Отв. секретарь

Лысенко А. В.

Редакция:

Григорин-Рябова Е. В.
Чугунова А. В.

Учредитель:
Издательство
"Новые технологии"

Издается с 1999 г.

СОДЕРЖАНИЕ

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

Окрепилов В. В. Качество в нанотехнологиях: роль метрологии и стандартизации 2

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Волобуев А. Н., Скворцов А. В. Взаимодействие фотонов высоких энергий со слабо связными электронами на нано- и микроуровнях 7

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. VII. Структуры на квантовых проволоках 14

Пономарев А. Н., Юдович М. Е., Груздев М. В., Юдович В. М. Взаимодействие электрического поля с неметаллическими наночастицами. Часть I. Теоретическая оценка топологического фактора 29

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

Невешкин А. А., Ревзин Б. А., Горин Д. А., Яценко А. М., Климов Б. Н., Кумаков А. В., Кумаков Ю. А. Применение автоматизированной установки на базе характеристографа "Эрбий-7107" для исследования электрофизических свойств МДП-структур, содержащих наноразмерные пленки Ленгмюра—Блоджетт. 34

Обухов И. А. Особенности функционирования квантовых приборов. 38

НОВОСТИ НАНО- И МИКРОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКИ 45

ИНФОРМАЦИЯ

Итоги 5-й конференции "Практические аспекты разработки отечественных СБИС типа "система на кристалле". 52

Система добровольной сертификации "НАНОСЕРТИФИКА" 53

Contents 55

Информация о журнале доступна на сайте журнала:
<http://www.microsystems.ru>. <http://eLIBRARY.ru>

ПОДПИСКА:

- по каталогу Роспечати (индекс 79493);
- по каталогу "Пресса России" (индекс 27849)
- в редакции журнала (тел./факс: (499) 269-55-10)

Адрес для переписки:
e-mail: nmst@novtex.ru

УДК 006.91

В. В. Окрепилов, д-р экон. наук, проф., чл.-корр. РАН, ген. директор ФГУ "Центр испытаний и сертификации — С.-Петербург", зам. председателя Президиума Санкт-Петербургского научного центра РАН,
e-mail: letter@rustest.spb.ru

КАЧЕСТВО В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ: РОЛЬ МЕТРОЛОГИИ И СТАНДАРТИЗАЦИИ

Метрология и стандартизация, являясь важнейшими составляющими системы технического регулирования, должны быть в полной мере задействованы при создании nanoиндустрии. Метрология дает возможность измерять параметры и характеристики процессов и объектов нанотехнологий с необходимой для практики точностью и гарантировать прослеживаемость единиц физических величин вплоть до государственного эталона по каждому виду измерений. Стандартизация позволяет пользоваться общепринятыми терминами и определениями и устанавливать оптимальные требования к объектам nanoиндустрии и методам их испытаний. В статье формулируются проблемы и пути их решения в области стандартизации, оценки соответствия, информационно-технического обеспечения нанотехнологий и нанопроизводства.

Ключевые слова: nanoиндустрия, нанотехнологии, нанопроизводство, метрология, измерения, измерительные потребности, обеспечение единства измерений, поверка, калибровка, стандартизация, подтверждение соответствия.

Бурное развитие nanoиндустрии охватывает сегодня самые разнообразные отрасли промышленности и сферы жизнедеятельности человека (электроника, энергетика, машиностроение, автомобильная и текстильная промышленность, строительство, оборонный комплекс, медицина, экология, сельское хозяйство и т. д.).

Большие объемы ожидаемого производства различных видов товаров, созданных на основе нанотехнологий, заставляют принять экстренные меры по развитию метрологии и стандартизации, которые, несомненно, являются одними из самых непростых проблем наномасштаба.

В России работы по созданию нанотехнологий были начаты еще 50 лет назад. Правда, велись они ограничено, лишь в отдельных академических и отраслевых институтах. Ученые, которые открывают новые явления, объекты, методы, как правило, не думают в

это время о стандартизации своих новинок и стараются не пользоваться эталонными измерительными установками ввиду их сложности и уникальности.

Между тем, чтобы повторить, закрепить новшество, необходимо, во-первых, установить его параметры и характеристики — это задача **стандартизации**; во-вторых, научиться их измерять с требуемой точностью — а это задача **метрологии**.

Особое внимание при работах в сфере нанотехнологий должно уделяться проблеме обеспечения точных измерений.

Метрология дает возможность измерить параметры и характеристики процессов и объектов нанотехнологий с необходимой для практики точностью. Научно-обоснованное обеспечение единства измерений позволяет гарантировать прослеживаемость единиц физических величин вплоть до государственного эталона по каждому виду измерений. Все это обеспечивает воспроизводимость результатов измерений и их повсеместное признание.

В особых условиях малых размеров элементов и структур метрология также должна быть особой. И мы являемся свидетелями развития нанометрологии.

Нанометрология охватывает измерения длины и определение размеров в нанометрическом диапазоне, а также измерение силы, массы, температуры, электрических, физико-химических и иных свойств нанообъектов (см. таблицу).

Физические величины, подлежащие измерению в nanoиндустрии

Физическая величина	Диапазон измерений
Длина, м	$10^{-11} \div 1$
Масса, кг	$10^{-15} \div 10^2$
Время, с	$10^{-16} \div 10^6$
Температура, К	$1 \div 3200$
Давление, Па	$10^{-11} \div 10^3$
Расход, м ³ /с	$10^{-7} \div 10^{17}$
Плотность, кг/м ³	$10^{-1} \div 10^4$
Концентрация, см ⁻³	$10^{10} \div 10^{22}$
Доля примесей, %	$10^{-8} \div 10^{-6}$
Сила тока, А	$10^{-16} \div 10^2$
Напряжение, В	$10^{-11} \div 10^5$
Мощность, Вт	$10^{-17} \div 10^{10}$
Индуктивность, Гн	$10^{-18} \div 10^2$
Емкость, Ф	$10^{-19} \div 1$
Соппротивление, Ом	$10^{-7} \div 10^{17}$
Частота, Гц	$10^{-4} \div 10^{10}$

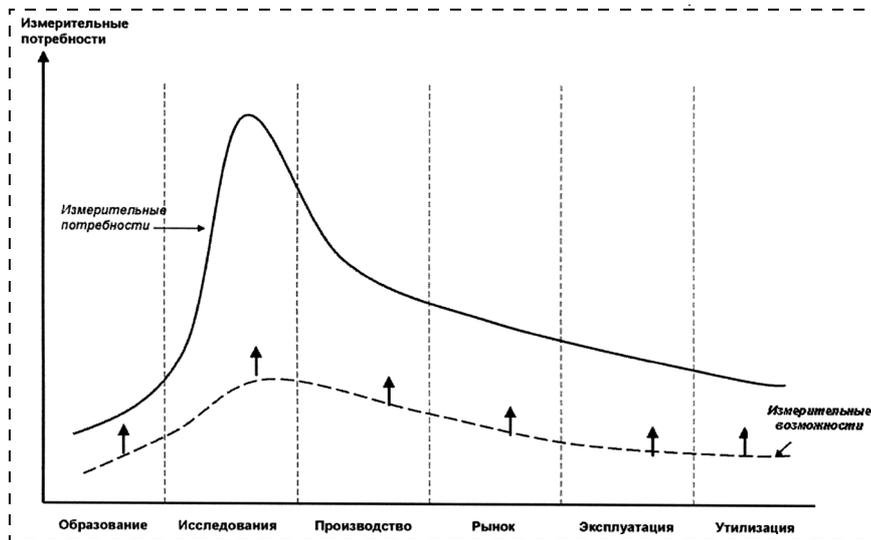


Рис. 1. Измерительные потребности при исследованиях

При этом метрологическое обеспечение работ в наносфере должно отвечать тем измерительным потребностям, которые вытекают из характера и масштаба проводимых работ.

Измерительные потребности — это совокупность средств и методов измерений, обеспечивающих получение достоверных и признаваемых значений необходимых параметров и характеристик продукции на всех этапах жизненного цикла.

Если проследить уровень измерительных потребностей по всему жизненному циклу нанопроизводства (рис. 1), то мы видим, что максимум потребностей падает на этап исследований.

Здесь необходимо измерить свойства, размеры, структуру, состав исследуемого объекта. При этом требуется очень высокая точность и как можно больше измеренных параметров. А время и стоимость измерений не играют роли.

Немаловажно на этапе исследований строго соблюдать условия окружающей среды, чтобы не исказить результаты измерений.

Как видно из графика, измерительные возможности, к сожалению, далеки от измерительных потребностей. Причина такого разрыва — двоякая: с одной стороны, исследователи не заказывают метрологам сверхточных приборов. С другой стороны, не все исследователи умеют работать на метрологическом оборудовании. Они нуждаются в четких методиках измерений.

На этапе промышленного производства нанопроизводства (рис. 2) наибольший объем метрологических работ приходится на стадию передачи продукции от производства к рынку. При этом число изме-

ряемых параметров, а значит и время, и стоимость измерений должны быть минимальными. Измерительные системы и установки должны эффективно работать даже в неблагоприятных условиях производственного процесса (вибрации, загрязненный воздух и т. д.).

Именно об этих особенностях метрологического обеспечения нанотехнологий говорится в отчете прошедшего в июле 2006 г. Европейского форума по нанотехнологиям, в рамках которого, в частности, были сделаны следующие выводы.

- Точный контроль размеров объектов — ключевой вопрос нанотехнологий и науки о нанобъектах. Нужно разработать новые методы измерений и даже усовершенствовать эталон метра.
- Технологии измерений, разработанные для традиционных материалов, во многих случаях не могут быть применимы к наноструктурам. Должны быть созданы специальные методики измерений для наноструктур и наноматериалов.
- Новые физические явления и свойства, возникающие при нанометрических размерах, требуют умения проводить измерения параметров очень малых объектов.
- Наноструктуры приобретают иногда необычные формы (фуллерены, переплетенные нанотрубки, наноструктурные металлы). Это ставит новые задачи перед нанометрологией.
- Наряду со стандартами, которые необходимо разработать, очень важной становится задача создания нового измерительного оборудования для метрологического обеспечения возникающих потребностей.

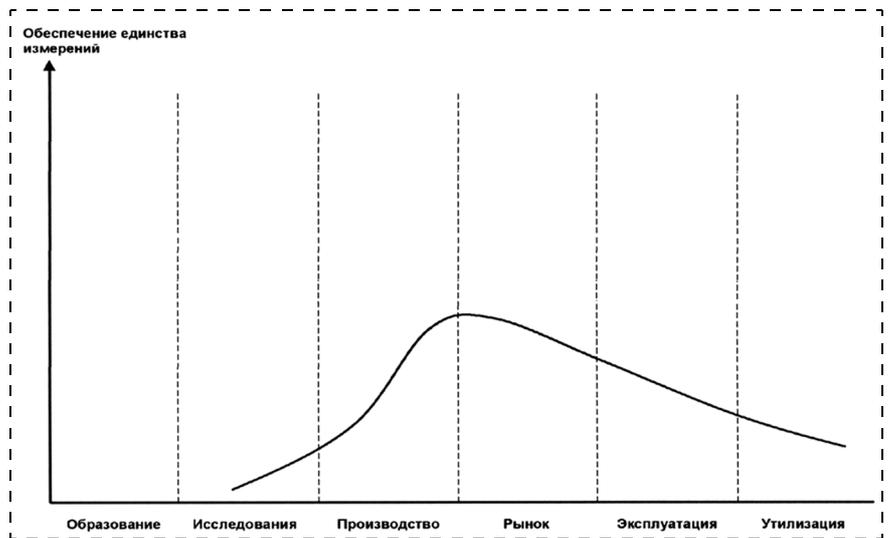


Рис. 2. Измерительные потребности при производстве



Рис. 3. Обеспечение единства измерений в области нанотехнологий

В настоящее время существуют разнообразные методы получения измерительной информации об объектах в нанометровом диапазоне.

Следует отметить, что приборы для измерения физических величин в нанометровом диапазоне существуют достаточно давно. Однако метрологическое обеспечение нанотехнологий разработано и исследовано еще недостаточно.

В метрологическом обеспечении нуждаются (рис. 3) как сам технологический процесс создания новых наноструктур, так и измерения параметров создаваемых наноустройств, а также измерения характеристик материалов со специальными физическими, химическими и биологическими свойствами. Особую задачу представляет съем и обработка измерительной информации с устройств таких малых размеров, обеспечение достоверности и метрологической надежности измерений, выполняемых при этом.

Кроме того, в области нанотехнологий наряду с измерительными инструментами и технологиями необходимы калибровочные меры и обеспечение прослеживаемости (привязки) к эталонам.

Крайне важно также отработать систему своевременной разработки, аттестации и внедрения гармонизированных унифицированных методик выполнения измерений, поверки, калибровки и испытаний высокоточных средств измерений, чтобы они не становились "метрологическими барьерами" на пути внедрения инновационных технологий в сфере наноиндустрии.

Основные проблемы системы обеспечения единства измерений в наноиндустрии заключаются

в определении приоритетных измерительных задач в условиях отсутствия четких требований к точности, а также методик поверки, калибровки и испытаний средств измерений.

Необходимо проанализировать измерительные и калибровочные потребности в сфере нанотехнологий и на этой основе определить пути развития национальной системы измерений.

Особого подхода требует и стандартизация в сфере нанотехнологий. Характеристики наноматериалов и наноизделий, методы их испытаний, система классификации и идентификации существенно отличаются от объектов макромира, что должно быть отражено в стандартах и других нормативных документах.

Немаловажно и то, что деятельность по стандартизации в области нанотехнологий обеспечивает соблюдение принципов технического регулирования, а это сегодня краеугольный камень развития экономики, ее законодательная основа. Без ее соблюдения ни конкурентоспособность, ни существование в условиях глобального рынка не обеспечить.

Для создания рынка наукоемкой продукции в России, с одной стороны, надо защитить его стандартами, а с другой стороны, гармонизируя нормы этих стандартов с международными требованиями, сделать привлекательным для наших потенциальных торговых партнеров. Другими словами, метрология и стандартизация должны помочь нашим ученым в создании конкурентоспособной нанопродукции.

В первую очередь, нужны терминологические стандарты. Новые термины появляются почти каж-



Рис. 4. Иерархия терминов, относящихся к нанобъектам (МС ИСО 27687:2008 "Нанотехнологии — Термины и определения в сфере нанобъектов — Наночастицы, нановолокна и нанопластины")

дый день. И не случайно поэтому первым стандартом ИСО в области нанотехнологий стал стандарт 27687:2008 "Термины и определения в сфере нанобъектов" (рис. 4). В нем дается лишь часть терминов, относящихся к трем видам нанобъектов: наночастица, нановолокно и нанопластина. Остальные терминологические стандарты находятся в разработке.

Хотелось бы подчеркнуть, что основными проблемами стандартизации нанотехнологий являются активизация разработки национальных стандартов и участие России в работе международных организаций по стандартизации.

Наряду с метрологией и стандартизацией в сфере нанотехнологий должно развиваться еще одно направление: оценка и подтверждение соответствия нанопродукции установленным требованиям.

На рис. 5 представлена структура этой системы. Основными ее элементами являются стандартизация, обеспечение единства измерений, испытания, подтверждение соответствия, надзор, системы менеджмента качества, аккредитация предприятий на соответствие международным требованиям. Следует подчеркнуть, что без метрологии и стандартизации невозможна реализация остальных элементов.

Наиболее эффективной формой оценки является подтверждение соответствия, которое, на наш взгляд, выступает ключевой проблемой развития nanoиндустрии, поскольку позволит определить безопасность объектов nanoиндустрии и их соответствие установленным требованиям с учетом степени риска причинения вреда (опасности).

К сожалению, пока не до конца изучены потенциальные опасности создаваемых наноматериалов и применяемых нанотехнологий, а значит, не опреде-



Рис. 5. Состав и структура системы оценки соответствия

лен перечень объектов контроля и контролируемых показателей. Поэтому необходимо определить эти характеристики и создать научно-технический и нормативно-методический комплекс системы оценки соответствия нанотехнологий и продукции наноиндустрии.

Необходимым условием для функционирования системы оценки соответствия является современная система информационно-технического обеспечения. Она должна включать в себя информационные и документальные массивы в виде официальных публикаций и в электронно-цифровой форме, справочно-поисковый аппарат и соответствующие информационные технологии. Естественно, что подобного фонда у нас пока нет. Его необходимо создавать.

Как видно из перечисленных проблем, предстоит большая работа в области метрологии и стандартизации нанотехнологий. Этому направлению большое внимание уделено в Федеральной целевой программе "Развитие инфраструктуры наноиндустрии в Российской Федерации на 2008—2010 годы".

На основе этой Программы во всех федеральных округах создаются отделения Федерального центра метрологического обеспечения и оценки соответствия нанотехнологий и продукции наноиндустрии.

При необходимости аналогичные организации могут создаваться и в других местах функционирования крупных объектов наноиндустрии.

Наряду с региональными подразделениями инфраструктуры наноиндустрии будут действовать отраслевые организации на базе головных научных организаций по основным направлениям нанотехнологий.

В Северо-Западном федеральном округе (СЗФО), например, базой для создания отделения стало ФГУ "Центр испытаний и сертификации — С.-Петербург" (ФГУ "Тест — С.-Петербург").

В этих работах участвуют более 20 научных, образовательных и промышленных организаций самого различного ведомственного подчинения, численности и формы собственности. Это прежде всего академические институты, ведущие университеты, отраслевые НИИ. Среди них: Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, ВНИИМ им. Д. И. Менделеева, Политехнический университет, ЦНИИ КМ "Прометей" и др.

Среди основных направлений деятельности Северо-Западного отделения Центра можно перечислить следующие:

- формирование структуры и разработка комплекса нормативно-методических и организационно-правовых документов, регламентирующих деятельность Центра в СЗФО;
- разработка механизма координации работ по развитию метрологического обеспечения, стандартизации и оценки соответствия с учетом безопасности применения новых нанотехнологий и наноматериалов;
- формирование системы управления и координации работ Центра в СЗФО;
- необходимое инструментальное дооснащение Центра в СЗФО, организация переподготовки и повышения квалификации кадров;
- аккредитация органов подтверждения соответствия, испытательных и метрологических лабораторий и служб и обеспечение международного признания калибровочных возможностей Центра в СЗФО;
- гарантия обеспечения потребностей предприятий нанотехнологической сети в услугах по поверке и калибровке используемых средств измерений, стандартах, а также по подтверждению соответствия продукции наноиндустрии требованиям безопасности и качества.

Отделение Центра должно вооружить всех участников программы нанотехнологических работ методиками измерений, организационными и процедурными документами в области метрологии и подтверждения соответствия.

Предусматривается также оснащение отделения Центра уникальным метрологическим оборудованием в целях проведения поверочных и калибровочных работ, а также его коллективного использования участниками работы.

Создание элементов инфраструктуры будет содействовать сокращению сроков коммерческой реализации инновационных проектов, повышению их эффективности, обеспечению качества и конкурентоспособности продукции наноиндустрии.

Список литературы

1. **Окрепилов В. В.** Стандартизация и метрология в нанотехнологиях. СПб.: Наука, 2008. 260 с.
2. **Окрепилов В. В.** Словарь терминов и определений по стандартизации и метрологии в области нанотехнологий. СПб.: Наука, 2008. 210 с.

УДК 535.215.1

А. Н. Волобуев, д-р техн. наук, проф., зав. каф., Самарский государственный медицинский университет;

А. В. Скворцов, канд. техн. наук, проф., Московский государственный открытый университет

E-mail: volobuev@samaramail.ru

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФОТОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ СО СЛАБО СВЯЗНЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ НА НАНО- И МИКРОУРОВНЯХ

Исследуются различные варианты взаимодействия фотонов высоких энергий со свободными электронами в веществе. Показано, что среди этих вариантов в веществе могут наблюдаться: поглощение фотона электроном, когерентное и некогерентное рассеяние фотонов, остановка электрона после взаимодействия с фотоном. Найдена зависимость изменения длины волны фотона после взаимодействия с электроном от параметров вещества и скорости движения электрона.

Ключевые слова: фотоны высоких энергий, когерентное и некогерентное рассеяние.

Введение

Процессы взаимодействия фотонов и электронов в веществе, технологически реализуемые в целях прямого преобразования электромагнитного излучения в электрическую энергию, имеют важнейшее значение. Техническая (промышленная) физика имеет дело с излучением высоких энергий, например, в атомных реакторах и при использовании радиоактивных изотопов. Задача конструирования и технологической реализации подобных источников электрической энергии весьма сложна и требует весьма тщательного подхода с использованием теоретических квантовых и релятивистских представлений. Жесткое электромагнитное излучение имеет фотоны, обладающие значительной энергией, и их взаимодействие с электронами различных веществ, включая органические, по-разному проявляется на нано-, микро- и даже на макроуровнях.

Одним из результатов такого взаимодействия, например, является некогерентное рассеяние. Эффект Комптона, или некогерентное рассеяние рентгеновских лучей на электронах, слабо связанных с ядром, при облучении поверхности парафина, которое впервые наблюдал А. Х. Комптон, является хорошо

изученной задачей [1]. В спектре рассеянного излучения он наблюдал более низкую частоту, чем частота падающего излучения. Эффект Комптона представляет собой яркий пример проявления квантовой природы света, так как отсутствует классический аналог этого явления, который можно было бы описать уравнениями Максвелла.

Существуют попытки описать эффект Комптона на основе волнового эффекта Доплера [2]. При этом электрон сначала рассматривается как подвижный приемник волны, а затем как подвижный источник волны. Однако еще сам Комптон критиковал подобные попытки [3]. Отметим, что рассеяние на неподвижном электроне, что в строгом математическом смысле и принято считать эффектом Комптона, вообще никак не вписывается в данную модель.

Довольно подробный анализ эффекта Комптона имеется в работе [4]. Но этот анализ направлен на исследование эффективных сечений взаимодействия электронов и фотонов. Кроме того, анализ эффекта Комптона осуществляется в предположении отсутствия воздействия окружающего вещества на процесс.

Целью настоящего исследования является исследование исходов при взаимодействии фотона и слабо связанного (далее свободного) электрона в веществе, а также влияние характеристик вещества на рассматриваемые процессы. Исследование некогерентного сдвига частоты в конечном итоге определяет направление (диаграмму распределения) импульсов движения электронов отдачи [5].

Законы взаимодействия фотона со свободным электроном

Рассмотрим взаимодействие движущегося электрона с фотоном (рис. 1). Во всех дальнейших преобразованиях полагаем, что система отсчета связана

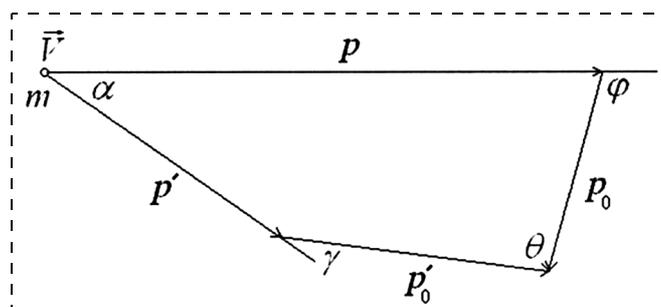


Рис. 1. Направление векторов импульсов частиц при взаимодействии фотона со свободным электроном

с неподвижными узлами кристаллической решетки вещества.

Закон сохранения энергии при взаимодействии фотона с движущимся электроном запишем в виде

$$E + h\nu = E' + h\nu', \quad (1)$$

где E и E' — энергия электрона до и после взаимодействия с фотоном; h — постоянная Планка; ν и ν' — частота фотона до и после столкновения с электроном.

Импульс фотона до взаимодействия с электроном

$$p_0 = h\nu/V_\Phi = nh\nu/c,$$

где V_Φ — скорость фотона в веществе; $n = c/V_\Phi$ — абсолютный показатель преломления вещества; c — скорость света в вакууме.

Следовательно, формула (1) переписывается в виде

$$E + p_0c/n = E' + p'_0c/n, \quad (2)$$

где $p'_0 = nh\nu'/c$ — импульс фотона после взаимодействия с электроном.

Закон сохранения импульса в векторной форме до и после взаимодействия (рис. 1) имеет вид

$$\mathbf{p} + \mathbf{p}_0 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_0. \quad (3)$$

Преобразуем (3) в скалярную форму:

$$p_0^2 + p_0'^2 - 2p_0p_0'\cos\theta = p^2 + p'^2 - 2pp'\cos\alpha, \quad (4)$$

где α — угол между направлениями импульса электрона до и после взаимодействия с фотоном; θ — угол между импульсами падающего и рассеянного фотонов.

Используя связь между энергией и скоростью электрона $E = mc^2 = pc^2/V$, где $p = mV$, величины m и V — масса и скорость электрона до столкновения, преобразуем уравнение (1) к виду

$$pc/V + p_0/n = p'c/V' + p'_0/n. \quad (5)$$

В формуле (5) $E' = p'c^2/V'$, а V' — скорость электрона после столкновения с фотоном.

Исключим из (4) и (5) величину p' . Находя из (5) величину p' и подставляя ее в (4), получаем:

$$\begin{aligned} p_0^2 + p_0'^2 - 2p_0p_0'\cos\theta &= \\ &= p^2 + [V'/c(pc/V + p_0/n - p'_0/n)]^2 - \\ &- 2pV'/c(pc/V + p_0/n - p'_0/n)\cos\alpha. \end{aligned} \quad (6)$$

Исключим из (6) скорость электрона V' после столкновения с фотоном. По определению импульса частицы имеем:

$$p' = m_0V'/\sqrt{1 - V'^2/c^2}, \quad (7)$$

где m_0 — масса покоя электрона.

Подставляя (7) в (5), находим

$$m_0c/\sqrt{1 - V'^2/c^2} = pc/V + p_0/n - p'_0/n. \quad (8)$$

Решая (8) относительно V' , получаем

$$V'/c = \sqrt{1 - (m_0c/(pc/V + p_0/n - p'_0/n))^2}. \quad (9)$$

Подставляя (9) в (6), получаем:

$$\begin{aligned} p_0^2 &= p_0'^2 - 2p_0p_0'\cos\theta = p^2 + \\ &+ (pc/V + p_0/n - p'_0/n)^2 - (m_0c)^2 - \\ &- 2p\left(\sqrt{(pc/V + p_0/n - p'_0/n)^2 - (m_0c)^2}\right)\cos\alpha. \end{aligned} \quad (10)$$

Закон сохранения импульса (3) в скалярной форме можно записать иначе, нежели (4):

$$\begin{aligned} p^2 + p_0^2 - 2pp_0\cos(180^\circ - \varphi) &= \\ &= p'^2 + p_0'^2 - 2p'p_0'\cos(180^\circ - \gamma), \end{aligned} \quad (11)$$

или

$$p^2 + p_0^2 + 2pp_0\cos\varphi = p'^2 + p_0'^2 + 2p'p_0'\cos\gamma, \quad (12)$$

где φ — угол между направлениями движения электрона и фотона до столкновения; γ — угол между направлениями электрона и фотона после столкновения.

Как и в предыдущем случае, подставляя величину p' из (5) в (12), получаем

$$\begin{aligned} p^2 + p_0^2 + 2pp_0\cos\varphi &= (V'/c)^2(pc/V + p_0/n - p'_0/n)^2 + \\ &+ p_0'^2 + 2p'_0(V'/c)(pc/V + p_0/n - p'_0/n)\cos\gamma. \end{aligned} \quad (13)$$

Далее, используя (9), перепишем (13) в виде

$$\begin{aligned} p^2 + p_0^2 + 2pp_0\cos\varphi &= (pc/V + p_0/n - p'_0/n)^2 - \\ &- (m_0c)^2 + p_0'^2 + 2p'_0 \times \\ &\times \left(\sqrt{(pc/V + p_0/n - p'_0/n)^2 - (m_0c)^2}\right)\cos\gamma. \end{aligned} \quad (14)$$

Рассмотрим некоторые частные случаи преобразования (10) и (14), которые не являются чрезмерно громоздкими и позволяют достаточно очевидно провести анализ результатов.

Поглощение фотона движущимся свободным электроном

Предположим, что фотон, падающий на движущийся свободный электрон, полностью поглощается. При этом должно выполняться условие $p'_0 = 0$. Из (14) находим:

$$p^2 + p_0^2 + 2pp_0 \cos \varphi = (pc/V + p_0/n)^2 - (m_0c)^2. \quad (15)$$

Проводя преобразования, получаем

$$\begin{aligned} p^2[1 - (c/V)^2] + p_0^2(1 - 1/n^2) = \\ = 2pp_0(c/nV) - \cos \varphi - (m_0c)^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Используя соотношение $p = m_0V/\sqrt{1 - (V/c)^2}$, имеем:

$$\begin{aligned} (m_0V/\sqrt{1 - (V/c)^2})^2 [1 - (c/V)^2] + \\ + p_0^2(1 - 1/n^2) = 2pp_0(c/nV) - \cos \varphi - (m_0c)^2. \end{aligned} \quad (17)$$

Несложно видеть, что первое слагаемое в левой части (17) равно $-(m_0c)^2$. Следовательно,

$$\cos \varphi = \frac{c}{nV} - \frac{p_0}{2p} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right). \quad (18)$$

Полученное выражение отличается от формулы для расчета угла вылета фотона, излученного равномерно движущимся в среде электроном, в эффекте Вавилова—Черенкова [6] лишь знаком минус в правой части (18). Это связано с противоположным направлением импульса фотона p_0 в рассматриваемой задаче по сравнению с эффектом Вавилова—Черенкова.

Из формулы (18) следует, что в вакууме, т. е. при $n = 1$, свободный электрон не может поглотить фотон, так как $\cos \varphi > 1$. Но в веществе при выполнении условия

$$c/(nV) - p_0/2p(1 - 1/n^2) \leq 1 \quad (19)$$

такой процесс возможен.

Рассмотрим более подробно условие поглощения фотона электроном. Преобразуем:

$$\frac{p_0}{p} = \frac{nh\nu}{mVc} \approx \frac{nh\nu}{m_0Vc} = \frac{n\Lambda\nu}{V} = \frac{n\Lambda c}{Vn\lambda} = \frac{\Lambda}{\lambda} \frac{c}{V}, \quad (20)$$

где величина $\Lambda = h/m_0c = 0,002426$ нм — комптоновская длина волны электрона. Принято также, что скорость электрона значительно меньше скорости света в вакууме, так что $m \approx m_0$. Следовательно, формула (19) принимает вид

$$(\Lambda/\lambda)(1 - 1/n^2) \geq 2/n. \quad (21)$$

Для $0 < n \leq 1$ неравенства (19) и (21) не выполняются. Если показатель преломления $n > 1$, получаем

$$\lambda \leq (\Lambda/2)(n - 1/n). \quad (22)$$

Формула (22) показывает, что поглощение фотона свободным электроном, движущимся в веществе с показателем преломления $n > 1$, возможно, по-видимому, только в области рентгеновского излучения. Причем, чем больше показатель преломления, тем большую длину волны может поглотить электрон.

Для ряда веществ, приведенных в [8], показатель преломления в области рентгеновского излучения меньше единицы, причем он очень близок к единице. Вакуум для рентгеновского излучения является по сравнению с этими веществами оптически более плотной средой. Для них поглощение фотонов электроном в соответствии с (22) невозможно. Однако нет физических оснований полностью отрицать существование веществ с показателем преломления больше единицы в области рентгеновского излучения. Свободные электроны в таких веществах могли бы поглощать кванты рентгеновского излучения.

Рассеяние фотона на свободном электроне

Когерентное рассеяние. Когерентное рассеяние фотона на движущемся свободном электроне возникает, если соблюдается условие $p'_0 = p_0$. Формула (5) преобразуется к виду $p = p'$, т. е. электрон изменяет только направление своего движения. В этом случае из уравнения (4) следует

$$p_0 \sin(\theta/2) = p \sin(\alpha/2). \quad (23)$$

Уравнение (12) приводит к условию

$$\cos \varphi = \cos \gamma. \quad (24)$$

Условие (24) показывает, что при когерентном рассеянии $\varphi = \gamma$. Данное условие фактически является законом отражения фотона, аналогичным закону отражения света от зеркальной границы раздела сред.

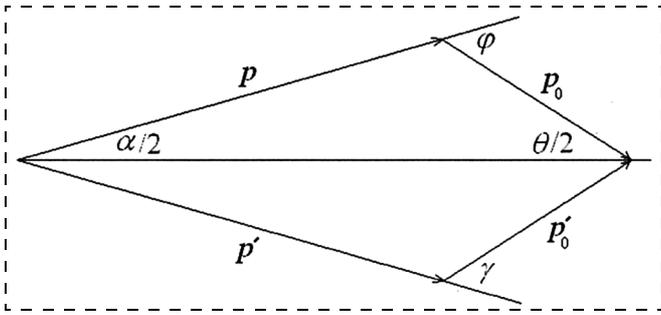


Рис. 2. Направление векторов импульсов частиц при когерентном рассеянии фотона на свободном электроне

Формулы (23) и (24) также показывают, что при когерентном рассеянии четырехугольник импульсов на рис. 1 становится симметричным (рис. 2).

Эффект Комптона. Параметры эффекта Комптона находятся при условии, что электрон неподвижен [6],

$$\text{т. е. } p = 0, V = 0, pc/V = m_0c/\sqrt{1 - V^2/c^2} = m_0c.$$

В этом случае формула (10) принимает вид

$$\begin{aligned} p_0^2 + p_0'^2 - 2p_0p_0'\cos\theta = \\ = (m_0c + p_0/n - p_0'/n)^2 - (m_0c)^2. \end{aligned} \quad (25)$$

Проводя дальнейшие преобразования (25), находим:

$$\begin{aligned} p_0 - p_0' = n/(2m_0c)[p_0^2 + p_0'^2](1 - 1/n^2) + \\ + 2p_0p_0'(1/n^2 - \cos\theta)]. \end{aligned} \quad (26)$$

Прибавляя и вычитая единицу в скобках последнего слагаемого (26), получаем:

$$\begin{aligned} p_0 - p_0' = n/(2m_0c)(p_0 - p_0')2(1 - 1/n^2) + \\ + np_0p_0'/(m_0c)(1 - \cos\theta). \end{aligned} \quad (27)$$

Обозначим разность импульсов падающего и рассеянного на электроне фотонов в вакууме [7]

$$\Delta p_{\text{вак}} = p_0p_0'/(m_0c)(1 - \cos\theta). \quad (28)$$

Таким образом, формулу (27) можно записать в виде

$$\Delta p_0 = n/(2m_0c)\Delta p_0^2(1 - 1/n^2) + n\Delta p_{\text{вак}}, \quad (29)$$

где $\Delta p_0 = p_0 - p_0'$ — разность импульсов падающего и рассеянного на электроне фотонов в веществе.

Введем безразмерные разности импульсов фотонов: $\eta = \Delta p_0/(m_0c) = \Lambda\Delta\nu_0/c$ — в веществе и $\eta_{\text{вак}} = \Delta p_{\text{вак}}/(m_0c) = \Lambda\Delta\nu_{\text{вак}}/c$ — в вакууме. Величины $\Delta\nu_0$ и $\Delta\nu_{\text{вак}}$ — изменение частоты при рассеянии фотона соответственно в веществе и в вакууме.

В новых обозначениях уравнение (29) можно переписать:

$$n\eta^2/2(1 - 1/n^2) - \eta + m\eta_{\text{вак}} = 0. \quad (30)$$

Решая квадратное уравнение (30), находим:

$$\eta = n/(n^2 - 1) \left[1 - \sqrt{1 - 2(n^2 - 1)\eta_{\text{вак}}} \right]. \quad (31)$$

Знак плюс перед корнем неприемлем, так как в этом случае разности импульсов фотонов в веществе и в вакууме имеют разную направленность изменения. Как будет видно из дальнейшего, использовать в (31) разложение корня в виде $\sqrt{1-x} \approx 1 - x/2$ не информативно для анализа влияния характеристик вещества на некогерентное рассеяние фотона.

Найдем в явном виде изменение длины волны фотонов при их некогерентном рассеянии. Преобразуем величины:

$$\begin{aligned} \eta = \frac{\Lambda\Delta\nu_0}{c} \approx -\frac{\Lambda}{c} d\nu_0 = -\frac{\Lambda}{c} d\left(\frac{V_{\Phi}}{\lambda}\right) = \\ = -\frac{\Lambda}{n} d\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{\Lambda}{n\lambda^2} d\lambda \approx \frac{\Lambda}{n\lambda^2} \Delta\lambda; \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \eta_{\text{вак}} = \frac{\Lambda\Delta\nu_{\text{вак}}}{c} \approx -\frac{\Lambda}{c} d\nu_{\text{вак}} = -\frac{\Lambda}{c} d\left(\frac{c}{\lambda_{\text{вак}}}\right) = \\ = \frac{\Lambda}{\lambda_{\text{вак}}^2} d\lambda_{\text{вак}} \approx \frac{\Lambda}{\lambda_{\text{вак}}^2} \Delta\lambda_{\text{вак}}, \end{aligned} \quad (33)$$

где λ и $\lambda_{\text{вак}}$ — длины волн при рассеянии фотонов на электронах в веществе и в вакууме. Знаки минус связаны с тем, что величины $\Delta\nu_0 = \nu - \nu'$ и $\Delta\nu_{\text{вак}} = \nu_{\text{вак}} - \nu'_{\text{вак}}$ приняты положительными. Кроме того, обозначено $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda \approx d\lambda$ и $\Delta\lambda_{\text{вак}} = \lambda'_{\text{вак}} - \lambda_{\text{вак}} \approx d\lambda_{\text{вак}}$, где параметры со штрихом соответствуют длинам волн фотонов после взаимодействия с электроном.

Используя определение показателя преломления в виде $n = \lambda_{\text{вак}}/\lambda$ [8], преобразуем (33) к виду

$$\eta_{\text{вак}} \approx \Lambda/(n^2\lambda)\Delta\lambda_{\text{вак}}. \quad (34)$$

Подставляя (32) и (34) в (31), находим

$$\Delta\lambda = \frac{n^2}{n^2 - 1} \frac{\lambda^2}{\Lambda} \left[1 - \sqrt{1 - 2\frac{(n^2 - 1)\Lambda}{n^2} \frac{\Delta\lambda_{\text{вак}}}{\lambda^2}} \right]. \quad (35)$$

В разложении корня в формуле (35) до первого порядка имеем $\Delta\lambda = \Delta\lambda_{\text{вак}}$, поэтому необходимо де-

лать разложение до второго порядка малости $\sqrt{1-x} \approx 1 - \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2$. В результате найдем:

$$\Delta\lambda \approx \Delta\lambda_{\text{вак}} + \frac{1}{2} \left(\frac{n^2-1}{n^2} \right) \frac{\Lambda}{\lambda^2} \Delta\lambda_{\text{вак}}^2, \quad (36)$$

где $\Delta\lambda_{\text{вак}} = \Lambda(1 - \cos\theta)$ [1].

Таким образом, во втором порядке разложения (35) изменение длины волны при некогерентном рассеянии зависит от самой длины волны.

Отметим, что в рентгеновской области спектра излучения показатель преломления $n < 1$. Поэтому в соответствии с (36) $\Delta\lambda < \Delta\lambda_{\text{вак}}$.

Введем, следуя [8], единичный декремент показателя преломления $\delta = 1 - n$. Тогда формула (36) преобразуется к виду

$$\Delta\lambda \approx \Delta\lambda_{\text{вак}} - \frac{1}{2} \frac{\delta}{\lambda^2} \left(\frac{n+1}{n^2} \right) \Lambda \Delta\lambda_{\text{вак}}^2. \quad (37)$$

Показатель преломления веществ в рентгеновском диапазоне близок к единице [8], поэтому формулу (37) можно переписать следующим образом:

$$\frac{\Delta\lambda_{\text{вак}} - \Delta\lambda}{\Delta\lambda_{\text{вак}}} = \frac{\delta}{\lambda^2} \Lambda \Delta\lambda_{\text{вак}}. \quad (38)$$

Формула (38) показывает, что в рентгеновском диапазоне влияние вещества на параметры некогерентного рассеяния очень незначительно и при практических расчетах можно пользоваться классической формулой Комптона $\Delta\lambda \approx \Delta\lambda_{\text{вак}} = \Lambda(1 - \cos\theta)$. Отсутствие в классической формуле Комптона параметров вещества определяется тем, что в разложении (35) эти параметры участвуют только во втором порядке малости.

Исходя из классической теории дисперсии Лоренца [8] получаем для рентгеновского диапазона зависимость

$$\frac{\delta}{\lambda^2} = 2,7 \cdot 10^{11} \frac{\rho Z}{A} [\text{м}^{-2}],$$

где ρ — плотность вещества в кг/м^3 ; Z — зарядовое число; A — массовое число. При $\Lambda = 2,426 \cdot 10^{-12}$ м находим

$$\varepsilon = \frac{\Delta\lambda_{\text{вак}} - \Delta\lambda}{\Delta\lambda_{\text{вак}}} = 0,655 \frac{\rho Z}{A} \Delta\lambda_{\text{вак}}. \quad (39)$$

Относительное изменение сдвига длины волны ε в веществе по сравнению с вакуумом при некоге-

рентном рассеянии в рентгеновском диапазоне спектра электромагнитного излучения пропорционально плотности вещества, его зарядовому числу и обратно пропорционально атомной массе вещества. Оно также линейно зависит от комптоновского сдвига длины волны в вакууме.

Остановка свободного электрона после взаимодействия с фотоном

Найдем условия, при которых после взаимодействия с фотоном свободный электрон в веществе остановится, т. е. $p' = 0$.

В этом случае уравнение (5) приобретает вид

$$pc/V + p_0/n = m_0c + p'_0/n. \quad (40)$$

Из уравнения (40) находим:

$$p = (nm_0c - \Delta p_0)V/(nc), \quad (41)$$

где, как и прежде, $\Delta p_0 = p_0 - p'_0$.

Формулы (4) и (12) изменяются

$$p_0^2 + p_0'^2 - 2p_0p_0'\cos\theta = p^2; \quad (42)$$

$$p^2 + p_0^2 + 2pp_0\cos\varphi = p_0'^2. \quad (43)$$

Используя равенство $p'_0 = p_0 - \Delta p_0$, уравнение (43) можно преобразовать к виду

$$p^2 + \Delta p_0(2p_0 - \Delta p_0) + 2p_0\cos\varphi = 0. \quad (44)$$

Решая совместно (42) и (43), находим

$$p_0 + \cos\varphi - p'_0\cos\theta = 0, \quad (45)$$

что эквивалентно:

$$p_0(1 - \cos\theta) + p\cos\varphi + \Delta p_0\cos\theta = 0. \quad (46)$$

Определяя из (46) величину p_0 и подставляя ее в (44), получаем

$$p^2 - \Delta p_0^2 - \frac{2p^2\cos^2\varphi}{(1 - \cos\theta)} - \Delta p_0 \frac{2p\cos\theta\cos\varphi}{(1 - \cos\theta)} - \Delta p_0 \frac{2p\cos\varphi}{(1 - \cos\theta)} - \Delta p_0^2 \frac{2\cos\theta}{(1 - \cos\theta)} = 0. \quad (47)$$

Преобразовывая (47), находим:

$$\Delta p_0^2 - 2\Delta p_0 p \cos\varphi - p^2 \left(1 - \frac{2\cos^2\varphi}{(1 - \cos\theta)} \right) \frac{(1 - \cos\theta)}{(1 + \cos\theta)} = 0. \quad (48)$$

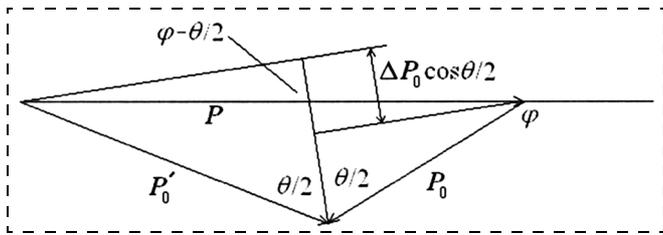


Рис. 3. Геометрическая интерпретация взаимодействия фотона с останавливающимся электроном

Решая квадратное уравнение (48), получаем

$$\frac{\Delta p_0}{p} = \cos \varphi + \sqrt{(\cos \varphi)^2 + \frac{(1 - \cos \theta)}{(1 + \cos \theta)} \left(1 - \frac{2 \cos^2 \varphi}{1 - \cos \theta}\right)}. \quad (49)$$

Как будет показано ниже, перед корнем нужно брать знак плюс.

После несложных преобразований формулы (49) получаем

$$\Delta p_0/p = \cos(\varphi - \theta/2)/\cos(\theta/2). \quad (50)$$

Формула (50) показывает, что при лобовом столкновении фотона и движущегося электрона, т. е. при $\varphi = 180^\circ$, в случае, если электрон после взаимодействия останавливается, направление рассеянного фотона равновероятно во все стороны.

Знак плюс перед корнем в формуле (49) связан с геометрическим истолкованием формулы (50) (рис. 3).

Отметим, что в случае, если электрон после взаимодействия с фотоном не останавливается, формула (50) в соответствии с аналогичным несложным геометрическим анализом (см. рис. 1) имеет более общий вид:

$$|\Delta p_0 \cos(\theta/2)| = |p' \cos(\gamma - \theta/2) - p \cos(\varphi - \theta/2)|. \quad (51)$$

При использовании (41) формула (50) преобразуется к виду

$$\Delta p_0 = m_0 V / [1 + V \cos(\varphi - \theta/2) / (nc \cos(\theta/2))] \times \cos(\varphi - \theta/2) / \cos(\theta/2). \quad (52)$$

Аналогично (32), перейдем от изменения импульса фотонов Δp_0 к сдвигу длин волн:

$$\frac{\Delta p_0}{m_0 c} = \frac{\Lambda \Delta \nu_0}{c} \approx -\frac{\Lambda}{c} d\nu_0 = \frac{\Lambda}{n\lambda^2} \Delta \lambda. \quad (53)$$

Следовательно, из (52) можно найти:

$$\Delta \lambda = \frac{n\lambda^2 \Delta p_0}{\Lambda m_0 c} = \frac{\lambda^2 \cos(\varphi - \theta/2)}{\Lambda \cos(\theta/2)} \left(\frac{nV}{c}\right) / \left[1 + \frac{\cos(\varphi - \theta/2) V}{\cos(\theta/2) nc}\right]. \quad (54)$$

Формула (54) является отражением частного случая некогерентного рассеяния, когда электрон, на котором происходит рассеяние, после взаимодействия с фотоном останавливается. Энергия движения электрона передается рассеянному фотону, поэтому его частота увеличивается, а длина волны уменьшается на величину $\Delta \lambda$.

Так как рассматривается случай, когда электрон останавливается, то угол $90^\circ < \varphi < 270^\circ$ (рис. 3). Среднее значение угла φ имеет место в случае лобового столкновения фотона рентгеновского излучения ($n \approx 1$) и электрона, поэтому в дальнейшем ограничимся этим случаем. При $\varphi = 180^\circ$ имеем:

$$\Delta \lambda = -\frac{\lambda^2 V}{\Lambda c} / \left(1 - \frac{V}{c}\right). \quad (55)$$

Знак минус указывает на уменьшение длины волны после столкновения фотона с останавливающимся электроном.

Отметим, что формула (55) действительно может натолкнуть на идею описать эффект Комптона доплеровским сдвигом длины волны [2]. Однако зависимость сдвига длины волны от угла θ в формуле (54) отличается от таковой в [2], которая, исходя из эффекта Доплера, получена в виде $\Delta \lambda \sim (1 - \cos \theta)$.

Изменение сдвига длин волн за счет движения электронов при некогерентном рассеянии с учетом (55) определяется формулой

$$\delta \lambda \approx \Delta \lambda_{\text{вак}} - \frac{\lambda^2 \left(\frac{V}{c}\right)}{\Lambda \left(1 - \frac{V}{c}\right)} = \Lambda \left[1 - \cos \theta - \left(\frac{\lambda}{\Lambda}\right)^2 \left(\frac{V}{c}\right) / \left(1 - \frac{V}{c}\right)\right]. \quad (56)$$

На рис. 4 показан график зависимости смещения $\Delta \lambda$ некогерентной линии рассеянного излучения от угла θ [8]. Показаны также экспериментальные точки, полученные для углерода при длине волны излучения $\lambda = 0,71 \cdot 10^{-11}$ м. Из анализа графиков следует, что при угле θ , близком к 180° , наблюдается довольно большое уменьшение смещения $\Delta \lambda$. Это уменьшение может быть объяснено только движением электрона, так как формула (37) не может описать такое большое уменьшение $\Delta \lambda$. Замедление движения электрона при взаимодействии с фотоном при-

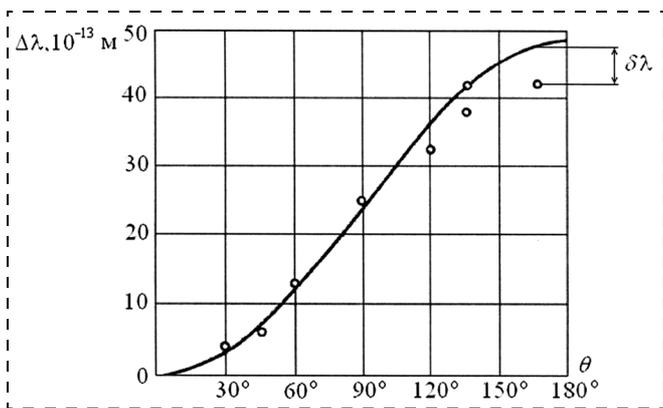


Рис. 4. Экспериментальная зависимость смещения некогерентной линии рассеянного рентгеновского излучения от угла рассеяния фотонов θ . Сплошная линия — расчет по формуле Комптона $\Delta\lambda_{\text{вак}} = \lambda(1 - \cos\theta)$

водит к увеличению энергии рассеянного фотона, т. е. снижению $\Delta\lambda$ на величину $\delta\lambda$. Оценка, проведенная по формуле (56) показывает, что наблюдаемое в эксперименте значение $\delta\lambda \approx 7 \cdot 10^{-13}$ м при угле $\theta \approx 180^\circ$ возникает при начальной скорости электрона $V = 0,6 \cdot 10^6$ м/с. Эта скорость близка к скорости Ферми для электрона, которую можно считать аналогом скорости теплового движения электронного газа [9].

Расчет по формуле (56), очевидно, носит оценочный характер. Во-первых, существует тепловое распределение Ферми—Дирака скоростей электронного газа в веществе, поэтому для остановки электронов нужны кванты различных энергий. Во-вторых, лобовое столкновение фотонов и электронов происходит достаточно редко. В-третьих, остановка электрона после взаимодействия с фотоном — также достаточно редкое явление. В общем виде изменение импульса фотона при некогерентном рассеянии определяется законом (51). Строго говоря, остановиться в электронном газе могут только два электрона с различными направлениями спинов. Это следует из принципа запрета Паули. Следовательно, должно существовать статистическое распределение величины $\delta\lambda$, которое определяется случайными способами формирования ее числового значения. Однако, учитывая, что лобовое столкновение фотона и электрона наблюдается, когда угол φ достигает среднего значения 180° в рассматриваемом процессе ($90^\circ < \varphi < 270^\circ$), а также близость экспериментальной оценки скорости электрона по формуле (56) к величине скорости Ферми, можно предположить, что по этой формуле допустимо оценивать примерное значение математического ожидания величины $\delta\lambda$, по крайней мере, при углах θ , близких к 180° .

Заключение

При взаимодействии фотона со свободным электроном в веществе возможны различные результаты: поглощение фотона, когерентное и некогерентное рассеяние, остановка электрона.

При этом поглощение фотона в рентгеновском диапазоне возможно только в веществе с показателем преломления больше единицы.

Изменение длины волны при некогерентном рассеянии рентгеновского излучения в веществе зависит от самой длины волны, в отличие от некогерентного рассеяния в вакууме. Однако влияние параметров вещества (плотности, зарядового и массового чисел) на сдвиг длин волн падающего и рассеянного излучений очень незначительно.

Наблюдаемое уменьшение сдвига длин волн при некогерентном рассеянии может быть объяснено только движением свободных электронов, взаимодействующих с фотонами. При лобовом столкновении фотона и движущегося электрона в случае, если электрон после взаимодействия останавливается, направление рассеянного фотона равновероятно во все стороны.

Список литературы

1. Вихман Э. Квантовая физика / Пер. с англ. М.: Наука, 1977. С. 156.
2. Кидд Р., Ардини Дж., Антон А. Представление эффекта Комптона в качестве двойного доплеровского сдвига: Сб. статей "Физика за рубежом. Серия Б" / Пер. с англ. М.: Мир, 1988. С. 59—67.
3. Compton A. H. Secondary radiation produced by X-rays and of their applications to physical problems. Bull. Nat. Res. Conc. 1922. V. 4. Part 2. N 20. P. 18—20.
4. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. Т. 4. М.: Наука, 1989. С. 402.
5. Волобуев А. Н., Скворцов А. В. Фотон-электронное взаимодействие в металлических пленках нанометрической толщины // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 3. С. 2—7.
6. Левич В. Г. Курс теоретической физики. Т. 1. М.: Физматгиз, 1962. С. 246, 302.
7. Матвеев А. Н. Атомная физика. М.: Высшая школа, 1989. С. 27.
8. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей. М.: Гостехиздат, 1957. С. 192, 193, 195, 220, 244, 301.
9. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела / Пер. с англ. Т. 1. М.: Мир, 1979. С. 49.

УДК 621.382

И. И. Абрамов, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, Минск,
Республика Беларусь,
e-mail: nanodev@bsuir.edu.by

Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники.

VII. Структуры на квантовых проволоках

В данной части работы проанализированы модели квантовых проволок и приборных структур на их основе. Оценены перспективы развития рассматриваемой области наноэлектроники.

Ключевые слова: квантовые проволоки, квантовая интерференция, приборные структуры.

Введение

Приборные структуры на квантовых проволоках в своем большинстве* относятся к более широкому типу *приборов на эффектах квантовой интерференции*. Наряду с длиной волны де Бройля λ_B наиболее важным параметром для данного типа приборов является длина фазовой когерентности λ_ϕ [1]. В случае, когда размеры структуры соизмеримы с λ_ϕ , волновые функции носителей заряда, например электронов, могут интерферировать, распространяясь по различным путям, в местах схождения этих путей, вызывая тем самым различного рода флуктуации, а именно: проводимости (кондактанса), других кинетических коэффициентов, тока и напряжения (нарушение закона Ома), что используется в практических приложениях. Здесь прослеживается аналогия с разнообразными интерференционными оптическими приборами и приборами СВЧ электроники. Поэтому в настоящее время предложено много приборных структур твердотельной электроники, включая наноэлектронику, базирующихся на эффектах квантовой интерференции и являющихся фактически

* Возможны приборы, включающие квантовые проволоки, в которых важны не обязательно эффекты квантовой интерференции, а например, одноэлектронное туннелирование, но это уже, как правило, комбинированные (гибридные) приборы.

твердотельными аналогами указанных выше типов приборов (см. обзоры [2–7]).

В 1959 г. Ааронов и Бом [8] теоретически показали, что в двухсвязанной системе (типа "кольца", "рамки"), когда электронный пучок (волновой пакет) расщепляется на два альтернативных пучка (волновых пакета), их интерференция наблюдается в месте схождения пучков (волновых пакетов). Управление этой интерференцией в месте схождения допустимо с помощью векторного потенциала электромагнитного поля, в частности, с приложением как магнитного (магнитный эффект Ааронова—Бома), так и электрического (электростатический эффект Ааронова—Бома) полей. Поскольку длина фазовой когерентности λ_ϕ возрастает с уменьшением температуры, то первые экспериментальные подтверждения эффекта были проведены при низких температурах вследствие более простой технологической реализации исследуемых образцов [2, 3]. В этом случае легче достигается баллистический (бесстолкновительный) режим переноса в половинках кольца (рамки), составляющих альтернативные пути движения разделенных пучков (волновых пакетов), так как процессы столкновения могут приводить к сбою фазы электронных волн, т. е. потере фазовой когерентности. Важно заметить, что Ю. В. Шарвином с сыном было экспериментально показано [9], что фазовая когерентность может не разрушаться вследствие процессов упругого рассеяния, что подтверждает упрощенную теорию работы [10]. В то же время разупорядочение (хаотизация) фазы вследствие неупругого рассеяния и различные тепловые эффекты могут приводить к разрушению требуемой когерентности пучков. Таким образом, исследования доказали *принципиальную важность при рассмотрении интерференционных эффектов учета влияния процессов рассеяния*.

Первые реализации колец и рамок Ааронова—Бома на тонких металлических проволоках с подведенными к ним контактами [2, 3] фактически являлись первыми приборными структурами на эффектах квантовой интерференции твердотельной электроники. В дальнейшем появилось огромное число предложений таких приборов, как правило, на основе разнообразных реализаций волноводов** (носителей заряда) в твердом теле (см. первые обзоры [4–7, 11, 12]). Здесь мы будем применять ха-

** Иногда к ним также добавляются резонаторы, интерферометры, точечные контакты.

ракторный, вообще говоря, для СВЧ электроники термин — "волновод", используемый традиционно в рассматриваемой области в зарубежной литературе (английский термин — "waveguide"). Это сделано для того, чтобы не было путаницы с более специфическим термином "квантовые проволоки"*, для которых принципиально важно пространственное квантование (дополнительный к квантовой интерференции в приборной структуре квантово-механический эффект) в поперечном сечении проволоки (волновода). Поэтому такие структуры, по существу, являются гибридными.

Приборные структуры на квантовой интерференции включают волноводы, построенные на 3D-, 2D-, 1D-объектах, самой разнообразной формы, а именно: кольца; рамки; зигзаги; уголки: пересечения типа "крест", Y-образные, T-образные; иные сочетания волноводов (параллельные, хаотические и др.); расширения; микросужения; точечные контакты и др. Материалы, используемые при создании приборов, могут быть также различными: металлы, полупроводники, диэлектрики. Весьма интересно и перспективно применение нанотрубок (углеродных, кремниевых и др.), молекул, атомных цепочек. Форма и размеры волноводов могут управляться также достаточно разными способами, например, с помощью затворов, влияющих на электронный 2D-газ или квантовую яму. Бесспорно важным является и влияние температуры окружающей среды. Интересно заметить, что резонансно-туннельные структуры, рассмотренные ранее [13], могут интерпретироваться в качестве интерференционных приборов, так как в режиме резонансного, а не последовательного, туннелирования принципиально важна интерференция многократно отраженных волн в квантовой яме (ямах), правда, в поперечном направлении. Естественно, рассмотреть все это огромное многообразие структур практически невозможно. Поэтому здесь остановимся на наиболее важных вопросах физики и моделирования рассматриваемого типа приборов и в особенности (согласно анализу [1]) — основанных на квантовых проволоках. Кроме того, один из наиболее существенных недостатков интерференционных приборов — многомодовость обычных волноводов [4], в результате чего получается большой разброс длин волн носителей заряда, а следовательно, это может приводить** к ослаблению ("размазыванию") интерференционных эффектов. Один из наиболее эффективных путей устранения такого ослабления — использование именно квантовых проволок в качестве волноводов. Бесспорно важным является и то, что в настоящее время теоретически

* В литературе иногда встречаются вместо "провода" следующие слова: "провод", "нить", "шнур". Более удачным в рассматриваемом случае было бы строгое и, к сожалению, более громоздкое словосочетание: "волноводы на квантовых проволоках".

** Для случаев, когда наблюдаются случайные фазы для различных мод [4].

показано, что на основе квантовых проволок может быть в принципе создан "полный набор элементов, функционально аналогичных обычным элементам микроэлектроники" [14].

Результаты теории неупорядоченных систем

Появлению квантовых проволок предшествовали интенсивные исследования в области мезоскопической физики, в частности, по интерференционным эффектам в неупорядоченных системах. Было установлено, что ряд явлений, правил и свойств, в частности, поправки к проводимости в режиме слабой локализации, флуктуации кондактанса в проводниках, эффекты Ааронова—Бома, неаддитивность последовательных сопротивлений и параллельных проводимостей и некоторые другие могут быть объяснены квантовой интерференцией. Хорошие обзоры по данным вопросам приведены в статьях [15, 16], монографиях [17, 18] и учебном пособии [19]. Поэтому здесь лишь кратко остановимся на ключевых результатах, так как они все же важны для дальнейшего изложения и понимания материала.

Так, принципиально важным для объяснения поведения мезоскопических систем является использование квантово-механических законов и положений (в этом плане они схожи с микроскопическими системами), что связано с проявлением влияния дискретности спектра носителей заряда, а также эффектов их квантовой интерференции, что начинает существенно сказываться на самых различных характеристиках данных систем. Именно эти два фактора и "роднят" теории неупорядоченных систем и квантовых проволок.

Одним из наиболее существенных первых результатов в направлении исследования неупорядоченных систем была теория локализации Андерсона [20] и ее последующее развитие [15—18]. Оказывается, что при достаточно сильном беспорядке происходит локализация состояний. В целом, энергетический спектр неупорядоченной конденсированной системы более разнообразный, чем в упорядоченной. В результате было показано, что, например, одномерные*** и двумерные*** металлические системы не являются в поведенческом смысле истинными металлами. Более того, в трехмерных системах возможен переход металл—диэлектрик (переход Андерсона).

Дальнейшим существенным шагом была разработка скейлинговой теории локализации [18] в зависимости от размерности образца d . При этом выделяют режимы слабой, когда квантовые поправки к проводимости малы, и сильной локализации. В целом, в настоящее время считается, что при достаточно

*** Здесь под размерностью часто подразумевают число пространственных координат в соответствующей модели системы (более детально вопрос рассмотрен в [18]). Не следует ее отождествлять с размерностью в обычном квантово-механическом смысле [1]. Поэтому в литературе в рассматриваемом случае добавляется приставка "квази1D-система". Этим также подчеркивается, что реальные системы не являются чисто одномерными [21].

сильном беспорядке все или почти все состояния — локализованные [18]. При промежуточной степени беспорядка (для $d > 2$) могут возникать как локализованные, так и делокализованные состояния в запрещенной зоне [18].

В результате этого существенно может изменяться картина кинетических явлений. В режиме локализации состояний возможны следующие процессы термоактивированной проводимости [18]:

- активация на край подвижности;
- активация в соседнее локализованное состояние;
- прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка.

Наряду с прыжковой (надбарьерной) проводимостью возможны также последовательное (нерезонансное) и резонансное туннелирование [17]. Принципиально важным для описания транспортных свойств становится учет различных взаимодействий, а именно: электрон-фононных, электрон-электронного и др. Интересно заметить, что фононы могут как разрушать локализацию, так и усиливать ее [17].

Вычисляемыми параметрами для неупорядоченных систем являются: плотность состояний, проводимость (кондактанс), другие кинетические коэффициенты, диэлектрическая проницаемость, средний коэффициент прохождения, радиус локализации волновой функции и др. Модели, как правило, строятся в одночастичном приближении в рамках формализмов волновых функций или функций Грина в сочетании с различного рода приближениями. Для описания беспорядка вводятся разнообразные зависимости потенциала в неупорядоченной системе [15–17]. Существенную роль при этом могут оказывать корреляционные эффекты.

Наиболее полной в настоящее время считается теория проводимости для одномерных неупорядоченных систем [15–17]. При построении моделей используются: одночастичное приближение, метод матрицы рассеяния, метод матриц переноса, метод корреляционных функций ток—ток (метод Кубо), метод сильной связи, функции Грина (диаграммные техники), метод Монте-Карло, метод ренормгруппы и др. При этом могут применяться различные приближения теории возмущений.

Особенно важным для развития мезоскопической физики при изучении транспортных свойств являлось создание двух формализмов для описания проводимости (кондактанса) на основе формулы линейного отклика Кубо [22] (формализм Кубо, формализм Кубо—Гринвуда, 1957—1958 гг.)* и формулы Ландауэра [23, 24] (формализм Ландауэра, формализм Ландауэра—Буттикера)*. Разработка этих формализмов происходила практически параллельно (одновременно) с началом развития мезоскопической физики, в частности, теорией локализации Андерсона, эффектами Ааронова—Бома. В целом, они

* В литературе встречаются именно такие названия формализмов.

могут приводить к эквивалентным результатам (см. далее).

В формализме линейного отклика Кубо (*R. Kubo*) получено несколько формул для проводимости и ее составляющих через корреляционную функцию [22]. В квантово-механическом случае исходным при их выводе является уравнение Лиувилля—фон Неймана для матрицы плотности. Далее используется линейное приближение и получаются выражения для тензора электропроводности, т. е. функции линейного отклика ток — внешнее электрическое поле через корреляционную функцию ток—ток. Были также выведены формулы для симметричной и антисимметричной частей статической электропроводности. В случае плоскополяризованного излучения получено выражение для электропроводности, соответствующее известной теореме Найквиста [22]. Заметим, что выведенная Кубо формула (формулы) представляет, как пишет сам автор, "наиболее общую форму соотношения Эйнштейна, связывающего электропроводность или подвижность с коэффициентом диффузии" [22].

В целом, с помощью формализма Кубо получен ряд важных результатов при изучении кинетических свойств неупорядоченных систем в различных случаях (см., например, [17, 18]). При вычислении корреляционных функций с помощью теории возмущений можно использовать известные методы теории многих тел, в частности, методы расщепления уравнений для функций Грина, диаграммные техники и др. Преимущество этих методов — возможность учета коллективных эффектов. Однако расчет проводимости с помощью теории возмущений в формализме Кубо довольно сложен, так как в некоторых случаях необходимо частичное суммирование бесконечного ряда [25].

Рассмотрение движения невзаимодействующих электронов проводимости металла в допущении о беспорядочности распределения центров рассеяния в кристалле приводит к удобной формуле Гринвуда (*D. A. Greenwood*) для электропроводности [22], которая достаточно часто используется в рамках описываемого формализма в качестве исходной (см., например, [17, 18]).

Остановимся на одном недостатке, характерном для формул, получаемых в рамках рассматриваемого формализма. Так, формула Кубо, строго говоря, применима для бесконечных систем с непрерывным спектром [18]. В то же время важное влияние на интерференционные явления, наряду с процессами неупругого рассеяния часто оказывает окружение** (резервуар), которое может приводить к разрушению когерентности волн носителей заряда, т. е. к дефазировке. Для конечных систем с дискретным спектром для учета слабого взаимодействия с резервуаром необходимо вводить уширение уровней, что приводит к необходимости модификаций в

** К нему могут быть отнесены и контакты.

формулах [18]. Таким образом, в формализме Кубо—Гринвуда дополнительно вводится параметр, характеризующий уширение уровней спектра системы вследствие взаимодействия с резервуаром, т. е. взаимодействие учитывается в определенной степени неявно. Часто это бывает неудобно.

Отмеченного недостатка лишен формализм Ландауэра (*R. Landauer*) [23, 24, 26], дополненный Буттикером (*M. Buttiker*) [27—29] и коллегами (см., например, [18]) (формализм Ландауэра—Буттикера).

Формализм Ландауэра первоначально был предложен для случая вычисления кондактанса систем с одним каналом с двумя подходящими контактами (одноканальная двухтерминальная формулировка). Однако, так как рассматриваться может мезоскопическая система, то кондактанс такой системы часто обладает необычными свойствами по сравнению с обычными резисторами.

В 1957 г. Ландауэр рассмотрел в одномерном случае потенциальный (рассеивающий*) барьер, подсоединенный идеальными одномерными проводниками с двумя резервуарами (контактами), характеризующимися фиксированными значениями химических потенциалов μ_1 и μ_2 , причем $\mu_1 - \mu_2 = qV$, где q — заряд электрона, а V — прикладываемое напряжение. Если T — коэффициент прохождения, а R — коэффициент отражения барьера, то кондактанс барьера (с учетом спина) определяется формулой [23, 24]

$$G = \frac{q^2 T}{\pi \hbar R}, \quad (1)$$

где \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π . В то же время кондактанс системы (барьер, проводники и контакты), т. е. измеряемый между двумя контактами, отличается и равен

$$G_c = \frac{q^2}{\pi \hbar} T. \quad (2)$$

Замечу, что формулы (1) и (2) вызвали многочисленные дискуссии в литературе ("какая из них правильная?"), пока не было достигнуто понимание того, что "они описывают разные физические величины" [18]. Следовательно, формула Кубо может дать значение кондактанса G и, строго говоря**, для нас не подходит. Эти результаты фактически подтвердили принципиальную важность рассмотрения системы в целом, а не отдельных ее составляющих. Важно также отметить, что под "барьером" может пониматься любой объект, например, рассеивающий центр, отрезок линейной цепочки и т. п., что и делает удобным применение формализма Ландауэра к мезоскопическим (одномерным) системам с двумя контактами.

Дальнейшими важными шагами в развитии формализма Ландауэра являлись его обобщения на мно-

гоканальный и многотерминальный случаи, которые необходимы для рассмотрения систем на квантовых проволоках с многими контактами, т. е. приборных структур, более сложных по сравнению с резистором, диодом и т. п., а также в случае конечных температур.

Вследствие дискретности спектра в квантовой проволоке в общем случае имеем N проводящих каналов, а следовательно, необходимо рассматривать многоканальный вариант. Обобщение формализма Ландауэра на этот случай было проведено с использованием матрицы рассеяния в работах [30, 31] при нулевых температурах, а также с применением других подходов*** в статьях [32—34]. При конечных температурах для двухтерминального (двух контактов) случая выражение для кондактанса (с учетом спина) было получено Имри [18]:

$$G_c = \frac{q^2}{\pi \hbar} \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sum_i T_i(E), \quad (3)$$

где E — энергия; f — функция распределения; T_i — коэффициент прохождения для i -го канала.

Важнейшими результатами применения формализма Ландауэра является установленная возможность неаддитивности последовательных сопротивлений и параллельных проводимостей мезоскопических систем (см., например, [18]).

Наиболее существенное обобщение было проведено Буттикером для четырехтерминального (четыре контакта) случая**** в статье [27]. При этом в образце (структуре) допускались процессы упругого рассеяния. Все процессы неупругого рассеяния происходят только в резервуарах (контактах). Процессы упругого рассеяния образца описывались с помощью коэффициентов прохождения носителей T_{ij} из j -го контакта в i -й и соответствующих коэффициентов отражения R_{ij} . В результате, кроме проводимости было получено полезное в мезоскопической физике выражение для тока i -го контакта (без учета спина), а именно [27]:

$$I_i = \frac{q}{2\pi \hbar} \left[(1 - R_{ii})\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j \right], \quad (4)$$

где μ_j — химический потенциал j -го резервуара (контакта). Соотношение (4) справедливо и для более общего n -терминального случая. В многоканальном случае выражение (4) модифицируется путем замены 1 на N_i , где N_i — число каналов для i -го терминала (контакта) [29]. Отметим, что получаемые кинетические коэффициенты удовлетворяют соотношениям симметрии онсагеровского типа (теорема взаимности) [18, 27, 29]. Это свойство является важ-

* Иногда в зарубежной литературе рассматриваемый формализм образно называется "рассеивающий подход" ("scattering approach").

** Необходимы отмеченные ранее модификации.

*** Интересно заметить, что при обобщении может использоваться теория линейного отклика Кубо (см., например, [33, 34]).

**** Именно поэтому в литературе рассматриваемый формализм часто называется формализмом Ландауэра—Буттикера.

ным физическим преимуществом многотерминальной формулировки Буттикера по сравнению с другими соотношениями для контактанса в подобных случаях [18].

Оригинальный и простой способ учета влияния процессов неупругого рассеяния непосредственно в образце был также предложен Буттикером [28]. В этом случае задача учета влияния неупругого центра рассеяния заменяется эквивалентной задачей путем подключения к образцу дополнительного резервуара (контакта) с двумя каналами, дающими в сумме нулевой ток. В результате может быть использована многотерминальная формулировка, описанная выше, и для этого практически важного случая, т. е. решаться гораздо более простая стационарная задача для процессов упругого рассеяния. Следует заметить, что данный способ с успехом применялся для построения упрощенной модели двухбарьерной резонансно-туннельной структуры в рамках описанного формализма [35].

В целом, *формализм Ландауэра—Буттикера является едва ли ни главным при построении модели приборных структур на квантовых проволоках*. В связи с этим не следует забывать о предположениях, лежащих в его основе, а именно:

- контакты находятся в термодинамическом равновесии;
- процессы неупругого рассеяния происходят только в контактах;
- в самой структуре без контактов могут иметь место только упругие процессы рассеяния;
- контактанс вычисляется исходя из коэффициентов прохождения и отражения.

Их следствием является то, что *этот формализм, строго говоря, применим для анализа внешних, а не внутренних характеристик структур, которые близки к состоянию равновесия*. К сожалению, об этом часто забывают.

Квантовые проволоки

В своей пионерской работе Сакаки (*H. Sakaki*) [36] теоретически показал, что в "ультратонкой полупроводниковой проволоке" ("*ultrafine semiconductor wire*") с размерами в поперечном прямоугольном сечении, сравнимыми с длиной волны де Бройля электронов в каждом из измерений, возможно существенное снижение упругого рассеяния. В результате такая одномерная (1D) система может обладать сильно возросшей подвижностью электронов. Это было показано с помощью оценки подвижности, ограничиваемой рассеянием на удаленной ионизированной примеси, которое доминирует над другими процессами рассеяния при низких температурах, как считал автор [36]. Впоследствии такие структуры были названы "квантовыми проволоками" ("*quantum wires*"). Как предполагал Сакаки, данное свойство таких проволок может найти широкое применение в различных электронных приборах [36]. Экспери-

ментальная реализация квантовых проволок не заставила себя долго ждать [37].

Подвижность является важнейшим электрофизическим параметром не только объемных материалов, но и таких искусственных систем, какими являются квантовые проволоки. Поэтому после работ Сакаки были начаты интенсивные исследования в этом направлении. Так, в статье [38] было показано, что ситуация оказывается не столь простой, поскольку необходимо учитывать другие механизмы рассеяния, в частности, на ионизированной примеси в самой квантовой проволоке и на акустических фононах. Подвижность в этих случаях может ограничиваться, а следовательно, вклад этих механизмов рассеяния не должен игнорироваться при анализе. В целом, было показано, что подвижность в квантовых проволоках на GaAs может не увеличиваться по сравнению с 3D-системами [39]. Дополнительное отрицательное в этом же плане влияние может оказывать рассеяние на полярных оптических фононах [39—41], а также температура окружающей среды [39, 41].

Необходимо заметить, что применение приближения времени релаксации проблематично для учета процессов неупругого рассеяния, таких как рассеяние на полярных оптических фононах, что отмечали сами авторы статьи [39]. Для более детальных по сравнению с [38] расчетов для вычисления волновых функций использовались приближения эффективной массы, а также бесконечно глубокой потенциальной ямы в поперечном сечении прямоугольной квантовой проволоки [39]. При этом подвижность электронов при малых полях в приближении времени релаксации вычислялась численно в квантово-размерном пределе* на основе полученных упрощенных аналитических выражений. Существенное влияние на времена релаксации момента импульса для различных механизмов рассеяния может оказывать и учет экранирования в квантовых проволоках [42, 43].

Различное влияние на рассеяние в квантовых проволоках, как было установлено, оказывают и другие факторы и процессы, а именно: границы раздела материалов; шероховатости поверхности проволоки; непараболичность зон; кристаллографическая ориентация; межподзонные и внутривидовые переходы; геометрическая форма сечения проволоки; электрон-электронные и даже трехчастичные процессы; неравновесные ("горячие") фононы; спин электронов и др. В целом, зависимость полной скорости рассеяния от энергии обычно характеризуется острыми пиками, что в значительной степени является следствием резонансной структуры плотности состояний в квантовых проволоках [44]. Под влиянием множества реальных факторов и процессов может происходить скорее уменьшение подвижности, чем

* В литературе на русском языке встречается термин "электрический квантовый предел".

ее увеличение, что отмечалось, например, в [45] при учете некоторых механизмов рассеяния.

Не менее важным при изучении транспортных свойств может быть также учет изменения эффективных масс в квантовых проволоках (см., например, [46] и далее), так как традиционно при анализе приборов на их основе используется метод эффективной массы.

Одним из главных недостатков ряда моделей квантовых проволок (и приборных структур на их основе) является неучет (или ограниченный учет) различных механизмов рассеяния в них. Многие модели разработаны лишь для баллистического режима транспорта*, хотя необходимо напомнить, что в первой работе Сакаки (см. ранее) по квантовым проволокам была показана принципиальная необходимость учета рассеяния в таких структурах. Весьма продуктивно для рассматриваемых целей в настоящее время используются методы Монте-Карло.

Модели, основанные на полуклассических методах Монте-Карло, как правило, предназначены для расчета дрейфовой скорости в стационарном и нестационарном случаях, средних значений кинетической энергии электронов. В стационарном случае может использоваться не многочастичный, а одночастичный метод Монте-Карло. Обычно моделируются квантовые проволоки на GaAs.

Дрейфовая скорость в квантовой проволоке на GaAs исследовалась в работе [47] в электрическом квантовом пределе (электроны занимают нижнюю подзону) в приближении бесконечно глубокой потенциальной ямы при температурах 30 К и 300 К. Учитывалось только рассеяние на полярных оптических фононах. Показано, что подвижность для 1D-системы может быть выше, чем для 3D-случая.

Дрейфовая скорость, средняя энергия и коэффициент диффузии в квантовой проволоке на GaAs квадратного поперечного сечения анализировались в работе [48] при температурах 30, 77 и 120 К. При моделировании учитывалось рассеяние на акустических и продольных оптических фононах.

Процессы установления стационарного состояния в квантовых проволоках квадратного поперечного сечения на GaAs при приложении электрического поля исследовались в работе [49] при температурах: 4,2; 77; 300 К. Использовался многочастичный метод Монте-Карло для расчета дрейфовой скорости и средней энергии. Учитывался только один уровень и рассеяние на полярных оптических фононах.

Квантовая проволока квадратного сечения на GaAs в электрическом квантовом пределе в приближении бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы исследовалась в [50, 51]. Анализиро-

* Такой режим работы, как правило, реализуется в коротких структурах и/или при низких температурах, что нередко и имеет место на практике. Кроме того, рассмотрение этого режима полезно для оценки потенциальных (предельных) характеристик структур.

вались дрейфовая скорость и средняя энергия. В модели учитывались механизмы рассеяния на полярных оптических фононах, на ионах примеси и неоднородностях поверхности. Для моделирования стационарных процессов использовался одночастичный метод Монте-Карло [50, 51]. Показано, что при больших полях основное влияние на дрейфовую скорость оказывает рассеяние на полярных оптических фононах и неоднородностях поверхности. Для моделирования нестационарных процессов применялся многочастичный метод Монте-Карло [50, 51]. Установлено, что примесное рассеяние и рассеяние на шероховатостях могут оказывать значительное влияние на переходные процессы в квантовых проволоках. В монографии [51] с использованием разработанного алгоритма исследовались также квантовые проволоки на Si.

Очень часто расчет параметров, характеризующих транспорт в квантовых проволоках, проводится в предположении электрического квантового предела. Однако исследования показывают, что в ряде случаев может быть важно межподзонное рассеяние.

Модель, описывающая многоподзонный перенос в квантовых проволоках, была предложена в работе [52]. В ней использовался одночастичный метод Монте-Карло, включалось рассеяние на полярных оптических и акустических фононах, привлекалось приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы. С помощью модели рассчитывались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения квантовой проволоки на основе GaAs—Al_xGa_{1-x}As-структуры при температуре 300 и 77 К; анализировалось влияние изменения ограничивающего потенциала. В целях экономии памяти ЭВМ рассматривался небольшой энергетический интервал. Отмечается сложность: большие пики в интенсивностях рассеяния могут приводить к артефактам (не физическим результатам) для функции распределения. Установлено, что подвижность может быть в два раза больше, чем в объеме при температуре 300 К.

Осцилляции фотопроводимости и отрицательная проводимость в прямоугольных квантовых проволоках на GaAs, погруженных в AIs, исследовались в работе [53] с помощью одночастичного и многочастичного методов Монте-Карло. Потенциальная яма предполагалась бесконечно глубокой. В модели учитывалась многоподзонная структура и рассеяние на продольных оптических фононах и локализованных поверхностных оптических фононах. В стационарном режиме при моделировании по одночастичному методу Монте-Карло оценивалось влияние комбинации электронов. В работе также анализировалась дрейфовая скорость и средняя энергия. Исследования проведены для температур 10; 77 и 300 К.

Стационарные и переходные процессы в квантовой проволоке на GaAs квадратного сечения моделировались при температуре 77 и 300 К в работе [54] с помощью многочастичного метода Монте-Карло.

Потенциальная яма предполагалась бесконечно глубокой. Учитывалось анизотропия эффективной массы, а также рассеяние на полярных оптических фононах и междолинное рассеяние. Анализировались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения. В работе было получено удовлетворительное согласие результатов с таковыми для упрощенной полуклассической модели, основанной на уравнениях сохранения момента и энергии в приближении времени релаксации.

Исследования магнетотранспорта в квантовой проволоке на GaAs при 77 и 300 К проведены с помощью метода Монте-Карло в работе [55]. Влияние магнитного поля учитывалось путем использования закона дисперсии, плотности состояний и интенсивностей рассеяния, определяемых численно, исходя из первых принципов. В модель включалось рассеяние на оптических, акустических и поверхностных оптических фононах. Рассчитывались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения электронов по скоростям. Показано, что магнитное поле может увеличивать дрейфовую скорость.

Важный для квантовых методов Монте-Карло анализ был проведен в обзоре [56]. В нем было показано, что формализм функций Вигнера более удобен по сравнению с формализмами матриц плотности, функций Грина, интегралов по траекториям, в частности, при построении моделей квантового переноса в полупроводниках на основе метода Монте-Карло ввиду аналогии с полуклассическим подходом. Отмечено, по каким причинам метод кинетического уравнения Больцмана (КУБ) оказывается часто достаточно адекватным вне своих формальных пределов применимости. Для этого в традиционно используемом приближении эффективной массы получен вид уравнения Лиувилля—фон Неймана, подобный КУБ. Из него также выведены интегральные уравнения, удобные для применения методов Монте-Карло, аналогичные полуклассическим.

К сожалению, непосредственно использование уравнения Лиувилля—фон Неймана для моделирования структур практически невозможно [1]. В связи с этим в работе [57] в рамках формализма функций Вигнера были получены два более простых кинетических уравнения Левинсона и Баркера—Ферри, обобщенные для электрон-фононных систем в квантовых проволоках. Основными приближениями являются слабое взаимодействие, равновесие фононов, а также приближение случайных фаз. Выведены удобные в применении интегральные формы уравнений. В качестве примера моделировались переходные процессы в квантовой проволоке на GaAs квадратного сечения при нулевом электрическом поле и очень низких температурах. Учитывалось рассеяние на полярных оптических фононах. При расчете применялся обращенный во времени метод Монте-Карло. Были проанализированы эволюция во времени функции Вигнера, электронной плотно-

сти и средней энергии. К сожалению, несмотря на введенные упрощения, временные затраты ЭВМ растут экспоненциально с увеличением времени эволюции. Поэтому доступны для моделирования времена в несколько сотен фемтосекунд. Для рассмотрения больших времен эволюции необходима разработка специальных ускоряющих процедур и использование новых возможностей вычислительной техники.

И в то же время учет дополнительных квантовых эффектов при моделировании целесообразен. Так, в работе [58] исследовался электронный транспорт в квантовых проволоках прямоугольного сечения на GaAs при больших электрических полях и температуре $T = 300$ К. С помощью кинетического уравнения Баркера—Ферри для одночастичной функции распределения учтены квантовый внутрисоударительный полевой эффект, а также межподзонное рассеяние на продольных оптических фононах. Потенциальный барьер на границах квантовых проволок предполагался бесконечным. Для решения уравнения использовался метод Монте-Карло. Было показано, что дрейфовая скорость электронов значительно уменьшается при средних электрических полях вследствие указанного квантового эффекта как для тонких (7×10 нм), так и для толстых (30×30 нм) проволок. Для этого проводилось сравнение с полуклассической моделью на основе КУБ. Эти данные, с одной стороны, подчеркивают важность учета квантово-механических коррекций при моделировании квантовых проволок, а с другой — возможный рациональный и более или менее эффективный путь применения методов Монте-Карло.

Кроме того, следует заметить, что при учете рассеяния только на потенциальном профиле, задаваемом приближенно, кинетическое уравнение для функции Вигнера может быть решено для резисторов на квантовых проволоках с помощью метода Монте-Карло, аналогичного описанному в [59], за приемлемое время на ПЭВМ [60, 61].

Один из существенных недостатков методов Монте-Карло при моделировании квантовых проволок заключается в том, что флуктуации физических величин в них могут быть большими, а следовательно, для получения физически разумных результатов требуются существенные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ.

Альтернативным в рамках полуклассического подхода является использование КУБ. Так, в работе [62] была разработана дискретная модель на основе КУБ для достаточно длинной квантовой проволоки на GaAs в условии вырождения. При этом учитывалось рассеяние на примеси и оптических фононах, межподзонное рассеяние. Применялось приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы. В работе анализировалась функция распределения, дрейфовая скорость и средняя энергия при низких температурах.

И в то же время в работе [63] с использованием метода Монте-Карло было установлено, что линейная аппроксимация КУБ может приводить к ошибочным для квантовых проволок результатам.

Анализ показывает, что многое в получаемых результатах зависит не только от того, какие приближения используются, например число включенных в рассмотрение подзон, но и от того, какие механизмы рассеяния учитываются, а также от адекватности моделей для интенсивностей рассеяния. Бесспорно важной информацией является энергетический спектр носителей заряда в квантовых проволоках. Строго говоря, здесь необходимо дополнительно самосогласованно решать уравнения Шредингера и Пуассона. Кроме того, многое зависит и от граничных условий. С учетом существенных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ чрезвычайно актуальной становится задача разработки различных ускоряющих процедур в рамках методов Монте-Карло.

В случае, когда размеры структуры соизмеримы с длиной фазовой когерентности λ_ϕ , особенно при низких температурах, использование полуклассических моделей становится неоправданным, и необходимо применять модели квантово-механических формализмов. В данных случаях, однако, временные затраты могут становиться просто гигантскими даже при использовании программ, реализующих параллельные алгоритмы вычислений и предназначенных для суперЭВМ. Так, при расчете одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ) простейших мезоскопических структур с учетом рассеяния только на полярных оптических фононах с применением метода Монте-Карло в рамках формализма функций Вигнера требуется около 30 ч на 100 CPU — Cray T3E вычислительной системе [64].

В целом, для адекватного моделирования электрофизических характеристик квантовых проволок необходимо учитывать целый комплекс факторов и процессов из отмеченных ранее. Так, в работе [65] изучалась электронная подвижность в малых электрических полях протяженных цилиндрических кремниевых квантовых проволок диаметром от 3 до 14 нм, окруженных диэлектриком толщиной 1 нм и металлическим затвором, при $T = 300$ К в рамках формализма Кубо—Гринвуда и самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Учитывались кулоновское, внутридолинное на акустических фононах, междолинное (6 типов) и на шероховатости поверхности механизмы рассеяния, а также непараболичность зоны. Показано, что результаты могут противоречить полученным ранее в электрическом квантовом пределе, в частности, при учете экранирования.

В связи с изложенным разработка моделей различных параметров (подвижности, эффективной массы, времен релаксации, скоростей рассеяния, диэлектрической проницаемости, плотности состояний и др.) квантовых проволок представляется чрезвычайно актуальной. Тут еще многое предстоит сделать.

Перейдем к рассмотрению упрощенных моделей квантовых проволок, которые непосредственно использовались для расчета кондактанса, ВАХ. Для этих целей при вычислении кондактанса или удельного сопротивления, как правило, применяются описанные ранее формализмы Кубо—Гринвуда и/или Ландауэра—Буттикера. Так как основной задачей становится расчет коэффициентов прохождения и отражения системы, то использоваться могут отмеченные ранее квантово-механические формализмы [1]: волновых функций; матриц плотности; функций распределения Вигнера; функций Грина; фейнмановских интегралов по траекториям.

Простые расчетные формулы для проводимости и удельного сопротивления квантовых проволок с прямоугольным сечением были получены в работе [66]. При рассмотрении учитывалось рассеяние на акустических фононах и точечных дефектах.

Плотность состояний проводимости одномерных каналов в кремниевых инверсионных слоях исследовались в работе [67]. При расчете проводимости на основе формулы Кубо учитывалось пространственное квантование, междолинное рассеяние, рассеяние на заряженной примеси, экранирование, уширение уровней и влияние температуры (не более 10 К). Использовалась теория возмущений и формализм функций Грина. Квантовая яма рассматривалась прямоугольной или параболической. Сравнение с экспериментальными данными для полевых транзисторов с решеточным затвором с 250 одномерными каналами в инверсионном слое [68] показало хорошее качественное согласование.

Упрощенная модель кондактанса "двумерного резистора" на квантовой проволоке была представлена в статье [69]. Транспорт электронов предполагался баллистическим с прерывающимися его процессами упругого рассеяния на случайно расположенных примесях в многомоновом режиме (30 мод). Для каждой из мод предполагался параболический закон дисперсии. Использовался формализм Ландауэра (при температуре $T = 0$ К), а при вычислении коэффициентов прохождения применялся метод матрицы рассеяния [31]. Было проведено сравнение результатов моделирования резистора на основе квантово-механической модели и полуклассической модели, соответствующей закону Ома. В статье также дана оценка кондактанса для случая двух параллельно расположенных резисторов (электростатический эффект Ааронова—Бома). В последующей более подробной статье авторов [70] было проведено моделирование при учете от 10 до 40 мод. При вычислении матриц рассеяния для каждого из центров использовалось борновское приближение в рамках формализма волновых функций [70]. Было осуществлено сопоставление с результатами, полученными ранее для неупорядоченных систем, в частности, в режимах слабой и сильной локализации, исследованы флуктуации кондактанса. В целом, подтверждено согласие со скейлинговой теорией локализации [70].

Кондактанс и его различные составляющие в стационарном случае (в рамках теории линейного отклика в борновском приближении) квантовых проволок был рассмотрен в работе [71]. Поперечное квантование учитывалось с помощью аппроксимаций, соответствующих для прямоугольной и параболической квантовой ямы, а в вертикальном направлении — для треугольной ямы. Рассматривались процессы рассеяния на примесях и электрон-электронные взаимодействия в присутствии примесей. Применялся метод эффективной массы для описания транспорта вдоль проволоки.

Метод согласования мод [69, 70] для волновых функций при решении уравнения Шредингера использовался в работе [72] для детального исследования влияния одного рассеивающего центра в квантовой проволоке бесконечной длины. Рассеяние предполагалось упругим. Анализировались два случая: потенциал рассеивающего центра (притягивающего или отталкивающего) аппроксимируется δ -функцией или прямоугольной формой. Для дефекта конечного размера использовался метод матриц переноса (трансферных матриц). Кондактанс рассчитывался с применением формализма Ландауэра—Буттикера (с учетом от 6 до 100 мод).

Квантовые проволоки (цепочки) с дефектами и шероховатостями и контактами (резервуарами) анализировались в работе [73] с помощью метода матриц переноса. В уравнении Шредингера использовался гамильтониан Андерсона, а кондактанс вычислялся в рамках формализма Ландауэра.

Ситуация может сильно меняться в случае учета влияния магнитного поля [5]. Так, в работе [74] были исследованы флуктуации кондактанса фактически для "двумерного резистора" на основе квантовой проволоки в данном случае. Потенциал рассеивающего центра аппроксимировался δ -функцией. Для анализа использовался метод матрицы рассеяния и формализм Ландауэра—Буттикера. При расчете кондактанса квантовых проволок при вычислении коэффициентов прохождения могут применяться и функции Грина [75].

В статье [76] с помощью методов согласования мод и матрицы рассеяния [69, 70] рассчитывался кондактанс квантовой проволоки с учетом рассеяния на шероховатостях. При моделировании рассматривалась бесконечная полоска, содержащая конечную область рассеяния со случайными флуктуациями ширины проволоки. Метод матрицы рассеяния использовался вследствие его численной устойчивости, так как метод матриц переноса может быть неприменим при длинах области рассеяния протяженностью, большей по сравнению с длиной волны де Бройля [76]. Расчет кондактанса осуществлялся с помощью формулы Ландауэра для многоканального случая. При этом учитывалось 50 мод. Анализ показал, что флуктуации кондактанса происходят не вследствие "классического рассеяния" от шероховатостей границ, а в результате модуляции

фазы волн из-за многократных их отражений в проволоке.

Метод согласования мод с успехом использовался для иллюстрации важности трехмерности контактов (резервуаров) к квантовым проволокам на основе GaAs при расчете кондактанса [77].

Интересный вывод получен в работе [78], в которой было показано, что в ряде случаев использование метода согласования мод в рамках формализма волновых функций приводит к полностью идентичным соотношениям для расчета кондактанса квантовых проволок, получаемым с применением формализма функций Грина.

В работе [79] была предложена двухзонная аппроксимация решения уравнения Шредингера для описания рассеяния в электронном квази1D-волноводе. Моделирование было проведено для различных случаев, включая одномерный волновод с донорной примесью и связанный с резонатором. Для расчета кондактанса применялась формула Ландауэра.

Существенное влияние на ВАХ резистора на квантовой проволоке оказывает температура окружающей среды. Использование даже простых моделей, основанных на теории линейного отклика в бесстолкновительном приближении и формуле Ландауэра—Буттикера, позволяет показать, что возможно не только "размытие" (лестницы кондактанса) ВАХ, но и появление на них области насыщения при больших напряжениях (см., например, [80, 81]).

Для исследования кондактанса квантовых проволок (одномерных решеток) с одной примесью или квантовой точкой (резонансно-туннельная структура) при конечных температурах может применяться упрощенный метод функционала ренормгруппы [82].

Использование формализма Келдыша [83] в модели неоднородной жидкости Томанаги—Латтинджера (*Tomonaga—Luttinger*) позволило провести упрощенный анализ влияния единичной примеси, температуры, длины и смещений на кондактанс, ВАХ и характеристики шумов квантовой проволоки с двумя контактами [84].

Квантовый и классический методы молекулярной динамики применялись для исследования структуры и энергетических свойств четырех различных видов кремниевых квантовых проволок [85]. Проводимость вычислялась с помощью приближения гамильтониана переноса для проволок с длиной от 4 до 9 нм.

Кремниевая квантовая проволока с поверхностными шероховатостями и с двумя полубесконечными квантовыми проволоками в качестве электродов анализировалась в работе [86]. Для этого использовались метод сильной связи (sp^3 -модель) и формализмы Кубо—Гринвуда и Ландауэра—Буттикера. Кондактанс в рамках последнего формализма определялся с помощью рекурсивного вычисления функций Грина. В работе изучались плотность состоя-

ний, средняя длина свободного пробега, подвижность и кондактанс.

В целом, при построении упрощенных моделей кондактанса квантовых проволок и резисторов на их основе часто используются формализм волновых функций, метод матрицы рассеяния, метод матриц переноса, метод согласования мод, функции Грина, модель жидкости Латтинджера, формализм Ландауэра—Буттикера и Кубо—Гринвуда.

Проведенный анализ показывает, что даже для простейших структур на квантовых проволоках требуется одновременный учет широкого спектра факторов и процессов. Достичь этого в рамках описанных ранее упрощенных моделей в общем случае не удастся. Необходимо разработка более сложных численных моделей. Неплохие обзоры таких моделей приведены, например, в [87—89].

Важным следующим шагом в развитии формализма Ландауэра—Буттикера была разработка приближенного метода Датты (*S. Datta*) с соавторами [5, 90—92], который рассматривался при анализе моделей резонансно-туннельных структур [13]. Существенным моментом метода для мезоскопических систем является обобщение многотерминальной формулы Буттикера для тока типа (4) на случай непрерывного распределения зондов напряжения (терминалов) в виде [92]:

$$I(\mathbf{r}) = \frac{q^2}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r}' T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\mu(\mathbf{r}') - \mu(\mathbf{r})], \quad (5)$$

где $I(\mathbf{r})$ — ток; $T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — описывает вероятность (плотность вероятности прохождения) того, что электрон, испытав разрушающее фазу рассеяние в точке \mathbf{r}' , последующее подобное рассеяние претерпевает в точке \mathbf{r} ; $\mu(\mathbf{r})$ — электрохимический потенциал в точке \mathbf{r} . Соотношение (5) было выведено из достаточно общего квантового кинетического уравнения в рамках формализма Келдыша—Каданова—Бейма [13] с применением ряда приближений. Это позволило также получить уравнения для вычисления функции $T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и упрощенное квантовое кинетическое уравнение для электрохимического потенциала $\mu(\mathbf{r})$ в интегральной форме. Очень важным преимуществом метода по сравнению с рассмотренными ранее моделями в рамках формализма Ландауэра—Буттикера и Кубо—Гринвуда является возможность вычисления внутренних характеристик — плотности электронов и плотности тока в структуре. Электростатический потенциал находится в результате решения линеаризованного уравнения Пуассона. Эти характеристики, как известно, имеют принципиальное значение для анализа физических процессов непосредственно в структурах. Важным достоинством метода является также возможность включения в рассмотрение различных диссипативных процессов. Наиболее существенный недостаток — большое число независимых переменных даже в стационарном случае, а именно: \mathbf{r} , k (волновой вектор), E .

Поэтому для его реализации на практике в исходном квантовом кинетическом уравнении необходимо использовать много дополнительных аппроксимаций и условий. В результате, моделирование структур возможно в режиме линейного отклика при малых прикладываемых смещениях, низких температурах, только для электронов зоны проводимости, для простой модели процессов рассеяния и др. [92]. Об этом, к сожалению, часто забывают другие авторы, применяющие этот метод. Серьезным его недостатком является и нарушение консервативности плотности тока на границе "прибор—контакт".

С использованием описанного метода было проведено численное моделирование ряда простых структур [92]: проволоки с туннельным барьером в ее середине в одномодовом режиме; квантовых проволок с контактами в одно- и многомодовом режиме; сужений различной формы и др. Для построения дискретной модели использовался метод сильной связи для преобразования гамильтониана и получения соответствующего уравнения Дайсона в матричной форме для функции Грина. Подробно метод ее нахождения описан в [92]. После этого может быть вычислена функция $T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и решено уравнение для электрохимического потенциала в структуре $\mu(\mathbf{r})$, что представляет собой чрезвычайно сложную задачу [92]. Затем находятся плотность тока, токи терминалов и электростатический потенциал [92]. Отмечу, что несмотря на сложность дискретной модели расчеты были проведены за приемлемое время на рабочей станции Sun 4.

Заметим, что в литературе по рассматриваемым задачам описанный метод (или его модификации) часто просто называется методом или формализмом неравновесных функций Грина. К сожалению, при этом иногда не дается никаких комментариев, за исключением ссылок на работы Датты.

Достаточно часто при численном моделировании различных свойств квантовых проволок используется и формализм волновых функций [87—89] (см. также далее).

Требование учета большого числа деталей привело к тому, что для моделирования квантовых проволок (и простейших структур на их основе) стали интенсивно использоваться и модифицироваться методы расчета зонных структур твердых тел и свойств химических соединений (см., например [93—95]), т. е. применяемые ранее для определения характеристик материалов. Это является, пожалуй, одной из главных особенностей численного моделирования квантовых проволок. Отличный обзор таких методов и моделей приведен в работе [88].

В рассматриваемом случае при анализе ряда структур на квантовых проволоках (например, на основе отдельных атомов, молекул, атомных и молекулярных цепочек) метод эффективной массы может быть уже недостаточен и необходимо более детально явно учитывать электронную структуру системы (и не только собственно квантовой проволоки!).

Так как моделирование транспорта даже в квантовых проволоках (тем более в приборах на их основе), исходя из первых принципов, без согласующих параметров и с учетом всех деталей атомной конфигурации требует огромных затрат вычислительных ресурсов даже высокопроизводительных систем, то традиционно используются более простые подходы и методы. К ним могут быть отнесены [87, 88]:

- метод сильной связи (см. например, приближенный метод Датты с соавторами) и его различные разновидности*;
- методы теории функционала плотности;
- метод матриц переноса;
- методы формализма функций Грина;
- метод молекулярной динамики.

Рассмотрим эти методы. Использование эмпирических методов при расчете матричных элементов в методе сильной связи требует, к сожалению, большого числа параметров (от 15 до 29) [88]. В то же время от их знания во многом зависят результаты моделирования. Хотя и имеются неплохие наработки в этом направлении [88], однако многое еще предстоит сделать. Попытки решить эту проблему можно с использованием полуэмпирических и *ab initio* методов. Но и здесь возникают непростые вопросы, в частности, касающиеся различных приближений. Поэтому в настоящее время применение методов из первых принципов, несмотря на их перспективность, целесообразно в материаловедении, а эмпирических или полуэмпирических методов — для моделирования приборов [88]. Определенные успехи при расчете матричных элементов в методе сильной связи достигнуты с помощью методов теории функционала плотности (см., например, [97]) с различного рода аппроксимациями [88]. Это позволяет моделировать структуры с несколькими тысячами атомов, а следовательно, в принципе применимых к простейшим приборным структурам на квантовых проволоках.

В целом же, вычисление транспортных свойств на основе теории функционала плотности (или метода Хартри—Фока) должно проводиться очень тщательно, так как рассогласование теории и эксперимента по абсолютной величине тока может быть значительным, по меньшей мере, в 5—10 раз [88].

Возможные причины этого для моделей теории функционала плотности для двухэлектродных структур, включающих молекулы, выделены в работе [98], а именно:

- применяемые модели недостаточно уточнены;
- паразитные эффекты в экспериментах недооцениваются;

* Метод сильной связи и возможные пути его дальнейшего развития для моделирования двухтерминальных приборов, в которых имеются наноструктуры и в которых протекает ток, рассмотрены в обзоре [96].

- не совсем ясна физика границ раздела молекула—контакт, и она очень не проста ввиду сложности атомной структуры этих границ;
- несовпадение в общем случае уровней энергии, используемых в моделях, с реальными уровнями энергии системы;
- применение различных обменно-корреляционных функционалов, которые приводят к вариациям тока более чем на порядок по величине.

Ясно, что многие из отмеченных причин могут быть важны и при моделировании других приборных структур (см. далее).

Достаточно экономичные модели в рамках формализма волновых функций могут быть построены с использованием метода сильной связи и метода матриц переноса. Однако увеличивающееся число матричных перемножений приводит к понижению точности расчета, что ограничивает сложность моделируемых структур [88].

При использовании формализма функций Грина в сочетании с методом сильной связи и эмпирическими методами или методами теории функционала плотности, к сожалению, часто требуется обращение матриц очень больших размеров. Такой случай был нами уже рассмотрен при анализе моделей резонансно-туннельных структур [13]. Это, естественно, приводит к существенным затратам вычислительных ресурсов ЭВМ. Возможно также и нарушение консервативности плотности тока. Внимание необходимо и при согласовании функций Грина на внутренних границах. Тем не менее, такие модели применялись для исследования проводимости и расчета тока для отдельных молекул, атомов, углеродных нанотрубок, атомных цепочек, кремниевых нанопроволок и др. [87, 88]. Важным преимуществом формализма неравновесных функций Грина является возможность учета различных механизмов рассеяния, включая неупругие, и многочастичных (электрон-электронных) взаимодействий, по крайней мере, при вычислении тока в принципе (см. ранее и [88]). При этом часто используются формулы для тока, которые могут интерпретироваться как обобщения применяемых в формализме Ландауэра—Буттикера (см. (5), а также [88]). Возможно также моделирование совместного электрон-фононного переноса, например, в переходах из одного, двух атомов между различными полубесконечными 1D-контактами [99]. Генерация теплоты и ее перенос могут быть важны, так как иногда приводят к разрушению структур.

Остановимся на ряде интересных результатов, полученных недавно в стационарном случае.

С применением теории функционала плотности показано [100], что реконструкция поверхности тонких кремниевых квантовых проволок приводит к появлению поверхностных состояний, которые могут усиливать проводимость. В результате такие проволоки обладают металлическими или полуметаллическими свойствами, а следовательно, их легиرو-

ние не требуется для получения хорошо проводящих Si-проволок.

Интересные результаты были получены и в работе [101] при расчете средней длины свободного пробега и сопротивления длинных кремниевых квантовых проволок в результате сравнения формализмов Кубо—Гринвуда и Ландауэра—Буттикера. В рамках последнего использовалось рекурсивное вычисление функций Грина. Оказалось, что два формализма приводят к качественно согласующимся результатам* и имеют преимущества и недостатки, однако в процессе применения формализма Кубо—Гринвуда проблемы возникают чаще. Атомная и электронная структура проволок определялись на основе теории функционала плотности с помощью комплекса программ SIESTA. Это позволяло вычислить составляющие гамильтониана, необходимые в расчетах. При моделировании учитывался беспорядок в объеме и на поверхности.

Формализм неравновесных функций Грина и самосогласованное приближение Хартри—Фока использовались в работе [102] для исследования влияния примесного центра и взаимодействия электронов с и без учета спина электронов на проводимость квантовой проволоки с полубесконечными контактами в зависимости от длины, температуры и силы взаимодействия.

Электронная структура, фоновые моды и частоты, электрон-фононная связь и неупругие свойства транспорта в цепочке атомов (от 3 до 7) золота между полубесконечными контактами и молекул углеводорода между двумя золотыми контактами исследовались в работе [103]. Для этого было проведено расширение возможностей комплексов программ SIESTA и TRANSIESTA, основанных на теории функционала плотности. Кондактанс, ВАХ и плотность мощности с учетом неупругих процессов рассчитывались на основе формализма неравновесных функций Грина. При этом использовано рекурсивное вычисление функций Грина. Электрон-фононное взаимодействие учитывалось в рамках самосогласованного приближения Борна и более простого разложения, требующего существенно меньших вычислительных ресурсов ЭВМ. Использован формализм Ландауэра—Буттикера. Рассмотренный подход применим при малых смещениях. Было получено неплохое согласование с некоторыми экспериментальными данными.

В работе [104] исследовано влияние направления роста и шероховатостей поверхности на электронный транспорт в кремниевых квантовых проволоках малого диаметра (0,46—1,56 нм) с длиной до 390 нм. Теория функционала плотности использо-

* Интересно заметить, что в обзоре [96] было показано, что в рамках метода сильной связи может быть получено пять эквивалентных с математической и с физической точек зрения формул для тока и кондактанса (в пределе нулевых смещений и температур) для двухтерминальных приборов, включающих наноструктуры.

валась для задания атомной структуры проволок, в частности, применялся комплекс программ VASP. Для описания транспорта использовалась $sp^3d^6s^*$ -модель сильной связи в сочетании с формализмом неравновесных функций Грина. Электростатический потенциал предполагался изменяющимся линейно. Формализм Ландауэра—Буттикера применялся при вычислении тока и кондактанса. Показано, что указанные факторы могут существенно влиять на ВАХ проволок с полубесконечными контактами стока и истока, в частности, приводить к существенному падению тока с ростом смещений для некоторых ориентаций.

Структурные и электронные свойства гидрогенизированных кремниевых квантовых проволок с ориентацией роста $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ диаметром от 0,7 до 3,2 нм исследовались с использованием многоступенчатого метода [105]: оптимизация геометрии проводилась с применением полуэмпирического метода, а зонная структура вычислялась с помощью теории функционала плотности. Показано, что изменение поверхностной структуры за счет заместителей, а следовательно, и зонной структуры, может быть существенным, и зависеть от ориентации проволоки. Кондактанс и ВАХ рассчитывались с использованием метода неравновесных функций Грина в рамках формализма Ландауэра—Буттикера для квантовых проволок диаметром около 0,8 нм и длиной ~1 нм между двумя контактами из Li и Si. В первом случае (контакты из Li) обнаружена отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП) на ВАХ. Выбор Li связан с относительно малым временем вычисления, так как контакты из Au и Pt требуют при расчетах очень больших времен. Во втором случае (контакты из Si) устанавливаются собственно электрические свойства кремниевой квантовой проволоки. В целом, проводимость чувствительна к химически поглощаемым проволокой веществам, что может быть полезным для создания различных датчиков.

Приближение локальной спиновой плотности в неколлинеарном случае использовалось для исследования обменно-корреляционных эффектов с учетом спин-орбитального взаимодействия в квантовой проволоке на GaAs/AlGaAs-гетероструктуре [106]. Потенциал предполагался параболическим в поперечном сечении проволоки в сочетании с приближением эффективной массы. Анализировались специфика зонной структуры и кондактанс с учетом влияния магнитного поля при $T = 0$ К. Показано, что учитываемые эффекты и взаимодействия могут приводить к "аномальным плато" в кондактансе. Результаты, прежде всего, важны для спинтроники.

Влияние модулируемого во времени рассеивающего потенциала в конечной области квантовой проволоки исследовалось в работе [107]. Анализ переходных процессов проводился в рамках формализма волновых функций. Нестационарное уравнение Шредингера с использованием преобразования Фурье сво-

дилось к интегральному уравнению типа Липпмана—Швингера, которое далее решается численно. Форма потенциала в поперечном сечении предполагалась параболической. В работе рассчитывался кондактанс в стационарном случае, а также токи и плотность вероятностей в нестационарном случае при учете влияния магнитного поля. В предыдущей работе авторов [108] исследовалось распространение волнового пакета в квантовой проволоке с антиоточкой или параллельными двумя квантовыми точками при воздействии однородного магнитного поля. При вычислении кондактанса использовался формализм Ландауэра—Буттикера. В работе показано важное влияние силы Лоренца на физические процессы в структурах.

При анализе переходных процессов используются также методы сильной связи, теории функционала плотности и молекулярной динамики [88].

Так, метод молекулярной динамики в сочетании с методом теории функционала плотности использовались в работе [109] для моделирования точечного контакта на Na при конечной температуре $T = 190$ К. Исследовались процесс растяжения металлической проволоки (вплоть до разрушения), а также плотности состояний и кондактанс для определенных конфигураций контакта. Кондактанс вычислялся в рамках формализма Кубо—Гринвуда. Обнаружено, что спектральные характеристики и кондактанс испытывают динамические тепловые флуктуации в субпикосекундном диапазоне благодаря перегруппировке атомов металла. Это может существенно модифицировать транспортные свойства таких проволок. Данные результаты подчеркивают важность анализа переходных процессов даже в квантовых проволоках и простейших структурах на их основе.

В методе молекулярной динамики при вычислении сил применяется и формализм функций Грина [87, 88]. В сочетании с методом сильной связи может рассматриваться уравнение движения для оператора эволюции в представлении взаимодействия с дальнейшим вычислением тока по формуле, аналогичной используемой в формализме Ландауэра—Буттикера [110]. Перспективным является и применение методов Монте-Карло (см. ранее).

Таким образом, хотя немало достижений в развитии рассмотренных методов, еще многое предстоит сделать при согласовании моделей с экспериментом. Большое поле деятельности и по повышению экономичности моделей.

Среди других интересных моделей квантовых проволок (и простейших структур на их основе) отметим следующие.

В работе [111] была получена система упрощенных квантовых гидродинамических уравнений в стационарном случае для замкнутой квантовой проволоки с одним локализованным упругим рассеивающим центром с потенциалом в виде δ -функции. Уравнение Пуассона аппроксимировалось в режиме линейного отклика и малых температур.

Обращает на себя внимание тот факт, что если на начальном этапе применялись квазиодномерные модели, то впоследствии все чаще стали использоваться двумерные и даже трехмерные (по пространству) модели, особенно для атомных цепочек и молекул [89]. Это свидетельствует о том, что традиционное обоснование путем "разбиения" трехмерного уравнения Шредингера на два уравнения (двумерное в поперечном сечении, а одномерное в направлении транспорта) все меньше и меньше начинало удовлетворять исследователей, так как приводит к потере важных деталей, а как следствие, к возможному плохому количественному согласованию моделей с экспериментальными данными. *Принципиально важным здесь может становиться интерфейс между квантовой проволокой и макроскопическим контактом, а поэтому модель, вообще говоря, должна быть трехмерной.* Важность такого интерфейса была продемонстрирована в ряде работ (см., например, [112] для атомных цепочек расчет ВАХ с применением метода теории функционала плотности). Необходимым может быть и учет туннелирования на границе между квантовой проволокой и контактами [113].

Окончание см. в следующем номере

Список литературы

1. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. IV. Квантово-механические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24—32.
2. **Washburn S., Webb R. A.** Aharonov—Bohm effect in normal metal. Quantum coherence and transport // *Advances in Physics*. 1986. V. 35. N 4. P. 375—422.
3. **Webb R. A., Washburn S.** Quantum interference fluctuations in disordered metals // *Physics Today*. 1988. V. 41. N 12. P. 46—53.
4. **Datta S.** Quantum devices // *Superlattices and Microstructures*. 1989. V. 6. N 1. P. 83—93.
5. **Nanostructure.** Physics and Fabrication: Proc. of the International Symposium. College Station, Texas, 13—15 March, 1989 / Ed. by M. A. Reed, W. P. Kirk. San Diego: Academic Press. 1989. 517 p.
6. **Capasso F., Datta S.** Quantum electron devices // *Physics Today*. 1990. Feb. P. 74—82.
7. **Лускинович П. Н.** Метод синтеза квантовых интегральных элементов и схем // *Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника*. 1991. Вып. 3. С. 8—11.
8. **Aharonov Y., Bohm D.** Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory // *Phys. Rev. (Sec. Ser.)*. 1959. V. 115. N 3. P. 485—491.
9. **Шарвин Д. Ю., Шарвин Ю. В.** Квантование магнитного потока в цилиндрической пленке из нормального металла // *Письма в ЖЭТФ*. 1981. Т. 34. Вып. 5. С. 285—288.
10. **Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г., Спивак Б. З.** Эффект Ааронова—Бома в неупорядоченных проводниках // *Письма в ЖЭТФ*. 1981. Т. 33. Вып. 2. С. 101—103.
11. **Thornton T. J.** Mesoscopic devices // *Rep. Prog. Phys.* 1994. V. 57. P. 311—364.
12. **Петрашов В. Т.** Квантовый электронный транспорт в металлических наноструктурах // *Микроэлектроника*. 1994. Т. 23. Вып. 5. С. 3—16.
13. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники.

ки. В. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 3. С. 57–70.

14. **Обухов И. А.** Приборы на основе квантовых проводков: перспективы и проблемы // Материалы 6-й Международной Крымской микроволновой конференции, КрыМиКо'96, 1996, Севастополь, Крым, Украина. С. 55–64.

15. **Erdős P., Herndon R. C.** Theories of electrons in one-dimensional disordered systems // *Advances in Physics*. 1982. V. 31. N 2. P. 65–163.

16. **Tartakovski A. V.** Theory of mesoscopic transport in disordered wires // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 52. N 4. P. 2704–2722.

17. **Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А.** Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982. 360 с.

18. **Имри Й.** Введение в мезоскопическую физику. М.: Физматлит, 2004. 304 с.

19. **Демиховский В. Я., Вугальтер Г. А.** Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.

20. **Anderson P. W.** Absence of diffusion in certain random lattices // *Phys. Rev.* 1958. V. 109. N 5. P. 1492–1505.

21. **Абрикосов А. А., Рыжкин И. А.** Электрические свойства одномерных металлов // *ЖЭТФ*. 1976. Т. 71. Вып. 9. С. 1204–1224.

22. **Вопросы** квантовой теории необратимых процессов. Сб. статей, пер. с англ. / Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М.: Изд. иностр. литературы, 1961. 365 с.

23. **Landauer R.** Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1957. V. 1. July. P. 223–231.

24. **Landauer R.** Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices // *Philos. Mag.* 1970. V. 21. N 172. P. 863–867.

25. **Рёнке Г.** Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.

26. **Landauer R.** Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 3. P. 306–316.

27. **Büttiker M.** Four-terminal phase-coherent conductance // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 57. N 14. P. 1761–1764.

28. **Büttiker M.** Role of quantum coherence in series resistors // *Phys. Rev. B*. 1986. V. 33. N 5. P. 3020–3026.

29. **Büttiker M.** Symmetry of electrical conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 3. P. 317–334.

30. **Anderson P. W., Thouless D. J., Abrahams E., Fisher D. S.** New method for a scaling theory of localization // *Phys. Rev. B*. 1980. V. 22. N 8. P. 3519–3526.

31. **Anderson P. W.** New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible extension to higher dimensionality // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23. N 10. P. 4828–4836.

32. **Azbel M. Ya.** Quantum δ -dimensional Landauer formula // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1981. V. 14. P. L225–L230.

33. **Fisher D. S., Lee P. A.** Relation between conductivity and transmission matrix // *Phys. Rev. B* 1981. V. 23. N 12. P. 6851–6854.

34. **Langreth D. C., Abrahams E.** Derivation of the Landauer conductance formula // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 24. N 6. P. 2978–2984.

35. **Büttiker M.** Coherent and sequential tunneling in series barriers // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 1. P. 63–75.

36. **Sakaki H.** Scattering suppression of high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1980. V. 19. N 12. P. L735–L738.

37. **Petroff P. M., Gossard A. C., Logan R. A., Wiegmann W.** Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties // *Appl. Phys. Lett.* 1982. V. 41. N 7. P. 635–638.

38. **Lee J., Spector H. N.** Impurity-limited mobility of semiconducting thin wire // *J. Appl. Phys.* 1983. V. 54. N 7. P. 3921–3925.

39. **Lee J., Vassel M. O.** Low-field electron transport in quasi-one-dimensional semiconducting structures // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1984. V. 17. P. 2525–2535.

40. **Leburton J. P.** Size effects on polar optical phonon scattering of 1-D and 2-D electron gas in synthetic semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1984. V. 56. N 10. P. 2850–2855.

41. **Fishman G.** Phonon-limited mobility in quasi-one-dimensional semiconductor // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 36. N 14. P. 7448–7456.

42. **Lee J., Spector H. N.** Dielectric response function for a quasi-one-dimensional semiconducting system // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 57. N 2. P. 366–372.

43. **Строшио М., Дутта М.** Фононы в наноструктурах. М.: Физматлит, 2005. 320 с.

44. **Mickevičius R., Mitin V. V., Kim K. W., Strocio M. A., Iafrate G. J.** Electron intersubband scattering by confined and localized phonons in real quantum wires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. V. 4. P. 4959–4970.

45. **Vagner P., Moško M.** Electron-impurity scattering in free-standing quantum wires: Effect of dielectric confinement // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81. N 7. P. 3196–3200.

46. **Ghoshal A., Mitra B., Ghatak K. P.** On the effective electron mass in quantum well wires of ternary chalcopyrite semiconductors // *Il Nuovo Cimento*. 1990. V. 12D. N 7. P. 891–899.

47. **Ghoshal A., Chattopadhyay P., Bhattacharyya A.** One-dimensional hot-electron transport in quantum-well wires of polar semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1986. V. 59. N 7. P. 2511–2513.

48. **Chattopadhyay D., Bhattacharyya A.** Monte Carlo calculations of transport parameters of one-dimensional hot electrons in quantum-well wires // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 12. P. 7105–7107.

49. **Осадчий В. М.** Исследование методом Монте-Карло нестационарного переноса горячих электронов в квантовых проволоках // *Физика и техника полупроводников*. 1994. Т. 28. Вып. 9. С. 1636–1644.

50. **Борздов В. М., Комаров Ф. Ф.** Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск: Изд. БГУ, 1999. 235 с.

51. **Борздов В. М., Жевняк О. Г., Комаров Ф. Ф., Галенчик В. О.** Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Минск: Изд. БГУ, 2007. 175 с.

52. **Briggs S., Leburton J. P.** Size effects in multisubband quantum wire structures // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 38. N 12. P. 8163–8170.

53. **Mickevičius R., Mitin V., Strocio M. A., Dutta M.** Oscillations of photoconductivity and negative absolute conductivity in quantum wires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1993. V. 5. P. 2233–2254.

54. **Ando Y., Cappy A.** Ensemble Monte Carlo simulation for electron transport in quantum wire structures // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 6. P. 3983–3992.

55. **Telang N., Bandyopadhyay S.** Effects of magnetic field on hot electron transport in quantum wires // *Appl. Phys. Lett.* 1995. V. 66. N 13. P. 1623–1625.

56. **Jacoboni C., Brunetti R., Bordone P., Bertoni A.** Quantum transport and its simulation with the Wigner-function approach // *Int. J. of High Speed Electron. and Syst.* 2001. V. 11. N 2. P. 387–423.

57. **Nedjalkov M., Vasileska P., Ferry O. K., Jacoboni C., Ringhofer C., Dimov I., Palankovski V.** Wigner transport models of the electron-phonon kinetics in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. N 3. P. 035311-1–18.

58. **Sano N., Natori K.** Drift-velocity degradation caused by an electric field during collision in one-dimensional quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. N 12. P. R8325–R8328.

59. **Rossi F., Poli P., Jacoboni C.** Weighted Monte Carlo approach to electron transport in semiconductors // *Semicond. Sci. Technol.* 1992. V. 7. P. 1017–1035.

60. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Игнатенко С. А., Королев А. В., Новик Е. Г., Рогачев А. И.** Система модели-

рования нанозлектронных приборов — NANODEV // Микроэлектроника. 2003. Т. 32. № 2. С. 124—133.

61. **Абрамов И. И., Строгова А. С., Рогачев А. И.** Моделирование квантовых проволок на различных материалах с использованием формализма функций Вигнера // "Актуальные проблемы твердотельной электроники и микроэлектроники". Труды девятой междунар. НТК. Ч. 1. Дивноморское, Россия, 12—17 сентября 2004 г. С. 29—32.

62. **Yamada T., Sone J.** High-field electron transport in quantum wires studied by solution of the Boltzmann equation // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 9. P. 6265—6271.

63. **Briggs S., Leburton J. P.** Breakdown of the linear approximation to the Boltzmann transport equation in quasi-one-dimensional semiconductors // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39. N 11. P. 8025—8028.

64. **Bordone P., Pascoli M., Brunetti R., Bertoni A., Jacoboni C., Abramo A.** Quantum transport of electrons in open nanostructures with the Wigner-function formalism // *Phys. Rev. B*. 1999. V. 59. N 4. P. 3060—3069.

65. **Jin S., Fischetti M. V., Tang T.** Modeling of electron mobility in gated silicon nanowires at room temperature: Surface roughness scattering, dielectric screening, and band nonparabolicity // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 102. N 8. P. 083715-1—14.

66. **Arora V. K.** Quantum size effect in thin-wire transport // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23. N 10. P. 5611—5612.

67. **DasSarma S., Xie X. C.** Calculated transport properties of ultrasubmicrometer quasi-one-dimensional inversion lines // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 35. N 18. P. 9875—9878.

68. **Warren A. C., Antoniadis D. A., Smith H. I.** Quasi one-dimensional conduction in multiple, parallel inversion lines // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 56. N 17. P. 1858—1861.

69. **Datta S., Cahay M., McLennan M.** Scatter-matrix approach in quantum transport // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 36. N 10. P. 5655—5658.

70. **Cahay M., McLennan M., Datta S.** Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 17. P. 10125—10136.

71. **Vasilopoulos P., Peeters P. M.** Electrical transport in a quantum wire: Influence of one- and two-body interactions // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 15. P. 10079—10087.

72. **Bagwell P. F.** Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41. N 15. P. 10354—10371.

73. **Berthod C., Gagel F., Maschke K.** dc transport in perturbed multichannel quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. N 24. P. 18299—18311.

74. **Tamura H., Ando T.** Conductance fluctuations in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 44. N 4. P. 1792—1800.

75. **Nanostructures. and Quantum Effects: Proc. of JRDC Int. Symp., Tsukuba, Japan, 17—18 Nov., 1993 / Ed. by H. Sakaki, H. Noge.** Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1994. 356 p.

76. **Takagaki Y., Ferry O. K.** Conductance of quantum waveguides with a rough boundary // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. V. 4. P. 10421—10432.

77. **Dacal L. C. O., Damiao A. J., de Andrada e Silva E. A.** Quantum ballistic conductance of quasi-two-dimensional and three-dimensional semiconductor nanowires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 15. P. 155330-1—6.

78. **Khomaykov P. A., Brocks G., Karpan V., Zwierzycki M., Kelly P. J.** Conductance calculations for quantum wires and interfaces: Mode matching and Green's functions // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035450-1—13.

79. **Tekman E., Bagwell P. F.** Fano resonances in quasi-one-dimensional electron waveguides // *Phys. Rev. B*. 1993. V. 48. N 4. P. 2553—2559.

80. **Неволин В. К.** Q1D-проводники при конечных температурах // *Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника*. 1991. Вып. 6. С. 56—58.

81. **Баграев Н. Т., Иванов В. К., Клячкин Л. Е., Маляренко А. М., Шелых И. А.** Баллистическая проводимость кван-

товой проволоки при конечных температурах // *Физика и техника полупроводников*. 2000. Т. 34. Вып. 6. С. 737—741.

82. **Enss T., Meden V., Andergassen S., Barnabé-Thériault X., Metzner W., Schönhammer K.** Impurity and correlation effects on transport in one-dimensional quantum wires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 15. P. 155401-1—19.

83. **Келдыш Л. В.** Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ*. 1964. Т. 47. Вып. 4. С. 1515—1527.

84. **Dolcini F., Trauzettel B., Safi I., Grabert H.** Transport properties of single-channel quantum wires with an impurity: Influence of finite length and temperature on average current and noise // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 16. P. 165309-1—26.

85. **Ponomareva I., Menon M., Srivastava D., Andriotis A. N.** Structure, stability, and quantum conductivity of small diameter silicon nanowires // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 95. N 26. P. 265502-1—4.

86. **Lherbier A., Persson M. P., Niquet Y.-M., Triozon F., Roche S.** Quantum transport length scales in silicon-based semiconducting nanowires: Surface roughness effects // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. N 8. P. 085301-1—5.

87. **Ciraci S., Buldum A., Batra I. P.** Quantum effects in electrical and thermal transport through nanowires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2001. V. 13. P. R537—R568.

88. **Pecchia A., Di Carlo A.** Atomistic theory of transport in organic and inorganic nanostructures // *Rep. Prog. Phys.* 2004. V. 67. N 8. P. 1497—1561.

89. **Nanoscience. Nanotechnologies and Nanophysics / Ed. by C. Dupas, P. Houdy, M. Lahmani.** Berlin—Heidelberg—New York: Springer-Verlag. 2007. 823 p.

90. **Datta S.** Steady-state quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 8. P. 5830—5833.

91. **Datta S.** A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1990. V. 2. P. 8023—8052.

92. **McLennan M. J., Lee Y., Datta S.** Voltage drop in mesoscopic systems: A numerical study using a quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 43. N 17. P. 13846—13884.

93. **Цидильковский И. М.** Зонная структура полупроводников. М.: Наука, 1978. 328 с.

94. **Кацнельсон А. А., Степанюк В. С., Фарберович О. В., Сас А.** Электронная теория конденсированных сред. М.: МГУ, 1990. 240 с.

95. **Степанов Н. Ф.** Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.

96. **Todorov T. N.** Tight-binding simulation of current-carrying nanostructures // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002. V. 14. P. 3049—3084.

97. **Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча.** М.: Мир, 1987. 400 с.

98. **Kurth S., Stefanucci G., Almladh C.-O., Rubio A., Gross E. K. U.** Time-dependent quantum transport: A practical scheme using density functional theory // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035308-1—13.

99. **Lü J. T., Wang J.-S.** Coupled electron and phonon transport in one-dimensional atomic junctions // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. N 16. P. 165418-1—9.

100. **Rurali R., Lorente N.** Metallic and semimetallic silicon < 100 > nanowires // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 94. N 2. P. 026805-1—4.

101. **Markussen T., Rurali R., Brandbyge M., Jauho A.-P.** Electronic transport through Si nanowires: Role of bulk and surface disorder // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. N 24. P. 245313-1—11.

102. **Agarwal A., Sen D.** Conductance of quantum wires: A numerical study of effects of an impurity and interactions // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73. N 4. P. 045332-1—14.

103. **Frederiksen T., Paulsson M., Brandbyge M., Jauho A.-P.** Inelastic transport theory from first principles: Methodology and application of nanoscale devices // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75. N 20. P. 205413-1—22.

104. **Svizhenko A., Leu P. W., Cho K.** Effect of growth orientation and surface roughness on electron transport in silicon nanowires // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. N 12. P. 125417-1-7.
105. **Ng M.-F., Zhou L., Yang S.-W., Sim L. Y., Tan V. B. C., Wu P.** Theoretical investigation of silicon nanowires: Methodology, geometry, surface modification, and electrical conductivity using a multiscale approach // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N 15. P. 155435-1-11.
106. **Malet F., Pi M., Barranco M., Serra L., Lipparini E.** Exchange-correlation effects on quantum wires with spin-orbit interactions under the influence of in-plane magnetic fields // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N 11. P. 115306-1-12.
107. **Gudmundsson V., Thorgilsson G., Tang C.-S., Moldoveanu V.** Transient magnetotransport through a quantum wire // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. N 3. P. 035329-1-10.
108. **Thorgilsson G., Tang C.-S., Gudmundsson V.** Time-dependent magnetotransport of a wave packet in a quantum wire

- with embedded quantum dots // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N 19. P. 195314-1-9.
109. **Barnett R. N., Landman U.** Cluster-derived structures and conductance fluctuations in nanowires // *Nature.* 1997. V. 387. 19 June. P. 788-790.
110. **Kwapiński T.** Time-dependent transport through a quantum wire // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. N 15. P. 153303-1-4.
111. **Sorée B., Magnus W., Schoenmaker W.** Energy and momentum balance equations: An approach to quantum transport in closed circuits // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. N 3. P. 035318-1-11.
112. **Asari Y., Nara J., Kobayashi N., Ohno T.** Effect of crystalline electrodes on the transport properties of Al monatomic wires at finite biases // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 72. N 3. P. 035459-1-5.
113. **Fabrizio M., Gogolin A. O.** Interacting one-dimensional electron gas with open boundaries // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 51. N 24. P. 17827-17841.

УДК 53.043 + 539.21 + 537.868

А. Н. Пономарев, канд. техн. наук, ген. директор,
М. Е. Юдович, канд. хим. наук, ст. науч. сотр.,
 зам. ген. директора,
М. В. Груздев, инженер, **В. М. Юдович**, инженер,
 ООО "НТЦ Прикладных нанотехнологий",
 г. Санкт-Петербург,
 e-mail: 9293522@gmail.com

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ С НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ. ЧАСТЬ I. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ФАКТОРА

В рамках электромагнитной теории Максвелла рассмотрено взаимодействие электромагнитного и электростатического полей с немагнитной наночастицей. Показано, что определяющим фактором для результата взаимодействия является форма наночастицы. Обнаружено наличие гигантского резонанса (усиления напряженности поля) на поверхности частиц тороидальной формы.

Ключевые слова: наночастицы, электромагнитные поля, теория Максвелла.

Введение

В связи с бурным развитием различных методов получения наноматериалов в последние годы синтезируются все новые и новые виды наночастиц, различающихся как по химическому составу, так и по форме. Получены многочисленные практически значимые результаты по их использованию [1].

Вместе с тем, наблюдается определенное отставание в развитии теоретических представлений об энергетических взаимодействиях в наном мире. До некоторой степени разработанной можно считать

лишь теорию взаимодействия электрического поля с металлическими наночастицами [2], основанную на классических представлениях Максвелла. В настоящей работе сделана попытка распространить подобное описание на немагнитные структуры с расширением круга нанообъектов по их топологии (форме).

Исторически одними из первых наночастиц (наряду с наноструктурами серебра), полученных экспериментально, были частицы фуллероидной природы — фуллерены и углеродные нанотрубки. Такие наночастицы имеют жесткий атомный каркас из атомов углерода и в зависимости от структурных параметров этого каркаса обладают свойствами проводников, полупроводников или диэлектриков. В связи с этим фуллерены и нанотрубки являются весьма хорошим объектом для применения максвелловских представлений о взаимодействии электромагнитного поля с веществом.

Сравнительно недавно был открыт новый тип фуллероидов — астралены [3], имеющий принципиально иную топологию (квазитороидальную).

Таким образом, представляется перспективным применить классическую электромагнитную теорию к ряду наночастиц одной природы (фуллероидной, т. е. составляющих замкнутые поверхности из сочетания углеродных пентагонов и гексагонов), но имеющих разную форму: сферы, цилиндра, тора. То обстоятельство, что такие нанообъекты существуют в реальности, позволит впоследствии сопоставить полученные теоретические закономерности с экспериментом.

Рамки применимости развитых ниже теоретических представлений, по нашему мнению, не ограничиваются модельным набором фуллероидов. Они могут быть применены и к жестким наноструктурам иной природы, например, к оксидам, силицидам, сложным комплексным соединениям и т. п.

Методика расчета

Рассмотрим* рассеяние плоской электромагнитной волны на наночастице, имеющей в общем случае диэлектрическую проницаемость

$$\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'' = (n + i\gamma)^2, \quad (1)$$

где ε — диэлектрическая проницаемость; n — действительная, γ — мнимая части показателя преломления.

Для справедливости рэлеевского приближения, как известно, необходимо, чтобы фаза электромагнитной волны на размерах тела d не менялась существенно, т. е. должно быть $\exp ikd\sqrt{\varepsilon} \approx 1$, где k — волновое число. Или, что то же самое,

$$d \ll \lambda/2\pi\gamma, \quad (2)$$

где λ — длина падающей электромагнитной волны.

Как будет видно из дальнейшего, условие (2) для рассматриваемых нами наночастиц выполняется.

В работе [4] теория Максвелла применена к описанию свойств электромагнитной волны на поверхности протяженной эллиптической серебряной нанотрубки. При этом метод граничных интегральных уравнений [5] позволяет свести данную задачу к двумерной и требует размещения контрольных точек только на поверхности частицы. Метод успешно применялся в расчетах дифракции на осесимметричных телах, а также при моделировании двумерных задач зондирования земной коры.

Система координат выбирается так, чтобы ось z совпадала с осью нанотрубки. Тогда, используя уравнения Максвелла

$$\begin{cases} \nabla \times E = i\omega\mu_0 H; \\ \nabla \times H = -i\omega\varepsilon_0 E, \end{cases} \quad (3)$$

где E и H — напряженности электрического и магнитного полей, а ε_0 и μ_0 — диэлектрическая и магнитная постоянные вакуума, получается скалярное уравнение Гельмгольца (при условии $\mu = 1$):

$$\Delta H + \varepsilon k^2 H = 0. \quad (4)$$

С помощью тождества Грина уравнение (4) преобразуется к интегральному виду

$$H(P) = \oint_{\Gamma} \left[G \frac{\partial H(M)}{\partial n} - H(M) \frac{\partial G}{\partial n} \right] d\Gamma. \quad (5)$$

Здесь $G = G(P, M)$ — функция Грина; $P(x_0, y_0)$ и $M(x, y)$ — точки наблюдения и интегрирования соответственно; n — нормаль к поверхности. Контур Γ образован пересечением границы тела с плоскостью xy .

* В этой части мы основываемся на результатах работы [4], посвященной описанию рассеяния электромагнитной волны на серебряной нанотрубке.

Подстановка известного [5] для двумерного уравнения Гельмгольца выражения

$$G = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\sqrt{\varepsilon} k |P - M|), \quad (6)$$

где $H_0^{(1)}$ — функция Ханкеля первого рода нулевого порядка, в уравнение (5), а также учет граничного условия для тангенциальной и нормальной составляющей поля H позволяют получить систему граничных интегральных уравнений [4]:

$$\begin{cases} \oint_{\Gamma} \left[H_s \left(\frac{\partial G_e}{\partial n} - \frac{\delta}{2} \right) - \frac{\partial H_s}{\partial n} G_e \right] d\Gamma = 0; \\ \oint_{\Gamma} \left[H_s \left(\frac{\partial G_p}{\partial n} + \frac{\delta}{2} \right) - \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_e} \frac{\partial H_s}{\partial n} G_p \right] d\Gamma = \\ = - \oint_{\Gamma} \left[H_0 \left(\frac{\partial G_p}{\partial n} + \frac{\delta}{2} \right) - \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_e} \frac{\partial H_0}{\partial n} G_p \right] d\Gamma. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь внешнее поле H_e представлено в виде суперпозиции падающей H_0 и рассеянной H_s волн; n — внешняя нормаль к поверхности тела, индекс p относится к внутренней области тела, а $\delta = \delta(P - M)$ — дельта-функция Дирака.

Система уравнений (7) решается с помощью метода граничных элементов [6], для чего граница разбивается на интервалы, на каждом из которых обе искомые функции аппроксимируются эрмитовыми интерполянтами.

На рис. 1 приведены заимствованные из работы [4] зависимости коэффициента усиления поля (КУП) от длины падающей электромагнитной волны для

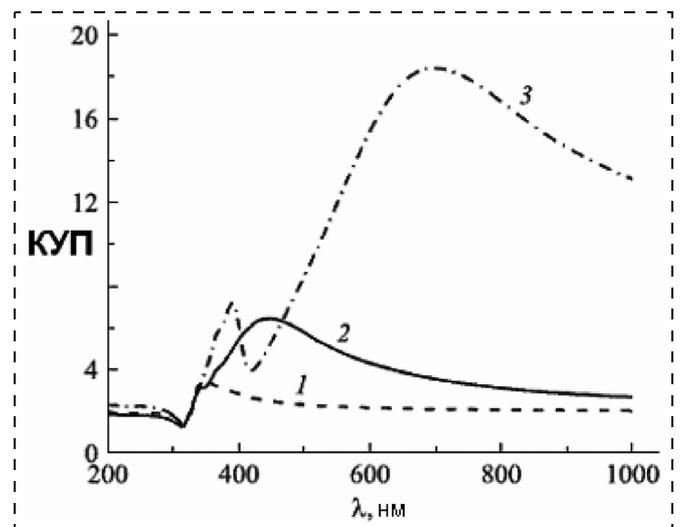


Рис. 1. Зависимость КУП от длины электромагнитной волны при различных значениях эксцентриситета сечения серебряного нанопцилиндра:

1 — $a/b = 1$; 2 — $a/b = 3$; 3 — $a/b = 9$ [4]

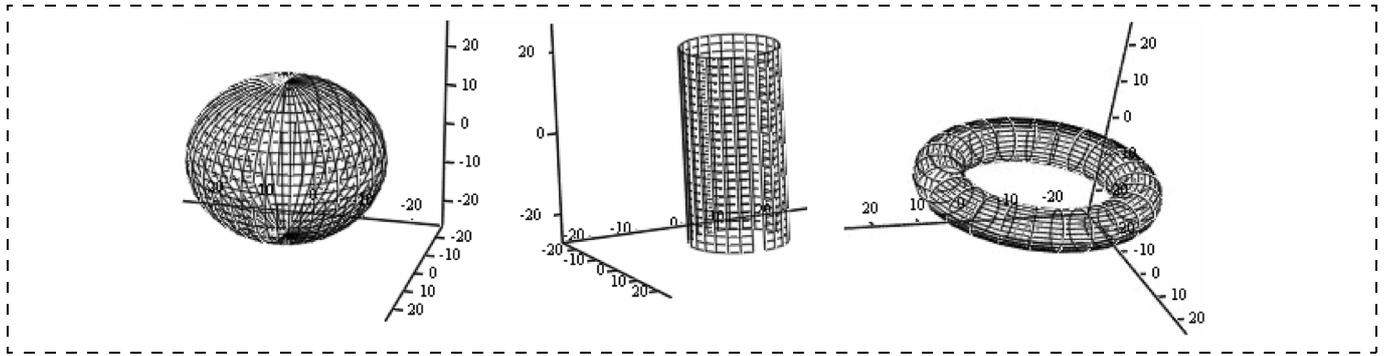


Рис. 2. Расположение координатных сеток относительно сферы, цилиндра и тора

различных отношений полуосей сечения эллиптического цилиндра при диэлектрической проницаемости серебра, равной $\epsilon = 1,4 + 2,8i$. При этом площадь сечения цилиндра оставалась постоянной и равной $\pi \cdot 1200 \text{ нм}^2$.

Можно видеть, что для КУП наблюдается весьма сильный резонанс, особенно при максимальной эллиптичности цилиндра. Обычно это явление связывают с так называемым "эффектом острия" [2, 7].

Расчет КУП для неметаллических структур с различной топологией

Ниже рассматриваются частицы форм сферы, цилиндра, тора. Их неметаллическость в рамках развешиваемого подхода задается тем, что мнимая часть диэлектрической проницаемости мала или равна нулю:

$$\epsilon''/\epsilon' \approx 0. \quad (8)$$

С целью расширить возможности метода несколько модифицируем схему расчета.

Расположим координатные сетки для всех трех объектов так, как иллюстрируется на рис. 2. Далее проведем замену координат в системе уравнений (7) с тем, чтобы сетка разбиений стала прямоугольной. В общем случае поверхность интегрирования не может быть сведена к одномерной, т. е. остается двумерной. Тем не менее задача может быть решена заменой интеграла квадратурной суммой [8]. Необходимо только использовать функцию Грина для уравнения Гельмгольца в трехмерном пространстве:

$$G = \left(-\frac{1}{4\pi} \right) \frac{\exp(-k\sqrt{\epsilon}|P-M|)}{|P-M|}. \quad (9)$$

В связи со значительным изменением геометрии задачи и расчетного метода, по нашему мнению, необходимо провести сравнение результатов его применения с данными, опубликованными в работе [4].

На рис. 3 приведена полученная численным интегрированием системы уравнений (7) при условии (8) (с использованием уравнения (9)) зависимость КУП от диэлектрической проницаемости неметаллической сферы. Длина падающей волны принята очень

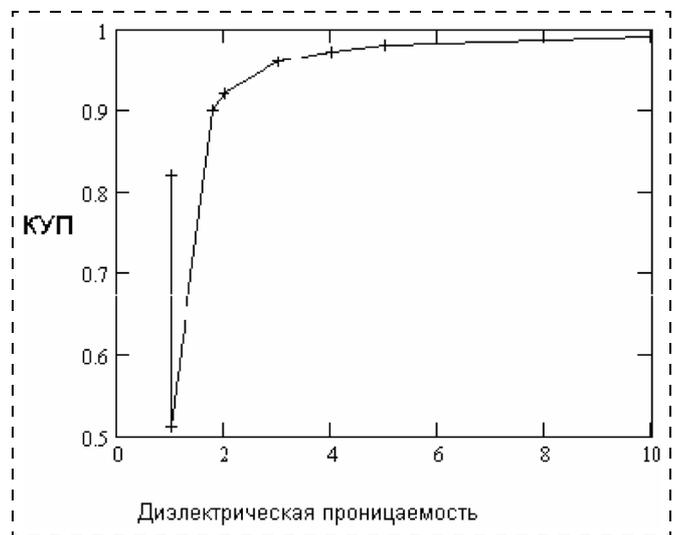


Рис. 3. Зависимость КУП от диэлектрической проницаемости неметаллической сферы

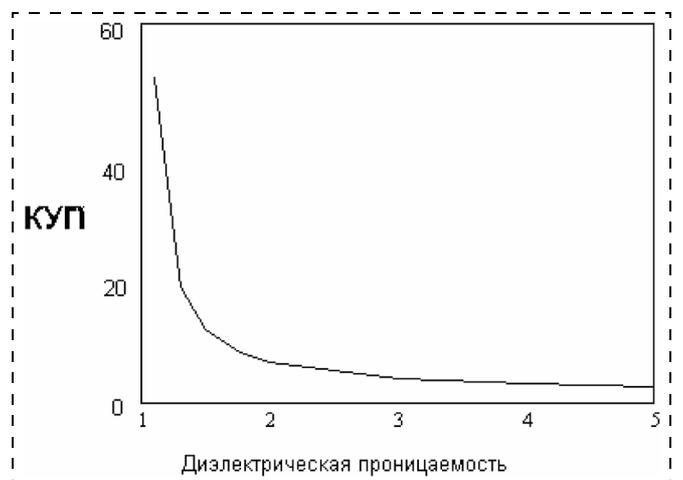


Рис. 4. Зависимость КУП от диэлектрической проницаемости неметаллического цилиндра

большой ($\lambda = 10^9$ нм), так что поле можно считать статическим.

Минимум на кривой есть не что иное, как стандартное увеличение ошибки при приближении к $\varepsilon = 1$, т. е. он связан только с особенностями численного решения системы уравнений (7). В целом же, как видно из графика, значения величины КУП асимптотически стремятся к единице, т. е. никакого усиления поля на поверхности диэлектрической сферы не происходит.

На рис. 4 приведена аналогичная зависимость для неметаллического цилиндра. Сразу же можно отметить, что топология нанобъекта играет принципиально важную роль для определения параметров электрического поля на поверхности рассматриваемой частицы. В целом же значения КУП соответствуют результатам работы [4] с той лишь разницей, что здесь рассматривается неметаллический цилиндр с круглым сечением. Последняя особенность не дает возможности объяснить наблюдаемое усиление поля "эффектом острия".

Обратимся теперь к рассмотрению наиболее сложного случая — тора. Для отработки методики расчета нами получены некоторые угловые зависимости значения КУП для случая серебряного тора (внешний радиус $R = 20$ нм, радиус "трубы" $r = 5$ нм, $\varepsilon = 1,4 + 2,8i$) при длине волны $\lambda = 630$ нм).

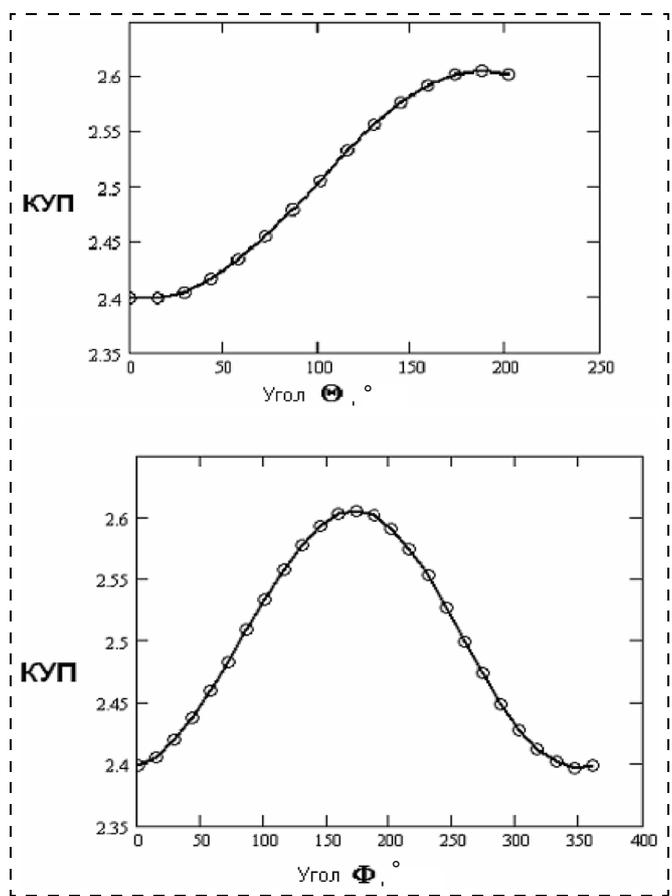


Рис. 5. Угловые зависимости КУП от полярных и азимутальных направлений

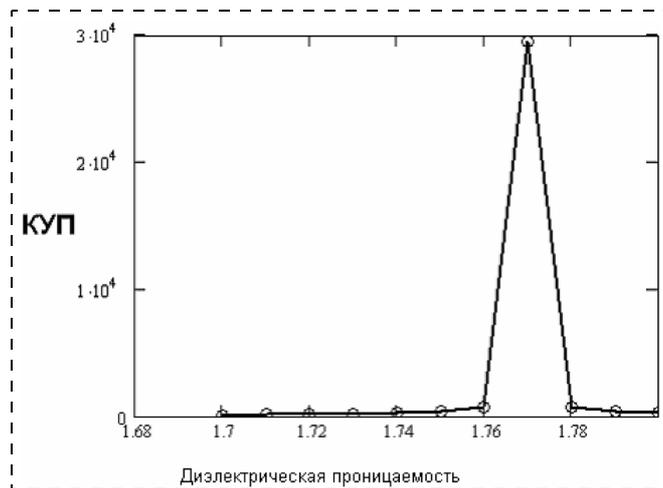


Рис. 6. Зависимость КУП от диэлектрической проницаемости тороидальной наночастицы

На рис. 5 приведены угловые зависимости значений величины КУП для вышеуказанных условий. Прежде всего, нельзя не отметить небольшие абсолютные значения собственно коэффициента усиления. Также следует отметить, что значения КУП очень незначительно зависят от углов наблюдения. Следовательно, рассеяние волны тором происходит практически равномерно во все стороны несмотря на его сильную анизотропию.

В настоящее время точные значения диэлектрической проницаемости углеродных нанотрубок и астраленов неизвестны; на этот счет существуют лишь единичные данные. Здесь можно указать, например, на оценку значения диэлектрической постоянной для фуллерита ($\varepsilon = 4 \div 4,5$) [9], а также на экспериментально измеренное значение $\varepsilon = 1,58$ для углеродной одностенной нанотрубки [10]. Это связано не только с экспериментальными затруднениями и большой номенклатурой подобных углеродных наночастиц, но и с известной неопределенностью самого понятия диэлектрической проницаемости в данном случае.

Действительно, и нанотрубки, и астралены обладают всеми признаками индивидуальной молекулы. Тогда для них не может быть определено понятие ε как статистической величины; скорее здесь применимо понятие поляризуемости. Вместе с тем, данные наночастицы построены из десятков и сотен тысяч атомов углерода и поэтому могут рассматриваться как статистические ансамбли.

В любом случае, оставляя этот вопрос открытым, мы провели оценку зависимости значения КУП на поверхности тороидальной структуры от значения диэлектрической проницаемости наночастицы.

Одна из таких зависимостей для неметаллического тора с параметрами: внешний радиус $R = 20$ нм, радиус "трубы" $r = 5$ нм, в квазистатическом ($\lambda = 10^9$ нм) электромагнитном поле приведена на рис. 6.

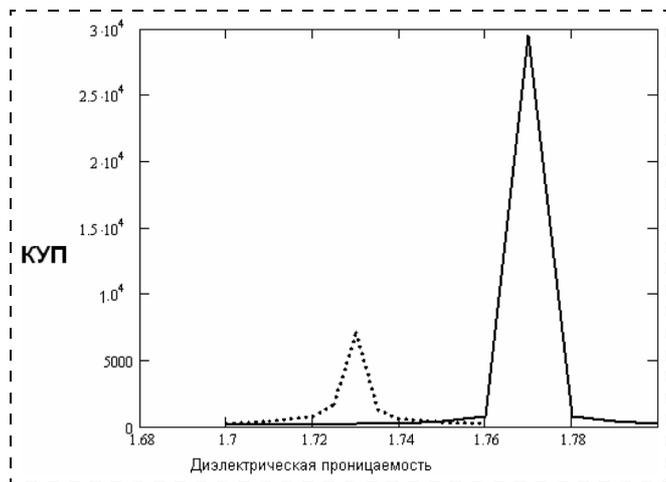


Рис. 7. Зависимость КУП от диэлектрической проницаемости тора для длин волн 10^9 нм (сплошная линия) и 630 нм (пунктир)

Легко видеть, что в точке с $\epsilon = 1,77$ обнаруживается гигантский резонанс поля. Существенно, что данное значение ϵ попадает в физически обоснованный интервал значений диэлектрических постоянных фуллероидных структур, отмеченный выше. Это совершенно не обычный факт побудил нас расширить параметризацию расчетов, что в результате позволило получить обширное семейство зависимостей. В рамках настоящей публикации мы приведем еще один график (рис. 7).

По сравнению с предыдущим рисунком здесь показана зависимость КУП на поверхности неметаллического тора от диэлектрической проницаемости для видимого света ($\lambda = 630$ нм), наложенная на зависимость, представленную на рис. 6. Можно легко видеть, что в случае видимого света резонанс смещается в сторону несколько меньших ϵ и уменьшается, все еще оставаясь гигантским.

Заключение

Завершая настоящее рассмотрение, необходимо отметить ряд принципиально важных моментов.

Прежде всего, существование на поверхности тороидальных наноструктур гигантских электрических резонансов позволяет не только объяснить многие эффекты, наблюдаемые при модификации композиционных материалов [11], но и прогнозировать их с учетом топологических особенностей тех или иных нанобъектов.

Действительно, хорошо известно наличие на межфазных границах весьма сильных статических полей дисперсионной природы [12]. Если теперь на такую границу поместить тороидальную наночастицу, то имеется возможность дополнительного усиления поля на несколько порядков. В этом случае возможно фор-

мирование совершенно необычных надмолекулярных структур в полимерах, появление аномалий при протекании различных химических реакций в органической и неорганической химии, смещение равновесий фазовых переходов (при плавлении, конденсации и т. п.). Гигантские резонансы электромагнитного поля могут найти применение в оптике и электрофизике, в электронике и радиационной физике, в машиностроении и при проектировании принципиально новых космических аппаратов.

Кроме того, представленный в настоящей работе эффект носит универсальный характер и не связан с природой фуллероидов (квазиароматический характер электронного облака, жесткий углеродный каркас и т. п.).

Действительно, главными и определяющими характеристиками наночастицы в расчете служат ее форма, размеры и диэлектрическая проницаемость. Специфические же характеристики отсутствуют полностью.

В последующих работах мы намерены расширить круг задаваемых параметров (размеры частиц, частотная зависимость) и систематизировать экспериментальные подтверждения представленного эффекта.

Список литературы

1. de S. Cameron Nigel M., Ellen Mitchell M. Nanoscale Issues and Perspectives for the Nano Century. Wiley-Interscience, A. John Wiley & Sons Inc., USA. 2007.
2. Оптика наноструктур / Под ред. А. В. Федорова. СПб: Недра, 2005. 326 р.
3. Пономарев А. Н., Никитин В. А. Патент РФ на изобретение № 2196731. Реестр ФИПС от 21.09.2000 г.
4. Зимовец С. В., Гешев П. И. Метод граничных интегральных уравнений для расчета рассеяния света на двумерных наночастицах // Журнал технической физики. 2006. Т. 76. № 3.
5. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972. 736 с.
6. Дмитриев В. И., Захаров Е. В. Вычислительные методы в программировании. 1968. Т. 10. С. 49—51.
7. Михеева О. П., Сидоров А. И. Поглощение и рассеяние инфракрасного излучения наночастицами диоксида ванадия с металлической оболочкой // Журнал технической физики, 2003. Т. 73. № 5. С. 79—83.
8. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Лаборатория базовых знаний, 2001. 632 с.
9. Сидоров Л. Н., Юровская М. А. Фуллерены: Учеб. пособие. М.: Изд-во "Экзамен", 2005. 142 с.
10. Khan M., Sood A. K., Mohanty S. K., Gupta P. K., Arobale G. V., Vijaymohan K., Rao C. N. R. Optical trapping and transportation of carbon nanotubes made easy by decoration with palladium // Optics express. 2006. V. 14 (1). P. 429—434.
11. Пономарев А. Н. Технологии модификации композиций фуллероидными наноматериалами // Пул Ч., Оуэнс Ф. "Нанотехнологии". М.: Техносфера, 2003. С. 319—327.
12. Дзялошинский И. Е., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Общая теория вандерваальсовых сил // Успехи химии. 1961. Т. 73. С. 381—421.

УДК 621.38.049.772.1

А. А. Невешкин^{1, 2}, канд. техн. наук, доц.,
e-mail: nevaa@mail.ru.

Б. А. Ревзин², аспирант,
e-mail: revzin@bk.ru

Д. А. Горин¹, канд. хим. наук, доц.,

А. М. Ященко¹, канд. физ.-мат. наук, доц.,

Б. Н. Климов¹, д-р техн. наук, проф.

А. В. Кумаков³, директор,

Ю. А. Кумаков³, вед. техн. специалист,
e-mail: jurakum@inbox.ru

¹ Саратовский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского,

² Саратовский государственный технический
университет,

³ ООО "ЭРБИЙ", г. Саратов

ПРИМЕНЕНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ УСТАНОВКИ НА БАЗЕ ХАРАКТЕРИОГРАФА "ЭРБИЙ-7107" ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МДП-СТРУКТУР, СОДЕРЖАЩИХ НАНОРАЗМЕРНЫЕ ПЛЕНКИ ЛЕНГМЮРА—БЛОДЖЕТТ

Описана автоматизированная установка для исследования электрофизических свойств МДП-структур, содержащих наноразмерные пленки. Рассмотрены конструктивные особенности измерительной установки, схема ее сопряжения с компьютером и программное обеспечение. Подробно описаны конструкция и функциональные возможности измерительной ячейки. Приведены результаты измерения вольт-амперных характеристик МДП-структур, содержащих органические наноразмерные пленки Ленгмюра—Блоджетт на основе каликсезорцинаренов с ионами никеля.

Ключевые слова: МДП-структура, электрофизические свойства, наноразмерная органическая пленка, пленки Ленгмюра—Блоджетт, автоматизированная измерительная установка.

Введение

Одним из перспективных направлений твердотельной электроники является интеграция наноразмерных органических пленок и традиционных полу-

проводниковых структур [1]. Это способствует разработке целого ряда новых приборов. Примерами служат устройства энергонезависимой памяти [2], матрицы инфракрасных приемников излучения [3], микроэлектромеханические датчики положений, акустические датчики [4] и анализаторы спектра [3], матриц для LCD-мониторов, OLED-дисплеев. Разрабатываемые устройства имеют следующие достоинства: высокий уровень миниатюризации и интеграции, возможность массового производства. Основными элементами служат МДП- и МДМ-структуры с наноразмерной органической пленкой в качестве диэлектрика. Для исследования электрофизических свойств таких систем необходимо проводить измерения вольт-амперных (ВАХ) и вольт-фарадных (ВФХ) характеристик в автоматическом режиме. В связи с этим актуальной является задача разработки и реализации автоматической установки с использованием характериографа "Эрбий-7107" и специального измерительного блока для проведения измерений вольт-амперных характеристик МДП-структур, содержащих наноразмерные слои, полученные методом Ленгмюра—Блоджетт.

Описание установки

Разработанный А. В. Кумаковым и Ю. А. Кумаковым [5] автоматизированный программно-аппаратный комплекс "Эрбий-7107" (рис. 1, см. третью сторону обложки) позволяет проводить исследования электрофизических свойств МДП-структур, содержащих наноразмерные пленки, методом статических ВАХ. Структурная схема установки "Эрбий-7107" приведена на рис. 2. В состав характериографа "Эрбий-7107" входит источник питания 1, управляющее устройство 2 с микроконтроллером АЦП, ЦАП и узлом для связи с ЭВМ 8 по интерфейсу RS 232, специальный измерительный блок 9, фотодиод 9с для контроля освещенности и регулятор освещенности 6, термодатчик 9е и терморегулятор 3, подключаемый к характериографу, источник напряжения испытываемого образца 4, измеритель тока через образец 5, универсальный осветитель 7.

Установка предназначена для измерений статических ВАХ различных полупроводниковых приборов и структур (типа "двухполюсник") в условиях заданной температуры и освещенности. Однако потенциальные возможности, которые могут быть реализованы при включении в конструкцию измерительного блока освещения, значительно шире, а именно: измерение параметров полупроводниково-

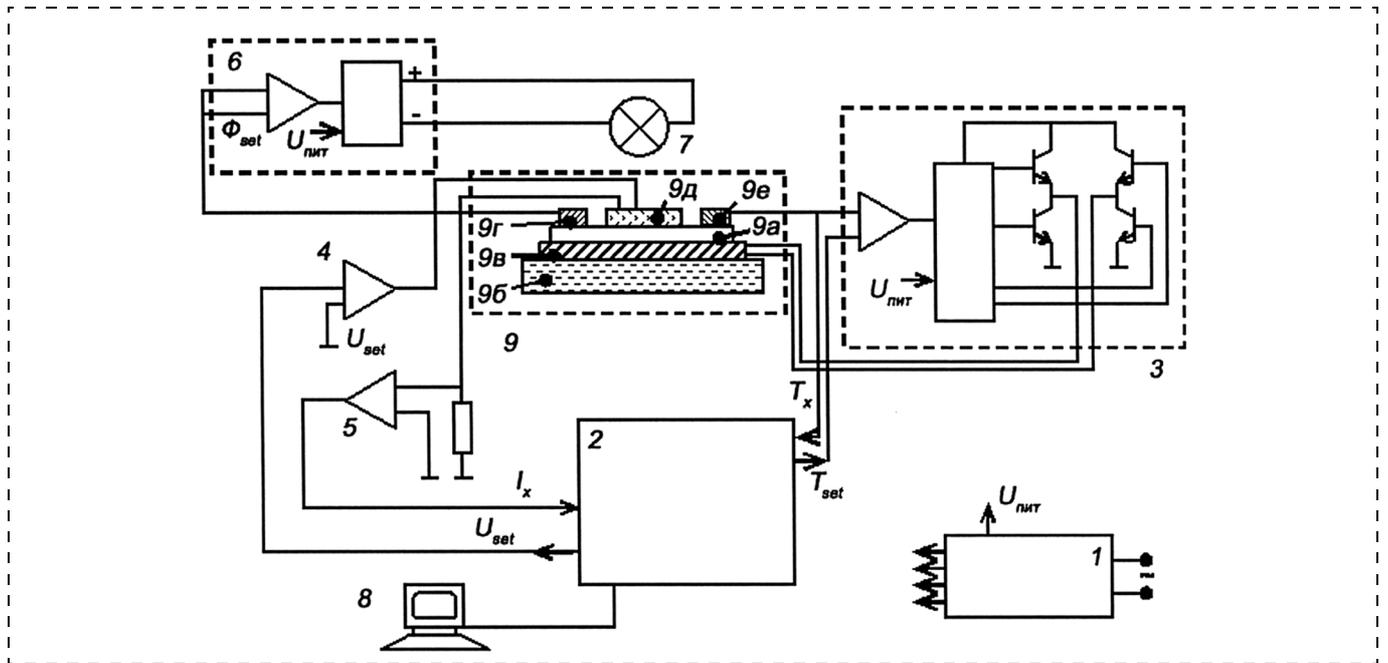


Рис. 2. Структурная схема установки "Эрбий-7107":

1 — источник питания 100 Вт; 2 — управляющее устройство с микроконтроллером АЦП, ЦАП, интерфейсом RS 232; 3 — термоконтроллер; 4 — регулятор напряжения; 5 — измеритель тока; 6 — регулятор освещенности; 7 — осветитель; 8 — ЭВМ; 9 — измерительный столик (9а — основание, 9б — теплоотвод холодильника, 9в — холодильник Пельтье, 9г — фотодиод — измеритель освещенности, 9д — образец, 9е — термоматчик)

го прибора (ток прибора, фототок короткого замыкания, фотоЭДС (напряжение холостого хода); получение ВАХ при различных освещенностях; получение зависимости фототока короткого замыкания от освещенности (люкс-амперная характеристика — ЛАХ); получение зависимости фотоЭДС (напряжения холостого хода) от освещенности (ЛВХ); получение временной зависимости тока $I(t)$ через прибор (функция самописца) — данный режим может быть полезен, как с точки зрения исследования инерционных свойств фотоприемников, так и для исследования резистивных твердотельных химических датчиков.

Прибор эксплуатируется совместно с персональным компьютером уровня 486, Pentium I или выше, имеющим порт RS 232, так как основная нагрузка лежит на микроконтроллере. В связи с этим нет необходимости в компьютерах с высокой производительностью, как, например, для измерительного комплекса, созданного с применением модулей *National Instruments* и программы *LabView 7.1* [6]. На компьютер установлена прилагаемая программа "Характериограф 7107" (рис. 3, см. третью сторону обложки), работающая в режиме *DOS* и режиме эмуляции *DOS* в ОС *Windows*, которая позволяет обеспечить заданные пользователем

параметры испытания: температуру, освещенность, напряжение на двухполюснике; измерить ток, фототок, фотоЭДС, шаг приращения напряжения и освещенности для быстрого получения ВАХ и ЛАХ. При измерении характеристик на экране монитора можно сразу видеть график полученных зависимостей. С помощью программы "Характериограф 7107" можно записывать численные значения величин (например, в случае измерения ВАХ — значения напряжений и токов) в текстовый файл. Полученные в таком виде данные можно затем обрабатывать, используя различные пакеты специальных программ, таких как *OriginPro*, *Microsoft Excel* и др.

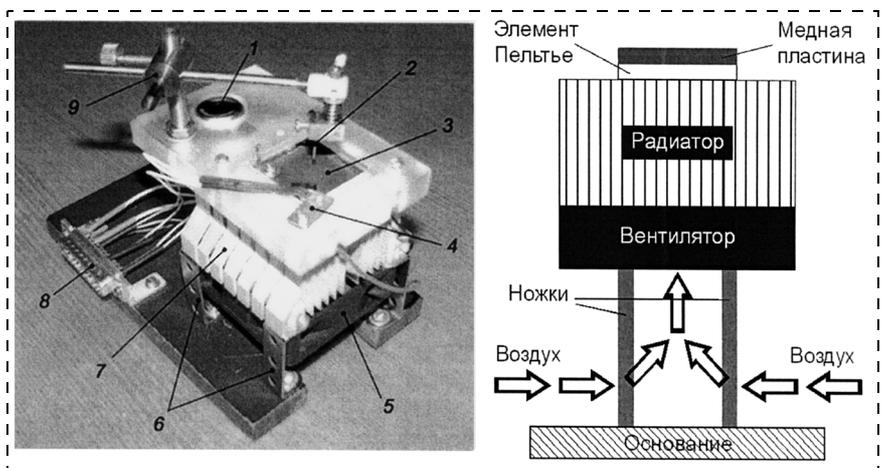


Рис. 4. Фотография измерительного блока и схема фрагмента измерительного блока: 1 — фотодиод; 2 — контакт; 3 — медная пластина; 4 — датчик измерения температуры; 5 — вентилятор; 6 — ножки; 7 — радиатор; 8 — разъем DB-25F; 9 — кронштейн

На рис. 4 приведены фотография специального измерительного блока, подключаемого к характернографу и обеспечивающего измерение электрических характеристик полупроводниковых приборов, а также схема его фрагмента.

Технические данные прибора

Напряжение на измерительной структуре можно варьировать в пределах от -5 до $+5$ В. Точность измерения и задания напряжения — от 0,1 до 1,3 % от предельного значения диапазона измерения. Шаг приращения напряжения выбирается от 10 мВ до 0,5 В. Ток полупроводникового прибора от -200 до $+200$ мА. При большем токе через полупроводниковый прибор включается защита от токовой перегрузки. Ток полупроводникового прибора измеряется с точностью 0,3...3 % от измеряемого значения в диапазоне токов не уже, чем 10 нА...200 мА любой полярности. Предусмотрена возможность использования универсального источника освещения. Значение освещенности определяется путем измерения тока фотодиода, расположенного в непосредственной близости от исследуемого полупроводникового прибора. Диапазон измеряемого фототока 1 мкА...20 мА. Точность измерения фототока в этом диапазоне 0,1...1 % от измеряемой величины. В приборе предусмотрен пересчет фототока в мощность излучения в милливаттах. Имеется возможность задания и измерения температуры держателя полупроводникового прибора с точностью 0,5 °С, стабильность 0,01...0,1 °С.

Измерение фотоЭДС полупроводникового прибора в диапазоне 40 мкВ...5 В с точностью не хуже 1,3 % от измеряемого значения. Входное сопротивление измерителя — не менее 1 ГОм. Измерение фототока короткого замыкания полупроводникового прибора в диапазоне 10 нА...200 мА с точностью не хуже 0,3...3 % от измеряемого значения.

Специальный измерительный блок для характернографа "Эрбий-7107"

Специальный измерительный блок — это конструкция для размещения испытуемого образца. Конструкцию специального измерительного блока, подключаемого к характернографу, можно существенно варьировать. Вид этой конструкции зависит не только от выбора входящих в нее стандартных элементов с параметрами, указанными в паспорте характернографа "Эрбий-7107" (микророзооильник Пельтье, фотодиод, термодатчик, вентилятор, радиатор охлаждения). Также он зависит от специфики исследуемых образцов, контактного устройства, выбора осветителя. С учетом всех указанных требований был разработан и изготовлен измерительный блок, показанный на рис. 4.

Для уменьшения вибрации была выбрана достаточно плотная и тяжелая платформа. К этой платформе на четырех ножках установлен охлаждающий

вентилятор с радиатором. Сверху на радиаторе — элемент Пельтье ТВ-127-1,0-0,8, далее — медная пластина, на которую кладется исследуемый образец. Элемент Пельтье находится в хорошем тепловом контакте с радиатором и медной пластиной. Сверху конструкция надежно фиксируется пластиной из оргстекла посредством четырех винтов, вкрученных через пластину в радиатор. В оргстекле вырезаны окошко для установки на медную пластину исследуемого образца, а также выемка для установки фотодиода ФД-24К. На медной пластине установлен датчик измерения температуры КР1019ЕМ1. На верхней пластине из оргстекла установлен кронштейн, на конце которого размещен зонд, подпираемый пружиной. Таким образом, зонд имеет три степени свободы и может быть установлен на контакт с различным усилием.

На основной платформе, несущей описанную конструкцию, вмонтирован разъем DB-25F, который обеспечивает подключение измерительного блока к характернографу "Эрбий-7107".

Также на платформе предусмотрено место для установки осветителя, необходимого для измерения фотоэлектрических характеристик образцов, хотя в описанных в настоящей статье экспериментах функцию поддержания освещения прибором не использовали.

Проведение тестовых измерений

Для тестирования установки были измерены ВАХ простейших приборов — резисторов. Для эксперимента было выбрано четыре резистора, номиналами 30 кОм, 200 кОм, 1 МОм и 5,1 МОм. Для каждого резистора было проведено 10 измерений ВАХ. В результате проведенных вычислений относительная погрешность измерений ВАХ резисторов, выбранных номиналов составила соответственно 0,01, 0,21, 0,46 и 0,55 %. Таким образом, установлено, что с увеличением сопротивления (в данном случае от 30 кОм, до 5,1 МОм) относительная погрешность также увеличивается (от 0,09 до 0,55 %).

Вольт-амперные характеристики МДП-структур, содержащих пленки каликсрезорцинаренов с ионами металлов

В исследуемых МДП-структурах (топология контактов и структура образцов представлена на рис. 5) в качестве диэлектрика использовались пленки каликсрезорцинаренов (КРА), различающихся длиной углеводородных цепей (рис. 6), с ионами никеля (Ni^{2+}). Формирование монослоев КРА, а также их перенос методом Ленгмюра—Блоджетт (ЛБ) на поверхность твердых подложек из монокристаллического кремния при постоянном поверхностном давлении (25 мН/м) осуществляли на модернизированной установке УНМ-2 (МНПО "НИОПИК", Россия), оснащенной весами Вильгельми [7]. Наличие ионов никеля в органической пленке подтверждено результа-

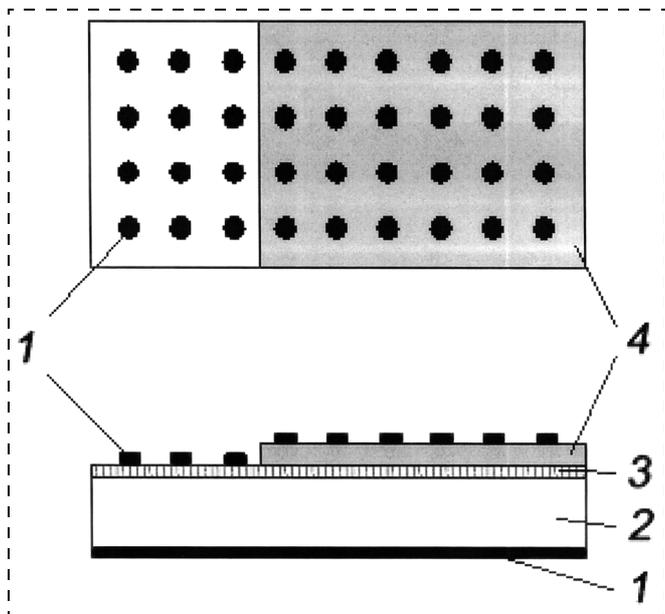


Рис. 5. Топология контактов и структура исследуемых образцов: 1 — контакты Al; 2 — Si; 3 — SiO₂; 4 — пленка ЛБ

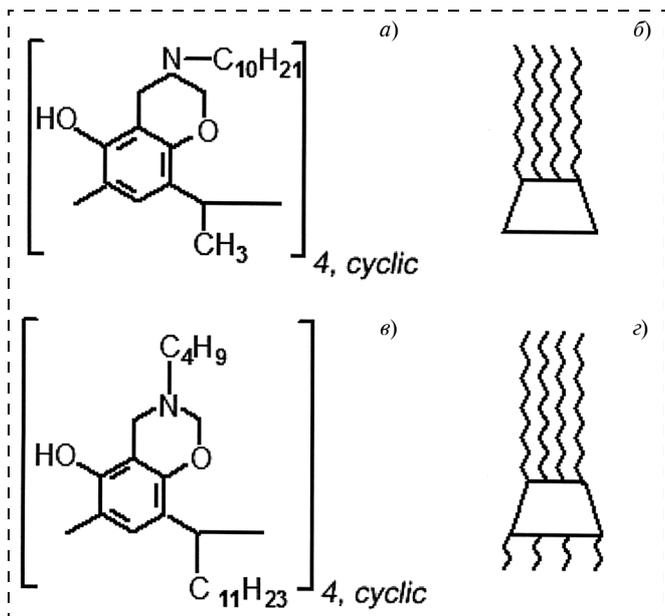


Рис. 6. Структурные формулы молекул КРА-1 (а) и КРА-2 (в) и их схематический вид (б) и (г) соответственно

тами вторично-ионной масс-спектрометрии [7]. На рис. 7, 8 приведены ВАХ исследуемых МДП-структур. На основе анализа ВАХ были рассчитаны сопротивления R МДП-структур в режиме обогащения (линейная часть прямой ветви ВАХ), по формуле $R = \Delta U / \Delta I$.

С использованием данных о сопротивлении МДП-структур с ЛБ пленкой и без нее (см. таблицу) рассчитывалось изменение их сопротивления, которое связано с нанесением ЛБ пленки, т. е. сопротивление ЛБ пленки ΔR .

Сопротивление образцов Al—КРА_Ni²⁺—Si

Число монослоев n	R , Ом	δ_R , %	ΔR , Ом	$\delta_{\Delta R}$, %
Al—КРА-1_Ni ²⁺ —Si				
0	1640	1,1	—	—
30	2056	2,3	416	15,9
60	2326	1,5	686	7,9
Al—КРА-2_Ni ²⁺ —Si				
0	768	2,9	—	—
30	1374	4,7	606	14,2
60	3213	7,4	2445	10,7

Из данных, представленных в таблице, следует, что с нанесением пленки на подложку и увеличением числа мономолекулярных слоев ЛБ пленки сопротивление МДП структуры Al—КРА_Ni²⁺—Si растет.

Таким образом, определены сопротивления рассматриваемых структур (без монослоев каликсрезорцинареннов и с ними), а также изменения их сопротивлений при нанесении пленки и увеличении ее толщины. Анализ результатов измерений, представленных в таблице, показывает, что с увеличением числа монослоев пленки ЛБ ее сопротивление возрастает, это хорошо согласуется с результатами работы [8]. Данное предположение также подтверждается анализом обратной ветви ВАХ МДП-структур (рис. 7, 8), из которых видно, что с увеличением числа монослоев пленки ЛБ уменьшается значение обратного тока во всем интервале изменения напряжения. Из таблицы видно, что сопротивление МДП-структур в случае образца Al—КРА-1_Ni²⁺—Si выше, чем у образца Al—КРА-2_Ni²⁺—Si при одинаковом числе пленок ЛБ. Возможно это связано с осо-

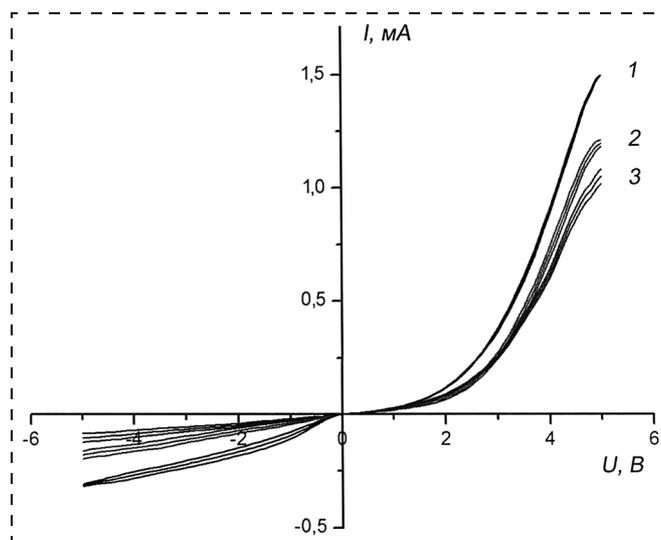


Рис. 7. Статические вольт-амперные характеристики образца Al—КРА-1_Ni²⁺—Si:

1 — Si; 2 — 30 слоев; 3 — 60 слоев

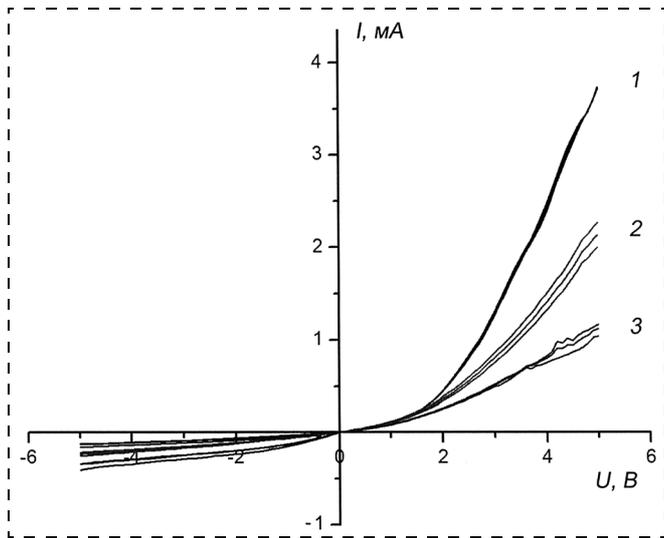


Рис. 8. Статические вольт-амперные характеристики образца Al-KRA-2-Ni²⁺-Si:
1 — Si; 2 — 30 слоев; 3 — 60 слоев

бенностями химического строения молекул каликсрезорцинаренов, а именно с тем, что суммарная длина алкильных цепей у KRA-2 больше, чем у KRA-1 (см. рис. 6). Углеводородные радикалы определяют диэлектрические свойства монослоя [9]. Следовательно, чем длиннее алкильные цепи, тем больше толщина диэлектрического слоя, а значит, и его сопротивление.

Навешкин А. А. благодарит программу ДААД (Германия) и Министерства образования и науки РФ "Михаил Ломоносов" (№ А/07/97642).

Список литературы

1. Плотников Г. С., Зайцев В. Б. Физические основы молекулярной электроники. М.: Изд-во МГУ, 2000. 164 с.
2. Setter N., Waser R. Electroceramic materials // Acta materialia. 2000. V. 48. P. 151–164.
3. Murali P. Micromachined Infrared Detectors based on Pyroelectric Thin Films // Reports on Progress in Physics. 2001. V. 64. P. 1339–1388.
4. Xiaoming Wu, Yi Yang, Jian Cai, Tianling Ren, Litian Liu. Measurements of Ferroelectric MEMS Microphones // Integrated Ferroelectrics. 2005. V. 69. P. 417/[1959] — 430/[1973].
5. www.erbyzar.com
6. Певцов Е. Ф., Горелов А. О., Пыжов Ю. А., Пыжова А. П. // Сб. тр. межд. научно-практ. конф. "Образовательные, научные и инженерные приложения в среде LabVIEW и технологии National Instruments". Москва, 14 ноября 2003 г. М.: Изд-во РУДН, 2003. С. 124–127.
7. Навешкин А. А., Русанова Т. Ю., Румянцева С. С. и др. Влияние ионов металлов на формирование и свойства монослоев и наноразмерных пленок Ленгмюра—Блоджетт на основе дифильных аминометилированных каликс[4]резорцинаренов // Журнал физической химии. 2008. Т. 82. № 2. С. 316–321.
8. Яценко А. М., Горин Д. А., Панкин К. Е. и др. Электрофизические свойства МДП-структур, содержащих наноразмерные пленки Ленгмюра—Блоджетт на основе β-циклодекстрина // Журнал технической физики. 2006. Т. 76. № 4. С. 105–108.
9. Блинов Л. М. Ленгмюровские пленки // Усп. физ. наук. 1988. Т. 55. Вып. 3. С. 443–475.

УДК 621.328(06)

И. А. Обухов, канд. физ.-мат. наук,
ООО "Наноэлектроника ТД", г. Королев, МО.
E-mail: iao001@mail.ru

ОСОБЕННОСТИ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ПРИБОРОВ

Показано, что квантовые приборы, в основу функционирования которых положены неравновесные пограничные эффекты, могут конкурировать по своим характеристикам с традиционными приборами микроэлектроники.

Ключевые слова: наноэлектроника, мезоскопические структуры, квантовые приборы, неравновесные эффекты, граничные эффекты, квантовый провод.

Введение

При разработке резонансно-туннельных диодов (РТД) стало ясно, что принятые в микроэлектронике подходы к проектированию оказались не вполне применимыми к квантовым приборам [1–10].

Упрощенные представления о физических эффектах, определяющих электрические характеристики РТД, приводили к тому, что экспериментальные результаты и предсказания теории различались на порядки (кривые 1 и 3 на рис. 1).

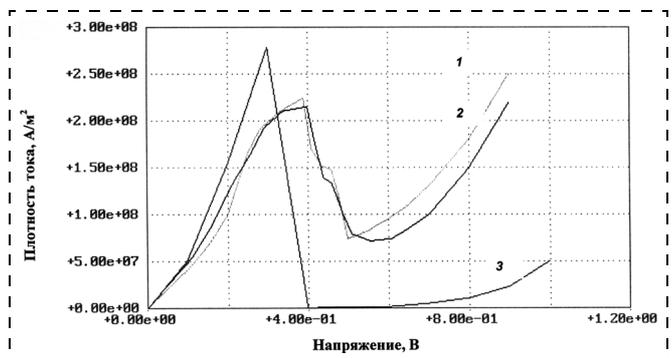


Рис. 1. Экспериментальная и теоретические вольт-амперные характеристики (ВАХ) РТД на основе GaAs/AlGaAs гетероструктуры на хорошо проводящей n+-подложке и с диаметром контакта к РТС 5 мкм при комнатной температуре ($T = 300$ К):

кривая 1 — эксперимент; кривая 2 — расчет на основе многофазной модели; кривая 3 — расчет на основе "стандартной" модели, использующей формулу Цу—Есаки для вычисления плотности тока

Более тщательное исследование процесса переноса заряда в РТД показало, что кроме собственно резонансного туннелирования, важное влияние на работу этого прибора оказывают неравновесные свойства электронного газа и классические явления. Хорошее соответствие теории и эксперимента было достигнуто при учете омического сопротивления резонансно-туннельной структуры и существенной неоднородности протекания тока через подложку [9–11].

Для адекватного описания характеристик РТД была разработана специальная многофазная модель переноса заряда, которая затем использовалась при проектировании и расчете характеристик других квантовых приборов [11]. Результаты этих исследований позволяют сделать вывод о принципиально важном влиянии неравновесных пограничных эффектов на электрические характеристики приборов с нанометровыми размерами активных областей.

1. Многофазная модель переноса заряда в мезоскопических структурах

В основу многофазной модели положено представление о газе носителей заряда (электронов), состоящем из различных фаз, взаимно однозначно соответствующих допустимым (интерпретируемым) состояниям этих носителей в исследуемой структуре. Каждая фаза характеризуется своим значением химического потенциала $F(x, \lambda)$. Индекс λ — это набор квантовых чисел интерпретируемого λ -состояния. Уравнения многофазной модели имеют следующий вид:

$$\begin{cases} i\hbar\partial\Psi_0(x, \lambda)/\partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m^{*-1}\nabla\Psi_0(x, \lambda)) - \\ - U(x)\Psi_0(x, \lambda) = 0, \\ (\nabla, \varepsilon\nabla\varphi(x)) = e(n(x) - N_{\text{int}}(x)), \\ \partial n(x, \lambda)/\partial t + (\nabla, \mathbf{n}(x, \lambda)) = -\hbar^{-1}\sum_{\lambda'}(F(x, \lambda) - \\ - F(x, \lambda'))\{n(x, \lambda)\Gamma_{\lambda\lambda'} + n(x, \lambda')\Gamma_{\lambda'\lambda}\}, \\ (\partial/\partial t + (\mathbf{u}(x, \lambda), \nabla))\mathbf{v}(x, \lambda) + \mathbf{v}(x, \lambda)/\tau(\lambda) = \\ = -\nabla F(x, \lambda)/m^*, \end{cases} \quad (1)$$

где

$$\begin{cases} U(x) = U^{\text{ext}}(x) - e\varphi(x), \quad x = (t, \mathbf{r}), \\ n(x) = \sum_{\lambda} n(x, \lambda), \quad \mathbf{n}(x) = \sum_{\lambda} \mathbf{n}(x, \lambda), \\ n(x, \lambda) = \rho(x, \lambda)f(s(x, \lambda)), \quad \mathbf{n}(x, \lambda) = \\ = \mathbf{j}(x, \lambda)f(s(x, \lambda)), \\ f(s) = 1/(\exp\{s\} + 1), \\ s(x, \lambda) = [E(x, \lambda) - F(x, \lambda) - \\ - m^*(\mathbf{u}(x, \lambda), \mathbf{v}(x, \lambda))]/kT, \quad \mathbf{u}(x, \lambda) = \\ = \mathbf{j}(x, \lambda)/\rho(x, \lambda), \\ \rho(x, \lambda) = \Psi_0^*(x, \lambda)\Psi_0(x, \lambda), \quad \mathbf{j}(x, \lambda) = \\ = -(i\hbar/2m^*)(\Psi_0^*(x, \lambda)\nabla\Psi_0(x, \lambda) - \\ - (\nabla\Psi_0^*(x, \lambda))\Psi_0(x, \lambda)), \\ E(x, \lambda) = (i\hbar/2)(\Psi_0^*(x, \lambda)\partial\Psi_0(x, \lambda)/\partial t - \\ - (\partial\Psi_0^*(x, \lambda)/\partial t)\Psi_0(x, \lambda))/\rho(x, \lambda). \end{cases} \quad (2)$$

Здесь \hbar — постоянная Планка; $\Psi_0(x, \lambda)$ — волновая функция электрона в интерпретируемом λ -состоянии; m^* — эффективная масса электрона; $U(x)$ — потенциал, включающий в себя встроенный потенциал $U^{\text{ext}}(x)$, обусловленный гетеропереходами или иными особенностями структуры, и самосогласованный электростатический потенциал $\varphi(x)$; ε — диэлектрическая проницаемость структуры; $n(x)$ — концентрация электронов; $N_{\text{int}}(x)$ — концентрация неподвижных зарядов (уровень легирования); $n(x, \lambda)$ — концентрация электронов в λ -состоянии; $\mathbf{n}(x, \lambda)$ — плотность пространственного потока электронов в λ -состоянии; $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ и $\Gamma_{\lambda'\lambda}$ — безразмерные вероятности переходов между λ и λ' состояниями [11]; $\mathbf{u}(x, \lambda)$ — микроскопическая скорость электрона в λ -состоянии; $\mathbf{v}(x, \lambda)$ — гидродинамическая скорость электрона в λ -состоянии; $\tau(\lambda)$ — время релаксации импульса электрона в λ -состоянии [12]; $\mathbf{n}(x)$ — пространственная плотность потока электронов; $f(s)$ — функция распределения электронов по λ -состояниям; $s(x, \lambda)$ — аргумент функции распределения электронов; $E(x, \lambda)$ — энергия электронов в λ -состоянии; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; $\mathbf{j}(x, \lambda)$ — пространственный поток плотности вероятности электронов в λ -состоянии; $\rho(x, \lambda)$ — плотность вероятности для электронов в λ -состоянии.

В системе (1) уравнение Шредингера описывает интерпретируемое состояние (λ -состояние) носителя заряда с эффективной массой m^* ; уравнение Пуассона описывает самосогласованный электростатический потенциал φ , определяемый концентрацией неподвижных зарядов N_{int} и суммарной концентрацией электронов n ; уравнение переноса с учетом опрделений (2) описывает поведение химического потенциала электронной λ -фазы; последнее уравнение в системе (1) описывает гидродинамическую скорость фазы $\mathbf{v}(x, \lambda)$.

Уравнения (1), (2) позволяют учесть влияние на перенос заряда неравновесных эффектов двух видов:

- отклонения электронного газа от состояния локального химического равновесия, определяемого условиями

$$F(x, \lambda) = F(x, \lambda'), \quad \text{для всех } \lambda \text{ и } \lambda'; \quad (3)$$

- отклонения гидродинамической скорости \mathbf{v} от равновесного решения

$$\mathbf{v}(x, \lambda) = -\tau(\lambda)\nabla F(x, \lambda)/m^*. \quad (4)$$

Модель последовательно в рамках единого формализма описывает квантовые и классические явления. В различных приближениях [10, 11] из уравнений (1) получаются и классические соотношения дрейф/диффузия [12], и чисто квантовая формула Цу—Есаки [4].

Применение многофазной модели к расчету характеристик РТД показало, что кроме эффекта резонансного туннелирования, важное влияние на ра-

боту этого прибора оказывают неравновесные свойства электронного газа и классические явления. Для того чтобы добиться хорошего соответствия теории и эксперимента, необходимо учитывать омическое сопротивление резонансно-туннельной структуры и растекание тока в подложке [9–11].

2. Особенности переноса заряда в мезоскопических структурах

Величиной, определяющей порог перехода от макроскопических структур к мезоскопическим, является длина размерного квантования L_{dq} [11, 13, 14]. Это характерный размер, при котором щель Δ между двумя низшими разрешенными уровнями энергии носителей заряда в структуре равняется энергии тепловых флуктуаций kT . Дальнейшее уменьшение размера структуры приводит к увеличению Δ . В простейшей модели, где потенциальный рельеф для носителей заряда имеет вид прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками, для L_{dq} получается выражение

$$L_{dq} = (3\hbar^2/2m^*kT)^{1/2}. \quad (5)$$

Анализ уравнений (1) позволяет выделить характерное время релаксации электронных фаз

$$\tau_0 = \hbar/kT \quad (6)$$

к состоянию химического равновесия (3). Характерная длина, на которой локализовано отклонение λ -фазы от этого равновесия, вычисляется по формуле

$$L_0(\lambda) = (\hbar\tau(\lambda)/m^*)^{1/2}. \quad (7)$$

Если воспользоваться определением (6), то из (5) следует, что

$$L_{dq} = (3/2)^{1/2}(\hbar\tau_0/m^*)^{1/2}. \quad (8)$$

Формулы (7) и (8) позволяют понять, что если

$$\tau(\lambda) \sim \tau_0,$$

то длины L_{dq} и L_0 являются величинами одного порядка.

Характерные длины релаксации химических потенциалов и размерного квантования для электронов при $T = 300$ К

Материал	Длина релаксации химических потенциалов электронов L_0 , нм	Длина размерного квантования для электронов L_{dq} , нм
Si	10	15
GaAs	24	25
InSb	73	58
Металлы	~2	~5

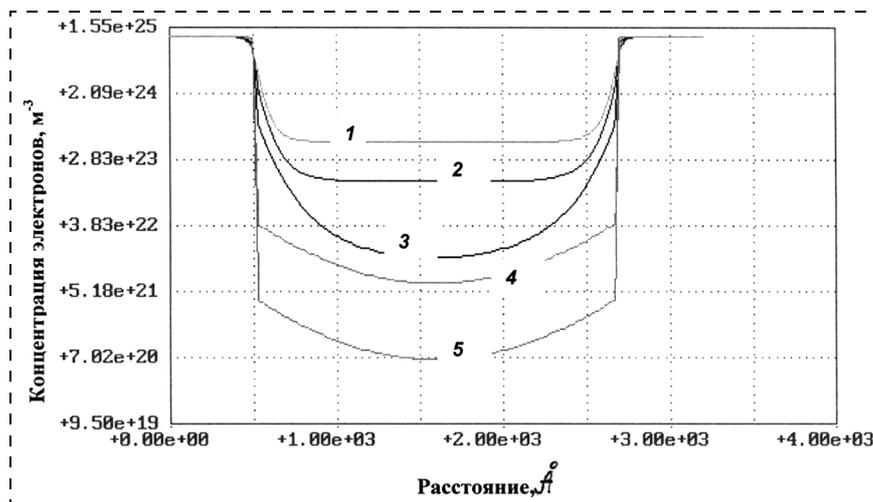


Рис. 2. Распределение концентрации электронов в КП в направлении переноса заряда при нулевом приложенном напряжении, комнатной температуре ($T = 300$ К) и различных L :

1 — "объемный материал" $L \gg L_{dq}$; 2 — $L = L_{dq}$; 3 — $L = L_{dq}/2$; 4 — $L = L_{dq}/3$; 5 — $L = L_{dq}/4$

Принимая в качестве оценки времени релаксации импульса в мезоскопических структурах значения этой величины в объемном материале, при комнатной температуре для L_0 получим значения, представленные в таблице. Из этих данных следует, что термины "мезоскопические структуры" и "наноструктуры" являются синонимами. Для представленных материалов длины L_{dq} и L_0 различаются менее чем в 1,5 раза. То есть для описания переноса заряда в мезоскопических структурах (наноструктурах) одинаково важно учитывать как квантовые, так и неравновесные свойства частиц.

Квантовые свойства электронов в мезоскопических структурах проявляются, прежде всего, в разреженности их энергетического спектра. Следствием этой разреженности является существенное уменьшение концентрации носителей заряда в наноструктурах по сравнению с объемным материалом.

В двумерном электронном газе — это уменьшение n примерно на порядок. В квантовых проводниках (КП) при поперечных размерах проводящего канала (ПК) $L < L_{dq}$ концентрация электронов ниже, чем в объемном материале на несколько порядков (рис. 2). Начиная с некоторого размера $L_F \sim L_{dq}$ в ПК происходит экспоненциально быстрое уменьшение концентрации электронов с убыванием L . Это обусловлено тем, что энергия первого разрешенного состояния для электронов в ПК при $L < L_F$ становится больше энергии Ферми в контактах КП [11, 15] (рис. 3).

Описанная закономерность существенно влияет как на электрофизические характеристики мезоскопических объектов [16], так и на электрические характеристики квантовых приборов на их основе [17].

Известно, что сопротивление металлов возрастает с ростом температуры. Однако для металлических квантовых проводов, у которых $L < L_F$, с ростом температуры наблюдается уменьшение сопротивле-

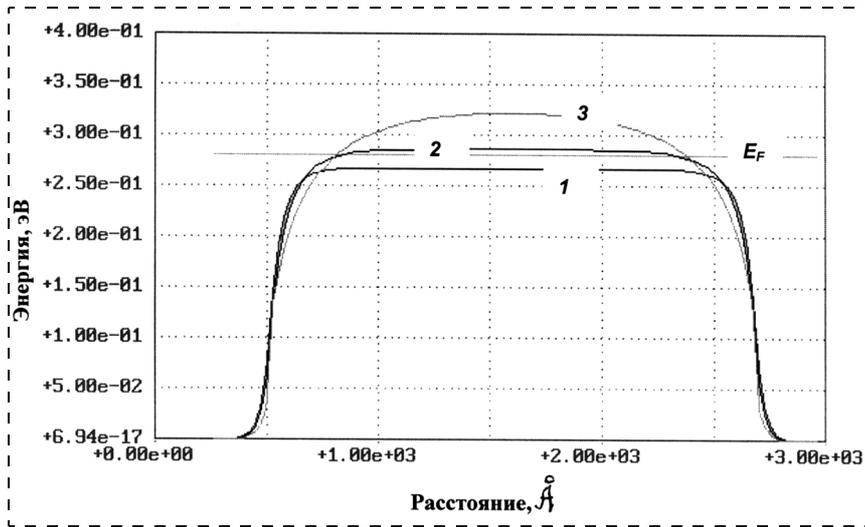


Рис. 3. Эффективные потенциальные рельефы для электронов в направлении Ox при нулевом приложенном напряжении, комнатной температуре ($T = 300$ К) и различных L : 1 — объемный материал; 2 — $L = L_{dq}$; 3 — $L = L_{dq}/2$

ния [16]. Это явление объясняется тем, что перенос заряда в проводящем канале такого тонкого провода осуществляется не собственными электронами, концентрация которых незначительна, а электронами, инжектированными из контактов посредством испарительной эмиссии [15].

Испарительная эмиссия — это переход электронов из состояний с энергией, меньшей или равной энергии Ферми в контактах, в состояния с большей энергией, соответствующей допустимым электронным состояниям в проводящем канале [11, 15]. Она сопровождается поглощением теплоты [18]. Имеет место и обратный процесс — конденсация, сопровождающаяся выделением теплоты. Если через структуру не протекает ток, то эмиссия и конденсация уравниваются друг друга. При протекании тока "испаренные" электроны увлекаются из контактной области в проводящий канал, существенно увеличивая концентрацию носителей заряда в нем. При этом в окрестности с размером порядка L_0 вблизи перехода эмиттерный контакт—проводящий канал образуется область неравновесности электронного газа. Именно она обеспечивает инжекцию электронов из контакта в канал. В аналогичной окрестности коллекторного контакта локализована область неравновесности, обеспечивающая

конденсацию частиц, поступающих из проводящего канала в контакт (рис. 4).

Этим механизмом объясняются рекордно большие плотности токов, которые были достигнуты в полевом транзисторе на основе КП [17]. Проведенные расчеты [11, 19] показывают, что при отсутствии инжекции из контактов плотность тока в приборе была бы несколько порядков меньше наблюдаемой.

Для осуществления эффективной инжекции электронов из эмиттерного контакта в проводящий канал квантового провода необходимо обеспечить высокий уровень неравновесности между данными конструктивными элементами прибора. Этого можно

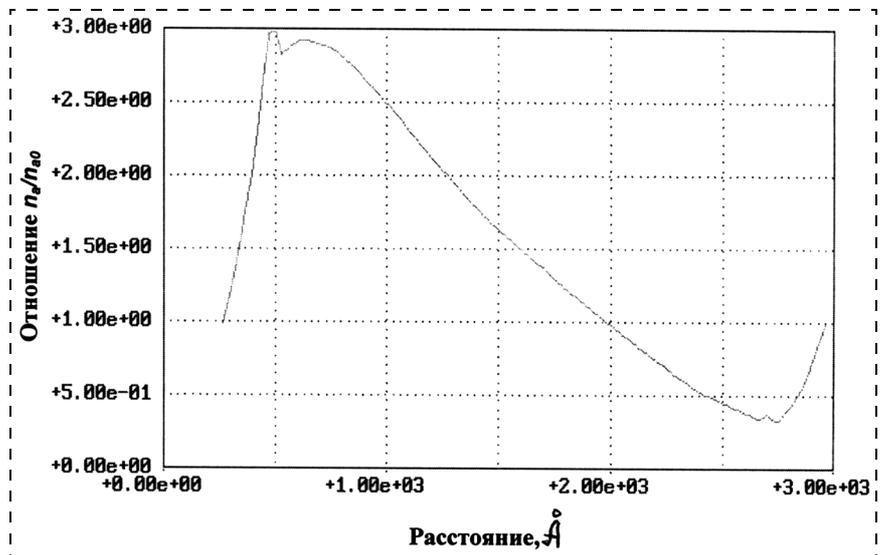


Рис. 4. Характерное для квантового провода пространственное распределение концентрации электронов n_a с энергией, большей E_F в контактах, при малом приложенном напряжении (в расчете $V_{ce} = 38$ В) и комнатной температуре ($T = 300$ К).

Величина n_{a0} — это концентрация n_a электронов при нулевом приложенном напряжении

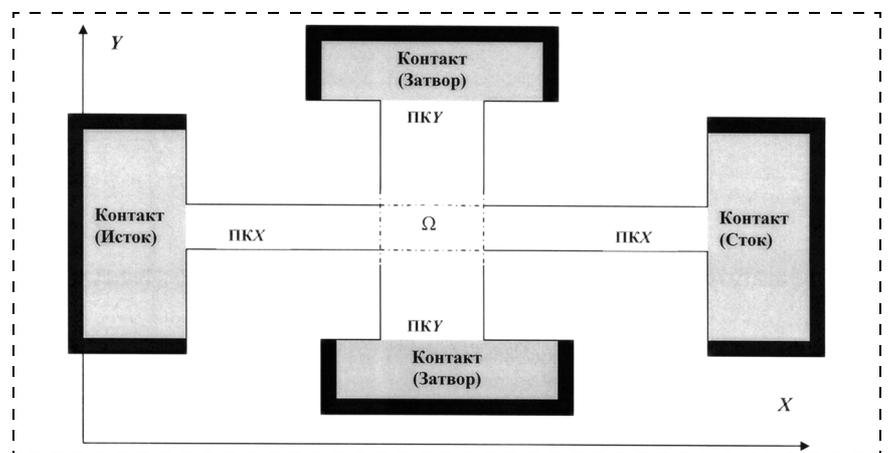


Рис. 5. Квантовый транзистор с инжекционным затвором

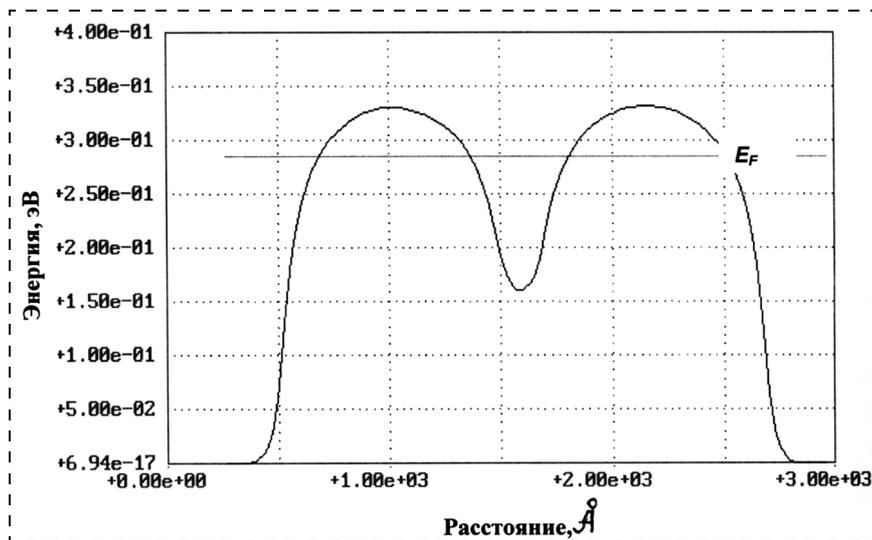


Рис. 6. Потенциальный рельеф и энергия Ферми КП при нулевом смещении с ПКХ, имеющем поперечные размеры $L = 3L_{dq}/4$

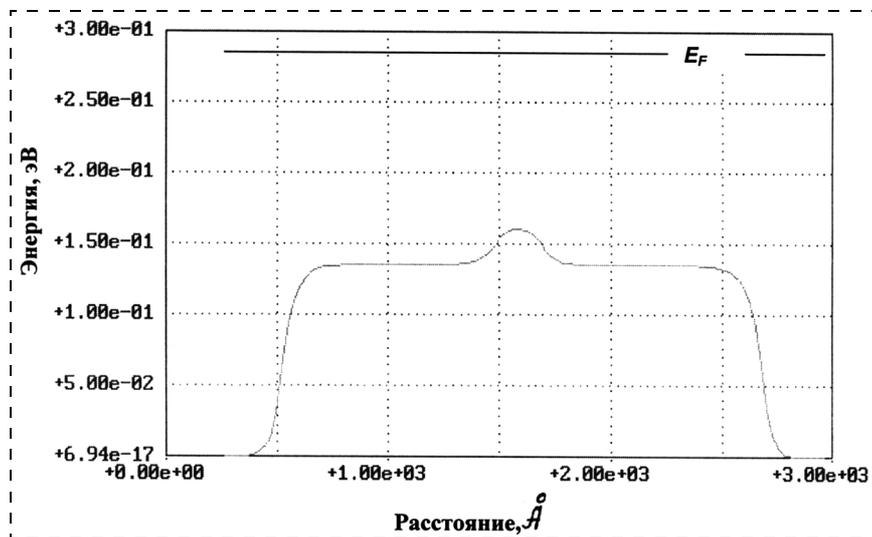


Рис. 7. Потенциальный рельеф и энергия Ферми ПК при нулевом смещении с ПКУ, имеющем поперечные размеры $L = 2L_{dq}$

добиться [11, 19, 20], используя границы, характеризуемые максимально высоким градиентом концентрации электронов. Для упомянутого полевого транзистора использовалась граница "прижимного типа" между металлом и углеродной нанотрубкой.

Испарительная эмиссия и высокая подвижность электронов в проводящем канале позволяют реализовать в полевом транзисторе на КП рекордно высокие плотности токов ($\sim 10^7$ А/см²) и удельную крутизну ($\sim 10^6 \dots 10^7$ А/В·см²). Однако собственно крутизна прибора оказывается $\sim 10^{-4} \dots 10^{-5}$ А/В, что на два порядка ниже, чем у обычных полевых тран-

зисторов. Это обусловлено малой площадью сечения проводящего канала, которая является непреодолимым препятствием на пути повышения крутизны полевых приборов на основе мезоскопических структур. Для увеличения влияния напряжения на затворе на ток в проводящем канале необходимо снижать концентрацию электронов в нем. Снижение концентрации ведет к уменьшению плотности тока. В обычных полевых приборах этот эффект компенсируется увеличением площади сечения канала и площади затвора.

Для достижения в приборах на основе квантовых проводов и других мезоскопических структур значений параметров управления, сравнимых и даже превышающих их значения для обычных макроскопических электронных приборов, целесообразно использовать неравновесные эффекты.

Вместо полевого транзистора можно сконструировать квантовый прибор с аналогичными выходными характеристиками, но с инжекционным затвором [11, 20]. Он представляет собой два квантовых провода, пересекающиеся проводящие каналы которых (ПКХ и ПКУ на рис. 5) имеют разные сечения.

Провод с более "толстым" каналом играет в этом случае роль затвора. Поскольку концентрация электронов в проводящем канале квантового провода зависит от попереч-

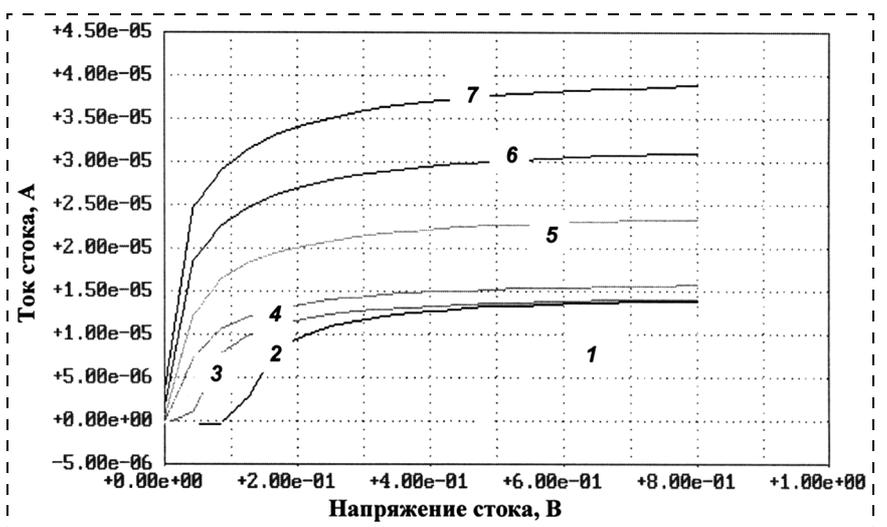


Рис. 8. Результаты расчетов ВАХ "тонкого" провода квантового транзистора с инжекционным затвором при различных напряжениях V_g , приложенных к "толстому" проводу: 1 — $V_g = 0,5$ В; 2 — $V_g = 0,1$ В; 3 — $V_g = 0,03$ В; 4 — $V_g = 0$ В; 5 — $V_g = -0,01$ В; 6 — $V_g = -0,02$ В; 7 — $V_g = -0,03$ В. В расчетах принималось, что $T = 300$ К

ного сечения канала, то на границах области пересечения проводящих каналов разного поперечного сечения (область Ω на рис. 5) образуются градиенты этой концентрации и, соответственно, потенциального рельефа (рис. 6 и 7). В зависимости от знака разности потенциалов между "тонким" и "толстым" каналами при протекании тока через область Ω реализуются режимы испарительной эмиссии или конденсации неравновесных электронов. Как показывают расчеты [20], эффективность этих процессов настолько высока, что позволяет добиться в приборе крутизны $\sim 10^{-3}$ А/В при удельной крутизне $\sim 10^8$ А/В \cdot см² (рис. 8).

Неравновесность электронного газа может быть реализована не только на пересекающихся, но и на последовательно соединенных одномерных проводящих каналах разного сечения. Если каждый из этих каналов подсоединить к различным контактным площадкам, как показано на рис. 9, то получится прибор, функционально аналогичный биполярному диоду [21] — релаксационный квантовый диод (РКД).

На рис. 10 показан потенциальный рельеф для электронов в РКД при нулевом смещении. Видно, что в области перехода между "толстым" ПК и "тонким" ПК созданы условия для реализации испарительной эмиссии или конденсации, в зависимости от знака приложенного напряжения. Этот прибор будет иметь типичную для диода асимметричную вольт-амперную характеристику [11, 21–23] (рис. 11).

Применяя четыре различных одномерных проводящих канала, можно спроектировать прибор, функционально аналогичный биполярному транзистору [11, 21–23]. Его топология показана на рис. 12.

Потенциальный рельеф для электронов в РКД в направлении эмиттер—коллектор при нулевых смещениях между контактами показан на рис. 13. Испарительная эмиссия или конденсация могут происходить в областях переходов эмиттер—база и коллектор—база. Базовый контакт является источником или стоком для электронов базового провода.

В этой конструкции неравновесные эффекты используются для усиления электрического сигнала. Для коэффициента усиления прибора по току β справедлива оценка [11, 12]

$$\beta \sim \exp\{-L_b/L_0\},$$

где L_b — длина проводящего канала, играющего роль базы (см. рис. 11). Если

$$L_b < L_0,$$

то РКД является транзистором с достаточно хорошими усилительными свойствами (рис. 14). Варьируя размеры проводящих каналов в рамках технологически достижимых величин, для β можно получить значения от 10 до 10^3 . Расчетные плотности тока в РКД достигают $10^6 \dots 10^7$ А/см², что соответствует экспериментально наблюдаемому в приборах на основе квантовых

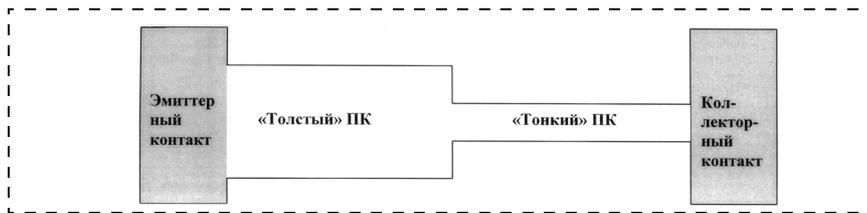


Рис. 9. Топология релаксационного квантового диода (РКД)

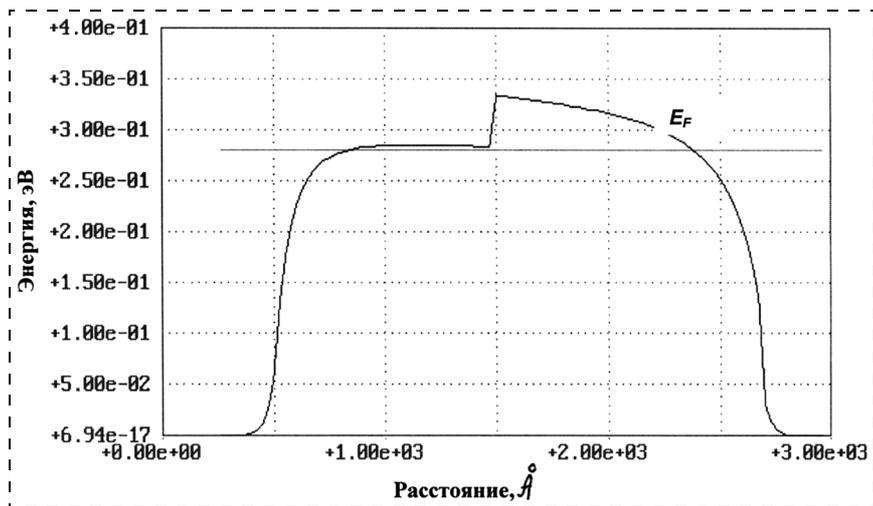


Рис. 10. Потенциальный рельеф для электронов в РКД на основе ПК с $L = L_{dq}$ ("толстый" ПК) и ПК с $L = L_{dq}/2$ ("тонкий" ПК) в направлении переноса при $V_{ce} = 0$

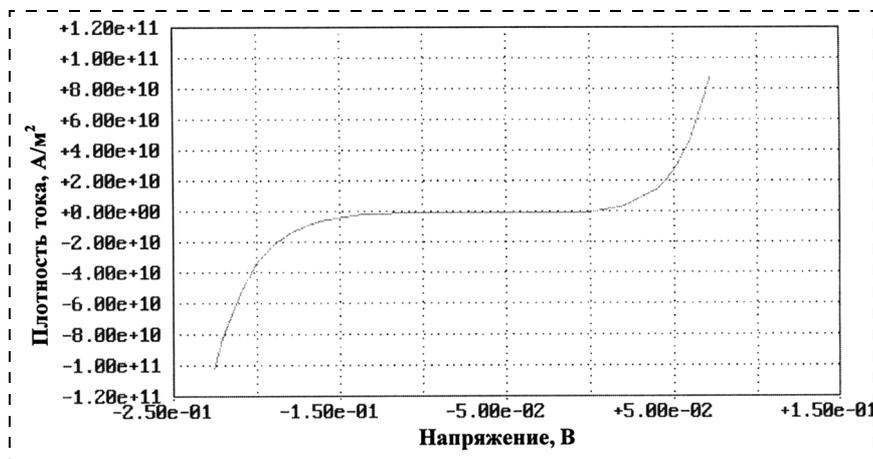


Рис. 11. Рассчитанная ВАХ РКД на основе ПК с $L = L_{dq}$ ("толстый" ПК) и ПК с $L = L_{dq}/2$ ("тонкий" ПК) при комнатной температуре ($T = 300$ К)

проводов значениям [13, 17]. Квантовый транзистор, имеющий такие параметры, вполне может конкурировать с традиционными биполярными приборами.

Заключение

Для мезоскопических структур, планируемых к применению в нанoeлектронике, характерны малые размеры, высокая подвижность и низкие концентрации носителей заряда. Эти особенности позволяют надеяться на достижение высоких рабочих частот квантовых приборов (10^{12} Гц и более) и высокой степени их интеграции в электронных схемах ($10^{10} \dots 10^{12}$ элементов/см²). Этими же особенностями обусловлены проблемы, возникающие при попытках проектировать и создавать наноприборы, способные конкурировать по своим характеристикам с традиционными полупроводниковыми приборами макроскопических размеров.

Достичь удовлетворительных электрических характеристик квантовых приборов возможно, если в качестве основы их функционирования использовать неравновесные эффекты. Отклонения состояния газа носителей заряда от состояния термодинамического (химического) равновесия вызываются протеканием тока через неоднородности потенциального рельефа, порождаемые гетерограницами и градиентами концентраций. Источники неравновесности локализуются в малых окрестностях этих неоднородностей, но оказывают решающее влияние на электрические характеристики мезоскопических структур. Это означает, что нанoeлектронику целесообразно строить как электронику границ и неравновесных пограничных эффектов.

Список литературы

1. Иогансен Л. В. // ЖЭТФ. 1966. Т. 50. Вып. 3. С. 709.
2. Тиходеев Ю. С. // Электронная техника. Сер. 2. Полупроводниковые приборы. 1973. Вып. 1 (73). С. 3.
3. Долманов И. Н., Толстихин В. И., Еленский В. Г. // Зарубежная радиоэлектроника. 1990. № 7. С. 66.
4. Tsu R., Esaki L. // Appl. Phys. Lett. 1973. Vol. 22. N 11. P. 562–564.
5. Solner T. C. L. G. et al. // Appl. Phys. Lett. 1983. V. 43. P. 588.

6. Brown E. R., Goodhue W. D., Solner T. C. L. G. // J. Appl. Phys. 1988. V. 64 (3). P. 1519.

7. Klusdahl N. C., Krivan A. M., Ferry D. K., Ringhofer C. // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 39. N. 11. P. 7720–7735.

8. Gavrillov O. T., Obukhov I. A., Dianov S. A. The classical regions influence on characteristics of resonant-tunneling diode // Proc. of the Second International Conference on Nanometer Scale Science and Technology (NANO-II). Moscow, Russia, 2–6 Aug. 1993. P. 860–870.

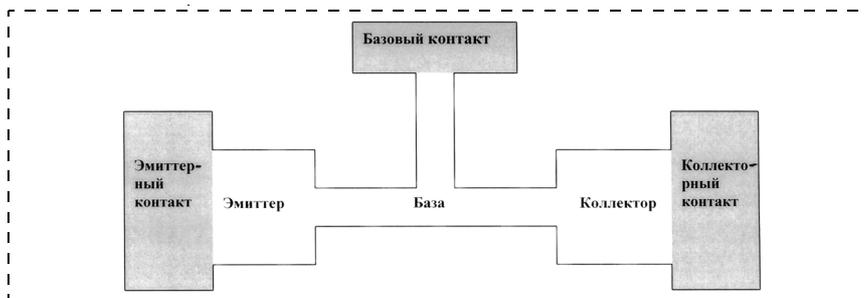


Рис. 12. Топология релаксационного квантового транзистора (РКТ)

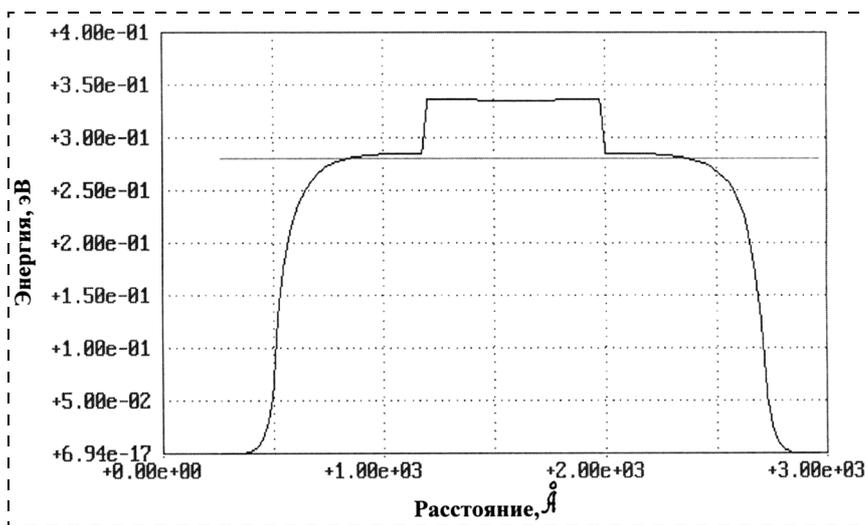


Рис. 13. Потенциальный рельеф для электронов РКТ в направлении переноса заряда от эмиттера к коллектору при $V_e = V_b = V_c = 0$.

Поперечный размер эмиттерного и коллекторного ПК равен L_{dq} а базового ПК — $L_{dq}/2$

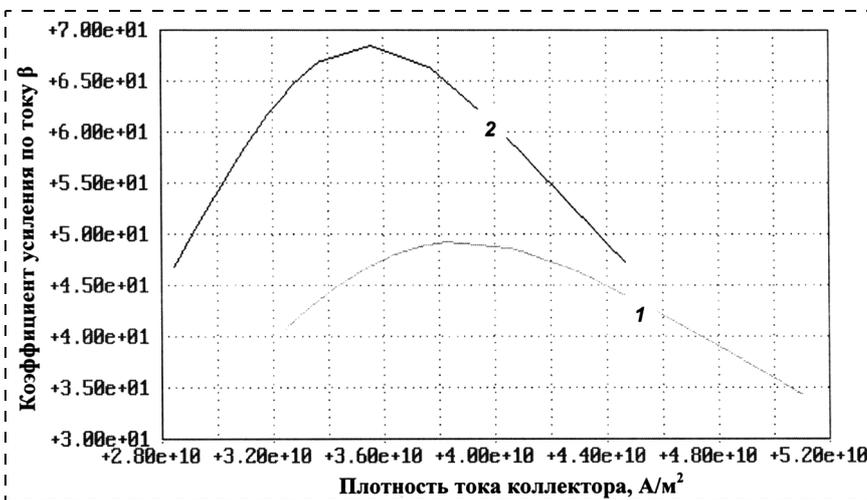


Рис. 14. Рассчитанный коэффициент усиления РКТ по току при схеме включения с общим эмиттером β при $L_b = 80$ нм и $V_{ce} = 0,06$ В (кривая 1); $V_{ce} = 0,07$ В (кривая 2), $T = 300$ К

9. **Гаврилов О. Т., Квяткевич И. И., Обухов И. А.** Влияние классических областей на характеристики резонансно-туннельного диода // *Материалы 7-й Международной Крымской конференции "СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии"*, 15–18 сентября 1997 г., Севастополь. Севастополь: Weber Co, 1997. С. 401–403.

10. **Обухов И. А.** Моделирование статических характеристик резонансно-туннельных приборов // *Микросистемная техника*. 2001. № 2. С. 23–28.

11. **Обухов И. А.** Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. Москва—Киев—Минск—Севастополь: Вебер, 2005. 226 с.

12. **Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г.** Физика полупроводников. М.: Наука, 1990. 688 с.

13. **Nanotechnology Research Direction: IWGN Workshop Report. Vision for Nanotechnology R&D in the Next Decade** / Ed. by M. C. Rocco, R. S. Williams, P. Alivisatos. Dordrecht/Boston/London: Kluwer Academic Publishers, 2000. 318 p. (Имеется перевод: *Нанотехнология в ближайшем десятилетии* / Пер. с англ. А. В. Хачоян; Ред. пер. с англ. Р. А. Андриевский. — М.: Мир, 2002. 292 с.).

14. **Frontiers in Nanoscale Science of Micron/Submicron Devices** / Ed. by Antti-Pekka Jauho and E. V. Buzaneva. NATO ASI Series, Series E: Applied Sciences Kluwer Academic Publishers, 1995. Vol. 328. 554 p.

15. **Обухов И. А.** О температурной зависимости сопротивления металлических квантовых проводов // *Нано- и микросистемная техника*. 2006. № 6. С. 33–36.

16. **Heremans J. P., Thrush C. M., Morelli D. T., Wu M.-C.** Resistance, Magnetoresistance and Thermopower of Zinc Nanowire Composites // *Phys. Rev. Lett.* 2003. 91. 076804.

17. **Martel R., Shmidt T., Shea H. R., Avouris P.** Single- and multi-wall carbon nanotube field effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 73. N 17. P. 2447.

18. **Обухов И. А.** Самоохлаждение эмиттерного контакта квантового провода // *Нано- и микросистемная техника*. 2007. № 5. С. 21–23.

19. **Квяткевич И. И., Обухов И. А., Чекадин М. С.** Моделирование полевого транзистора на основе квантового провода // *Материалы 12-й Международной Крымской микроволновой конференции*. Севастополь, 2002. С. 455–457.

20. **Обухов И. А., Квяткевич И. И., Лавренчук А. А., Румянцев С. В.** Статические характеристики пересекающихся квантовых проводов // *Материалы 14-й Международной Крымской микроволновой конференции*, Севастополь, 2004. С. 507–511.

21. **Обухов И. А.** О возможности создания релаксационных квантовых приборов // *Письма в "Журнал технической физики"*. 1993. Т. 19. Вып. 17. С. 12–16.

22. **Обухов И. А.** Приборы на основе квантовых проводов: перспективы и проблемы. *Материалы 6-й Международной Крымской конференции "СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии"*, 16–19 сентября 1996. Севастополь: Weber Co, 1997. С. 55–64.

23. **Обухов И. А.** О возможности применения СТМ—АСМ литографии для создания новых типов квантовых приборов // *Микросистемная техника*. 2003. № 6. С. 34–37.

Новости нано- и микросистемной техники

Малозумящая схема считывания для вибрационного MEMS гироскопа

Представлено описание малозумящей программируемой по усилению схемы считывания на переключаемых конденсаторах для гироскопа, изготовленного по объемной микромеханической технологии с резонансной частотой 3–4 кГц и полосой пропускания сигнала 100 кГц. Используется способ передачи заряда, позволяющий совместить считывание и формирование сигнала в одной структуре гироскопа для получения стабильного напряжения смещения, так что влияние возбуждающей силы флуктуации напряжения на общий узел при традиционном методе считывания устраняется. Схема устранения сдвига используется в схеме считывания для подавления смещения операционного усилителя и две программируемые конденсаторные матрицы также реализуются на

кристалле для компенсации исходного смещения емкости MEMS гироскопа. Для того чтобы смоделировать переходные характеристики схемы при работе с вибрационным гироскопом предлагается упрощенная модель, в которой используется напряжение, меняющееся по времени, для формирования конденсатора, с сопротивлением, меняющимся по времени. Схема изготовлена на кристалле площадью $2 \times 2,5 \text{ мм}^2$ с использованием стандартного 0,35 мкм КМОП технологического процесса. Результаты моделирования показали, что схема считывания может регистрировать вариации входной емкости на уровне 95 аФ в полосе 100 кГц с динамическим диапазоном 83,4 дБ от одного источника питания 5 В.

Yin T. et al. A low-noise readout circuit for MEMS vibratory gyroscope // *3rd IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems*. 6–9 Jan. 2008. P. 124–127.

Монолитный трехосевой микромеханический кремниевый емкостной гироскоп

Представлено описание конструкции, моделирования, изготовления и результатов предварительного тестирования монолитного трехосевого вибрационного гироскопа. Прибор воплощает в себе интеграцию двух одноосевых плоскопараллельных гироскопов (оси x и y) и одного одноосевого внеплоскостного гироскопа (ось z). Все три отдельных гироскопа активируются электростатической силой и детектируются конденсаторами. В целях тщательного изучения вибрационных характеристик прибора сконструированные структуры гироскопа были проанализированы детально теоретически и промоделированы с использованием метода конечных элементов (FEM) программы ANSYS8.1. Трехосевой гироскоп изготовлен на общей стеклянной подложке с использованием технологии по обработке объемного кремния, что позволяет получить большие значения испытательной массы (*proof-mass*) и считывающей емкости и улучшить чувствительность гироскопа. Задающие характеристики гироскопов были протестированы при атмосферном давлении и результаты показали, что максимальная ошибка между практическими резонансными частотами и теоретическими составила 5 %, что соответствует требованиям конструкции.

Xu Y. et al. A Monolithic Triaxial Micromachined Silicon Capacitive Gyroscope // Proc. of 1st IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems. Jan. 2006. P. 213—217.

Конструирование и изготовление нового трехосевого микрогироскопа

Представлено описание инновационного микрогироскопа, обладающего возможностями обнаружения угловых перемещений по трем осям. Эффект взаимосвязи угловых скоростей по трем осям, вследствие ускорения Кориолиса, и нелинейность высокочастотных мод могут быть эффективно уменьшены посредством использования развязывающей конструкции механической структуры. В целях обеспечения дальнейшей повторяемости и надежности, характеристики прогиба и жесткости подвешивания исследовали по методу конечных элементов (PEM) и сравнивали с данными упрощенного математического анализа применительно к теории деформации обычной

балки. Наконец, чувствительность и нелинейность трехосевых гироскопов теоретически исследована и оценена.

Tsai N-Ch. et al. Design and fabrication of a novel tri-axis micro-gyroscope // Proc. of 3rd IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems. 6—9 Jan. 2008. P. 457—461.

Планы NASA по использованию наноспутников для коммерциализации космоса

Исследовательский центр AMES NASA планирует работать с фирмой M2mi Corp. по разработке миниатюрных спутников для реализации телекоммуникаций и сетей в космосе. Фирма будет работать по кооперативному плану исследований и разработок, что является третьим соглашением такого рода за всю историю. Согласно плану будут созданы спутники массой 11...110 фунтов, которые образуют созвездие на низкоземной орбите. Созвездие позволит создать надежную глобальную быстродействующую сеть космического базирования для связи, хранения данных и наблюдения за Землей.

Ведется разработка системы телесвязи и сети для оказания IP-услуг как системы пятого поколения, которая позволит осуществлять передачу голоса по IP, передачу видеоданных и беспроводную передачу данных. NASA будет использовать свой опыт в создании нанодатчиков, беспроводных сетей, наноспутников. Фирма M2mi приложит свой опыт в создании программного обеспечения, датчиков, глобальных систем, адаптивного контроля и коммерциализации.

Jones K. C. NASA plans "nano" satellites to help commercialize space.
www.eetimes.com/show Article.jhtml?articleID=207402145

8-разрядный кодовый генератор четности на базе многозатворного одноэлектронного транзистора

Представлена конструкция схемы 8-разрядного кодового генератора четности с использованием одноэлектронных транзисторов (SETs). Конструкция базируется на свойствах многозатворного одноэлектронного транзистора и одноэлектронного транзистора, которые позволяют реализовать n -входовой вентиль исключающее ИЛИ (XOR) или вентиль исключающее НЕ-ИЛИ

(XNOR). Рассматриваемая конструкция позволяет сконструировать 8-разрядный кодовый генератор четности всего лишь на четырех SETs. Моделирование осуществляется с использованием устройства моделирования PSpice.

Gang Wu et al. A 8-bit parity code generator based on multigate single electron transistor // Proc. of 3rd IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems. 6—9 Jan. 2008. P. 183—185.

Создание самых быстродействующих схем на базе углерода

Согласно последним исследованиям в Мэрилендском университете (США) транзисторы на базе углерода могут превзойти по быстродействию транзисторы даже из антимонида индия, самого быстродействующего из полупроводниковых материалов. При исследовании графеновых монослоев, слоев из чистого углерода толщиной в один атомный слой, было установлено, что в графеновых транзисторах возможно достижение максимального быстродействия при комнатной температуре. Подвижность электронов графеновых монослоев составила $15\,000\text{ см}^2/\text{В}$ в температурном диапазоне между 50 и 500 К. Для сравнения, в кремнии подвижность электронов составляет $1400\text{ см}^2/\text{В}$, а в антимониде индия около $77\,000\text{ см}^2/\text{В}$. Как полагают, подвижность электронов в графене при комнатной температуре может достигнуть $200\,000\text{ см}^2/\text{В}$, что более, чем в 100 раз превышает подвижность электронов в кремнии. Подвижность электронов в углеродных нанотрубках составляет $100\,000\text{ см}^2/\text{В}$, что в 2 раза меньше, чем в графеновых монослоях. В качестве материала для подложки рассматриваются карбид кремния и алмаз.

Однако в настоящее время невозможно изготовление большого количества графена. Пока в Манчестерском университете (Великобритания) изготавливаются графеновые кристаллы с размерами 100 мкм, что слишком мало для промышленного производства. Другой недостаток заключается в плохой стабильности материала при размерах элементов менее 10 нм. Ученые университета считают, что схемы на базе графена не появятся раньше 2025 года и до той поры будут превалировать приборы на кремнии.

Johnson R. C. Carbon could enable fastest chips. <http://eetimes.eu/gernany/206905590>

Walko J. Group touts graphene transistor advance. www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID=207400803

Wallco J. Graphene transistor to rival silicon, say researcher. <http://eetimes.eu/industrial/197700700>

Гибридный фотодиод на основе нанопроволоки InP полимера

Представлена новая конструкция гибридного фотодиода на основе нанопроволоки/полимера. Нанопроволоки *n*-InP выращиваются непосредственно на электроде из ИТО (indium tin oxide) для увеличения эффективности собирания носителей заряда и устранения необходимости использования дорогой подложки. Эксперименты показали, что между нанопроволоками и электродом из ИТО возникает омический контакт. Нанопроволоки затем покрываются сопряженным полимером с высокой подвижностью дырок. По сравнению с контрольным прибором на одном лишь полимере включение InP проволок увеличивает проводимость тока с прямым смещением на 6—7 порядков. В данных фотодиодах достигается высокий коэффициент выпрямления. Гибридный прибор имеет фоточувствительность с коэффициентом заполнения 0,44, тем самым являясь альтернативой современным полимерным солнечным элементам.

Novotny C. J. et al. InP Nanowire/Polymer Hybrid Photodiode // Nano Letters. 2008. 8 (3). 775—779.

Использование подхода "bottom-up" для реализации кремниевой наноэлектроники

Представлены результаты последних исследований по использованию подхода "bottom-up" (развития снизу — вверх) для реализации наноэлектронных устройств на базе кремния. Требованиям вышеупомянутого подхода соответствуют, в том числе с точки зрения транспортных свойств носителей, кремниевые нанотрубки (SiNDs) и нанопроволоки (SiNWs). Поскольку указанные кремниевые наноструктуры могут быть сформированы на некремниевых подложках, например, из стекла, это может привести к созданию электронных устройств с высокими значениями характеристик. Кроме того, нулевая и одномерная природа электронных состояний отдельных SiNDs и SiNWs позволяет реализовать новые электронные и оптические свойства, которые не могут быть получены на объемном кремнии. Совмещая подход "bottom-up" с обычной кремниевой технологией "top-down" появляется возможность исследовать кремниевые нано-, микро- и

макроэлектронные устройства на одной подложке.

H. Mizuta, Sh. Oda. Bottom-up approach to silicon nanoelectronics. *Microelectronics Journal*. 39(2008). 171—176.

MEMS-датчики для обнаружения взрывчатки

В статье рассматривается разработка обнаружения взрывчатки с использованием MEMS-техники. Различные методы обнаружения классифицируются в системе микрокалориметрической спектроскопии: измерение оптического смещения, измерение сдвига резонансной частоты, мониторинг пьезорезистивного напряжения, тепловая абсорбция и др. Рассматриваются преимущества и недостатки каждого метода.

Deyi Kong et al. MEMS based sensors for explosive detection: Development and discussion // Proc. of 3rd IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems. 6—9 Jan. 2008. P. 265—269.

Новый тип двухосевого MEMS-акселерометра на кремнии

Данная структура состоит из четырех вертикальных кантилеверных балок с цилиндром, прикрепленным в центре структуры. Посредством расположения резисторов с образованием моста Ветстоуна этот датчик может обнаруживать ускорение в двух направлениях. Желательно, чтобы применение оригинальной структуры акселерометра привело к улучшению чувствительности. Для анализа чувствительности новой структуры использовались механическая модель и пьезорезистивный эффект. Для изготовления была использована MEMS-технология. Результаты эксперимента показали, что акселерометр имеет в двух направлениях высокую чувствительность и хорошую линейность. Чувствительность акселерометра по оси X составила 1,017 мВ/г, а по оси Y 0,898 мВ/г; линейность по оси X составила 0,99991, а по оси Y — 0,99945. Частотная характеристика представляет собой прямую и ровную линию, а измеренная резонансная частота составляет около 670 Гц.

Sh. Chen et al. A new type of MEMS two axis accelerometer based on silicon // Proc. of 3rd IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems. 6—9 Jan. 2008. P. 959—964.

Состояние производства MEMS-приборов на заводах для обработки пластин 200 мм

Первой к производству MEMS-приборов на заводе для обработки пластин 200 мм приступила фирма *Texas Instruments* (TI) в 2001 г. Поскольку TI была единственным значительным изготовителем MEMS на указанных пластинах, возможности для поставщиков оборудования и пластин в течение нескольких лет были ограничены. Начиная с 2005 года, к клубу пластин 200 мм присоединились *Hewlett Packard* (HP), *STMicroelectronics* (ST), *ERCOS* и заводы (*foundaries*) *Dalsa*, *DNP* и *tMt*. Фирма *Wicht Technologie Consulting* (WTC) уже по состоянию на 2006 г. оценивает долю MEMS-приборов, полученных с 200 мм пластин в 16 % от общего рынка MEMS. Более того, WTC полагает, что 2008 г. будет переходным и ожидает, что доля MEMS с 200 мм в общем рынке MEMS удвоится за период с 2008 года (16 % — 1,4 млрд долл.) по 2011 год (31 % — 3,5 млрд долл.). Особенно ускоренный выпуск ожидается в 2009, 2010 гг., когда возрастет число заводов по обработке пластин 200 мм пластин для MEMS. Если в 2006 г. только две фирмы — TI и HP — выпускали MEMS-приборы на пластинах 200 мм, то в 2011 г. таких фирм будет по меньшей мере 12. ST и *Freescale* уже приступили к выпуску. В последующие 18 месяцев за ними последуют: *Bosch*, *Omron* и *Canon*. К ним присоединятся еще около шести фирм. К заводам присоединяются *Jazz Semiconductor*, *APM*, *Omron*, *TSMC Silix* (последние три в 2009 г.).

Bouchaud J. The year of the 8-inch MEMS fab. www.memsinvestorjournal.com/2008/03/2008-is-year-of.html

Рост рынка MEMS-датчиков и актюаторов

Известная исследовательская фирма рынка *IC Insight* полагает, что среднегодовой прирост мировых продаж полупроводниковых датчиков и актюаторов на базе MEMS в период с 2007 по 2012 год составит 19 % и достигнет 9,7 млрд долл. (4,1 млрд долл. в 2007 г.). В штучном выражении за тот же период среднегодовой прирост составит 27 % и рынок достигнет уровня 4,3 млрд шт. в 2012 г. против 1,3 млрд шт. в 2007 г. Такой рост обусловлен развитием пользовательского интерфейса в системах управления движением в бытовой электронике и свойств обнаружения отклонения и защиты в портативных системах.

За тот же самый период среднегодовой прирост продаж всех датчиков и актюаторов составит 23 % и достигнет в 2012 г. уровня 12,1 млрд шт. (4,3 млрд шт. в 2007 г.). В стоимостном выражении общий рынок датчиков/актюаторов составит 11,9 млрд долл.

В настоящее время в 80 % полупроводниковых датчиков/актюаторов (5 млрд долл. используется MEMS-техника. Доля актюаторов на базе MEMS составила 54 % от общего рынка датчиков/актюаторов в 2007 г., равного 5,1 млрд долл. Среднегодовой прирост продаж актюаторов в период с 2007 по 2012 г. составит 20 % и продажи достигнут уровня 6,8 млрд долл. по сравнению с 2,8 млрд долл. в 2007 г.

По данным другой аналитической фирмы *Wicht Technologic Consulting* (WTC) современный рынок MEMS-генераторов, оцениваемый в 2,5 млн долл. к 2012 г. вырастет до уровня 140 млн долл., что определяется миниатюризацией бытовой и автомобильной электроники, а также системами на кристалле, где используются несколько MEMS-генераторов. Ожидается, что эти генераторы найдут применение в автомобильных камерах заднего обзора, цифровых телевизорах и цифровых портативных видеокамерах.

В последнее время в схемах синхронизации для беспроводных приборов используются кристаллические генераторы с температурной синхронизацией (*temperature-compensated crystal oscillators* (TCXO), рынок которых составляет 1 млрд долл. В MEMS-системах на кристалле используется отдельный MEMS-резонатор для каждого синхронизирующего сигнала в матрице резонаторов в составе КМОП-схемы. Изготовители MEMS-генераторов добиваются того, чтобы размеры и форма каждого резонатора могли быть точно подогнаны к частоте и скважности каждого синхронизирующего сигнала для обеспечения превосходных уровней шумов и неустойчивой синхронизации. Крупнейший в мире поставщик кварцевых кристаллов — отделение *Toyoucom* фирмы *Seiko Epson* поставляет MEMS-версии кварцевых кристаллов quartz-MEMS (QMEMS). В 2007 году продажи MEMS приборов 30 ведущих фирм составили 5,6 млрд долл., что составляет 80 % общего рынка MEMS (данные фирмы *Yole Development*). Лидирующее положение занимает фирма *Hewlett Packard*, годовые продажи которой превысили 850 млн долл.

Walco J. Huge growth seen for MEMS sensors, actuators. www.mobilehandsetdesignline.com/207000688

Lammers D. Strong Sensor, Actuator Market Driven By MEMS Technologies // *Semiconductor International*. 3/27/2008.

Jonsson R. C. MEMS market could explode. www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID=207100311

Eloy J. C. Yole Ranks Top 30 MEMS Suppliers; Sees Rapid Growth in Consumer, Medical // *Semiconductor International*. 1/31/2008.

Схема интеграции MEMS/GPS на базе конструктивных нейронных сетей

Рассматривается идея развития альтернативной схемы слияния данных, в которой интегрируются выходы недорогого инерционного измерительного MEMS-устройства и приемник глобальной системы позиционирования (GPS). Предлагаемая схема реализуется с использованием конструктивной нейронной сети — каскадной корреляционной сети (*cascade-correlation network* (CCN)) для определения ограничений обычной техники, базирующейся на фильтрах Кальмана. CNN имеет преимущество в гибкости топологии по сравнению с недавно использованными многослойными нейронными сетями с прямой связью в инерционной навигационной системе GPS. Представленные предварительные результаты иллюстрируют эффективность предлагаемого метода.

Chiang K. et al. Constructive neural-network-based MEMS/GPS integration scheme // *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*. April 2008. Vol. 44. Is. 2. P. 582—594.

Конструирование и моделирование инерционного MEMS-датчика удара с высоким уровнем G

В обычных инерционных датчиках удара в качестве переключающих приборов используются кантилеверные балки или осевые пружины. Время реакции таких датчиков или слишком велико, или, во многих случаях, датчик совсем не срабатывает в применениях с высоким уровнем G . В данной статье приводится описание инерционного MEMS-датчика с диапазоном измерений 8000-21000 G . Механизм переключения представляет собой комбинацию кантилевера и пружинной структуры. Конструкция механизма была подвергнута серии аналитических исследований. Результаты моделирования показали, что инерционный MEMS-датчик удара с высоким уровнем G имеет меньшее время реакции, чем обычные инерционные датчики удара. Кроме того, MEMS-датчики имеют достаточно высокую

выживаемость при столкновении в условиях большого уровня G , где обычные датчики терпят неудачу.

Wang Y. P. et al. Design and simulation of a MEMS high G inertial impact sensor // IEEE Sensors Applications Symposium. 12–14 Feb. 2008. P. 95–100.

Наноэлектромеханические переключатели на основе углеродных нанотрубок

Рассматриваются основные проблемы, непосредственно связанные со способностью воспроизведения наноэлектромеханических переключателей на основе углеродных нанотрубок в целях выполнения функций логики и памяти через оценку типовых параметров, свойственных КМОП-приборам. Представлен подробный анализ измеренных характеристик, касающихся порогового напряжения, статической и динамической потребляемой мощности, быстродействия и степени интеграции. Абстрагируясь от проблем корпусирования и надежности, указанные переключатели представляются конкурирующими в плане потребляющей мощности при создании схем логики и памяти.

Yousif M. Y. A. et al. CMOS considerations in nanoelectromechanical carbon nanotube-based // Nanotechnology. 16 July 2008. Is. 28. 7 p.

Использование MEMS в космическом спектрометре

Сотрудники лаборатории прикладной физики университета Джона Хопкинса в содружестве с Академией ВВС США осуществляют разработку интегрального плазменного спектрометра на пластине для выполнения картографии. В конструкции используется большое количество MEMS-приборов и микроэлектронных схем. Проведены успешные демонстрационные испытания устройства на орбите в рамках программы FalconSat-3. Устройство включает сенсорную матрицу, печатную плату с матрицей электронных усилителей, источник питания. Все устройство занимает объемом 400 см^3 и весит 0,5 кг. Потребляемая мощность

равна 700 мВт. Сенсорная матрица изготовлена и собрана на уровне пластины. Вместе с электронными устройствами при изготовлении были использованы глубокое реактивное ионное травление, лазерная обработка, обработка электрическим разрядом, а также совершенные методы сборки и корпусирования. Рассматриваются комбинации методов изготовления, комбинации материалов и методов корпусирования, которые могут быть использованы для миниатюризации устройств космического базирования. В работе приведено описание космического устройства следующего поколения, которое позволит осуществлять более эффективные по стоимости проекты.

Wesolek D. M. et al. Wafer Scale Integration Enabling Space Science // IEEE Aerospace Conference. 1–8 March 2008. P. 1–7.

Конструирование и изготовление мезоразмерного гироскопа

Целью данной работы была разработка недорогого гироскопа для авиации общего назначения. Для этого была создана новая конструкция гироскопа с использованием MEMS-технологии и пьезоэлектрических актюаторов и датчиков, увеличивающих амплитуду сигнала. Пленки $\text{Pb}(\text{Zr}_{20}\text{Ti}_{80})\text{O}_3$ были выращены по обе стороны $\text{Pt}/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{TiO}_2/\text{Pt}$ пластины 100 мм посредством осаждения из химического раствора. Были измерены эффективные поперечные пьезоэлектрические коэффициенты этих пленок на импульсном и постоянном токе, которые оказались в диапазоне $3,2...6,36 \text{ С/м}^2$. Эти пленки затем были использованы для изготовления мезоразмерного гироскопа с использованием стандартной фотолитографии, мокрого травления, ионного травления и глубокого реактивного ионного травления. Одна сторона пленки использовалась для приведения в действие, а другая сторона — для считывания гироскопа. Резонансная частота гироскопа составила 12,6 кГц, что хорошо согласуется с результатами моделирования.

Kotru S. et al. Design and Fabrication of a Meso-Scale Gyroscope // IEEE Workshop on Microelectronics and Electron Devices, 18 April 2008. P. 5–8.

Монолитная интеграция КМОП СБИС и углеродных нанотрубок для гибридных применений нанотехнологии

На одной подложке были интегрированы углеродная нанотрубка (CNT) со стандартной КМОП СБИС для гибридных применений нанотехнологии. В интегрированном устройстве совмещаются достоинства КМОП- и CNT-технологий. Такие применения включают оптические, биологические, химические и газовые датчики на базе CNT, для которых требуются сложные КМОП-схемы для контроля, калибровки и обработки сигнала. Была продемонстрирована схема на одном кристалле, включающая канал связи, двухтранзисторный каскадный мегагерцовый усилитель, в котором используются, как кремниевые *n*-канальные МОП-транзисторы, так и CNT-транзисторы с общей потребляемой мощностью 62,5 мВт.

Akinwande D. et al. Monolithic Integration of CMOS VLSI and Carbon Nanotubes for Hybrid Nanotechnology Applications // IEEE Transactions on Nanotechnology. Sept. 2008. Vol. 7. Is. 5. P. 638–639.

Создание первого цветного электрофоретического дисплея на основе углеродных нанотрубок

В мае 2008 г. фирма *Samsung* впервые в мире продемонстрировала черно-белый электрофоретический 2,3-дюймовый дисплей на основе углеродных нанотрубок. На международной конференции по информационным дисплеям (Корея, 13–17 октября 2008 г.) был продемонстрирован первый цветной крупномасштабный электрофоретический дисплей формата 14,3" (электронной бумаги) на основе использования прозрачных электродов из углеродных нанотрубок. Создание дисплея стало результатом совместной работы фирм *Unidym, Inc.* (филиал *Arrowhead Research Corporation*) и *Samsung Electronics*. Это достижение стало возможным благодаря непрерывному

совершенствованию важных свойств пленок из углеродных нанотрубок специалистами фирмы *Unidym*, которая является лидером в изготовлении и применении углеродных нанотрубок. Новый дисплей имеет неотъемлемые преимущества перед плоскими дисплеями в плане потребляемой мощности и яркости, что делает их пригодными для использования в портативных и мобильных устройствах. Так как дисплей может быть изготовлен на тонкой, гибкой подложке, он идеально подходит для использования в качестве электронной бумаги. В отличие от обычных плоских дисплеев, новый дисплей работает на отраженном свете, может сохранять текст или изображение без необходимости постоянной регенерации при резком уменьшении потребляемой мощности.

Unidym Announces a Demonstration by Samsung Electronics of the First Color Carbon Nanotube-Based Electrochromic Display // Business Wire. 2008. October 16.

Перестраиваемый графеновый одноэлектронный транзистор

Сообщается об экспериментах с электронным транспортом в графеновом одноэлектронном транзисторе. Прибор состоит из графенового островка, соединенного с электродами истока и стока через два узких графеновых сужения. Перестройка осуществляется электростатически посредством трех горизонтальных графеновых затворов и дополнительного заднего затвора. Туннельное взаимодействие является в сильной степени немонотонной функцией напряжения затвора, указывая на наличие локальных состояний в барьерах. Были исследованы масштабы энергии для туннельного зазора, резонансов в сужениях. При различных барьерных конфигурациях прибора была выделена зарядная энергия $\approx 3,4$ мэВ и оценен характеристический масштаб энергии для резонансов сужения ≈ 10 мэВ.

Stampfer C. et al. Tunable Graphene Single Electron Transistor // Nano Letters. 2008. July 22.

Составил В. А. Юдинцев

ИТОГИ 5-Й КОНФЕРЕНЦИИ "ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ РАЗРАБОТКИ ОТЕЧЕСТВЕННЫХ СБИС ТИПА "СИСТЕМА НА КРИСТАЛЛЕ"

В апреле 2009 года ОАО "ОТИК-групп" (г. Зеленоград) провело очередную 5-ю научно-техническую конференцию по тематике "Практические аспекты разработки отечественных СБИС типа "система на кристалле". На конференции были заслушаны доклады и сообщения специалистов организаций-разработчиков аппаратуры и СБИС промышленного и двойного назначения.

В работе конференции приняли участие представители следующих организаций и предприятий:

ФГУП "НИИ телевидения", ГУП НПЦ "ЭЛСОВ", ОАО "Концерн "ЦНИИ "Электроприбор", ФГУП "РНИИ КП", ООО "НПП "Цифровые решения", ЗАО "ДИ ЭС Технолоджи", МИРЭА, ФГУП НИИ "Квант", ЗАО "Фаворит-ЭК", ОАО "Концерн "Моринформсистема-Агат", ФГУП "ВНИИА", ОАО "РИРВ", ФГУП "НПО Автоматики", ОАО "МНИИ Агат", ФГУП "ОНИИП", ФГУП "ЦНИИ "Комета", ОАО "Концерн НПО "Аврора", НИИСИ РАН, ОАО "Российская электроника", УП "Завод полупроводниковых приборов" НТЦ "Белмикросистемы", ФГУП "НПП "Пульсар", ОАО "ОТИК-групп", ОАО "НИИ нанотехнологии".

На конференции были заслушаны следующие доклады.

1. "Мультиядерные мультитредовые кристаллы для суперЭВМ".
2. "Опыт разработки СБИС типа "система на кристалле".
3. "Проектирование аналого-цифровых схем типа "система на кристалле" на примере разработки ИМС совмещенного микроконтроллера и видеопроцессора".

4. "Опыт и перспективы разработки СБИС для обработки сигналов спутниковых радионавигационных систем".

5. "Особенности разработки специализированных устройств на основе перепрограммированных логических интегральных схем".

6. "Конструктивно-технологическая база радиационно-стойких СБИС с минимальным топологическим размером до 0,25 мкм на структурах КНИ — проблемы и реализация в реальном производстве".

7. "Дизайн-центры и изготовитель — проблемы взаимоотношений и терминологии".

8. "Моделирование времени выполнения алгоритмов в системных моделях СБИС СнК".

9. "Возможные подходы и реализации синтеза модели с системного уровня на RTS".

10. "Особенности и проблемы аттестации СВЧ СФ блоков".

11. "ASIC для микромеханического гидроскопа. Первые результаты".

12. "Опыт и перспективы аппаратуры РКТ с применением аналогового БМК".

13. "Видеосистемы на кристалле".

14. "Контроль в системах на кристалле".

15. "Задачи и пути решения метрологических проблем в технологии нанoeлектронных ИС".

16. "Конструктивно-технологическая база изготовления СБИС типа СнК высокого быстродействия, малой потребляемой мощности, с высокой радиационной стойкостью".

17. "Разработка нормативно-технических документов (НТД), регламентирующих требования, описание, порядок создания и испытания систем на кристалле (СнК) и СФ-блоков. Опыт разработки СнК на основе существующих комплектов НТД".

Участники конференции отметили ряд нерешенных проблем, тормозящих развитие инфраструктуры СБИС типа "система на кристалле" (СнК):

- отсутствие единой нормативной документации по проектированию и производству СБИС типа СнК;
- отсутствие единой библиотеки унифицированных СФ-блоков и аттестованных в установленном порядке;
- нескоординированность работ предприятий различных ведомств в разработке и применению СФ-блоков различного назначения и СБИС типа СнК на их основе;

- отсутствие нормативных документов, регламентирующих технические требования к ЭКБ космического уровня качества, аналогичных зарубежной квалификационной категории "Space";
- отсутствие отечественных средств проектирования СБИС типа СнК, в том числе средств моделирования воздействия дестабилизирующих факторов в процессе проектирования СБИС.

По результатам обсуждения было принято решение конференции, которое передано для утверждения в Департамент радиоэлектронной промышленности Минпромторга РФ.

СИСТЕМА ДОБРОВОЛЬНОЙ СЕРТИФИКАЦИИ "НАНОСЕРТИФИКА" THE SYSTEM OF CERTIFICATION NANOCERTIFIKA

В конце 2008 года в Президент-отеле представителями Российской корпорации нанотехнологий (РОСНАНОТЕХ) была организована презентация системы добровольной сертификации "Наносертифика".

Как подчеркивалось в выступлении директора департамента стандартизации, метрологии и сертификации продукции nanoиндустрии Ю. И. Ткачука, в соответствии с заданной стратегической целью по вхождению России в число мировых лидеров в сфере нанотехнологий, ГК "РОСНАНОТЕХ" ориентирован на обеспечение коммерциализации разработок, создание конкурентоспособных наноматериалов, нанотехнологий и продукции с их применением для ускоренного вывода нанопродукции на российский и международный рынок.

Для обеспечения качества и безопасности нанопродукции корпорацией формируются системы по стандартизации нанотехнологий и продукции nanoиндустрии, предусматривающие опережающее создание стандартов в nanoиндустриальной сфере по направлениям, имеющим принципиальное значение для реализации инвестиционных проектов РОСНАНОТЕХ в раз-

витие отечественного производства нанопродукции, и оперативное внедрение международных нанотехнологических стандартов. Формируется система сертификации "Наносертифика", зарегистрированная в Ростехрегулировании. Ее объектами являются: системы охраны труда и предупреждения профессиональных заболеваний (стандарты серии OHSAS 18000); технологии nanoиндустрии; системы экологического менеджмента работающих в сфере nanoиндустрии или применяющих продукцию nanoиндустрии предприятий (стандарты серии ISO 14000); системы менеджмента качества создающих nanoиндустриальную продукцию предприятий (стандарты серии ISO 9000); продукция, создаваемая при реализации относящихся к ведению РОСНАНОТЕХ и/или финансируемых корпорацией проектов по производству nanoиндустриальной продукции, созданной или поставляемой в РФ, соответствие которой требованиям техрегламентов, стандартов, сводов правил или иных документов может быть подтверждено при сертификации.

Система "Наносертифика" допускает участие в сертификации всех производителей на-

нопродукции для подтверждения ее соответствия и защиты от недобросовестных российских и зарубежных производителей и потребителей нанопродукции. Для подтверждения безопасности нанопродукции предусматривается: создание нормативно-правовой базы (технических регламентов и стандартов); обоснование состава контролируемых критериев (показателей) безопасности при подтверждении соответствия наноматериалов, продукции и объектов нанопромышленности; оценка потенциально опасных свойств наноматериалов, наночастиц и продукции на их основе для людей и окружающей среды.

Решения в сфере сертификации систем менеджмента предусматривают на основе подтвержденного уровня развития системы управления при разработке и изготовлении нанопродукции создание и применение ступенчатого механизма присвоения рейтинга корпоративного управления предприятием. Основными задачами системы сертификации "Наносертифика" являются: увеличение инвестиционной привлекательности предприятий и улучшение их имиджа с повышением к ним доверия со стороны страховых и кредитных компаний, инвесторов и клиентов; подтверждение способности производителя обеспечить стабильность при изготовлении продукции, качества и безопасности нанопродукции, эффективности деятельности организации, а также состоятельности и конкурентоспособности продукции на внутреннем и международном рынках.

Развитию испытательной и методической базы системы сертификации "Наносертифика" был посвящен доклад руководителя сертифици-

кационного центра корпорации, д-ра физ.-мат. наук, проф., члена-корреспондента РАН В. И. Иванова. Особенности наносоставляющей в продуктах нанопромышленности являются повышенная опасность некоторых нанопродуктов (например биологическая активность и проницаемость), новые методики и принципы измерений, наноразмерный масштаб длины от 1 до 100 нм, нестабильность и повышенная активность ряда нанопродуктов. Поэтому, наряду с новыми средствами метрологического контроля и измерения нанобъектов, компетентные в сфере нанопродуктов и наноструктур испытательные центры "Наносертифика" обеспечивают всю полноту проводимых испытаний всех нанопромышленных продуктов, обеспечивая требуемую точность результатов, их объективность и достоверность на основании сертификационных испытаний и специальных измерений с формированием протоколов и отчетов по сферам их компетенции.

Среди перечня требований к испытательным центрам можно выделить следующие: соответствие нормативным требованиям для заявляемой области испытаний рабочих и служебных помещений; актуализация фонда нормативно-правовых документов; наличие методик выполнения испытаний (анализа и измерений) и необходимого измерительного оборудования, измерительных установок и средств измерений, технических средств метрологического обеспечения испытаний и измерений, определяющих порядок проведения испытаний продукции нанопромышленности организационных документов и квалифицированного персонала для проведения испытаний в заявляемой области.

Okrepilov V. V. *Quality in Nanotechnology: Role of Metrology and Standardization* 2

The basic supporting pillars of quality are metrology and standardization. They cover all spheres of the economy including nanotechnology. Metrology enables to measure parameters and characteristics of processes and objects of nanoindustry with accuracy needed in the practice and ensures tracing physical units up to the national standard for each kind of measurement. Standardization allows using the standard terms and definitions. The standards also lay down the optimum requirements to objects of nanoindustry and methods for their testing. The article will focus on problems and their solution in the fields of standardization, conformity assessment, information and technical backing of nanotechnologies and nanoproducts.

Keywords: nanoindustry, nanotechnology, nanoproducts, metrology, measurement, measuring needs, traceability, verification, calibration, standardization, conformity conformation.

Volobuev A. N., Skvortsov A. V. *Interaction of Photons High Energy with Poolry Connected Electrons on Nano- and Microlevels*. 7

Various variants of interaction of photons high energy with free electrons in substance are investigated. It is shown, that among these variants, in substance can be observed: absorption of a photon by electron, coherent and not coherent dispersion of photons, a stop electron after interaction with a photon. Dependence of change of length of a wave of a photon after interaction with electron from parameters of substance and speed of movement electron is found.

Keywords: photons high energy, coherent and not coherent dispersion.

Abramov I. I. *Problems and Principles of Physics and Simulation of Micro- and Nanoelectronics Devices. VI. Quantum Wire Structures*. 14

The models of quantum wires and devices based on quantum wires were analyzed. The perspectives of quantum wire structures were considered.

Keywords: quantum wires, quantum interference, devices.

Ponomarev A. N., Yudovitch M. E., Gruzdev M. V., Yudovitch V. M. *Interaction of the Electric Field with Non-metallic Nanoparticles. Part 1. The Theoretical Estimation of Topological Factor* 29

On a base of Maxwell's electromagnetic theory the interaction of electromagnetic and electrostatic fields with nonmetallic nanoparticles have studied. It was founded that the nanoparticle shape is the dominant item are influencing on the interaction. The existence of giant resonance (increasing of the field strength) on the surface of toroid-like particles have founded.

Keywords: nanoparticles, electromagnetic fields, Maxwell theory.

Neveshkin A. A., Revzin B. A., Gorin D. A., Yaschenok A. M., Klimov B. N., Kumakov A. V., Kumakov Yu. A.
An Automated Setup Based on Characteriograph "Erbium-7107" for Investigation Electro-Physical Properties of MIS-Structures with Nanodimensional Langmuir—Blodgett films 34

An automated setup for investigation electro-physical properties of MIS-structures with nanodimensional Langmuir—Blodgett films is described. The design, the scheme of connection with a computer, and software of the setup are described. The design and functional resources of measurement cell is described in detail. The results of volt-ampere characteristic measuring of MIS-structures with organic nanodimensional Langmuir—Blodgett films based on calixresorcinarene with nickel ions is presented.

Keywords: MIS-structure, electro-physical properties, nanodimensional organic film, Langmuir—Blodgett films, automated measurement setup.

Obukhov I. A. *Features of Functioning of Quantum Devices* 38

Demonstrated that quantum devices functioning by using of nonequilibrium boundary effects may to reach characteristics comparable with characteristics of traditional devices of microelectronics.

Keywords: nanoelectronics, mesoscopic structures, quantum devices, nonequilibrium effects, boundary effects, quantum wire.

For foreign subscribers:

Journal of "NANO and MICROSYSTEM TECHNIQUE" (Nano- i mikrosistemnaya tekhnika, ISSN 1813-8586)

The journal bought since november 1999.

Editor-in-Chief Ph. D. Petr P. Maltsev

ISSN 1813-8586.

Address is: 4, Stromynsky Lane, Moscow, 107076, Russia. Tel./Fax: +7(499) 269-5510.

E-mail: nmst@novtex.ru; <http://www.microsystems.ru>

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромьинский пер., 4. Телефон редакции журнала **(499) 269-5510**. **E-mail: nmst@novtex.ru**

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства

в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.

Дизайнер *Т. Н. Погорелова*. Технический редактор *Е. М. Патрушева*. Корректор *Е. В. Комиссарова*

Сдано в набор 14.05.2009. Подписано в печать 19.06.2009. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 7,93. Заказ 556. Цена договорная

Отпечатано в ООО "Подольская Периодика", 142110, Московская обл., г. Подольск, ул. Кирова, 15