



Введение

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

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

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

протеины и нуклеиновые кислоты, и даже элементов биологических объектов.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

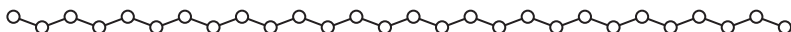
Поскольку существующие программы подготовки студентов не предполагают знания ими квантовой механики, физики твердого тела и электроники в объеме, достаточном для понимания принципов действия многих наноэлектронных приборов, в учебном пособии даются ссылки на соответствующую литературу и излагаются также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

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

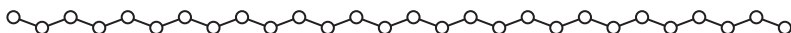
Работа между авторами распределилась следующим образом: главы 1—3 написаны И. М. Агеевым, главы 4—7 написаны Г. Г. Шишкиным, глава 8 написана авторами совместно.

Р а з д е л

1



ФИЗИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ





ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

1.1. Основные положения квантовой механики, используемые в наноэлектронике

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

чающий независимой переменной, сводится к умножению на эту переменную:

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

Оператор импульса постулируется следующим образом:

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

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

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

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

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

Отсюда следует, что оператор квадрата импульса имеет вид:

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

что согласуется с соотношениями (1.9).

1.2. Момент импульса и спин

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

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

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

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

Вследствие этого состояния электрона в атоме характеризуют полным моментом импульса l и одной из его проекций, которые принимают дискретные значения, т. е. *квантуются*. Две другие проекции момента импульса не имеют определенного значения в этих состояниях.

Квантовая механика дает формулы квантования квадрата момента импульса электрона $|\vec{l}|^2$ и его проекции l_z на некоторое направление z :

$$|\vec{l}|^2 = l(l + 1) = \hbar^2, \quad (1.14)$$

$$l_z = m\hbar. \quad (1.15)$$

Здесь *орбитальное квантовое число* l и *магнитное квантовое число* m принимают целочисленные значения:

$$\begin{aligned} l &= 0, 1, 2, \dots, n - 1, \\ m &= -l, -l + 1, -l + 2, \dots, 0, 1, 2, \dots, l. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Оператор момента импульса \hat{l} связан с «круговым» (орбитальным) движением частицы. Если частица заряжена, то ее «вращательное движение», т. е. наличие момента импульса порождает аналог замкнутого тока с соответствующим *магнитным моментом*. Кроме этого, целый ряд экспериментов указывает на существование у частиц не только рассмотренного момента импульса, но и дополнительного собственного момента импульса, не зависящего от орбитального движения. Этот момент импульса называется *спином* (см. п. 1.1). Спин — это существенно квантовая и одновременно релятивистская характеристика микрочастиц.

Последовательное теоретическое описание спина частиц может быть выполнено только в рамках релятивистской квантовой механики. Т. Дирак показал, что квадрат модуля собственного механического момента (спина) квантуется, причем формула квантования спина аналогична выражению (1.14) для орбитального момента:

$$\hat{s}^2 = s(s + 1)\hbar^2. \quad (1.17)$$

Однако значение спинового квантового числа s , определяемое из теории Дирака, не обязательно должно быть целым как орбитальное квантовое число l в выражении (1.16). У элемен-

тарных частиц, таких, как электрон, протон, нейтрон, $s = \frac{1}{2}$. Это означает, что для таких частиц возможны только две различных проекции спинового момента импульса на произвольную ось (или, как говорят, две ориентации спина):

$$s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar. \quad (1.18)$$

Полный момент импульса частицы (электрона) складывается из спина и момента импульса орбитального движения. Оператор полного момента импульса является суммой соответствующих операторов:

$$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{s}}. \quad (1.19)$$

Собственные значения оператора квадрата полного момента импульса выражаются аналогичным формуле (1.14) соотношением

$$|\vec{j}|^2 = j(j+1)\hbar^2. \quad (1.20)$$

По правилу сложения моментов в квантовой механике при условии независимости систем (если спин не взаимодействует с орбитальным моментом) число j пробегает следующий ряд значений:

$$j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s-1, l+s. \quad (1.21)$$

Частицы с массой покоя, отличной от нуля, обладающие моментом импульса, имеют также и магнитный момент. Отношение магнитного момента $\vec{\mu}$ к механическому \vec{l} называется гиромагнитным отношением γ . Для орбитального движения электрона

$$\gamma = \gamma_l = -\frac{e}{2mc}, \quad (1.22)$$

где c — скорость света в вакууме, m , e — масса покоя и модуль заряда электрона. (Знак «-» в соотношении (1.22) показывает, что магнитный и механический моменты для электрона направлены в противоположные стороны.)

Удобно ввести величину, которая называется *магнетон Бора*

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл}. \quad (1.23)$$

Тогда операторы магнитного момента $\hat{\mu}_l$ и орбитального момента импульса \hat{l} электрона связаны простым соотношением:

$$\hat{\mu}_l = -\mu_B \hat{l}. \quad (1.24)$$

Операторы собственного магнитного момента $\hat{\mu}_s$ и спина \hat{s} электрона связаны аналогичным соотношением:

$$\hat{\mu}_s = -2\mu_B \hat{s}, \quad (1.25)$$

с той лишь разницей, что спиновое гиромангнитное отношение $\gamma_s = -\frac{e}{mc}$ вдвое больше орбитального.

Поэтому говорят, что спин электрона характеризуется «двойным магнетизмом», при этом проекция спинового магнитного момента на направление внешнего магнитного поля равна одному магнетону Бора.

Частицы, составляющие ядро атома (нуклоны) также обладают спином. Полный магнитный момент ядра складывается из магнитных моментов нуклонов, а полный момент атома является суммой момента ядра и электронных моментов.

Необходимо отметить, что поскольку масса нуклона в 1840 раз больше массы электрона, то магнитный момент нуклона, как следует из формулы (1.23), во столько же раз меньше и определяется *ядерным магнетоном*.

1.3. Магнитный резонанс

Существование магнитного момента у электрона и ядра атома приводит к возникновению в определенных условиях резонансных явлений. Явление магнитного резонанса следует рассматривать в рамках квантовой механики. Однако возможна и его наглядная интерпретация с позиций классической механики.

Если на вращающееся тело (частицу, обладающую моментом импульса) подействовать какой-либо силой (непараллельной оси), то ось вращения начнет смещаться в направлении, перпендикулярном направлению действующей силы. Это явление, называемое *прецессией*, хорошо известно каждому, кто запускал волчок. Ось вращения волчка под действием силы тяжести прецессирует.

На заряженную частицу, обладающую моментом импульса и соответствующим ему магнитным моментом, в постоянном магнитном поле также действует сила, вызывающая прецессию оси вращения [9]. Движение вектора магнитного момента $\vec{\mu}$ в этом случае определяется уравнением

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma[\vec{\mu}, \vec{B}], \quad (1.26)$$

где γ — гиромагнитное отношение, а \vec{B} — вектор магнитной индукции.

Для решения этого уравнения целесообразно ось z направить вдоль вектора постоянного магнитного поля \vec{B} и представить в декартовых координатах векторное произведение $[\vec{\mu}, \vec{B}]$, учитывая, что $B_z = B_0$, $B_x = B_y = 0$. В результате получается система уравнений

$$\frac{d\mu_x}{dt} = \gamma(\mu_y B_0), \quad (1.27)$$

$$\frac{d\mu_y}{dt} = -\gamma(\mu_x B_0), \quad (1.28)$$

$$\frac{d\mu_z}{dt} = 0. \quad (1.29)$$

Решение этой системы уравнений дает $\mu_x = A \sin \omega_0 t$, где $\omega_0 = \gamma B_0$, а для μ_y получается выражение $\mu_y = A \cos \omega_0 t$. Результирующий вектор μ_1 проекции магнитного момента на ось xu вращается в плоскости xu с угловой скоростью ω_0 . Уравнение (1.29) показывает, что проекция вектора магнитного момента

на ось z постоянна. Описанная ситуация иллюстрируется рисунком 1.1.

Возникающее вращение вектора момента импульса называется *ларморовской прецессией*, а частота ω_0 — *ларморовской частотой*. При прецессии угол θ между вектором магнитного момента и осью z остается постоянным. Также постоянна и энергия магнитного момента $\vec{\mu}$ в поле \vec{B}_0 , пропорциональная скалярному произведению векторов $\vec{\mu}$ и \vec{B}_0 .

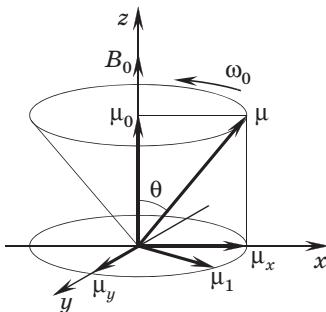


Рис. 1.1

Приложим теперь дополнительно переменное синусоидальное магнитное поле \vec{B}_1 , направленное для определенности вдоль оси x , как показано на рисунке 1.2.

Движение в этом случае будет несколько сложнее. Для его анализа представим переменное синусоидальное магнитное поле \vec{B}_1 в виде суммы двух магнитных полей, равномерно вращающихся с частотой изменения поля \vec{B}_1 в противоположных направлениях в плоскости xy . Предположим теперь, что частота переменного поля \vec{B}_1 совпадает с ларморовской частотой прецессии ω_0 вектора магнитного момента в постоянном поле B_0 . В этом случае в системе координат, вращающейся вместе с вектором магнитного момента, одна из компонент поля B_1 , которая вращается в том же направлении, что и вектор магнитного момента $\vec{\mu}$, будет неподвижна. Эта компонента вызовет дополнительную прецессию вектора магнитного момента вокруг вращающейся оси x' . Вторая составляющая поля B_1 будет приводить к периодическим колебаниям вектора магнитного момента, которые в данном случае не существенны.

Обычно напряженность переменного магнитного поля B_1 значительно меньше напряженности постоянного поля B_0 . Поэтому прецессия вокруг вращающейся оси x' происходит значительно медленнее, чем вокруг оси z . В лабораторной системе координат магнитный момент описывает сложную траекторию по сферической поверхности. В описанном случае угол θ между направлением вектора магнитного момента и осью z уже не постоянен, а медленно изменяется от значения θ до $\pi - \theta$. Такое движение называется *нутацией*.

Важно то, что в случае нутации вместе с изменением угла θ изменяется и энергия магнитного момента в постоянном магнитном поле, которая равна скалярному произведению вектора магнитного момента и вектора магнитной индукции. Очевидно, данное явление носит резонансный характер. Для электрона оно называется *электронным парамагнитным резонансом* (ЭПР), а

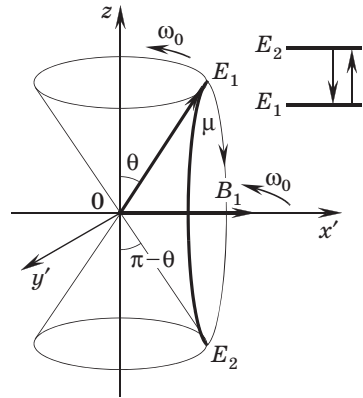


Рис. 1.2

в случае ядерного магнитного момента — *ядерным магнитным резонансом* (ЯМР).

Если рассматривать это явление, основываясь на принципах квантовой механики, то непрерывное изменение угла θ следует заменить дискретными скачками, которые соответствуют дискретным значениям проекции вектора магнитного момента на ось z .

Энергия взаимодействия магнитного диполя с полем \vec{B} определяется в классическом случае формулой $E = -\vec{\mu}\vec{B}$. Для получения оператора взаимодействия (гамильтониана) следует заметить в этом выражении физические величины их квантовыми аналогами:

$$\hat{H} = -\hat{\mu}B, \quad (1.30)$$

или

$$\hat{H} = -\gamma\hbar\hat{j}_z B_0, \quad (1.31)$$

где γ — гиромагнитное отношение, \hat{j}_z — оператор проекции полного момента импульса.

Отсюда видно, что значения энергии частицы определяются выражением

$$E_m = -\gamma\hbar B_0 m = -\mu_B B_0 m, \quad (1.32)$$

где m — суммарное магнитное квантовое число, принимающее дискретный ряд значений. Таким образом, энергетические уровни E_m являются эквидистантными с разностью энергий между соседними уровнями

$$\Delta E = \mu_B B_0. \quad (1.33)$$

Если на систему накладывается дополнительное переменное магнитное поле с частотой, близкой к частоте $\Delta E/\hbar$, возможны индуцированные переходы между уровнями. Частота таких переходов $\omega_0 = \gamma B_0$ совпадает с ларморовской частотой.

Таким образом, с точки зрения квантовой механики магнитный резонанс представляется следующим образом. (Для определения рассмотрим ЭПР.) В отсутствие магнитного поля энергия электрона, обладающего магнитным моментом, не зависит от магнитного квантового числа m . Это очевидно, поскольку нет внешнего поля, нет выделенного направления в пространстве, и энергия электрона зависит только от квадрата момента импульса (аналог классического вращения). В этом случае энергия электрона

определяется квантовым числом l . Говорят, что существует вырождение уровня энергии по квантовому числу m . Включение внешнего магнитного поля приводит к тому, что состояния с различной проекцией момента импульса начинают различаться по энергии. Из одного уровня энергии, характеризовавшегося квантовым числом l , получается $2l + 1$ уровней энергии с разными числами m , т. е. наличие магнитного поля снимает вырождение энергетического состояния. Если дополнительно воздействовать на электрон внешним переменным магнитным полем, то при равенстве частоты действующего поля частоте перехода между уровнями имеет место ЭПР, т. е. происходит вынужденный переход электрона.

1.4. Туннельный переход через потенциальный барьер

Рассмотрим важнейшую задачу квантовой механики, имеющую прямое отношение к наноэлектронике — это прохождение частицы через потенциальный барьер, или туннельный эффект.

Проанализируем движение квантовой частицы массы m (например, электрона) в потенциальном поле $U(x)$ следующего вида (рис. 1.3):

$$\left. \begin{aligned} U(x) &= 0 & x < 0 \\ U(x) &= U_0 & x \geq 0 \end{aligned} \right\} \quad (1.34)$$

В одномерном случае потенциальная энергия $U(x)$ явно не зависит от времени и пространственная часть волновой функции $\psi(x) = \psi$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера в форме

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0. \quad (1.35)$$

В классической динамике всякая частица с энергией E_1 , перемещающаяся в таком поле слева направо, отражается от потенциального барьера при $x = 0$, как от стенки. Если же энергия частицы $E_2 > U_0$, то по законам классической механики она свободно проходит в область $x > 0$ и

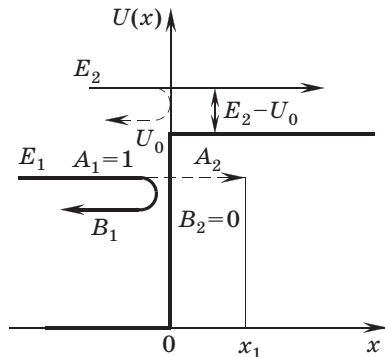


Рис. 1.3

движется там с меньшей скоростью, определяемой кинетической энергией $E_2 - U_0$. В квантовой физике оказывается возможным *проникновение частицы в классически запрещенную область в случае $E_1 < U_0$ и отражение частицы от потенциального барьера в случае $E_2 > U_0$* . Такое движение частиц показано на рисунке 1.3 штриховыми линиями.

Для областей $x < 0$ и $x > 0$ уравнение Шредингера (1.35) можно записать в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, & \quad x < 0 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = k'^2\psi = 0. & \quad x > 0 \end{aligned} \right\}, \quad (1.36)$$

здесь

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0). \quad (1.37)$$

Решениями этих уравнений являются экспоненциальные функции, которые в общем виде записываются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \psi(x) = A_1 e^{ikx} + B_1^{-ikx}, & \quad x < 0 \\ \psi(x) = A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, & \quad x > 0 \end{aligned} \right\}. \quad (1.38)$$

Выражения (1.38) при $E > U_0$ являются суперпозицией плоских волн, распространяющихся в положительном (плюс в показателе экспоненты) и отрицательном (минус в показателе экспоненты) направлениях оси x . Квадрат амплитуды волны пропорционален плотности потока вероятности [26]:

$$j_{A_2} = \frac{\hbar k}{m} |A_2|^2, \quad j_{B_{1,2}} = \frac{\hbar k}{m} |B_{1,2}|^2. \quad (1.39)$$

Для падающего на барьер потока частиц положим, что $A_1 = 1$ (см. рис. 1.3). Для определения других коэффициентов нужно воспользоваться условиями, налагаемыми на волновую функцию, а именно сама функция и ее производная должны быть непрерывны [26]. Поэтому при $x = 0$ должны выполняться граничные условия

$$\left. \begin{aligned} \psi(+0) &= \psi(-0), \\ \psi'(+0) &= \psi'(-0). \end{aligned} \right\} \quad (1.40)$$

С учетом соотношений (1.40) можно определить A_2 и B_1 . Что касается B_2 , то этот коэффициент равен нулю, так как в облас-

ти $x > 0$ нет отраженных волн, распространяющихся в отрицательном направлении оси x . В результате получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 \text{ — из первого условия (1.40),} \\ k - kB_1 &= k'A_2 \text{ — из второго условия (1.40).} \end{aligned}$$

Решение этой системы имеет вид

$$B_1 = \frac{k - k'}{k + k'}, A_2 = \frac{2k}{k + k'}. \quad (1.41)$$

Видно, что частицы испытывают отражение ($B_1 \neq 0$) даже если их энергия выше потенциального барьера. Отношение соответствующих потоков вероятности, т. е. коэффициент отражения R и прохождения D будут равны:

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2, D = \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \quad (1.42)$$

Рассмотрим теперь случай $E < U_0$. При этом k' — чисто мнимая величина, которую удобно записать в виде $k' = ik$, где $\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$. Тогда отраженная волна запишется в виде

$$\Psi_r = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} e^{-ikx} = e^{-i(kx + \delta)}. \quad (1.43)$$

Отражение приводит к изменению фазы волны, а коэффициент отражения $R = 1$ (модуль комплексного числа $\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}$ равен единице). При этом частицы все-таки проникают в область $x > 0$, так как $\psi(x) \neq 0$, но волновая функция в этой области экспоненциально затухает:

$$\psi(x) = A_2 e^{-\kappa x} = \frac{2k}{k + i\kappa} e^{-\kappa x}. \quad (1.44)$$

Мнимый волновой вектор κ в этом случае представляет коэффициент затухания. Плотность вероятности $|\psi(d)|^2$ того, что частица находится в точке d , равна

$$|\psi(d)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-2\kappa d}. \quad (1.45)$$

Проникновение частиц в область запрещенных энергий представляет специфический квантовый эффект, получивший название *туннельного эффекта*.

В электронике часто случается ситуация, когда электрон взаимодействует с барьером конечной протяженности (рис. 1.4).

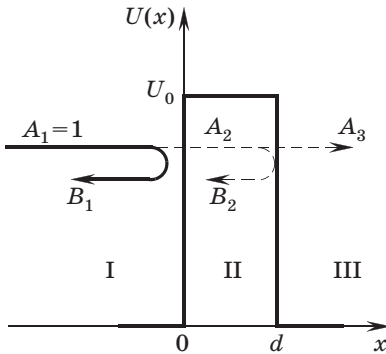


Рис. 1.4

Вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер определяется его шириной (толщиной) d и высотой $U_0 - E$. Так, коэффициент прохождения D , или *коэффициент прозрачности барьера*, равный отношению $|\psi(d)|^2 / |\psi(0)|^2$, в соответствии с формулами (1.44, 1.45) записывается в виде

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} d \sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (1.46)$$

Таким образом, электроны могут проходить через потенциальные барьеры, превышающие их энергию. Однако поток прошедших частиц экспоненциально уменьшается с ростом толщины и высоты барьера, а также массы m частиц). Поэтому существенная плотность тока может наблюдаться только в случае тонких потенциальных барьеров малой энергетической высоты.

1.5. Квантовые потенциальные ямы

В нанозлектронных структурах очень часто встречается случай движения электрона между двумя потенциальными барьерами. Такая структура называется потенциальной ямой. Качественный анализ движения электрона в квантовой яме (рис. 1.5)

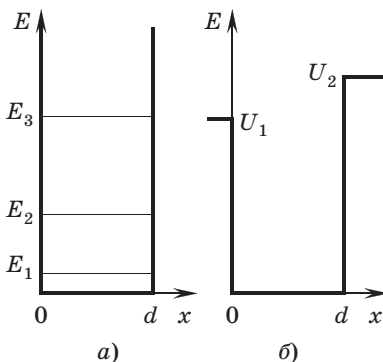


Рис. 1.5

при ее ширине d , сравнимой с длиной волны де Бройля λ электрона, дает картину, резко отличающуюся от классического случая ($d \gg \lambda$).

В классическом случае частица (электрон), двигаясь вдоль оси x , будет попеременно отражаться от правого и левого скачка потенциала (стенки) и, таким образом, совершать колебательное движение. Энергия частицы в этом случае может быть произвольной. В случае

ямы конечной глубины (см. рис. 1.5, б) энергия частицы в яме $E < \min \{U_1 U_2\}$.

Если же рассматривать электрон как квантовую частицу-волну, то нужно учесть, что при ее движении к правому потенциальному барьеру и отражении от него падающая волна (с амплитудой A_1 в предыдущей задаче об отражении электрона от потенциального барьера) складывается с отраженной (с амплитудой B_1). Тот же процесс происходит при отражении от противоположного (левого) барьера. Если ширина ямы будет равна целому числу полувольт, образуется стоячая волна. Явление полностью аналогично образованию стоячих электромагнитных волн в резонаторе. Поскольку длина волны электрона зависит от его энергии, в потенциальной яме могут находиться электроны только с определенными (дискретными) значениями энергии, при которых на ширине потенциальной ямы укладывается целое число электронных полувольт.

Запишем уравнение Шредингера для случая движения электрона в потенциальной яме (см. рис. 1.5). Решение упрощается для бесконечно глубокой ямы (см. рис. 1.5, а). В этом случае потенциальная энергия записывается в следующей форме:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < d \\ \infty & \text{при } x \leq 0 \text{ и } x \geq d. \end{cases}$$

Решение уравнения следует искать в двух областях — вне ямы и внутри ее. Поскольку вне ямы, где потенциальная энергия бесконечна, частица находиться не может, ее волновая функция там равна нулю. Из условия непрерывности она равна нулю и в точках $x = 0$, $x = d$.

Это требование служит граничным условием для решения уравнения Шредингера внутри ямы. В этой области, т. е. при $0 < x < d$, уравнение Шредингера для стационарных состояний (1.3) имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi. \quad (1.47)$$

Его решение в данном случае удобно записать в виде

$$\psi = A \sin(kx + \alpha). \quad (1.48)$$

Здесь

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (1.49)$$

Используем граничные условия: $\psi(0) = 0$, $\psi(l) = 0$. Следствием первого условия будет $\alpha = 0$. Второе условие дает

$$kd = n\pi, \quad (1.50)$$

где n — любое целое число, не равное нулю (*квантовое число*). Подставив выражение для волнового числа (1.49), найдем возможные значения энергии

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2. \quad (1.51)$$

С математической точки зрения дискретность энергии возникает как следствие граничных условий для ψ -функции.

Отметим важные особенности полученного решения. Разность энергий между соседними уровнями ΔE_n уменьшается при увеличении массы частицы и размеров области движения в соответствии с выражением:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} (2n + 1).$$

Например, для электрона ($m \sim 10^{-27}$ г), движущегося в области $d \sim 10^{-8}$ см, получаем $\Delta E \sim 1$ эВ, а для молекулы с массой $m \sim 10^{-23}$ г, движущейся в области $d \sim 10$ см, оказывается, что $\Delta E \sim 10^{-20}$ эВ. Эта энергетическая ступенька настолько мала, что энергию молекулы можно рассматривать как непрерывно меняющуюся величину.

Относительная разность энергий $\frac{\Delta E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$ стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$, т. е. дискретность перестает проявляться при больших квантовых числах. Таким образом, квантовые свойства потенциальных ям (и других структур) проявляются только для легких частиц, или микрочастиц (например, электронов), причем размеры структур должны быть достаточно малы.

В случае ямы конечной глубины (см. рис. 1.5, б) решение задачи усложняется и приводит к трансцендентному уравнению для волнового числа $k \sim \sqrt{E}$ (E — энергия частицы):

$$kd = n\pi - \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_1}} - \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_2}}. \quad (1.52)$$

Его анализ показывает, что при различных значениях потенциалов $U_{1,2}$ всегда имеется настолько малая ширина ямы, что

в ней не будет ни одного дискретного уровня. С другой стороны, в симметричной яме ($U_1 = U_2 = U_0$) всегда имеется по крайней мере один уровень энергии, расположенный вблизи ее верха:

$$E_0 = U_0 - \frac{md^2}{2\hbar^2} U_0^2. \quad (1.53)$$

1.6. Интерференционные эффекты в наноструктурах

Как мы видели выше, при взаимодействии электрона с электрическим полем (потенциальными барьерами) в микроструктурах решающую роль играет его волновая природа. В этих процессах очень существенную роль играют интерференционные явления. Именно они приводят к возникновению дискретных уровней энергии в квантовых системах. Интерференционные эффекты проявляются и в других случаях, имеющих отношение к наноэлектронике.

Рассмотрим движение электронов по тонкому проводнику, имеющему разветвление с последующим слиянием (рис. 1.6). Такая конструкция (интерферометр) служит для демонстрации *эффекта Ааронова—Бома* [6]. В центре кольца, по которому движутся электроны, расположен соленоид, магнитное поле которого, направленное перпендикулярно плоскости рисунка, создает магнитный поток Φ . Стрелками A обозначен векторный потенциал магнитного поля. Для наблюдения эффекта необходимо обеспечить *квазибаллистический* режим пролета электронов (см. п. 1.7), т. е. они должны двигаться практически без неупругих столкновений с узлами кристаллической решетки на длине ветвей кольца. В этом случае ток на выходе определяется интерференцией электронных волн. Поскольку движение электронов либо параллельно, либо антипараллельно векторному потенциалу, возникает разность фаз волновых функций электронов

$$\Delta\varphi = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (1.54)$$

где $\Phi_0 = h/e$ — квант магнитного потока [9]. Амплитуда суммарной волны, образующейся на выходе, зависит от этой разности фаз, и таким образом, изменяя магнитное поле, можно наблюдать периодическое изменение сопротивления проводящего кольца. Практически наиболее ярко эффект Ааронова —

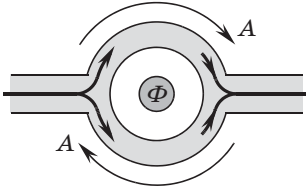


Рис. 1.6

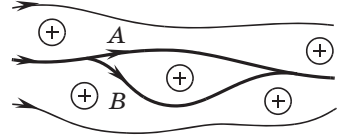


Рис. 1.7

Бома проявляется при измерении сопротивления углеродных нанотрубок, о чем более подробно рассказывается ниже (п. 2.3).

Изменение проводимости, обусловленное фазовой интерференцией, может наблюдаться в низкоразмерных структурах полупроводников. Дефекты внутри полупроводника создают потенциальные барьеры, которые электроны (электронные волны) должны преодолеть. Схематически этот процесс представлен на рисунке 1.7 для одного атома примеси, нарушающего когерентное распространение электронов.

В результате изменения траектории, которое может быть вызвано изменением электрического или магнитного полей, что эквивалентно смыканию петли Ааронова — Бома, составленной из путей *A* и *B*, возникают колебания электронной проводимости материала. Это явление называется *универсальной флуктуацией проводимости*. Оно весьма постоянно во времени и зависит от особенностей конфигурации рассеивающих центров в образце. Условием наблюдения флуктуаций является сопоставимость размеров образца с длиной фазовой когерентности волн, которая определяется плотностью центров рассеяния в материале образца. Среднеквадратичное отклонение проводимости имеет порядок e^2h . При увеличении размеров образца квантование колебаний проводимости сглаживается усреднением по большому количеству происходящих интерференционных процессов.

Следующий интерференционный процесс, в котором ярко проявляются волновые свойства электронов, а именно прохождение электроном системы потенциальных барьеров, широко используются при разработке наноэлектронных приборов.

Рассмотрим для начала простейшие системы, состоящие из двух квантовых ям, разделенных потенциальным барьером (рис. 1.8, [11], [32]). Системы отличаются тем, что в первом случае (см. рис. 1.8, *а*) рассматриваются ямы одинаковой ширины d_1 и одинаковой глубины. Во втором случае (см. рис. 1.8, *б*) — ямы различной глубины и ширины d_1 и d_3 . Численный рас-

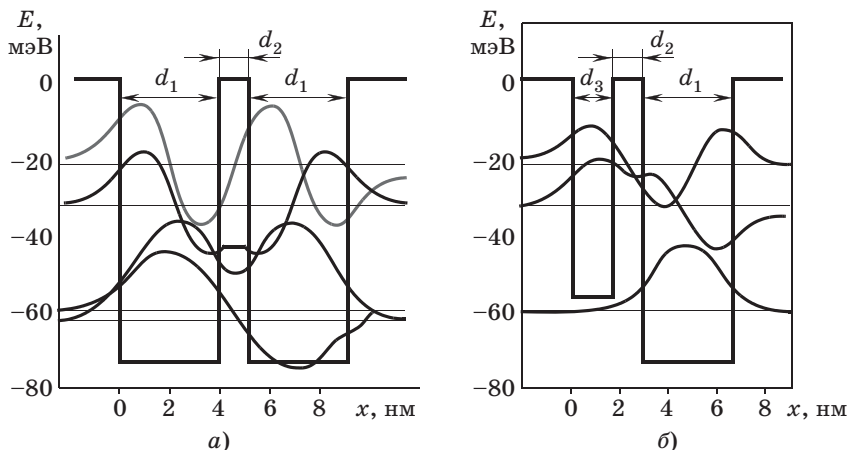


Рис. 1.8

чет [32] волновых функций электрона (см. кривые на рис. 1.8) и значений разрешенной энергии для этой модельной задачи показывает, что первоначально одиночные уровни энергии (см. рис. 1.5, *a*), характерные для частицы в одиночной яме, расщепляются на два подуровня, которые соответствуют симметричным и антисимметричным волновым функциям (см., например, рис. 1.8, *a*). При увеличении числа ям и барьеров усложняется энергетическая система уровней электрона в ямах и, соответственно, вид зависимостей для коэффициента прохождения D .

В случае трех квантовых ям каждый уровень расщепляется на три подуровня и т. д. При увеличении числа ям ($k \geq 7$) подуровни сливаются и превращаются в сплошные зоны, разделенные интервалами запрещенных энергий.

Такая искусственно созданная структура называется *сверхрешеткой* и будет рассмотрена в п. 1.8.

1.7. Элементы зонной теории и транспортные явления в наноразмерных структурах

Для объяснения физической природы проводимости различных веществ, в том числе и наноструктур, используется зонная теория, составляющая одну из основ физики твердого тела. Напомним ее основные положения [9].

Движение электрона в твердом теле описывается уравнением Шредингера с соответствующим гамильтонианом — оператором полной энергии, в котором потенциальная энергия электрона является периодической функцией с периодом, равным периоду кристаллической решетки. Это означает, что при смещении электрона на вектор решетки $\vec{a}_n = \vec{a}_1 n_1 + \vec{a}_2 n_2 + \vec{a}_3 n_3$ ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ — базисные векторы, n_1, n_2, n_3 — целые числа) он будет находиться в полностью аналогичных условиях, с той же плотностью вероятности, т. е. его волновая функция (*функция Блоха*) может измениться только на фазовый множитель, равный $e^{i\vec{k}\vec{a}_n}$:

$$\Psi_k(\vec{r} + \vec{a}_n) = e^{i\vec{k}\vec{a}_n} \Psi_k(\vec{r}). \quad (1.55)$$

Вследствие этого волновую функцию можно записать в виде

$$\Psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (1.56)$$

где $u_k(\vec{r})$ — произвольная периодическая функция с периодом \vec{a}_n кристаллической решетки: $u(\vec{r} + \vec{a}_n) = u(\vec{r})$.

Действительно, в этом случае

$$\begin{aligned} \Psi_k(\vec{r} + \vec{a}) &= u_k(\vec{r} + \vec{a}_n) e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{a}_n)} = \\ &= u_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{a}_n} = e^{i\vec{k}\vec{a}_n} \Psi_k(\vec{r}). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Вектор \vec{k} называют квазиволновым, а вектор $\vec{p} = \vec{k}\hbar$ называют *квазиимпульсом* электрона. Эти названия указывают на определенную аналогию движения электрона в рассматриваемом случае со свободным движением, когда волновая функция электрона представляет плоскую волну. Очевидно, волновая функция свободного электрона является частным случаем функции (1.56) при $u_k(\vec{r}) = \text{const}$. Ее можно получить из условия равенства вероятности обнаружить электрон в любой точке пространства. Эквивалентность всех точек пространства означает отсутствие сил, действующих на электрон, или постоянство потенциальной энергии. В периодическом потенциальном поле $u_k(\vec{r})$ не сводится к константе, поэтому аналогия между импульсом и квазиимпульсом оказывается неполной. В частности, компоненты квазиимпульса не являются собственными значениями оператора импульса. Тем не менее, наличие инвариантности относительно сдвига в обоих случаях приводит к возможности характеризовать состояние электрона некоторым постоянным вектором — импульсом или квазиимпульсом.

При исследовании движения электрона во внешнем поле или взаимодействия электрона с фононами, атомами примеси и дефектами решетки часто потенциальную энергию можно представить в виде

$$U(\vec{r}) + \delta U(\vec{r}), \quad (1.58)$$

где $U(\vec{r})$ — потенциальная энергия электрона в периодическом кристаллическом поле, а $\delta U(\vec{r})$ — непериодическая функция, описывающая перечисленные взаимодействия электрона. При этом оказывается, что задачу можно решать с помощью приближенного метода *эффективной массы*. Идея его состоит в том, что уравнение Шредингера с потенциальной энергией (1.58) сводится к более простому уравнению, содержащему только $\delta U(\vec{r})$. Роль периодического потенциала сводится к изменению оператора кинетической энергии, в который вместо массы свободного электрона входит эффективная масса, описывающая поведение электрона в идеальном кристалле.

На рисунке 1.10 показаны зависимости кинетической энергии электрона (а), его скорости (б) и эффективной массы (в) от модуля волнового вектора.

Рост волнового вектора приводит вначале к увеличению скорости электрона v и эффективной массы m^* , а затем эффективная масса становится отрицательной, а скорость электрона падает до нуля по мере приближения волнового числа к значению π/a . Такое парадоксальное, с классических позиций, поведение электрона обусловлено его волновой природой и интерференцией проходящих и отраженных от потенциальных барьеров, создаваемых ионами решетки, волн. Рост волнового вектора (квазиимпульса) однозначно связан с уменьшением длины волны де Бройля электрона, что при некоторой ее величине приводит к полному отражению электрона, аналогичному брэгговскому отражению электромагнитных волн от периодических слоев кристаллической решетки.

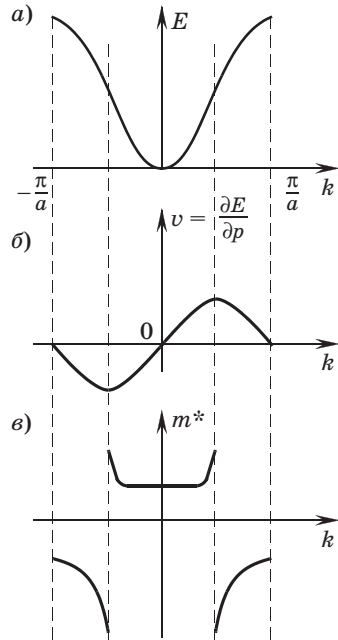


Рис. 1.10

Все предыдущие рассуждения касались случая стационарного электрического поля. Ситуация изменится, если рассматривать скачок электрического поля с крутым передним фронтом. Для наблюдения эффекта необходимо, чтобы характерное время изменения поля было меньше времени релаксации импульса электрона (характерного времени, в течение которого в результате столкновения электрон теряет приобретенный за счет электрического поля импульс).

В достаточно сильных полях скорость дрейфа электронов v_d при этом может достигать величин, значительно превышающих скорость насыщения в стационарных полях, когда включаются механизмы рассеяния, уменьшающие величину v_d . Рассчитанные скорости дрейфа электрона в кремнии в зависимости от времени действия прямоугольного импульса представлены на рисунке 1.11 [11], из которого видно, что электроны при комнатной температуре за время порядка 0,5 пс разгоняются до скорости, в два раза превышающей скорость насыщения. За это время их энергия достигает энергии оптических фононов, и они начинают активно на них рассеиваться, что приводит к снижению скорости дрейфа до постоянной величины насыщения. Кривые 1 и 2 на рис. 1.11 представляют результат расчета скорости дрейфа v_d электронов для $T = 77\text{K}$ и $T = 293\text{K}$. Этот эффект можно использовать в тонких слоях полупроводников. Действительно, при скорости 10^7 см/с электрон пролетает область

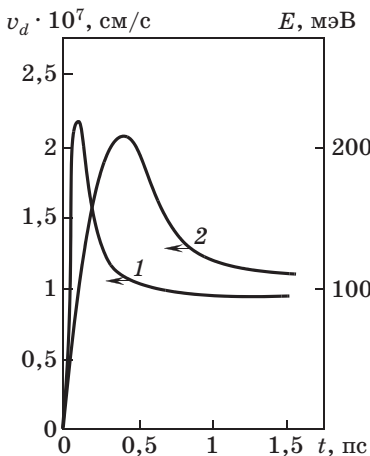


Рис. 1.11

100 нм за время 10^{-12} с. Поэтому всплеск скорости во времени приведет к увеличению скорости по пространству на всю толщину полупроводникового слоя. Поскольку быстродействие электронных приборов определяется скоростью дрейфа носителей заряда, описываемый эффект может существенно улучшить временные параметры приборов.

Необходимый резкий скачок напряженности электрического поля может быть реализован за счет пространственной неоднородности полупроводника в нанометровом диапазоне. Расчет по-

казывает, что при приложении к структуре $n^+ - i - n^+$, полученной с помощью двусторонней имплантации кремния в пластины арсенида галлия, напряжения 2В зависимость скорости дрейфа электронов от нормированного расстояния x/L ($L = 75$ мкм) имеет вид, представленный на рисунке 1.12 [11].

Здесь скачок электрического поля возникает за счет неоднородности структуры полупроводника и носит стационарный характер.

Электроны при движении попадают в область крутого скачка поля и испытывают резкое изменение скорости. После прохождения скачка электроны будут продолжать двигаться по инерции с небольшим числом актов рассеяния. В этом случае их движение называется *баллистическим*.

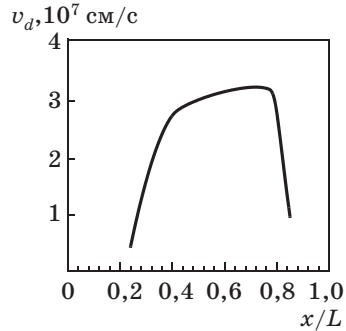


Рис. 1.12

1.8. Сверхрешетки

Общие сведения. *Сверхрешеткой* называется периодическая структура, состоящая из тонких чередующихся в одном направлении слоев полупроводников. Период сверхрешетки обычно намного превышает постоянную кристаллической решетки, но меньше длины свободного пробега электронов. Такая структура обладает, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, дополнительным потенциалом, обусловленным чередующимися слоями полупроводников, который называют *потенциалом сверхрешетки*. Наличие потенциала сверхрешетки существенно меняет зонную энергетическую структуру исходных полупроводников. Впервые сверхрешетки были рассмотрены Л. В. Келдышем в 1962 г.

Сверхрешетки обладают многими уникальными свойствами. В сверхрешетках может быть почти подавлена электронно-дырочная рекомбинация, поэтому в течение длительных промежутков времени возможно существенное отклонение от теплового равновесия. Концентрация электронов и дырок в сверхрешетках не является фиксированным параметром, определяемым легированием, а представляет собой легко перестраиваемую ве-

личину. Наличие потенциала сверхрешетки существенно влияет на энергетический спектр, благодаря чему сверхрешетки обладают рядом свойств, которые отсутствуют у обычных полупроводников. Параметры потенциалов сверхрешетки легко изменять в широких пределах, что, в свою очередь, приводит к существенной модификации энергетического спектра. Так, можно регулировать зонную структуру полупроводниковых сверхрешеток. Это позволяет, в частности, сильно изменять их транспортные свойства, создавая на основе сверхрешеток низкошумящие лавинные детекторы, фотоумножители, сверхбыстродействующие приборы, фотодетекторы и др.

Энергетическая структура сверхрешеток. Дополнительный периодический потенциал сверхрешетки, накладываемый на потенциал кристаллической решетки полупроводника, приводит к существенным изменениям структуры энергетических зон. Анализ энергетической структуры можно провести в рамках *модели Кронига — Пенни* [6]. Периодический потенциал сложной формы в этой модели заменяется набором прямоугольных потенциальных ям одинакового размера, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга. Вид потенциала показан на рис. 1.13. Уравнение Шредингера (1.3) для рассматриваемого здесь одномерного случая можно записать следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (1.59)$$

Волновая функция для свободного электрона представляет плоскую волну, пространственная часть которой в стационарном случае имеет вид $\psi(x) = Ce^{ikx}$. При движении в периодическом потенциальном поле следует учесть два обстоятельства.

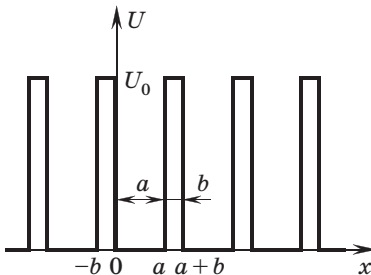


Рис. 1.13

Первое — связь модуля волнового вектора k с энергией E не выражается здесь простой формулой $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, а должна быть определена из решения задачи, поскольку необходимо учитывать эффективную массу электрона. Второе — естественно предположить, что амплитуда плоской волны C периодически изменяет

ся в пространстве с периодом, равным периоду структуры, т. е. мы опять, как в п. 1.7, записываем волновую функцию электрона в виде функции Блоха типа (1.55):

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}. \quad (1.60)$$

Подставляя волновую функцию (1.60) в уравнение Шредингера (1.59), получим два уравнения — для области ямы и для области барьера:

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - k^2 \right) u &= 0, \\ \frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - \left(\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} + k^2 \right) u &= 0. \end{aligned} \quad (1.61),$$

Введем обозначения

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad \beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

и запишем решение уравнений (1.61) в общем виде:

$$\begin{aligned} u_1 &= A_1 e^{i(\alpha - k)x} + B_1 e^{-i(\alpha + k)x} & 0 < x < a, \\ u_2 &= A_2 e^{i(\beta - ik)x} + B_2 e^{-(\beta + ik)x} & a < x < a + b. \end{aligned} \quad (1.62),$$

Условия непрерывности для функций $u_{1,2}(x)$ и производных $u'_{1,2}(x)$ в точках разрыва потенциала, т. е. в точках $x = a$ и $x = a + b$, приводят к линейной системе четырех уравнений, из которой можно определить коэффициенты $A_{1,2}$ и $B_{1,2}$. Условием существования нетривиального решения однородной системы (все правые части уравнений равны нулю) является равенство нулю главного определителя системы, что дает уравнение

$$\cos k(a + b) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{sh}(\beta b) \sin(\alpha a) + \operatorname{ch}(\beta b) \cos(\alpha a). \quad (1.63)$$

Полученное *дисперсионное соотношение* связывает энергию электрона E , которая входит в выражения для α и β , с его волновым вектором k .

Подробное исследование этого уравнения не входит в нашу задачу. Отметим только наиболее важные результаты. Слева в формуле (1.63) стоит косинус, который не может быть больше единицы. Функция справа $y(E)$ (при некоторых произвольных значениях входящих в нее параметров, выбранных здесь лишь из соображений наглядности) имеет характерный вид, пока-

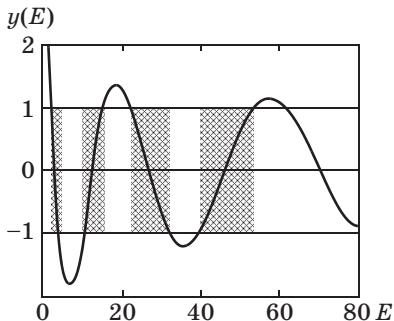


Рис. 1.14

занный на рисунке 1.14. Видно, что при некоторых значениях аргумента (энергии E , представленной в относительных единицах) значения функции $y(E)$ превышают единицу, и значит при этих значениях аргумента решение уравнения (1.63) отсутствует. Разрешенными оказываются только те значения аргумента E , при которых $y(E) \leq 1$ (на рис. 1.14 эти области заштрихованы). Этот пример наглядно демонстрирует образование разрешенных и запрещенных зон энергии при движении электрона в периодическом поле.

В общем случае решение уравнения (1.63) может быть получено лишь численно. Однако при некоторых упрощающих предположениях (в частности о том, что потенциальные барьеры очень высокие и очень узкие) можно получить аналитическое выражение для решения, которое имеет следующий вид:

$$E = E_{0n} - C_n + (-1)^n A_n \cos ka, \quad (1.64)$$

где $E_{0n} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$ — уровни энергии (1.51) в одиночной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a ; C_n, A_n — постоянные величины, зависящие, в частности, от проницаемости потенциального барьера.

Из выражения (1.64) видно, что уровни энергии в периодическом поле опускаются на величину C_n . На изменение уровня энергии также влияет третье слагаемое в правой части соотношения (1.64). Поскольку в это выражение входит периодическая ограниченная функция $\cos ka$, энергия E изменяется также по гармоническому закону в ограниченных пределах, что определяет зонный характер энергетического спектра электронов.

Все рассуждения, приведенные выше, одинаково справедливы как для естественной кристаллической решетки, так и для искусственной сверхрешетки. Но так как период сверхрешетки $d = a + b$ (см. рис. 1.13) значительно больше постоянной кристаллической решетки, то получающиеся при этом сверхрешеточные зоны (минизоны) представляют собой более мелкое дробление

энергетических зон исходных полупроводников (рис. 1.15). Здесь штриховой линией показана зависимость энергии электрона при его движении по кристаллической решетке полупроводника от волнового вектора. Упрощая рассмотрение, можно считать, что выше этой кривой находится зона проводимости. Зона проводимости в данном случае разбивается на три минизоны проводимости в интервалах энергии от E_0 до E_1 , E_2 до E_3 , и от E_4 до E_5 . Между ними лежат запрещенные зоны.

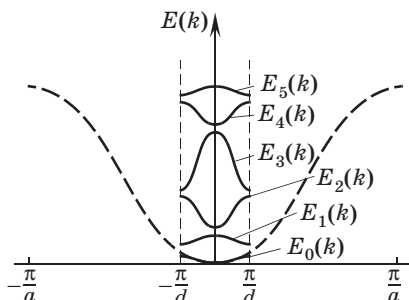


Рис. 1.15

Следует помнить, что образование минизон происходит только при движении электронов вдоль оси сверхрешетки (перпендикулярно плоскостям скачка потенциала) в отличие от образования энергетических зон при движении электронов вдоль любого направления в естественной кристаллической решетке.

1.9. Плотность энергетических состояний в низкоразмерных структурах

Потенциальные ямы и другие структуры, ограничивающие движение электрона, можно создать в полупроводниках методами, описанными ниже (гл. 3).

В потенциальных ямах в направлении движения, перпендикулярном плоскости скачка потенциала, энергия электрона, как это было показано в п. 1.5, принимает дискретный ряд значений. В то же время движение электронов вдоль плоскости не ограничено и подчинено законам, справедливым для трехмерных кристаллов.

В результате полная энергия электрона имеет смешанный характер и представляет сумму дискретного значения, определяемого соотношением (1.64), и двух слагаемых, представляющих кинетическую энергию движения электрона вдоль плоскости раздела полупроводников. Кинетическую энергию электрона можно записать в классическом виде, если ввести

эффективную массу электрона m^* ; тогда полная энергия E имеет вид

$$E = E_n + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} = E_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}. \quad (1.65)$$

За счет второго и третьего слагаемых электрон, находящийся на квантовом уровне n (для поперечного движения) может обладать любой энергией от E_n до бесконечности. Эта непрерывная совокупность состояний называется *подзоной размерного квантования*.

Можно ограничить движение электрона в двух направлениях. Такая структура называется *квантовой нитью*. Для квантовой нити энергия электрона определяется выражением (1.65), в котором следует оставить только два первых слагаемых. В случае, когда движение электрона ограничивается во всех трех направлениях, электрон, подобно тому, как это имеет место в атомах, может обладать энергией только из дискретного набора значений E_n . Этот случай называется *квантовой точкой*. Квантовая точка во многих отношениях подобна искусственному (созданному) атому [11].

Наличие потенциальных барьеров, ограничивающих движение электронов, приводит не только к возникновению дискретных уровней энергии, но и меняет плотность разрешенных состояний в зоне проводимости, что обусловлено принципом запрета Паули для случая свободных частиц со спином $1/2$ (см. п. 1.1).

Фазовый объем, занимаемый свободным электроном (фазовая ячейка) в условиях обычного трехмерного пространства, равен h^3 (h — постоянная Планка). Пользуясь этим, можно легко подсчитать количество вакансий dz для электронов в единице объема, обладающих энергией в диапазоне dE около значения E , т. е. определить *плотность состояний* $N(E) = dz/dE$. Электрон с энергией E обладает импульсом $\sqrt{2m^*E}$. Следует учесть, что импульс — это векторная величина, поэтому такой же энергией будут обладать и другие электроны, с другим направлением вектора импульса. Все они располагаются в пространстве импульсов в объеме между двумя сферами радиусами p и $p + \Delta p$. Объем такого шарового слоя равен $4\pi p^2 dp$ (площадь поверхности сферы умноженная на толщину шарового слоя dp), а число

электронов в нем составляет $dz = 2 \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} = \frac{8\pi p^2 dp}{h^3}$ (умножением на два здесь учтено, что в каждой фазовой ячейке может находиться два электрона с разными спинами). Перейдя от импульсов к энергиям, получим окончательное выражение для плотности состояний в трехмерном случае (в выражении учтено, что энергия отсчитывается от дна зоны проводимости E_n):

$$N_3(E) = \frac{dz}{dE} = 4\pi \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_n)^{1/2}. \quad (1.66)$$

Примерно таким же образом плотность состояний вычисляется и в случае структур пониженной размерности. Рассмотрим случай двумерной системы (квантовой ямы). Плотность состояний определяется как отношение числа электронных состояний в интервале энергий от E до $E + dE$, приходящихся на единицу площади (в рассмотренном выше трехмерном случае — на единицу объема), к интервалу dE . Число электронов, обладающих импульсом в диапазоне от p до $p + dp$, приходящихся на единицу поверхности, с учетом двукратного вырождения по спину определяется выражением

$$dz = \frac{4\pi p}{h^2} dp = \frac{2\pi}{h^2} d(p^2). \quad (1.67)$$

Поскольку $p^2 = 2m^*(E - E_1)$, где E_1 — энергия первого разрешенного уровня, от которого отсчитывается энергия, и $d(p^2) = 2m^*dE$, плотность состояний, приходящихся на единицу площади, для электронов с энергией вблизи значения $E > E_1$ определяется выражением

$$N_2(E) = \frac{dz}{dE} = \frac{4\pi m^*}{h^2} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}. \quad (1.68)$$

В трехмерном случае плотность состояний рассматривается для одной зоны проводимости, и функция $N_3(E)$ изменяется непрерывно. В двумерном случае в зоне проводимости существует много подзон, причем они перекрываются (поскольку несколько электронов могут находиться в одной и той же точке фазового пространства, если у них различается состояние, определяемое дискретной энергией E_n поперечного квантованного движения). Таким образом, при увеличении энергии плотность состояний в

квантовой яме скачками увеличивается по мере достижения очередного разрешенного уровня. Окончательно полная плотность состояний $N_2(E)$ имеет вид

$$N_2(E) = \frac{im_i^*}{\pi\hbar^2}, \quad (1.69)$$

где i — число разрешенных уровней энергии, лежащих ниже энергии электрона E .

Подобным образом можно получить выражения $N_1(E)$ и $N_0(E)$ для одномерных и нульмерных структур (для квантовых нитей и квантовых точек). Для квантовой нити плотность состояний $N_1(E)$ (на единицу длины) равна

$$N_1(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sum_i \frac{1}{\sqrt{E - E_i}}. \quad (1.70)$$

Графики зависимости плотности состояний для различных случаев размерности [32] показаны на рис. 1.16. В квантовых нитях плотность состояний уменьшается в диапазоне энергий, лежащем между соседними разрешенными состояниями, а струк-

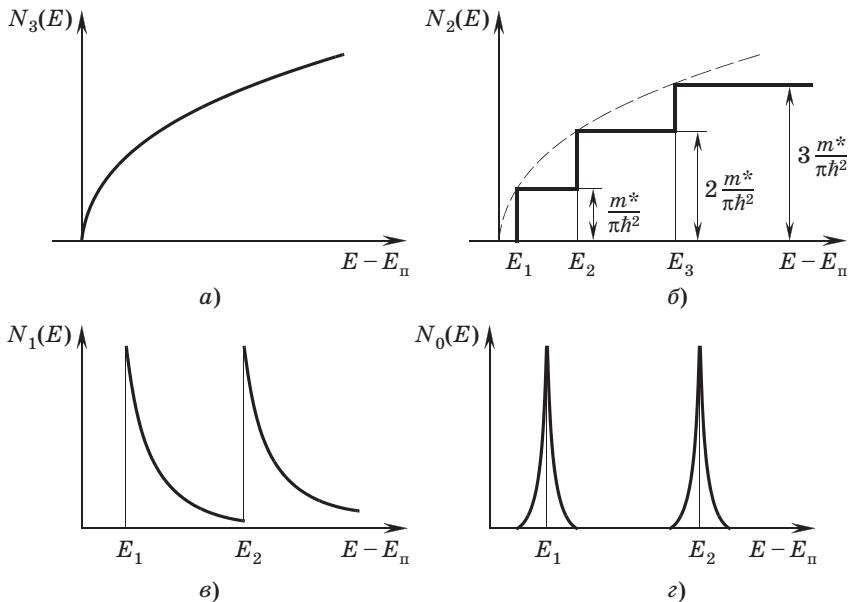


Рис. 1.16

тура состояний квантовых точек аналогична спектру изолированного атома, т. е. состоит из дискретных уровней энергии. В реальности скачкообразное и δ -образное изменение плотности состояний сглаживается за счет различных механизмов уширения, (см. рис. 1.16, *з*). Плотность электронных состояний в полупроводниковой сверхрешетке также существенно отличается от соответствующей величины в трехмерном кристалле. На рис. 1.17 [32] показана зависимость плотности электронных состояний $N(E)$ в сверхрешетке от энергии E (сплошная кривая 1). Интервал изменения энергии ограничен тремя первыми минизонами. Ширина каждой из этих минизон обозначена соответственно ΔE_1 , ΔE_2 и ΔE_3 . Для сравнения на этом же рисунке приведены зависимости (1.66) и (1.69) для трехмерного электронного газа (кривая 2) и для двумерного газа электронов (ступенчатая штриховая линия 3).

Умножив плотность состояний электронов, зависящую от их энергии, на вероятность обладания соответствующей энергией, т. е. на функцию Ферми (для вырожденного полупроводника) или Больцмана (для невырожденного полупроводника), и проинтегрировав по всему интервалу энергий, получим собственную концентрацию электронов в зоне проводимости.

Введение примесей в наноразмерные структуры, так же, как и в случае объемного полупроводника, приводит к существенному изменению концентрации электронов. При этом следует учитывать, что потенциальные барьеры, ограничивающие структуры, изменяют свойства электронов, связанных с примесью. Особенно сильно это сказывается для тех состояний примесных атомов, для которых размер электронных орбит больше

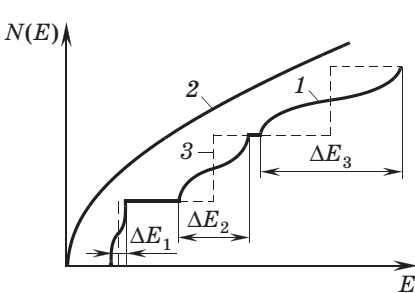


Рис. 1.17

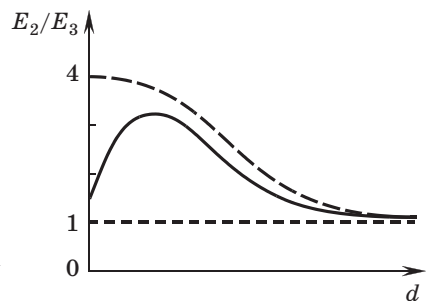


Рис. 1.18

ширины структуры. Можно показать, что в случае потенциальной ямы со стенками бесконечной высоты энергия ионизации водородоподобной примеси (донора) возрастает в 4 раза по сравнению с трехмерным кристаллом, при том условии, что ширина ямы много меньше боровского радиуса водородоподобного донора. Таким образом, одни и те же доноры, введенные в полупроводник с пониженной размерностью, образуют в запрещенной зоне полупроводника более низкие уровни по сравнению с обычным полупроводником. Увеличение энергии ионизации примеси связано с локализацией электронной волны потенциальными стенками ямы около заряженного ядра, что препятствует отрыву электрона. В случае очень тонких размерных структур с конечной высотой потенциальных барьеров, образованных полупроводником с широкой зоной, который окружает полупроводник с менее широкой запрещенной зоной, необходимо учитывать возможность туннельного перехода электрона примеси в широкозонный полупроводник, окружающий яму. При этом локализирующее действие стенок ослабевает, и энергия связи возвращается к значению для трехмерного полупроводника с учетом отличия эффективных масс электрона в широкозонном и узкозонном полупроводнике. Зависимость энергии ионизации примеси от ширины потенциальной ямы (рис. 1.18) представлена как зависимость отношения энергии донорного уровня в двумерном полупроводнике (E_2) к энергии донорного уровня в обычном трехмерном полупроводнике (E_3) от ширины потенциальной ямы d [32]. Штриховая кривая относится к случаю бесконечно глубокой ямы, а сплошная линия — к случаю потенциальных барьеров конечной высоты.

Следует также отметить, что энергия связи электрона с атомом примеси, т. е. положение донорного уровня в запрещенной зоне, зависит от положения атома примеси относительно стенок ямы. Это приводит к размыванию энергетического уровня вследствие усреднения по многим атомам примеси и превращению его в примесную зону. Аналогично изменению уровней примесных атомов в структурах пониженной размерности изменяются уровни *экситонов*. Энергия связи электрона с дыркой так же, как и водородоподобной примеси, в двумерном электронном газе возрастает в четыре раза по сравнению с трехмерным случаем. Вследствие этого экситонные эффекты в квантоворазмерных системах оказываются выраженными более сильно, чем в объемном кристалле.

1.10. Одноэлектроника

Волновые свойства электрона ярко проявляются в явлении *одноэлектронного туннелирования*. Это явление представляет интерес как один из прогрессивных путей создания новых типов электронных приборов. *Одноэлектронные приборы* — это приборы, в которых контролируется перемещение определенного количества электронов, в частности одного. В таких приборах электроны перемещаются посредством туннелирования. Поскольку времена туннельного перехода малы, теоретический предел быстродействия одноэлектронных приборов очень высок. Кроме того, энергопотребление одноэлектронных схем должно быть чрезвычайно низким. По оценкам основоположника одноэлектроники К. К. Лихарева теоретический предел для одноэлектронных приборов по частоте составляет сотни терагерц, а энергопотребление одного прибора $\sim 3 \cdot 10^{-8}$ Вт.

Рассмотрим структуру, состоящую из двух областей проводника, разделенных тонким диэлектриком. В этой структуре ток переносится комбинированно: непрерывно в проводнике и дискретно путем туннелирования через диэлектрик. Свободные электроны в проводнике могут смещаться на любое малое расстояние, поэтому суммарный переносимый заряд изменяется монотонно с дискретностью меньшей, чем заряд электрона. По существу, рассматриваемая структура (два проводника и диэлектрик между ними) представляет собой конденсатор. Его энергия составляет величину

$$E = \frac{q^2}{2C}. \quad (1.71)$$

При приложении к внешним контактам напряжения начинается непрерывное изменение заряда на границе проводника с диэлектриком, т.е. происходит зарядка конденсатора. Накопление заряда продолжается до тех пор, пока не произойдет туннелирование одного электрона. Если первоначальный заряд на обкладках равен q_0 , то после туннелирования он станет $q_0 - e$. Видно, что энергия конденсатора уменьшится, если q_0 больше $e/2$. При начальном заряде, меньшем $e/2$, энергия конденсатора увеличивается и туннелирования не происходит. Соответственно напряжение, при котором становится возможным туннельный переход электрона, должно превышать величину $U = \frac{e}{2C}$. Эффект

отсутствия туннельного тока при приложении напряжения, меньшего указанной величины, носит название *кулоновской блокады* [6]. Наблюдение кулоновской блокады и одноэлектронного туннелирования в однобарьерной структуре сопряжено с большими экспериментальными трудностями. Для этого необходимо, чтобы изменение энергии при переходе электрона было много больше температурных флуктуаций:

$$\Delta E \gg kT. \quad (1.72)$$

Кроме этого, необходимо, чтобы изменение энергии было значительно больше квантовых флуктуаций, которые определяются соотношением неопределенности Гейзенберга:

$$\Delta E \Delta t > h. \quad (1.73)$$

Поскольку характерное время процесса Δt определяется постоянной времени зарядки конденсатора RC , последнее условие можно записать в виде:

$$\Delta E \gg \frac{h}{RC}. \quad (1.74)$$

Комбинируя (1.71) (при $q = e$ и $\Delta E = E$) и (1.72), можно получить условие

$$C \ll \frac{e^2}{2kT}. \quad (1.75)$$

Подставив значения заряда электрона и постоянной Больцмана, получим, что даже при гелиевых температурах ($T = 4,2$ К) емкость перехода и подводящих проводников не должна превышать $2 \cdot 10^{-16}$ Ф, что практически очень трудно реализовать. Поэтому на практике используется двухбарьерная структура (см. гл. 5, рис. 5.15).

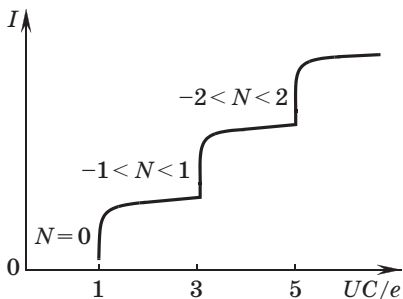


Рис. 1.19

Это может быть металлический проводник с металлическим или полупроводниковым островком в его разрыве. Островок по размерам соответствует квантовой точке, в которой локализовано определенное количество электронов. Он имеет емкостную связь с электродами C_1 и C_2 . Как и в случае однобарьерной структуры, существует диапазон на-

пряжений, в котором отсутствует электрический ток вследствие кулоновской блокады. Однако симметрия вольтамперной характеристики (ВАХ) при положительных и отрицательных напряжениях, характерная для однобарьерной структуры, может быть нарушена вследствие дополнительных ограничений, связанных с существованием разрешенных электронных состояний в островке. В случае несимметричных барьеров, когда один из них имеет большую прозрачность для туннельного перехода, ВАХ приобретает специфический ступенчатый вид, представленный на рисунке 1.19. Такую характеристику называют *кулоновской лестницей*. Электрод у барьера с большей прозрачностью называется *истоком*, а с меньшей прозрачностью — *стоком*. Прозрачность барьера можно характеризовать его сопротивлением (R_1 и R_2 на рис. 5.15). Повышение напряжения на внешних контактах приводит к увеличению падения напряжения главным образом на стоковом барьере, поскольку он обладает большим сопротивлением. Падение напряжения на истоковом барьере остается почти неизменным, а поскольку именно его величина определяет скорость инжекции электронов в островок, общий ток также изменяется слабо. Это приводит к образованию пологой части ВАХ. При этом в каждый момент времени на островке находится определенное количество электронов, зависящее от приложенного напряжения. Последующее увеличение тока происходит, когда повышение напряжения приводит к увеличению заряда островка на один электрон, т. е. с периодичностью UC/e .

В реальных условиях действуют различные факторы, приводящие к отклонению от одноэлектронного туннелирования, характерного для рассмотренных идеальных процессов. Одним из таких факторов являются малые квантовые флуктуации числа электронов в промежуточных островках двух- или многобарьерных структур. Они приводят к возникновению виртуальных состояний, в которые из истока туннелируют электроны с энергией, меньшей той, которая необходима для преодоления кулоновской блокады. Такой перенос электронов происходит параллельно с одноэлектронными процессами, контролируемые кулоновской блокадой. Он называется *сотуннелированием*. Сотуннелирование может происходить без изменения энергии переносимого электрона или с изменением энергии в процессах генерации и рекомбинации электронно-дырочных пар.

Наряду с рассмотренными полуклассическими эффектами, возможно проявление чисто квантовых эффектов, заключающихся в туннелировании электронов через системы квантовых уровней, которые могут образовываться в островках при их нанометровых размерах. В этом случае на кулоновской лестнице будет проявляться структура энергетических уровней островка [6].

1.11. Физические основы спинтроники

Спинтроника является областью электроники, изучающей проблемы использования спина электронов в твердотельных системах.

Как отмечалось выше, электроны обладают зарядом и спином, но до недавнего времени их зарядовые и спиновые свойства рассматривались по отдельности. В классической электронике заряды электронов подвергаются воздействию электрических полей, при этом спиновыми свойствами электронов обычно пренебрегают. Другие традиционные прикладные направления, например магнитная запись, используют свойства спина, но только применительно к такой макроскопической характеристике, как намагниченность ферромагнетика. Эта картина начала качественно меняться в 1988 г. с момента открытия *гигантского магнито-резистивного эффекта (гигантского магнетосопротивления)* в магнитных многослойных пленках, положившего начало эффективному управлению движением электронов путем воздействия на их спиновые магнитные моменты. Для дальнейшего напомним основные положения, касающиеся спина электрона и магнитных свойств веществ (см. п.п. 1.2, 1.3). Намагниченность вещества \vec{J} определяется как магнитный момент единицы объема. Безразмерная величина χ , равная отношению намагниченности к напряженности внешнего магнитного поля H , называется магнитной восприимчивостью: $\chi = J/H$. Относительная магнитная проницаемость вещества μ — коэффициент пропорциональности между вектором магнитной индукции \vec{B} и напряженностью магнитного поля \vec{H} — определяется выражением $\mu = 1 + \chi$. Проявление магнитных свойств веществ весьма разнообразно, хотя традиционно все вещества делятся на три группы: *диамагнетики*, *парамагнетики* и *ферромагнетики*. Диамагнетизм веществ связан в основном с орбитальными магнитными моментами электронов и рассматриваться не будет. Причиной парамагнитных и ферро-

магнитных свойств веществ является преимущественно спиновая составляющая магнитного момента электрона [10, 31].

Существует несколько механизмов, приводящих к усилению магнитного поля в веществе — парамагнетизму. Один из них связан с *эффектом Зеемана*. Электроны с проекцией магнитного момента вдоль внешнего поля имеют энергию меньшую, чем электроны с направлением магнитного момента против внешнего поля. Таким образом, в магнитном поле происходит расщепление энергетических уровней электронов в атомах. В условиях термодинамического равновесия распределение электронов по энергиям определяется законом Больцмана, в связи с чем плотность электронов с направлением магнитного момента вдоль внешнего поля оказывается несколько большей, чем с противоположным направлением. Парамагнетизм, обусловленный этим механизмом, также как и диамагнетизм, сравнительно мал. Магнитная восприимчивость парамагнетиков находится в пределах 10^{-6} — 10^{-2} . Самыми сильными парамагнетиками являются кислород и азотная кислота.

Парамагнетизм Паули связан с превышением концентрации электронов с одним направлением спина над концентрацией электронов с противоположным направлением спина. Причина, по которой это происходит, связана с зависимостью плотности состояний от энергии. Рассмотрим обычный металл с частично заполненной зоной проводимости. Допустим, что справедливы закон дисперсии для электронов $E = \frac{p^2}{2m}$, при котором

плотность состояний в зоне проводимости $N(E) \sim \sqrt{E}$ (см. (1.66)).

В отсутствие магнитного поля плотность состояний электронов с различным направлением спинов одинакова. При включении магнитного поля происходит сдвиг состояний электронов, как показано на рисунке 1.20. При этом появляется избыток электронов со спином, направленным вдоль поля (на рис. 1.20 обозначены стрелкой вверх, слева от оси энергии), который обеспечивает парамагнетизм Паули. Парамагнетизм Паули тем сильнее, чем больше плотность электронных состояний около уровня Ферми.

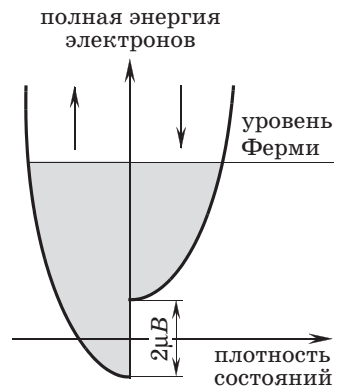


Рис. 1.20

Наиболее сильно проявляются эффекты, связанные с магнитными моментами электронов, в ферромагнетиках. В них спины электронов незаполненных оболочек атомов ориентируются параллельно вследствие *обменного взаимодействия* [26].

Обменное взаимодействие в ферромагнетиках приводит к тому, что энергетически выгодным является состояние, при котором спины электронов на $3d$ оболочке (или $4f$ оболочке для редкоземельных элементов) направлены параллельно, что вызывает макроскопическую спонтанную намагниченность металла. В реальных образцах ферромагнетика достаточно большого объема спины параллельны только в отдельных областях, которые называются *доменами*. Образование доменов объясняется конкуренцией обменного и классического магнитного дипольного взаимодействия спинов. Дипольное взаимодействие примерно на три порядка слабее обменного, но оно спадает обратно кубу расстояния, в то время как обменное взаимодействие спадает экспоненциально. Начиная с некоторого расстояния обменное взаимодействие становится слабее дипольного и более выгодным оказывается конфигурация с антипараллельным направлением спинов доменов.

Для практических целей спинтроники необходимо помимо ферромагнитных металлов иметь ферромагнитные полупроводники. Такими свойствами обладают соединения типа A^3B^5 и полупроводниковые шпинели (например, $CdCr_2Se_4$). Однако монокристаллы этих соединений трудно выращивать, и, кроме того, у них низкая температура ферромагнитного перехода (*температура Кюри*), что затрудняет их практическое использование. Другой путь состоит в сплавлении немагнитных полупроводников с магнитными элементами. Такие материалы получили название *разбавленных магнитных полупроводников*. Наиболее известный из них (Ga, Mn) As с температурой Кюри 110 К способен работать при температуре жидкого азота (77 К), что позволяет широко использовать его в исследованиях.

Спиновые эффекты, используемые в спинтронных приборах, в явном виде проявляются через транспортные явления в электронных структурах, помещенных в магнитное поле. Для их реализации необходимо осуществить ориентацию спинов. Эта задача в настоящее время решается двумя способами: с помощью *оптической ориентации* и с использованием *спиновой инжекции*.

Оптическая ориентация осуществляется при поглощении полупроводником света с круговой поляризацией. Напомним, что

квант электромагнитного излучения (фотон) имеет спин, равный 1, если вектор напряженности электрического поля вращается по часовой стрелке, и -1 в противоположном случае. При поглощении фотона и переходе электрона из валентной зоны полупроводника в зону проводимости спин фотона прибавляется к полному моменту импульса электрона, изменяя его соответственно на $+1$ или -1 . Это может привести в определенных условиях к различию в концентрации электронов в зоне проводимости со спином вдоль направления распространения света и с противоположным направлением.

Рассмотрим, например, случай поглощения света с круговой поляризацией арсенидом галлия. Зона проводимости этого полупроводника сформирована из s -состояний ($l = 0$), и, таким образом, полный момент импульса электрона j составляет $1/2$. Валентная зона образуется из p -орбиталей ($l = 1$), и, следовательно, полный момент импульса может принимать значения $3/2$ и $1/2$. В первом случае ($j = 3/2$) образуются две подзоны — тяжелые и легкие дырки, во втором случае ($j = 1/2$) образуется одна подзона, которая называется отщепленной. Важно, что максимумы энергии легких и тяжелых дырок совпадают, а максимум энергии отщепленной зоны лежит ниже. При поглощении фотонов со спином $+1$ происходят переходы электронов с изменением полного момента импульса j : $-3/2 \rightarrow -1/2$, $-1/2 \rightarrow +1/2$ из подзон тяжелых и легких дырок и переход $-1/2 \rightarrow +1/2$ из отщепленной подзоны. Квантово-механический расчет дает отношение вероятностей этих переходов $3 : 1 : 2$ соответственно. Если энергия фотона достаточно велика, переходы будут происходить из всех подзон, и количество электронов в зоне проводимости с проекциями спина $-1/2$ и $+1/2$ будет одинаковым. Если же энергии фотона недостаточно для перевода электрона из отщепленной подзоны, поскольку ее максимум лежит ниже максимумов двух других подзон, будут происходить переходы электронов только из подзон тяжелых и легких дырок. В этом случае, как видно из соотношения вероятностей переходов, количество электронов с проекцией спина $-1/2$ будет превышать количество электронов с проекцией спина $+1/2$.

Вторым способом управления спиновой поляризацией является спиновая инжекция. Как отмечалось выше, в ферромагнетиках существует спонтанная равновесная спиновая поляризация, т. е. превышение концентрации электронов с определенным направлением спина (условно со спином, направленным

вверх). При протекании тока между ферромагнетиком и немагнитным материалом происходит перенос спина. В результате в области немагнитного материала вблизи контакта с ферромагнетиком создается избыточная концентрация электронов со спином вверх. Такое явление называется *спиновой аккумуляцией*. Это состояние является неравновесным для немагнитного проводника, поскольку в равновесном состоянии концентрации электронов со спином вверх и со спином вниз равны. Процесс установления равновесного состояния приводит к релаксации спинов и уменьшению спиновой поляризации. Поскольку неравновесные электронные спины живут относительно долго (порядка наносекунд, что значительно дольше времени релаксации импульса), спины успевают переместиться на значительное расстояние от границы с ферромагнетиком. Весь этот процесс очень напоминает процесс рекомбинации неосновных носителей при инъекции их в p — n переходе. Степень спиновой поляризации спадает по мере удаления от границы между ферромагнетиком и немагнитным материалом по экспоненциальному закону $\sim \exp\left(-\frac{x}{L_s}\right)$, где L_s — длина спиновой диффузии (при инъекции неосновных носителей заряда через p — n переход в этом законе фигурирует диффузионная длина пробега электронов или дырок). Величина длины спиновой диффузии определяется временем спиновой релаксации. Механизмы спиновой релаксации связаны с рассеянием электронов на *фонах* (тепловых колебаниях решетки) и примесях, а также на дырках в полупроводниках p -типа, возможны и взаимодействия с ядерными спинами. Характерные времена спиновой релаксации составляют несколько десятков наносекунд.

Спиновая диффузионная длина значительно больше обычной диффузионной длины электрона. Для примера, в молекулах углерода спиновая диффузионная длина превышает микронный интервал и спин-поляризованные токи со значительной спиновой поляризацией могут переноситься по всей длине протяженных углеродных нанотрубок.

В настоящее время разработан ряд спинтронных приборов (будут рассмотрены в п. 5.3). Наиболее известные из них используют эффект гигантского магнетосопротивления. Магнетосопротивление определяется как изменение электрического сопротивления, обусловленное магнитным полем. Магнетосопротивление в металлах наблюдалось только в очень сильных полях при ни-

зких температурах, что не давало возможности его практического применения. Ситуация изменилась в 1988 г. с открытием гигантского магнетосопротивления в чередующихся слоях ферромагнитного и немагнитного материала нанометровой толщины. Наибольший эффект зарегистрирован в Fe—Cr и Co—Cu многослойных структурах при числе слоев около 100 при толщине каждого слоя в несколько нанометров.

В ферромагнитных материалах рассеяние электронов с изменением спина настолько редки по сравнению с диссипативными процессами, определяющими омическое сопротивление материала, что ими можно пренебречь. Относительная независимость двух групп электронов (с разными направлениями спина) является одной составляющей эффекта. Второй составляющей является тот факт, что плотность состояний и подвижность электронов двух групп в ферромагнетиках обычно существенно различаются. Истоки этого различия тесно связаны с обменным взаимодействием, которым обусловлен ферромагнетизм.

На рисунке 1.21 [10] показана трехслойная структура (а) и ее энергетическая диаграмма (б). Крайние слои F_1 и F_2 со стрелками, показывающими направление намагниченности, являются ферромагнитными проводниками. Между ними располагается

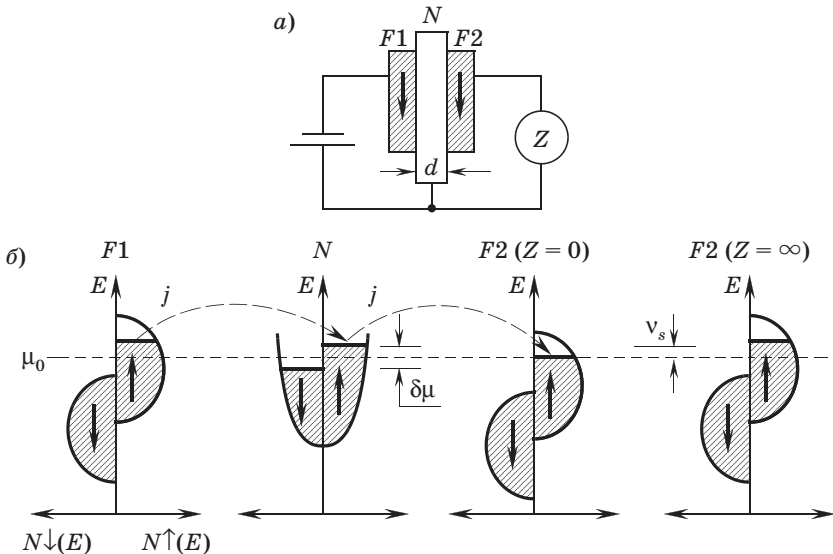


Рис. 1.21

немагнитный проводник N толщиной d . Он необходим для того, чтобы нарушить короткодействующее обменное взаимодействие между ферромагнитными слоями и обеспечить возможность изменения взаимных направлений намагниченностей этих слоев. В ферромагнетике электроны имеют преимущественную спиновую поляризацию, по направлению совпадающую с намагниченностью ферромагнетика. При указанной поляризации электроны перемещаются из левого ферромагнитного контакта в немагнитный проводник. При этом происходит инжекция спин-поляризованных электронов. Таким образом, левый переход играет роль поляризатора электронов. В результате инжекции в нормальном проводнике (средний слой) создается избыточная концентрация электронов со спином вверх. Правый контакт (нормальный проводник — ферромагнитный проводник) выполняет роль анализатора. При совпадении направлений намагниченностей в ферромагнитных левой и правой обкладках (см. рисунок 1.21), электроны свободно проходят сквозь анализатор, и структура имеет малое сопротивление z . Если же направление намагниченности правого ферромагнетика изменится на противоположное, то перемещение электронов из немагнитного слоя в правый ферромагнетик будет затруднено. В идеальном случае при 100%-й спиновой поляризации электронов в намагниченном «вниз» ферромагнетике все состояния со спином вверх при абсолютном нуле температуры будут заняты и перемещение электронов со спином вверх будет запрещено. В этом случае структура должна иметь бесконечное сопротивление.

Эффект гигантского магнетосопротивления существует как при протекании тока вдоль плоскостей многослойной структуры, так и при протекании тока перпендикулярно слоям. В последнем случае он не только выше по сравнению с параллельным эффектом, но и проявляется на структурах со значительно более толстыми слоями. Но такие структуры менее удобны для исполнения в планарной технологии. При конечных температурах и неполной спиновой поляризации сопротивление структуры будет конечно, но больше, чем при совпадающих намагниченностях ферромагнитных слоев. Следует отметить, что концентрация электронов на поверхности Ферми (см. рис. 1.20) и их подвижность зависят от зонной структуры металла. Две асимметрии — в концентрации и в подвижности — часто конкурируют, т. е. электроны с большей подвижностью могут иметь меньшую концентрацию,

и наоборот. Сочетание двух этих эффектов является одной из причин, ухудшающих работу соответствующих устройств. Туннельно-спиновые приборы, для которых асимметрия подвижности носителей роли не играет, свободны от этого недостатка и имеют таким образом преимущество над конкурентами.

Контрольные вопросы и задания

1. Какие переменные входят в качестве аргументов в волновую функцию электрона, находящегося в потенциальной яме?
2. Перечислите квантовые числа, определяющие состояние электрона в атоме, и укажите их физический смысл.
3. Как математически определяется возможность одновременного измерения параметров квантового объекта с произвольной точностью?
4. Как образуются наноразмерные объекты с пониженной размерностью?
5. Поясните причину возникновения дискретных уровней энергии электрона в квантовой яме, исходя из представления о волновой природе электрона.
6. Качественно изобразите волновую функцию электрона при туннельном переходе через потенциальный барьер.
7. В чем состоит физическая причина образования энергетических минизон в сверхрешетках?
8. Опишите процесс кулоновской блокады.
9. В чем состоит эффект гигантского магнетосопротивления?
10. Какова возможная структура, в которой наблюдается эффект гигантского магнетосопротивления?