

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)» (СГАУ)

Физические основы электроники

Научно-образовательный модуль
в системе дистанционного обучения MOODLE

САМАРА
2012

УДК 681.5

Автор-составитель: **Саноян Ашот Геворкович**

Физические основы электроники [Электронный ресурс] : электрон. научно-образоват. модуль в системе дистанц. обучения MOODLE / Минобрнауки России, Самар. гос. аэрокосм. ун-т им. С. П. Королева (нац. исслед. ун-т); авт.-сост. А. Г. Саноян. - Электрон. текстовые и граф. дан. - Самара, 2012. – 1 эл. опт. диск (CD-ROM).

В состав научно-образовательного модуля входят:

1. Курс лекций.
2. Методические указания к лабораторным работам.
3. Вопросы к экзамену.
4. Тесты для контроля знаний.

Научно-образовательный модуль предназначен для студентов радиотехнического факультета, обучающихся по направлению подготовки бакалавров 210100.62 «Электроника и нанoeлектроника», изучающих дисциплину «Физические основы электроники» в 4 семестре.

Модуль разработан на кафедре наноинженерии.

© Самарский государственный
аэрокосмический университет, 2012

Глава 1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ МИКРОЧАСТИЦ В НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ С ПОЗИЦИИ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

1.1. Элементы квантовой механики

1.1.1. Корпускулярно-волновой дуализм

Зарождение квантовых представлений принято связывать с исторической статьей М. Планка «К теории распределения энергии излучения в нормальном спектре», в которой он ввел в рассмотрение универсальную физическую постоянную h . Суть квантовой гипотезы М. Планка состояла в том, что любая энергия поглощается или испускается светом только *дискретными порциями* с энергией W , пропорциональной частоте ν излучаемой световой волны:

$$W = h \cdot \nu, \quad (1.1)$$

где h – постоянная Планка, численно равная $6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с.

Используя квантовую гипотезу М. Планка для объяснения явлений фотоэффекта, А. Эйнштейн (1905 г.) предположил, что свет также состоит из отдельных *квантов*, которые впоследствии были названы фотонами и рассмотрены в качестве своеобразных микрочастиц.

Для объяснения структуры атома Н. Бор (1913 г.) предположил существование *стационарных энергетических состояний* электрона в атомах, у которых энергия может принимать лишь ряд дискретных значений. Этот подход, развитый Зоммерфельдом и рядом других физиков, принято называть старой квантовой теорией, отличительной чертой которой является сочетание традиционных классических представлений и противоречащих им дополнительных квантовых предположений.

В 1923 году Луи де Бройль выдвинул гипотезу о двойственной природе вещества, основанную на том, что движение материальных частиц обладает как корпускулярными, так и волновыми свойствами. Л. де Бройль сопоставил движение микрочастицы с распространением некой волны, что получило экспериментальное подтверждение при исследовании дифракции электронов в кристаллах.

В 1927 году К. Дэвиссон и Л. Гермер демонстрируют дифракцию медленных электронов на кристаллах. При интерпретации угловой зависимости интенсивности отраженных электронов было показано её соответствие дифракции рентгеновских лучей. До принятия гипотезы де Бройля дифракция расценивалась как исключительно волновое явление, а любой дифракционный эффект – как волновой. Таким образом, гипотеза де Бройля была экспериментально подтверждена для случая микрочастиц (электрона). Этот факт стал поворотным моментом на пути дальнейшего становления как самой квантовой теории, так и развития фундаментальных представлений о физической природе материального мира.

Подобно тому как А. Комптон демонстрирует корпускулярную природу света, эксперимент Дэвиссона-Гермера подтвердил неразрывное «сосуществование» с микрочастицей её волновых представлений, т.е. присущность ей некой волновой природы. Подтверждение этой идеи для физики стало важным этапом, поскольку дало возможность не только характеризовать любую микрочастицу, присваивая ей определённую индивидуальную длину волны, но и полноправно используя её в виде объективного физического фактора в волновых представлениях эволюции состояния частиц.

Из вышеизложенного следует важный для последующего изложения вывод, что для всех физических объектов (в особенности это характерно для элементарных микрочастиц) экспериментально зафиксирован двойственный характер их поведения, что и получило название *корпускулярно-волнового дуализма* [1].

1.1.2. Квантово-механические принципы анализа состояния микрочастиц

Как отмечалось выше, в основе квантовой механики лежит представление о дискретном характере изменения энергии индивидуальных атомов и фотонов. Основопологающей концепцией в квантовой механике явилось то, что корпускулярно-волновая двойственность свойств, установленная для света, имеет универсальный характер и должна проявляться для любых частиц, обладающих механическим импульсом. Т.е. все частицы, обладающие конечным импульсом, проявляют волновые свойства, и их движение можно представить с помощью некоего волнового процесса.

Гипотеза Л. де Бройля: движению свободной частицы (т.е. для случая отсутствия в пространстве каких-либо внешних по отношению к микрочастице физических полей) ставится в соответствие плоская монохроматическая волна (ПМВ), длина волны λ и частота ν которой определяются выражениями:

$$\nu = W/h \quad (1.2)$$

(аналог выражения (1.1) для случая микрочастиц);

$$\lambda = h/p = h/(m \cdot \nu), \quad (1.3)$$

где W и p – соответственно энергия и механический импульс микрочастицы; m – масса микрочастицы; ν – скорость движения микрочастицы.

Волны, о которых идет речь, принято называть *волнами де Бройля*. Нетрудно заметить, что длина волны де Бройля для частицы, имеющей кинетическую энергию W_k , равна

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot W_k}}. \quad (1.4)$$

В практике использования электронно-лучевых технологий (в частности для оценки разрешающей способности электронной литографии) удобно использовать выражение вида

$$\lambda = \frac{12.25}{\sqrt{\varphi}} \text{ (ангстрем)}, \quad (1.5)$$

где φ – электрический потенциал (вольт), используемый для обеспечения процесса ускорения электронов.

Гипотеза де Бройля была экспериментально подтверждена опытами по рассеянию электронов и ряда других частиц на кристаллах и по прохождению частиц сквозь вещества. Признаком волнового процесса во всех таких опытах является дифракционная картина распределения микрочастиц в приемных устройствах.

Волны де Бройля имеют специфическую природу, не имеющую аналогии среди волн, изучаемых в классической физике. Физический смысл имеет *квадрат модуля амплитуды волны де Бройля* в данной точке пространства, который является *мерой вероятности* того, что частица будет обнаружена в этой точке. Дифракционные картины, которые наблюдаются в опытах, являются проявлением статистической закономерности, согласно которой микрочастицы чаще попадают в определенные места в приёмниках, т.е. туда, где интенсивность волны де Бройля имеет наибольшее значение. Микрочастицы никогда не обнаруживаются в тех местах, где, согласно статистической интерпретации, квадрат модуля амплитуды «волны вероятности» обращается в нуль (только в этом моменте прослеживаются элементы проявления традиционного классического принципа детерминизма).

В этой связи весьма существенным моментом является то, что в квантовой механике вероятностные представления (проявление которых объяснялось в рамках классической механики как

следствие неполноты информации об объектах и влияния метрологических погрешностей средств измерения) возведены в ранг объективной физической реальности.

Весьма характерным является то обстоятельство, что волновые свойства объектов не проявляются в явном виде у макроскопических тел. Этот факт связан с тем, что длина волны де Бройля для таких тел настолько мала, что обнаружение волновых проявлений оказывается практически невозможным даже с помощью современных экспериментальных методов анализа.

Например, движению объекта массой в один грамм со скоростью 100 м/с ставится в соответствие волна вероятности де Бройля со значением $\lambda = 6 \cdot 10^{-33}$ м.

В то же время для случая движения электрона с той же скоростью длина волны де Бройля составляет $\lambda = 6 \cdot 10^{-6}$ м, что:

- находится в пределах возможностей современных экспериментальных методов (10^{-10} м) определения величины протяженности физических объектов;
- более чем в 10^6 раз превышает «размер» электрона, если исходить из представлений классической физики о размерах индивидуальных атомов.

Следует отметить, что волны де Бройля (характерные, по определению, только для случая свободных частиц) представляют весьма ограниченный практический интерес, поскольку в инженерно-физической практике приходится, как правило, иметь дело с частицами, локализованными в некоторой ограниченной области физического пространства (т.е. частицами, «запертыми» в потенциальном ящике). Сам факт наличия потенциального ящика заведомо ограничивает свободу перемещения частицы и, следовательно, она уже не может считаться свободной от воздействия внешних силовых полей, в роли которых выступают стенки (границы) потенциального ящика. Этот, более сложный и интересный для практических приложений случай поведения частиц будет рассмотрен ниже. Несколько забегая вперед, отметим, что именно факт локализации микрочастиц в ограниченной области физического пространства приводит к появлению дискретных (квантовых) энергетических состояний у индивидуальных микрочастиц в конденсированных средах.

1.1.3. Волновой вектор плоской монохроматической волны

Плоская монохроматическая волна (ПМВ) для одномерного случая, т.е. при ее распространении вдоль направления оси x , может быть представлена в виде

$$U(x, t) = U_0 \cdot \cos[\omega \cdot (t \pm x/\vartheta) + \delta], \quad (1.6)$$

где ϑ – фазовая скорость ПМВ, определяемая из условия $(t - x/\vartheta) = \text{const}$; δ – начальная фаза волны при значении времени $t = 0$; U_0 – амплитуда бегущей волны.

Термин «плоская» означает, что фронт распространения волны может быть отображен в виде плоскости, а «монохроматическая» – что волна сохраняет при своем движении неизменную частоту ($\omega = \text{const}$) в пространстве и во времени.

Если направление распространения ПМВ составляет с осями декартовых координат соответственно углы α, β и γ , то выражение (1.6) преобразуется к виду

$$U(x, t) = U_0 \cdot \cos \left[\omega \cdot \left(t \pm \frac{x \cdot \cos \alpha + y \cdot \cos \beta + z \cdot \cos \gamma}{\vartheta} \right) + \delta \right] \quad (1.7)$$

Введем в рассмотрение понятие о *волновом векторе* \vec{k} , модуль которого равен $|\vec{k}| = 2 \cdot \pi / \lambda$, а его проекции на координатные оси соответственно равны:

$$k_x = \left(2 \cdot \frac{\pi}{\lambda}\right) \cos \alpha; \quad k_y = \left(2 \cdot \frac{\pi}{\lambda}\right) \cos \beta; \quad (1.8)$$

$$k_z = \left(2 \cdot \frac{\pi}{\lambda}\right) \cos \gamma.$$

Используя понятие скалярного произведения волнового вектора \bar{k} и радиуса вектора \bar{r} (проекции которого равны: x , y и z), выражение (1.7) приобретает более лаконичный вид:

$$U(x, t) = U_0 \cdot \cos \left[(\omega \cdot t \pm \bar{k} \cdot \bar{r}) + \delta \right]. \quad (1.9)$$

Как правило, для облегчения последующих математических операций ПМВ часто представляют в комплексном виде, используя для этого формулу Эйлера:

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi. \quad (1.10)$$

В этом случае (на основании формального использования формулы Эйлера) выражение для ПМВ можно представить в комплексной форме:

$$U(x, t) = U_0 \cdot \operatorname{Re} \cdot e^{i[(\omega t \pm \bar{k} \cdot \bar{r}) + \delta]}, \quad (1.11)$$

где фрагмент (Re) свидетельствует о том, что в выражении (1.11) следует учитывать только действительную часть.

На практике, как правило, фрагмент (Re) не принято обозначать, но по умолчанию его присутствие подразумевается:

$$U(x, t) = U_0 \cdot e^{i[(\omega t \pm \bar{k} \cdot \bar{r}) + \delta]}. \quad (1.12)$$

Введя в рассмотрение комплексную амплитуду ПМВ ($U_0^* = U_0 \cdot e^{i[\delta]}$), выражение (1.12) приобретает более лаконичный вид:

$$U(x, t) = U_0^* \cdot e^{i[\omega t \pm \bar{k} \cdot \bar{r}]}. \quad (1.13)$$

Используя представление о волновом векторе ПМВ, выражение (1.3) преобразуется к виду

$$\bar{p} = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \bar{k}, \quad (1.14)$$

где $\bar{k} = \left(2\pi/\lambda\right) \cdot \bar{n}$ – волновой вектор ПМВ; \bar{n} – единичный вектор в направлении распространения фронта ПМВ.

Для случая свободной частицы (т.е. при отсутствии потенциальных полей) полная энергия частицы всецело определяется ее кинетической составляющей W_k :

$$W_k = \frac{m \cdot v^2}{2} = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot \pi^2} \cdot k^2, \quad (1.15)$$

где k – модуль волнового вектора ПМВ свободной частицы; m – масса частицы; v – скорость движения частицы.

Поскольку в выражении (1.15) на модуль волнового вектора k не накладывается никаких ограничений, то полная энергия свободной частицы W_k может принимать непрерывный ряд значений в диапазоне величин $(0 - \infty)$. Именно из этого обстоятельства следует тот факт, что энергия свободной частицы не квантуется.

Для последующего рассмотрения важно отметить, что ПМВ имеет бесконечную протяженность в пространстве, что, собственно, и следует из фактора ее монохроматичности. Последнее обстоятельство приводит к парадоксальной ситуации, когда речь идет о вероятностных волнах де Бройля. Согласно разделу (1.1.1.), квадрат модуля амплитуды волны де Бройля в определенной точке пространства является мерой вероятности того, что частица может быть обнаружена в этой

точке. В то же время фактор бесконечной протяженности ПМВ в пространстве свидетельствует о том, что квадрат модуля амплитуды волны должен быть тождественно равен нулю. (Правомерность этого утверждения следует из необходимости обеспечения условия нормировки для вероятности нахождения частицы в заданной точке пространства, согласно которому суммарная вероятность нахождения микрочастицы в безграничном пространстве (неважно где) должна быть равна единице.) Следует отметить, что равенство нулю указанных вероятностей для свободной частицы является тривиальным фактом даже с точки зрения здравого смысла, и для установления этого обстоятельства едва ли было бы целесообразным вводить в рассмотрение волны де Бройля. В то же время волны де Бройля могут оказаться бесполезными, если на их основе удастся «сконструировать» вероятностные представления для случая микрочастиц, движение которых происходит в локализованной области пространства (в потенциальном ящике). Эта задача решается ниже в концепции представлений о волновом пакете, образованном из совокупности волн де Бройля.

1.1.4. Волновой пакет из вероятностных волн де Бройля

Как отмечалось выше, ПМВ представляет собой бегущую волну, которая имеет *бесконечную протяженность* в пространстве. В то же время следует отметить, что даже квант света воспринимается как объект, вполне локализованный в ограниченной области пространства. Из этих соображений следует, что отдельный квант света не может быть представлен в виде единственной ПМВ. Ниже будет показано, что создание пространственно-локализованных объектов (микрочастиц или фотонов) возможно путем суперпозиции бесконечного количества индивидуальных ПМВ. Такие пространственно-локализованные объекты, образованные путем суперпозиции большого количества ПМВ, получили название *волнового пакета* [2].

Создадим прообраз волнового пакета путем *суперпозиции* бесконечного количества ПМВ, у которых волновой вектор k (в целях упрощения анализа рассматривается одномерный случай согласно выражению (1.6)) пробегает непрерывный ряд значений в интервале значений $(k_0 - \Delta k) \div (k_0 + \Delta k)$:

$$U(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} U_0 \cdot \cos(\varpi \cdot t - k \cdot x) dk, \quad (1.16)$$

где U_0 – постоянная величина.

После интегрирования выражения (1.16) и элементарных математических преобразований имеем аналитическое выражение для волнового пакета в виде

$$U(x, t) = 2 \cdot U_0 \cdot (\Delta k) \cdot \left(\frac{\sin(\Delta k \cdot x)}{(\Delta k \cdot x)} \right) \cdot \cos(\varpi \cdot t - k_0 \cdot x). \quad (1.17)$$

Напомним фрагмент выражения (1.17):

$$\left(\frac{\sin(\Delta k \cdot x)}{(\Delta k \cdot x)} \right) = \begin{cases} 1 & \text{при условии:} \\ & (\Delta k \cdot x) \rightarrow 0; \\ \\ 0 & \text{при условии:} \\ & (\Delta k \cdot x) = \pm n \cdot \pi. \end{cases} \quad (1.18)$$

В целях наглядности на рис. 1.1 представлены волновые пакеты, построенные для двух случаев: $(\Delta k / k_0) = 0.1$ и $(\Delta k / k_0) = 0.5$. Протяженность центрального фрагмента рисунка $2\Delta x$ (при $x = 0$)

условно принимается равной ширине волнового пакета (т.е. области локализации объекта). Из рисунка следует, что увеличение протяженности интервала значений $(k_0 - \Delta k) \div (k_0 + \Delta k)$ приводит к повышению степени локализации объекта в пространстве.

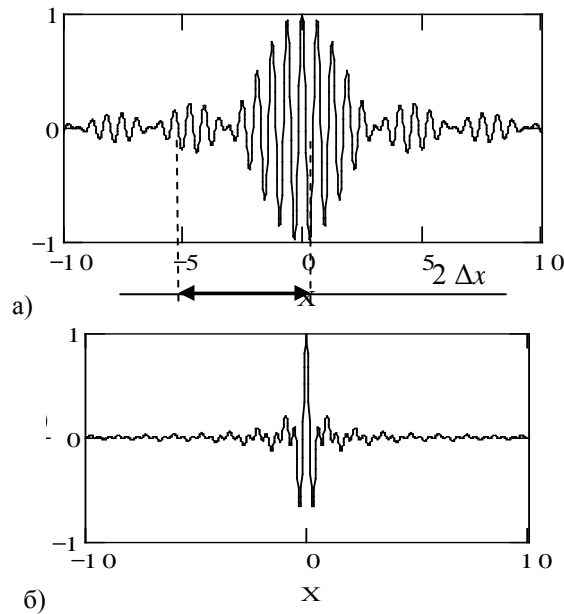


Рис. 1.1. Зависимость пространственной протяженности волнового пакета $2\Delta x$ от относительной величины интервала вариаций Δk :
 а) – $(\Delta k / k_0) = 0.1$; б) – $(\Delta k / k_0) = 0.5$

С учетом выражения (1.18) (нижнее условие) для определения пространственной протяженности волнового пакета Δx имеем

$$(\Delta k \cdot \Delta x) = \pi. \quad (1.19)$$

Из выражения (1.19) следует, что при выполнении условия:

- $\Delta k \rightarrow \infty$, протяженность волнового пакета $\Delta x \rightarrow 0$, т.е. в данном случае имеет место реализация абсолютно локализованного в пространстве объекта (например, идеализированного кванта света);
- $\Delta k \rightarrow 0$, протяженность волнового пакета $\Delta x \rightarrow \infty$, т.е. в данном случае имеет место реализация одной единственной бесконечно протяженной ПМВ с волновым вектором, равным k_0 (аналог волны де Бройля для свободной частицы);
- $\Delta k = \text{const}$, протяженность волнового пакета Δx становится равной определенной конечной величине, т.е. в данном случае имеет место реализация цуга волн, отображающего область нахождения реального объекта.

Таким образом, можно считать, что методология формирования волновых пакетов является эффективным способом создания пространственно-локализованных структур (объектов) из бесконечно протяженных составляющих, имеющих волновую природу, вне зависимости от физической специфики рассматриваемых волновых процессов. В силу оговоренной выше универсальности подобного подхода он нашел весьма широкое распространение не только в оптике (электромагнитные волны), но в электронике (спектральный анализ электрических сигналов) и в квантовой механике (вероятностные волны де Бройля). Во всех вышеупомянутых случаях производится «конструирование» локализованных объектов путем суммирования (суперпозиции) большого количества (в пределе бесконечного) индивидуальных ПМВ.

Из выражения (1.14) следует, что интервалу значений Δk соответствует определенный интервал значений Δr (по каждой из координат $\{x, y, z\}$):

$$\Delta p = \left(\frac{h}{2 \cdot \pi} \right) \cdot \Delta k. \quad (1.20)$$

Из выражений (1.19) и (1.20) следуют соотношения, известные как *принцип неопределенностей* В. Гейзенберга:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = h/2; \quad \Delta p_y \cdot \Delta y = h/2; \quad \Delta p_z \cdot \Delta z = h/2. \quad (1.21)$$

Принцип неопределенности свидетельствует о *невозможности одновременного и точного* определения координат и импульсов микрочастиц (следует особо отметить, что классическая физика не налагает подобного рода принципиальных запретов), а следовательно, становится проблематичным определение потенциальной (фактор Δx) и кинетической (фактор Δp) энергии микрочастиц.

Выражение (1.21) может быть использовано для проведения грубых оценок (с точностью до порядка величины) кинетической энергии микрочастиц, «запертых» в пределах одномерного потенциального ящика, имеющего протяженность $2 \Delta x$ (см. рис. 1.1). Для этой цели, полагая, что $\Delta p \approx p$, можно провести оценку кинетической энергии частицы согласно выражению:

$$W_k = \frac{p^2}{2 \cdot m} = (\Delta p)^2 / (2 \cdot m) = h^2 / \left[8 \cdot m \cdot (\Delta x)^2 \right]. \quad (1.22)$$

В табл. 1.1 представлены зависимости абсолютных W_k и относительных W_k / W_T значений кинетической энергии электрона (где W_T – средняя энергия теплового движения электрона) от протяженности потенциального ящика ($2 \cdot \Delta x$), полученные на основании выражения (1.22).

Т а б л и ц а 1.1. *Зависимость параметров W_k и W_k / W_T от протяженности потенциального ящика ($2 \Delta x$) (масса покоя электрона: $m = 9.11 \cdot 10^{-31}$ кг)*

1	$2 \Delta x$, нм	0.2	0.5	1.0	2.0	5.0	10	20	50	100	
2	W_k , эВ	36	5.8	1.4	0.35	$5 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	
3	$\frac{W_k}{W_T}$	$T=300$ К	1000	200	60	10	2	0.4	0.1	0.02	0.004
		$T=30$ К	1000	2000	600	100	20	4.0	1.0	0.2	0.04
		$T=3$ К	$1 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^4$	6000	1000	200	40	10	2.0	0.4

Примечание: заливкой обозначены ячейки, в которых W_T превосходит W_k более чем на порядок.

Данные табл. 1.1 позволяют в некоторой мере оценить влияние на энергетическое состояние микрочастицы масштабного фактора, свидетельствующего об ограничении свободы перемещения микрочастицы в пространстве. В частности из таблицы видно, что при размерах «потенциального ящика» более чем 100 нм влияние фактора ограничения свободы микрочастицы становится пренебрежимо мало относительно возможности проявления физико-химических эффектов, которые могут быть обусловлены проявлением тепловых флуктуаций в системе.

1.1.5. Квантование энергии микрочастицы, находящейся в потенциальном ящике

Как уже отмечалось выше, в квантовой механике движение свободной микрочастицы отображается посредством ПМВ, что свидетельствует об одинаковой вероятности ее нахождения в любой точке физического пространства (и, по сути, эта вероятность тождественно равна нулю – подробнее см. выше).

Движение микрочастицы в потенциальном ящике, с бесконечно высокими стенками, происходит в ограниченной области пространства (частица не имеет возможности выйти за пределы ящика), а следовательно, вероятностное представление ее местонахождения в пространстве будет иметь вид, схематически представленный для случая одномерного движения на рис. 1.2.

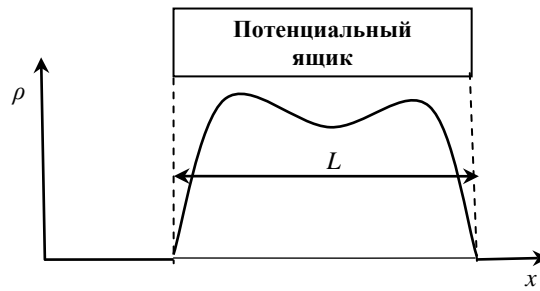


Рис. 1.2. Условное отображение функции плотности распределения вероятностей местонахождения микрочастицы в одномерном потенциальном ящике

Для начального рассмотрения важен не столько сам вид представленной кривой (этот аспект будет рассмотрен позже), а то обстоятельство, что вероятность нахождения микрочастицы непосредственно на границах потенциального ящика должна быть принята равной нулю. Это граничное условие следует из условия непрерывности поведения реальных физических объектов (т.е. при приближении к границе ящика как справа, так и слева должна наблюдаться одинаковая вероятность местонахождения микрочастицы). Отсюда следует, что движению микрочастицы должны соответствовать не любые ПМВ, а лишь те из них, которые могут обеспечить выполнение этого граничного условия.

На рис. 1.3 представлены четыре (из бесконечной совокупности) варианта таких «правильных» ПМВ, суперпозиция которых образует волновой пакет, определяющий вид кривой на рис. 1.3.

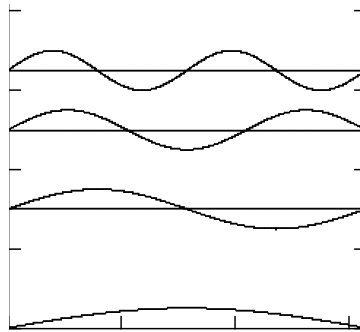


Рис. 1.3. Иллюстрация четырех ПМВ ($n = 1, 2, 3, 4$), участвующих в образовании волнового пакета

Согласно волновому представлению, изображенному на рис. 1.3, к числу вышеуказанных «правильных» волн следует отнести только лишь те из ПМВ, для которых выполняется условие: $\lambda_n = (2 \cdot L) / n$, где параметр n пробегает бесконечный ряд значений из набора величин $\{1, 2, 3, \dots, \infty\}$.

Принимая во внимание результаты раздела 1.1.3, можно заключить, что и модуль волнового вектора волн де Бройля тоже может принимать бесконечный ряд дискретных значений, равных: $k_n = (\pi \cdot n) / L$. С учетом выражения (1.15) и вышеизложенных моментов относительно допустимых значений волнового вектора ПМВ можно каждому значению модуля вектора k_n поставить в соответствие вполне определенную волну де Бройля со значением энергии микрочастицы, равным:

$$W_n = \frac{h^2 \cdot n^2}{8 \cdot m \cdot L^2}. \quad (1.23)$$

Из выражения (1.23) следует фундаментальный вывод о том, что энергия микрочастицы, находящейся в потенциальной яме, может принимать только дискретный ряд значений, т.е.

квантуется. Параметр n , характеризующий возможное значение энергии микрочастицы, получил название *квантового числа энергетического состояния* микрочастицы.

Определим относительное изменение энергии микрочастицы, представленное в виде отношения $W_{(n+1)}/W_{(n)}$, при ее переходе с одного квантового уровня (n) на соседний уровень ($n+1$). Согласно выражению (1.23) для искомого отношения имеем

$$\frac{W_{(n+1)}}{W_{(n)}} = \frac{(n+1)^2}{n^2} \rightarrow 1 \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (1.24)$$

Из выражения (1.24) следует, что наибольшие относительные изменения энергии при квантовых переходах имеют место при малых значениях квантовых чисел n и абсолютно не проявляются на практике при значениях $n \rightarrow \infty$. В последнем случае принято считать, что энергетический спектр микрочастицы при больших значениях параметра n имеет непрерывный (а не дискретный) характер.

Можно отметить также то обстоятельство, что в случае выполнения вышеуказанного условия ($n \rightarrow \infty$) количество максимумов (на графиках рис. 1.3) будет крайне велико и располагаться они между собой будут очень плотно. Отсюда можно сделать вывод, что вероятность местоположения микрочастицы будет практически постоянна в любой точке потенциального ящика, как это и принято считать в классической физике, для случая движения шарика по абсолютно ровной и горизонтальной поверхности.

Для последующего рассмотрения необходимо уточнить, что в выражении (1.23) в силу ограничений, накладываемых принципом неопределенности (см. раздел 1.1.4.), речь может идти только о полной энергии микрочастицы. О потенциальной энергии можно говорить только в контексте налагаемого на рассматриваемую систему в целом внешнего (относительно микрочастицы) силового поля, в условиях которого происходит движение микрочастицы. Кинетическая энергия микрочастицы (определяемая, как это общепринято считать в классической физике, в виде разницы полной и потенциальной энергий частицы) в квантовой физике не является параметром, доступным процедуре непосредственного измерения, а следовательно, и не является физическим параметром системы.

В более общей трактовке можно сформулировать фундаментальный вывод о том, что координаты (x, y, z) и проекции импульса (p_x, p_y, p_z) микрочастицы уже не могут рассматриваться в качестве основных базовых параметров, однозначно характеризующих физическое состояние рассматриваемой системы. Это обстоятельство можно наглядно отобразить с помощью фазового портрета состояния микрочастицы.

На рис. 1.4 представлены фазовые портреты состояния индивидуальной частицы для случаев классического и квантового подходов (на рисунке 6-мерная система координат фазового пространства состояния системы условно представлена как трехмерная). В классическом подходе состояние микрочастицы отображается на фазовом портрете посредством одной единственной точки, с проекциями на оси координат – x, y, z, p_x, p_y, p_z .

В квантовом подходе следует учесть то обстоятельство, что в соответствии с выражениями (1.21) состояние микрочастицы в фазовом пространстве определяется с некоторой долей неопределенности, величина которой связана с наличием элементарного фазового объема ΔV (т.е. это уже не точка):

$$\Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = h^3. \quad (1.25)$$

На рис. 1.4 положения точки A (классический подход) и объема ΔV_{t_0} (квантовый подход) характеризуют состояние микрочастицы в фазовом пространстве в начальный момент времени t_0 . С

течением времени микрочастица перемещается в физическом пространстве и в момент времени t_1 фазовый портрет состояния микрочастицы отображается уже точкой \mathbf{B} (классический подход) и объемом ΔV_{t_1} (квантовый подход).

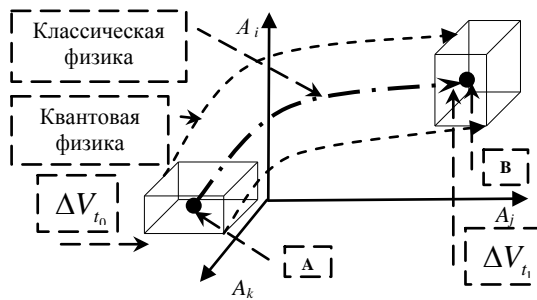


Рис. 1.4. Схематическое отображение фазовых траекторий движения микрочастицы в классическом и квантовом подходах

Процесс движения микрочастицы при классическом подходе отображается определенной фазовой траекторией (что условно обозначено толстой штрихпунктирной линией), что свидетельствует о жестко детерминированном характере процесса эволюции системы. В случае использования квантового подхода как начальное, так и конечное состояние движущейся микрочастицы содержит элемент неопределенности. В этой связи в последнем случае конечный результат процесса эволюции системы может быть спрогнозирован только на основе вероятностных представлений, представленных выше.

Из вышеизложенного следует, что детерминизм квантовой механики (в части своеобразного проявления причинно-следственных связей в физической системе) имеет своеобразный характер и исключает возможность формирования точного прогноза относительно состояния системы в будущем. Причем эта неопределенность состояния системы испытывает тенденцию к непрерывному возрастанию во времени.

1.1.6. Волновая функция как характеристика состояния микрочастицы

Основной задачей разд. 1.1.5 являлось рассмотрение феномена эффекта квантования энергии микрочастицы, локализованной в ограниченной области пространства (т.е. «запертой» в потенциальном ящике). При этом остался открытым вопрос, где именно находится частица в пределах упомянутого потенциального ящика.

Строгое рассмотрение этого вопроса предполагает использование понятия о *волновых функциях* микрочастицы [1]. Отметим, что волновые представления уже использовались ранее в вышеизложенных материалах в виде элементарных ПМВ де Бройля. Поэтому все нижеизложенные материалы можно рассматривать как дальнейшее развитие волновых представлений квантовой механики.

Волновая функция $\Psi(x, y, z, t)$ состояния микрочастицы формируется таким образом, чтобы квадрат её модуля $|\Psi(x, y, z, t)|^2$ представлял собой функцию плотности вероятности распределения микрочастицы ϖ . Для случая дискретных возможностей расположения частицы – это просто вероятность обнаружить микрочастицу в момент времени t_0 в точке пространства с координатами (x_0, y_0, z_0) :

$$\varpi = |\Psi(x_0, y_0, z_0, t_0)|^2 = \Psi \cdot \Psi^*, \quad (1.26)$$

где Ψ^* – комплексно-сопряженная с Ψ волновая функция.

Можно отметить значительную схожесть трактовки физического смысла волновой функции Ψ и ПМВ де Бройля (см. раздел 1.1.3).

Представляется очевидным, что волновая функция должна удовлетворять условию нормировки:

$$\iiint \Psi(x, y, z) \cdot \Psi^*(x, y, z) \cdot dx \cdot dy \cdot dz = 1, \quad (1.27)$$

где интегрирование производится по всему геометрическому пространству.

Равенство интеграла (1.27) единице отражает тот очевидный факт, что событие, состоящее в том, что микрочастица будет обнаружена в какой-либо точке геометрического пространства (при этом неважно, в какой именно точке пространства), является достоверным.

Целесообразность введения в рассмотрение функции плотности вероятности ϖ обусловлена появившейся возможностью определения вероятности нахождения микрочастицы в ограниченной области пространства (в частности, в пределах потенциального ящика). Действительно, из определения понятия функции плотности вероятности следует, что вероятность нахождения микрочастицы dP в бесконечно малом объеме пространства $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ равна

$$dP = \varpi \cdot dV. \quad (1.28)$$

С учетом выражения (1.28), для вероятности нахождения микрочастицы $P(V)$ в любой области пространства конечного объема V имеем (в различных формах представления):

$$P(V) = \int_V dP \equiv \int_V \varpi \cdot dV \equiv \int (\Psi \cdot \Psi^*) \cdot dV. \quad (1.29)$$

Для полноты рассмотрения вопроса отметим, что набор координат, которые выступают в роли аргументов волновой функции в выражении (1.29), принято называть в квантовой механике *полным набором физических величин*, характеризующих состояние системы в соответствии со спецификой рассматриваемой задачи. В квантовой механике можно выбрать различные варианты полных наборов величин. Выбранный полный набор величин определяет *представление волновой функции*. Наибольшее распространение в инженерно-физической практике получило *координатное представление* ($dV = dx \cdot dy \cdot dz$) и *импульсное представление* ($dV = dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z$). В первом случае определяется местоположение микрочастицы в обычном геометрическом пространстве, а во втором – в виртуальном импульсном пространстве.

Для волновых функций справедлив *принцип суперпозиции*, который уже был использован (в неявном виде) в разделе 1.1.5 при формировании волнового пакета из ПМВ де Бройля. Физическая суть принципа суперпозиции состоит в том, что если система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями из набора индивидуальных функций $\{\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n\}$, то она может пребывать и в обобщенном состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_Σ , определяемой в виде

$$\Psi_\Sigma = \sum_{i=1}^n c_i \cdot \Psi_i, \quad (1.30)$$

где c_i – постоянные коэффициенты (в общем случае комплексные), удовлетворяющие условию нормировки $\sum |c_i|^2 = 1$.

Именно совокупное проявление индивидуальных функций $\{\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n\}$ (как результат их суперпозиции в виде волновой функции – Ψ_Σ) определяет конкретный вид распределения вероятности нахождения микрочастицы в пределах потенциального ящика (см. рис. 1.2).

Из наличия у частиц волновых проявлений следует, что закон их движения также должен основываться на волновых принципах. Отсюда следует, что при анализе движения микрочастицы следует руководствоваться неким *волновым уравнением*. Для микрочастицы, движущейся в силовом поле с потенциальной энергией $U(x, y, z, t)$, это волновое уравнение имеет следующий вид (уравнение Шредингера, имеющее статус закона природы [2]):

$$-i \cdot \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) - U(x, y, z, t) \cdot \Psi, \quad (1.31)$$

где Ψ – рассмотренная выше волновая функция микрочастицы; m – масса микрочастицы; i – символ мнимой единицы, равный $\sqrt{-1}$.

Важность волнового уравнения (1.31) состоит в том, что оно отражает процесс эволюции состояний микрочастицы во времени. Следует отметить, что решением уравнения Шредингера являются только *комплексные* волновые функции. Это обстоятельство не должно вызывать недоразумение, поскольку физическим смыслом обладает только плотность вероятности распределения частиц ϖ (см. выражение (1.26)), а она является действительным числом.

Как правило, аналитическое решение уравнения Шредингера для случая реальных потенциальных функций $U(x, y, z, t)$ связано со значительными математическими трудностями. В этой связи в инженерно-физической практике часто, в целях упрощения анализа, рассматриваются:

- идеализированные модели функции потенциальной энергии $U(x, y, z, t)$, к примеру, рассмотренная выше модель потенциального ящика;
- стационарные задачи (интересные для многих случаев практического применения), в которых функция потенциальной энергии не зависит от времени, т.е. рассматривается функция – $U(x, y, z)$.

Рассмотрим общие принципы решения волнового уравнения Шредингера для *стационарного случая* на примере *одномерного* (во избежание громоздких выражений) движения микрочастицы. Условие стационарности позволяет представить волновую функцию $\Psi(x, y, z, t)$ в виде произведения независимых координатных и временных функций:

$$\Psi(x, y, z, t) = \phi(x, y, z) \cdot \varphi(t). \quad (1.32)$$

Подставив (1.32) в выражение (1.31) и разделив полученное выражение на фрагмент $\{\phi(x, y, z) \cdot \varphi(t)\}$, получим

$$\frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m} \cdot \frac{1}{\phi(x)} \cdot \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} - U(x) = -i \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \frac{1}{\varphi(t)} \cdot \frac{d\varphi(t)}{dt}. \quad (1.33)$$

Выражение (1.33) интересно тем, что его левая часть является функцией только координаты местонахождения микрочастицы x , а правая – только времени t . Такая ситуация возможна только в том случае, если обе эти части равны одной и той же постоянной величине. Отметим также, что эта постоянная величина имеет размерность энергии. Можно показать [2], что эта постоянная равна

$(-W)$, где W – полная энергия микрочастицы (замечания относительно возможности совместного определения потенциальной и кинетической энергии частицы приведены в разделе 1.1.5).

Приравняв правую и левую часть выражения (1.33) $(-W)$ и проведя необходимые алгебраические преобразования, получим два уравнения:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (W - U(x)) \cdot \phi(x) = 0, \quad (1.34a)$$

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -i \cdot \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot \varphi(t) \cdot W. \quad (1.34b)$$

Функция $\phi(x)$, или в общем случае $\phi(x, y, z)$, получила название *амплитудной* волновой функции. Как будет показано ниже (на примерах определения энергетических состояний для случая несвободных частиц), амплитудное уравнение (1.34a) имеет решение только при строго определенных значениях энергии микрочастицы $\{W_1, W_2, W_3, \dots, W_n\}$, которые называются *собственными значениями энергии* частицы. Волновые функции $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_n\}$, отвечающие этим значениям энергии, называются *собственными волновыми функциями*.

Решение уравнения (1.34a) не зависит в явном виде от функции $U(x)$ и находится посредством интегрирования по методу разделения переменных:

$$\varphi_n(t) = e^{-2 \cdot \pi \cdot i \cdot \frac{W_n \cdot t}{h}}, \quad (1.35)$$

где W_n – одно из собственных значений энергии микрочастицы.

Из выражения (1.35) следует, что временная зависимость имеет гармонический характер с частотой колебаний $\nu_n = W_n/h$ или $\omega_n = (2 \cdot \pi \cdot W_n)/h$ (обратить внимание на сходство с выражением (1.2)).

Таким образом, для рассматриваемого стационарного случая *полная волновая функция* $\Psi_n(x, t)$ для квантового состояния с номером n может быть представлена в виде

$$\Psi_n(x, y, z, t) = \phi_n(x, y, z) \cdot \varphi_n(t) = \phi_n(x, y, z) \cdot e^{-i \cdot \omega_n \cdot t}. \quad (1.36)$$

С учетом вышеизложенного вероятность обнаружения микрочастицы dP в элементе объема dV будет равна

$$dP = \phi(x, y, z) \cdot \phi^*(x, y, z) \cdot dV, \quad (1.37)$$

где совокупность координат $\{x, y, z\}$ характеризует расположение элементарного объема dV в геометрическом пространстве. Эта вероятность dP для рассмотренного стационарного случая не зависит от времени.

1.1.7. Примеры квантования энергии микрочастиц в физических системах

а) Идеализация потенциальных атомных диаграмм

В настоящем разделе приведены примеры решения уравнения Шредингера для ряда конкретных физических систем, широко используемых в современной инженерно-физической практике. Ограниченный объем пособия не предполагает проведения детального рассмотрения данных материалов. В этой связи основной целью раздела является изучение основных методологических принципов анализа квантовых *стационарных* систем на примерах движения микрочастиц в условиях [8]:

- отсутствия потенциальных полей как таковых (специальный случай, адекватный вероятностным волнам де Бройля);
- нахождения в потенциальном ящике конечной протяженности с бесконечно высокими стенками;
- электростатического механизма взаимодействия микрочастиц (электрона с протоном в водородоподобном атоме);

Как отмечалось выше, практическое использование уравнения Шредингера сопряжено со значительными математическими трудностями. Эффективность процесса минимизации указанных математических трудностей напрямую связана с решением вопроса «оптимизации» используемых потенциальных функций $U(x, y, z)$. Под оптимизацией принято понимать процедуру замены реальных потенциальных функций взаимодействия микрочастиц на их упрощенные (идеализированные) модели, которые, тем не менее, адекватны целям рассматриваемой задачи.

В инженерно-физической практике анализа микроскопических (атомно-молекулярных) и макроскопических систем (конденсированные среды) в качестве базовой потенциальной функции $U(x, y, z)$ часто используется выражение вида [3]

$$U(r) = 4 \cdot \varepsilon \cdot \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right], \quad (1.38)$$

где r – межцентровое расстояние микрочастиц; n и m – постоянные величины, численное значение которых определяется типом механизма взаимодействия микрочастиц (выполняется условие: $n > m$); ε и σ – постоянные, определяемые экспериментальным путем для каждого типа взаимодействующих микрочастиц (в частности, для случая атомно-молекулярных взаимодействий (*потенциал Леннарда-Джонса* [3]): $n = 12$; $m = 6$).

Первое слагаемое в выражении (1.38) характеризует проявление сил взаимного отталкивания между микрочастицами, второе – сил взаимного притяжения. На рис. 1.5 представлены примеры графического отображения процедуры проведения идеализации (варианты (Б) и (В)) потенциальной функции $U(x, y, z)$ вида (1.38).

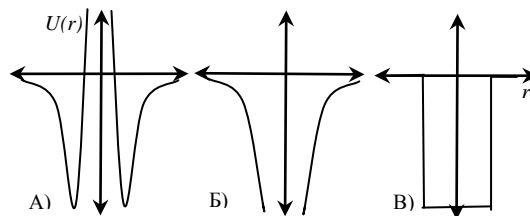


Рис. 1.5. Варианты представления потенциальной функции $U(x, y, z)$
 (А – реальная функция, по (1.38); Б – идеализация № 1;
 В – идеализация № 2)

Из материалов рис.1.5 следует, что на некоторых участках оси r функция $U(x, y, z)$ принимает отрицательные значения. Последнее обстоятельство является следствием наложенного требования о равенстве $U(x, y, z) = 0$ при $r \rightarrow \infty$. Факт появления отрицательных значений энергии не должен вызывать особого недоразумения, поскольку в расчетной практике представляют интерес не абсолютные значения энергий (уровни квантования энергии), а их разностные формы, определяющие энергетические параметры конкретных элементарных физико-химических процессов.

*б) Движение микрочастицы в условиях отсутствия
потенциальных полей*

В отсутствие потенциального поля (т.е. при условии: $U(x) = 0$) движение микрочастицы следует рассматривать как абсолютно свободное и стационарное. Уравнение Шредингера для этого типа движения микрочастицы в одномерном приближении имеет вид

$$-i \cdot \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right). \quad (1.39)$$

С учетом стационарного характера движения микрочастицы решением этого уравнения является полная волновая функция (см. выражение (1.36)):

$$\Psi(x, t) = \phi(x) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}, \quad (1.40)$$

где $\phi(x)$ – амплитудная волновая функция, удовлетворяющая амплитудному уравнению (1.34).

При выполнении условия $U(x, y, z) = 0$ для амплитудного волнового уравнения $\phi(x)$ имеем

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot W \cdot \phi(x) = 0. \quad (1.41)$$

Поскольку в данном случае полная энергия микрочастицы равна ее кинетической энергии, то с учетом выражения (1.15) для амплитудного уравнения имеем

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + k^2 \cdot \phi(x) = 0. \quad (1.42)$$

Частными решениями амплитудного уравнения (1.42) являются:

$$\phi_1(x) = A \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} \quad \text{и} \quad \phi_2(x) = B \cdot e^{-i \cdot k \cdot x}, \quad (1.43)$$

где параметры, стоящие перед экспонентами, A и B – постоянные коэффициенты.

С учетом выражения (1.40), решая уравнение (1.39), для полной волновой функции $\Psi(x, t)$ имеем

$$\Psi(x, t) = A \cdot e^{i(k \cdot x - \omega \cdot t)} + B \cdot e^{-i(k \cdot x - \omega \cdot t)}. \quad (1.44)$$

Уравнение (1.44) отражает суперпозицию двух ПМВ де Бройля (как это и следовало ожидать, согласно материалам раздела 1.1.2), распространяющихся в противоположных направлениях вдоль оси x геометрического пространства.

Для последующего изложения необходимо отметить, что энергия движения свободной микрочастицы (то есть при выполнении условия: $U(x, y, z) = 0$) не квантуется (поскольку нет никаких ограничений на допустимые значения модуля волнового вектора – k), ее изменение может иметь непрерывный характер, а ее величина пропорциональна квадрату модуля волнового вектора (подробнее см. выражение (1.15)).

*в) Квантование энергии микрочастицы, находящейся
в потенциальном ящике*

Определим энергетический спектр микрочастицы при ее движении в пределах потенциального ящика (используется модельное представление согласно рис. 1.5,В). Для этого рассмотрим случай движения микрочастицы в условиях внешнего силового поля, определяемого потенциальной функцией $U(x)$ вида

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{при } x < 0 \text{ – (область № I);} \\ 0, & \text{при } 0 \leq x \leq L \text{ – (область № II);} \\ U_0, & \text{при } x > 0 \text{ – (область № III).} \end{cases} \quad (1.45)$$

Уравнения Шредингера (см. (1.34а)) для вышеуказанных областей оси x имеют соответственно вид

$$\frac{d^2\phi_{I,III}(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (W - U_0) \cdot \phi_{I,III}(x) \equiv \frac{d^2\phi_{I,III}(x)}{dx^2} + k_1^2 \cdot \phi_{I,III}(x) = 0, \quad (1.46)$$

где $k_1 = \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot (W - U_0)}$;

$$\frac{d^2\phi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot W \cdot \phi_{II}(x) \equiv \frac{d^2\phi_{II}(x)}{dx^2} + k^2 \cdot \phi_{II}(x) = 0, \quad (1.47)$$

где $k = \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot W}$.

Для упрощения рассмотрения задачи положим, что стенки потенциального ящика являются бесконечно высокими, а следовательно, решение уравнения (1.46) имеет вид

$$\phi_I(x) = \phi_{III}(x) \equiv 0. \quad (1.48)$$

Общим решением уравнения (1.47), характерного для случая нахождения микрочастицы в пределах потенциального ящика, является:

$$\phi_{II}(x) = A \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} + B \cdot e^{-i \cdot k \cdot x}. \quad (1.49)$$

Воспользовавшись условием непрерывности волновой функции $\phi(x)$ на левой границе ($x = 0$) потенциального ящика, имеем

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0) = 0. \quad (1.50)$$

Из выражения (1.50) следует, что постоянные коэффициенты A и B , используемые в выражении (1.49), удовлетворяют условию: $A = -B$. С учетом этого обстоятельства для волновой функции $\phi_{II}(x)$ находим:

$$\phi_{II}(x) = A \cdot (e^{+i \cdot k \cdot x} - e^{-i \cdot k \cdot x}) = C_1 \cdot \sin(k \cdot x). \quad (1.51)$$

Воспользовавшись условием непрерывности волновой функции $\phi(x)$ на правой границе ($x = L$) потенциального ящика, имеем

$$\phi_{II}(L) = \phi_{III}(L) = 0. \quad (1.52)$$

Из выражений (1.51) и (1.52) следует весьма существенное следствие:

$$C_1 \cdot \sin(k \cdot L) = 0, \quad (1.53)$$

что представляется возможным (если $C_1 \neq 0$) только лишь в том случае, если выполняется условие: $(k_n \cdot L) = n \cdot \pi$, где $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$.

С учетом этого условия для амплитудной волновой функции имеем

$$\phi_n(x) = C_n \cdot \sin\left(n \cdot \frac{\pi \cdot x}{L}\right), \quad (1.54)$$

где значения постоянных коэффициентов C_n определяются из условия нормировки амплитудной волновой функции.

Искомое энергетическое состояние микрочастицы, описываемое волновой функцией (1.54), можно получить, подставив дискретные величины k_n в выражение (1.15):

$$W_k = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot L^2} \cdot n^2. \quad (1.55)$$

Из выражения (1.55) следует, что при больших значениях L , намного превосходящих атомные масштабы, расстояние между соседними энергетическими уровнями может оказаться столь незначительным, что позволит считать функцию $W_n = \varphi(n)$ непрерывной (случай свободной микрочастицы).

г) Квантование энергии электронов в водородоподобном атоме

В водородоподобном атоме вокруг ядра с электрическим зарядом, равным $Z \cdot e$ (где Z – порядковый номер химического элемента; e – заряд электрона), движется всего один – единственный электрон (предполагается, что отсутствие остальных $(Z - 1)$ электронов в атоме обусловлено проявлением процессов ионизации). В этом случае, потенциальная энергия электростатического взаимодействия этого электрона с зарядом ядра равна (используется модельное представление согласно рис. 1.5,Б):

$$U(r) = -\frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}, \quad (1.56)$$

где r – расстояние между геометрическими центрами ядра и электрона; ϵ_0 – электрическая постоянная, численно равная $8.854 \cdot 10^{-12}$ Ф/м.

Поскольку рассматриваемая зарядовая система обладает центральной симметрией, уравнение Шредингера необходимо представить в сферической системе координат:

$$\Delta\phi(r) + \frac{8 \cdot m \cdot \pi^2}{h^2} \cdot \left(W + \frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}\right) \cdot \phi(r) = 0, \quad (1.57)$$

где Δ – оператор Лапласа, представленный в сферической системе координат.

Решение уравнения (1.57) приводит к спектру разрешенных энергетических состояний для электрона в атоме в виде (подробный вывод рассмотрен в источнике [7]):

$$W_n = -\frac{Z^2 \cdot m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (1.58)$$

Весьма характерно то обстоятельство, что фрагмент n^2 в выражении (1.58) находится в знаменателе (в выражении (1.55) он расположен в числителе). Это расхождение обусловлено тем

обстоятельством, что в рассматриваемом случае не используется представление о бесконечной глубине потенциальной ямы, в которой находится микрочастица.

Решение в виде (1.58) является достаточно грубым приближением, поскольку в нем не учитывается фактор орбитального движения электрона, приводящего к нарушению сферической симметрии у функции плотности вероятности расположения электрона (обратить внимание на тот факт, что потенциальная функция (1.56) задана в симметричной форме относительно параметра r). Приемлемая точность выражения (1.58) имеет место только при значениях параметра $n > 100$.

Несмотря на оговоренные выше недостатки, выражение (1.58) нашло широкое распространение в научно-технической практике, поскольку оно способствует пониманию (на качественном уровне рассмотрения) физических принципов эффекта квантования энергии электронов в центрально-симметричных системах, в качестве которых выступают индивидуальные атомно-молекулярные объекты.

Рассмотренные выше примеры практического использования уравнения Шредингера позволяют понять основные методологические принципы квантово-механического анализа энергетического спектра состояний микрочастиц.

Следует отметить, что метод анализа состояния систем, основанный на использовании уравнения Шредингера, не является единственным в теоретическом арсенале квантовой механики. В частности, широкое распространение получил *метод вторичного квантования* [4], основанный на использовании (в качестве базовой концепции) операторов рождения и уничтожения элементарных квантовых состояний. Суть метода вторичного квантования состоит в том (подробное рассмотрение выходит за рамки настоящего пособия), что в нем, вместо волновых функций микрочастиц в координатном или в импульсном представлении (см. разд. 1.1.5) вводится в рассмотрение новый класс волновых функций в представлении чисел заполнения различных квантовых состояний одной частицы. При этом переходы между различными состояниями одной частицы описываются как уменьшение числа заполнения, соответствующего одной волновой функции, на единицу, и соответственного увеличения числа заполнения другого состояния на единицу.

Несомненным достоинством метода вторичного квантования является то, что он позволяет упростить процедуру анализа физико-технических функциональных (в плане практических интересов) систем, содержащих большое количество индивидуальных микрочастиц, используемых при формировании твердотельных микро- и наноразмерных атомно-молекулярных структур.

1.2. Квантово-механические принципы анализа параметров электронных состояний в наноразмерных структурах

1.2.1. Общие принципы классификации наноразмерных структур

В настоящее время существует чрезвычайно большое количество физических и биологических объектов, которые, исходя из их размерных характеристик, могут быть отнесены к наноразмерным структурам. В рамках настоящего пособия рассматривается довольно ограниченный класс наноразмерных структур, а именно структур с упорядоченным расположением атомов (их ближайшим аналогом в макром мире являются кристаллы с электронной проводимостью). В части практических интересов и целевых установок основные результаты этого раздела более всего относятся к области создания и анализа потенциальных возможностей наноразмерных устройств электронной техники. Тем не менее значительный объем рассмотренных ниже материалов может оказаться полезным и при проведении анализа свойств неупорядоченных (например: веществ с атомной структурой аморфного типа) или квазиупорядоченных (т.е. структур, обладающих хотя бы

некоторыми элементами симметрии в расположении атомных группировок, что характерно для значительного круга биологических объектов) наноструктур.

В современной научно-технической практике принято (с некоторой долей условности) подразделять наноразмерные структуры на три класса по критерию пространственной конфигурации [5]:

- **квантовая точка** – пространственная, нуль-мерная структура (условное обозначение – (0D)), в которой движение носителей зарядов (электронов) *ограничено* по всем *трем* геометрическим координатам;
- **квантовая проволока** – пространственная, одномерная структура (условное обозначение – (1D)), в которой движение носителей зарядов (электронов) *ограничено* по *двум* геометрическим координатам, которые направлены по нормали по отношению к направлению раскрытия проволоки;
- **квантовая пленка** – пространственная, двумерная структура (условное обозначение – (2D)), в которой движение носителей зарядов (электронов) *ограничено* по *одной* координате, направленной по нормали к плоскости поверхности структуры.

Относительно приведенных выше определений, использованных при классификации наноразмерных структур, необходимо сделать ряд замечаний общего и частного характера:

а) под термином «*пространственная структура*» следует понимать тот факт, что в общем случае характеристические размеры наноразмерной структуры (по всем координатам или по некоторым из них) могут по порядку величин быть более чем атомного (характерный размер – 1 ангстрем) масштаба;

б) под словосочетанием «*движение ограничено*» следует понимать то обстоятельство, что для характеристических размеров структуры должно быть приемлемым условие квантования энергии микрочастиц, представленное в виде выражения (1.23) (последнее означает, что параметр L в выражении (1.23) не должен быть настолько большим, чтобы энергетический спектр микрочастиц можно было бы считать непрерывным);

в) условные обозначения $\{(0D), (1D), (2D)\}$ относятся к структурам, графическое отображение которых представлено на рис. 1.6;

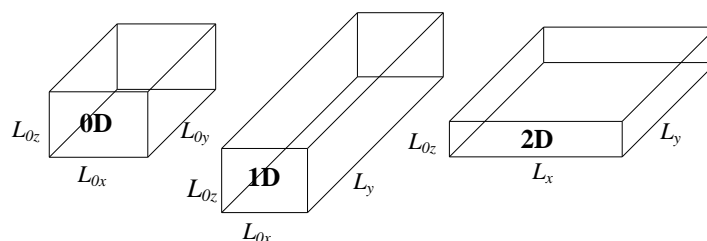


Рис. 1.6 Графическое отображение структур различной размерности: $\{(0D), (1D), (2D)\}$ (индекс «0» при L относится к направлениям с ограниченным движением)

г) в более общей постановке, речь может идти о факторах ограничения движения микрочастиц других типов (помимо электронов), обусловленных проявлением эффекта квантования энергетических состояний микрочастиц в наноразмерных структурах (с позиции представлений, развитых в разделе № 1, т.е. в потенциальном ящике, имеющем конечную протяженность в соответствии с пунктом (б) настоящих замечаний);

д) на вид функциональной зависимости потенциальной энергии от координат в пределах потенциального ящика (в котором находится микрочастица) не накладывается особых ограничений, однако в последующих материалах предполагается, что эта функция отслеживает фактор упорядоченного расположения атомов, характерного для монокристаллических структур.

Резюмируя вышеизложенное, отметим, что целью дальнейшего рассмотрения является анализ влияния квантовых эффектов на характер движения микрочастиц в пространственных структурах, ограниченных (хотя бы по одной из координат) потенциальными барьерами. В конкретном плане подлежит рассмотрению следующий круг вопросов:

- специфика спектров энергетических состояний микрочастиц, находящихся в пределах пространственно упорядоченных наноразмерных атомных структур, с геометрическими параметрами систем типа: $\{(0D), (1D), (2D)\}$;
- специфика процессов транспорта носителей заряда в твердотельных структурах, с характеристическими размерами, предполагающими учет факторов размерного и квантово-механического характера.

Указанные моменты играют существенную роль в вопросах создания перспективных электронных и электронно-оптических вычислительных сред (на основе традиционных планарных технологий производства интегральных схем), обладающих чрезвычайно высокой степенью интеграции элементов ($10^{13} - 10^{15}$ элементов/см³) и уровнем быстродействия ($10^{10} - 10^{12}$ Гц).

Освоение оговоренных практических рубежей позволит вплотную приблизить теоретическую и конструкторско-технологическую базу к постановке задач по созданию квантовых компьютеров, которые, благодаря специфике реализации вычислительных операций (этот аспект рассмотрен в разд. 1.3), позволят обеспечить дальнейшее повышение тактико-технических данных вычислительных средств.

1.2.2. Энергетические состояния микрочастиц в наноразмерных структурах

а) Зонные энергетические диаграммы монокристаллических структур

В разд. 1.1.7 на примере атома водородоподобного типа показано, что полная энергия микрочастицы (в частности, электрона), находящейся в потенциальной яме, квантуется. Последнее означает, что энергия микрочастицы может принимать ряд (в пределе бесконечный) строго определенных дискретных значений.

Рассмотрим вопрос: во что трансформируется спектр разрешенных энергетических состояний электрона, находящегося в атоме (потенциальной яме), при образовании кристаллического тела из большой совокупности индивидуальных атомов одного и того же типа. При этом следует иметь в виду то обстоятельство, что расстояние между соседними атомами в твердом теле настолько мало (порядка 1 ангстрем), что каждый атом находится в силовом поле, образованном соседними атомами. Несколько забегаая вперед, отметим, что именно факт наличия оговоренного выше атомного силового поля вызывает трансформацию энергетических диаграмм (спектров) индивидуальных атомов при образовании ими кристаллических структур. В рамках настоящего раздела этот вопрос обсуждается на качественном уровне рассмотрения.

На рис. 1.7 представлены энергетические диаграммы и волновые функции $\phi(x)$ для случая двух однотипных атомов, разнесенных друг от друга на столь значительное расстояние r , что их атомные силовые поля можно считать не взаимодействующими.

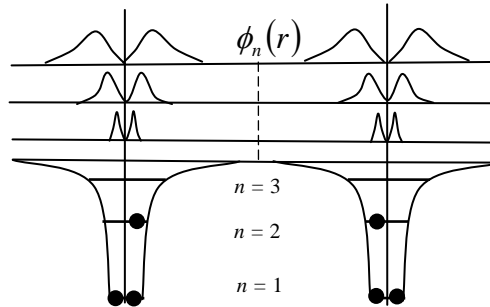


Рис. 1.7. Амплитудные волновые функции электронов при $n = 1, 2, 3$ для двухатомной системы (случай отсутствия взаимодействия атомных полей)

Для дальнейшего рассмотрения вопроса необходимо отметить ряд характерных деталей (рис. 1.7):

- атомные потенциальные функции $U(r)$ пространственно разнесены и в этой связи не претерпевают искажений, обусловленных присутствием соседнего атома;
- посредством горизонтальных отрезков, расположенных в потенциальной яме, отображены разрешенные энергетические состояния (уровни) электронов в атоме;
- чем глубже расположен электрон в потенциальной яме (например: при $n = 1$), тем он более локализован в пространстве (т.е. более несвободен в своем движении);
- при очень больших значениях параметра n разрешенные энергетические состояния подходят близко к потолку потенциальной ямы и волновые функции $\phi_n(r)$ становятся все более протяженными, а следовательно, поведение электрона приобретает черты свободного движения микрочастиц (т.е. волн де Бройля);
- суперпозиция всевозможных амплитудных волновых функций $\phi_n(r)$ при значениях параметра $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ образует волновой пакет, реализующий фактор локализации микрочастицы в пределах потенциального ящика (атома);
- жирными точками условно обозначено положение электронов, находящихся на разрешенных энергетических уровнях (согласно принципу Паули их должно быть не более двух на одном энергетическом уровне).

Сблизим теперь атомы друг к другу до такого малого расстояния, чтобы их атомные поля начали перекрываться, и рассмотрим возможные варианты заселения энергетических уровней имеющимися у атомов электронами (в данном случае это шесть электронов, отображенных на рис. 1.7). Здесь надо иметь в виду то обстоятельство, что если ранее имели место два независимых объекта (атомов), то теперь имеется одна общая атомная система, подчиняющая «интересы» индивидуальных атомов «интересам» системы в целом.

Под последним утверждением понимается то фундаментальное обстоятельство, что любая физическая система в процессе ее самопроизвольной эволюции стремится в конечном итоге принять состояние, обладающее минимальной энергией. (В более строгой постановке, здесь следует говорить о выполнении принципа *минимальной свободной энергии* системы, который является своеобразным компромиссом между принципами *минимальной энергии* и *максимальной энтропии* системы [6]).

На рис. 1.8 рассмотрены возможные варианты трансформации энергетической диаграммы индивидуальных атомов при образовании ими кристаллической структуры.

В первом варианте «сложения» энергетических спектров индивидуальных атомов (на рис. 1.8 – зачеркнут) энергетическая диаграмма оставлена неизменной, и электроны при образовании

кристаллической структуры начинают заполнять более высоко отстоящие свободные энергетические уровни (напомним, что согласно принципу Паули, на каждом энергетическом уровне может быть расположено не более двух электронов). Но в этом случае, при большом количестве атомов, образующих кристалл (в 1 см^3 кристалла порядка 10^{23} атомов), электроны начнут заполнять энергетические уровни, весьма близко отстоящие от нулевого уровня «0», в результате чего работа выхода электронов из кристалла становится функцией размера образуемого кристалла. Поскольку на практике это свойство кристалла не проявляется, рассмотренный вариант энергетической диаграммы является ошибочным.

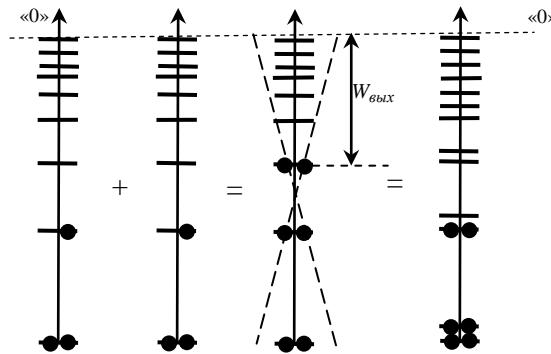


Рис. 1.8. Схематическое отображение трансформации энергетического спектра состояний электронов при образовании кристалла ($W_{\text{вых}}$ – работа (энергия) выхода электрона из кристалла)

В действительности, в природе наблюдается ситуация, представленная на рис. 1.8 справа. Ей соответствует тот факт, что *при объединении атомов в кристаллическую структуру каждый индивидуальный энергетический уровень атома расщепляется на совокупность $N/2$ дополнительных уровней, где N – количество атомов, задействованных в процессе создания кристалла.*

Для дальнейшего рассмотрения важно акцентировать внимание на трех принципиальных моментах:

- при образовании кристалла каждый энергетический уровень электрона в атоме вырождается в *энергетическую зону*, содержащую большое количество ($N/2$) разрешенных энергетических состояний и имеющую протяженность (по энергетической шкале исчисления) порядка 1 эВ;

- расстояние между соседними уровнями в энергетической зоне составляет по порядку величины – 10^{-23} эВ. Столь малое значение энергетического интервала позволяет считать, что энергетический спектр разрешенных состояний в пределах разрешенной энергетической зоны является (практически) *непрерывным*, а не *дискретным*, как это имеет место в индивидуальных атомах. (Для сравнения отметим, что средняя тепловая энергия микрочастицы, приходящаяся на одну степень свободы, составляет (при температуре окружающей среды $T = 300 \text{ К}$) 0.025 эВ. Приведенное значение средней тепловой энергии более чем на двадцать порядков превышает энергетический интервал между соседними уровнями, расположенными в пределах разрешенной энергетической зоны кристалла. В этой связи при рассмотрении *макроскопических тел дискретный характер энергетического спектра в разрешенной энергетической зоне практически не проявляется;*

- значительная протяженность (1 эВ) энергетических зон при относительно небольшой полной глубине атомной потенциальной ямы (2 – 28 эВ), как правило, приводит к *эффекту перекрытия зон*, т.е. к их наложению друг на друга, что

еще больше способствует образованию непрерывного спектра допустимых энергетических состояний, но уже в пределах объединенных зон.

Появление энергетических зон в кристаллических структурах существенным образом сказывается на их электрических и оптических характеристиках, что и обуславливает практический интерес к этому вопросу. На рис. 1.9 представлена обобщенная энергетическая диаграмма фрагмента кристаллической структуры, построенная с учетом моментов, приведенных на рис. 1.7 и 1.8.

Уточним и конкретизируем ряд характерных графических фрагментов, представленных на рис. 1.9:

- посредством штриховки отображены факторы наличия дискретных энергетических уровней и конечной протяженности (по энергетической шкале) индивидуальной энергетической зоны кристаллической структуры, соответствующей определенному значению квантового числа n ;
- точками, расположенными в пределах энергетической зоны, отражен тот факт, что в данной зоне индивидуальные энергетические уровни могут быть полностью либо частично заполнены электронами;
- точка «A» характеризует местоположение максимального значения потенциальной энергии кристаллической системы, имеющей периодический характер по пространственной координате x (рассматривается одномерный случай);
- штриховая линия на верхнем фрагменте графика функции $\phi_n(x)$ отображает суммарное значение амплитудной волновой функции в пределах этого интервала (в рамках модельного представления о суперпозиции индивидуальных вероятностных волн де Бройля, характерных для свободной частицы);
- функция потенциальной энергии (в нижней части рисунка) претерпела значительное изменение относительно невозмущенной функции потенциальной энергии (см. рис. 1.7), что обусловлено фактором сильного сближения соседних атомов (до расстояния порядка 1 ангстрем) в процессе образования кристаллической структуры.

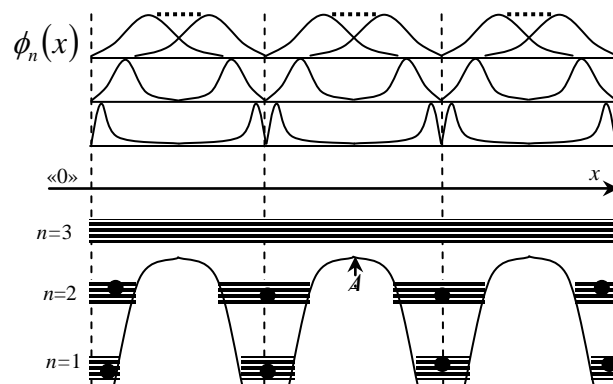


Рис. 1.9. Схематическое отображение энергетических зон в кристалле и соответствующих им амплитудных волновых функций $\phi_n(x)$

На основании схематического отображения, представленного на рис. 1.9, можно сформулировать ряд важных, с практической точки зрения, выводов относительно характера поведения электронов, находящихся в атомных структурах с периодической потенциальной функцией:

- амплитудные волновые функции электронов, расположенных в глубоко лежащих энергетических зонах ($n = 1$), имеют ярко выраженный локализованный характер, а следовательно,

возможность их перемещения в пределах кристаллической структуры полностью исключается (т.е. их следует считать абсолютно несвободными с позиции представлений о ПМВ де Бройля);

- электроны, находящиеся в энергетической зоне, условно характеризуемой квантовым числом $n = 2$, имеют более протяженные в пространстве амплитудные волновые функции и для них существует определенная вероятность движения в пределах кристаллической структуры (т.е. их следует считать ограниченно свободными с позиции представлений о ПМВ де Бройля);

- электроны, находящиеся в энергетической зоне, условно характеризуемой квантовым числом $n = 3$ (обратить внимание на штриховую линию на фрагменте амплитудной волновой функции), могут рассматриваться как свободные микрочастицы, движение которых полностью соответствует поведению элементарных ПМВ де Бройля.

Для полноты рассмотрения необходимо отметить, что согласно рис. 1.9 взаимное расположение атомов принято статичным, т.е. предполагается, что межатомное расстояние является неизменной величиной. В реальности же наличие фактора теплового колебательного движения атомов (получивших название *фононов*) приводит к появлению вариаций этого расстояния, а следовательно, положение точки *A* на энергетической шкале (см. рис. 1.9) тоже непрерывно меняется (происходит ее перемещение вверх или вниз) во времени. В этой связи амплитудные волновые функции испытывают аналогичные динамические вариации, что может внести свои негативные коррективы в характер движения электронов (в частности может иметь место рассеяние поступательного движения электронов на фононах). Представляется очевидным, что интенсивность процессов рассеяния поступательного движения электронов в кристаллической структуре должна подчиняться общим статистическим закономерностям процессов образования фононов.

Энергетическая диаграмма, представленная на рис. 1.9, не используется в современной инженерно-физической практике, поскольку она обременена большим количеством деталей. На практике используется гораздо более лаконичное отображение, получившее название *зонной диаграммы* кристаллической структуры, представленное на рис. 1.10.

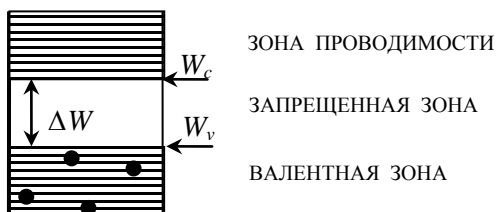


Рис. 1.10. Зонные энергетические диаграммы кристаллических структур

Для построения зонной диаграммы (рис. 1.10) используются следующие фрагменты рис. 1.9:

- самая высоко расположенная энергетическая зона, заполненная электронами ($n = 2$, на рис. 1.9), – *валентная зона*;
- самая низко расположенная энергетическая зона, свободная от электронов при температуре кристалла равной нулю ($n = 3$, на рис. 1.9), – *зона проводимости*;
- интервал между вышеуказанными зонами – *запрещенная зона*.

На рис. 1.10 использованы символы, нашедшие широкое распространение в современной научно-технической практике:

- W_c – значение энергии для самого низко расположенного энергетического уровня в зоне проводимости;

- W_v – значение энергии для самого высоко расположенного энергетического уровня в валентной зоне;
- ΔW – ширина запрещенной зоны.

Несмотря на лаконичность рассмотренной зонной диаграммы, ее вполне достаточно для объяснения практически всех электрофизических и оптических характеристик кристаллических структур с электронным типом проводимости. В частности, с ее помощью проводится классификация кристаллических тел по критерию их электропроводности: $\Delta W = 0$ – металлы (энергетические зоны перекрываются); $\Delta W < 1.5$ эВ – собственные полупроводники; $\Delta W > 1.5$ эВ – диэлектрики. Из приведенного принципа классификации веществ по критерию их уровня электропроводности следует, что разделение материалов на диэлектрики и полупроводники имеет несколько условный характер.

б) Спектр энергетических состояний в рамках модели слабосвязанных электронов

В вышеизложенном пункте (а) настоящего раздела проведен анализ (на качественном уровне рассмотрения) энергетических диаграмм конденсированных сред, что позволило уяснить основные физические принципы появления практически непрерывных энергетических спектров разрешенных состояний микрочастиц в регулярных многоатомных структурах и целесообразность их отображения в виде зонных энергетических диаграмм. Ниже этот же круг вопросов будет рассмотрен более корректно, с использованием математического аппарата волновой квантовой механики.

Последующий анализ проводится в рамках модели, основанной (в целях упрощения математических выкладок) на приближении *слабосвязанных электронов* [7]. Согласно этому приближению, потенциальная диаграмма кристаллической структуры представляется в виде потенциального ящика со слаборифленным дном, отражающим периодический характер функции потенциальной энергии электрона в кристаллической структуре. При этом считается, что потенциал решетки мало отличается от потенциала решетки в приближении свободных электронов. Последнее приближение можно допустить в случае, если глубина потенциального ящика намного превышает амплитуду рифления дна ящика.

Привлекательность приближения слабосвязанных электронов состоит в том, что в этом случае представляется возможным искать решение уравнения Шредингера (1.34а) в виде совокупности элементарных ПМВ де Бройля. Однако следует иметь в виду то обстоятельство, что периодические вариации потенциальной энергии (рифление дна ящика) должны найти свое отражение в общем решении уравнения Шредингера. Представляется вполне естественным, что указанная периодичность потенциала в кристаллической структуре должна привести к появлению фактора *дополнительной периодичности* амплитудной волновой функции $\phi(x, y, z)$.

С учетом вышеизложенных моментов амплитудная волновая функция электрона, находящегося в периодическом потенциале, ищется в виде выражения (для одномерного случая)

$$\phi(x) = u(x) \cdot e^{i \cdot k \cdot x}, \quad (1.59)$$

где $u(x)$ – некоторая периодическая функция с периодом, равным *постоянной* (межцентровому расстоянию между соседними атомами) кристаллической структуры.

Выражение (1.59) в современной научно-технической практике получило название *функции Блоха*. Нетрудно заметить, что по своей сути функция Блоха представляет собой рассмотренную ранее ПМВ де Бройля (фрагмент $e^{i \cdot k \cdot x}$), амплитуда которой модулирована периодической функцией $u(x)$.

Конкретный вид функции $u(x)$ определяется видом периодической потенциальной функции кристаллической структуры $U(x)$, используемой в уравнении Шредингера.

На рис. 1.11 представлена потенциальная функция кристаллической структуры (*модель Кронига-Пенни*), которая будет использована в дальнейшем для нахождения спектра разрешенных энергетических состояний в регулярной кристаллической структуре.

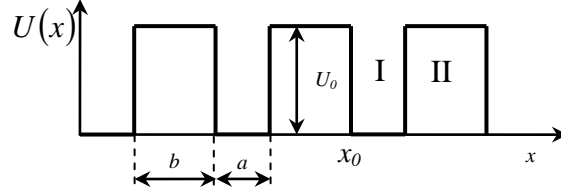


Рис. 1.11. Фрагмент потенциальной диаграммы кристаллической структуры в рамках модели Кронига-Пенни

Допустим, что энергия электрона W меньше высоты потенциального барьера U_0 (в этом случае можно считать, что он заперт в ограниченных пределах потенциального ящика с рифленным дном). В общем случае состояние электрона (амплитудная волновая функция) описывается уравнением Шредингера (см. (1.34a)):

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (W - U(x)) \cdot \phi(x) = 0. \quad (1.60)$$

Для областей (I), для которых $U(x) = 0$, решение уравнения Шредингера (1.60) имеет вид (подробнее см. раздел № 1.1.7, пункт «б»)

$$\phi_I(x) = A \cdot e^{i\alpha \cdot x} + B \cdot e^{-i\alpha \cdot x}, \quad (1.61)$$

где A и B – постоянные коэффициенты; α – характеристический параметр движения микрочастицы в области (I), равный $\alpha = \sqrt{\frac{8 \cdot m \cdot \pi^2 \cdot W}{h^2}}$.

Для областей (II), для которых $U(x) = U_0$, решение уравнения Шредингера (1.60) имеет вид (подробнее см. раздел № 1.1.7, пункт «в»)

$$\phi_{II}(x) = C \cdot e^{\beta \cdot x} + D \cdot e^{-\beta \cdot x}, \quad (1.62)$$

где C и D – постоянные коэффициенты; β – характеристический параметр движения микрочастицы в области (II), равный $\beta = \sqrt{\frac{8 \cdot m \cdot \pi^2 \cdot (U_0 - W)}{h^2}}$.

Подставив амплитудные волновые функции $\phi_I(x)$ и $\phi_{II}(x)$ из выражений (1.61) и (1.62) в выражение для функции Блоха (1.59), можно определить вид периодической функции $u(x)$ для соответствующих пространственных областей (I) и (II):

$$u_I(x) = A \cdot e^{i(\alpha-k)x} + B \cdot e^{-i(\alpha+k)x}; \quad (1.63)$$

$$u_{II}(x) = C \cdot e^{(\beta-i k)x} + D \cdot e^{-(\beta+i k)x}. \quad (1.64)$$

Для определения постоянных коэффициентов A , B , C и D воспользуемся условиями:

- Условие № 1: Функция $u(x)$ и ее первая производная считаются непрерывными, в том числе в местах скачка потенциальной энергии (например в точке x_0), поскольку реальные природные объекты не имеют бесконечных скоростей в процессах эволюции:

$$u_I(x_0) = u_{II}(x_0); \quad \left(\frac{du_I(x)}{dx} \right)_{x=x_0} = \left(\frac{du_{II}(x)}{dx} \right)_{x=x_0}. \quad (1.65)$$

- Условие № 2: Функция $u(x)$ обладает свойством периодичности по геометрическим координатам с периодом, равным $(a+b)$:

$$u_I(x_0) = u_{II}(x_0 + a + b); \quad \left(\frac{du_I(x)}{dx} \right)_{x=x_0} = \left(\frac{du_{II}(x)}{dx} \right)_{x=x_0+a+b}. \quad (1.66)$$

Подставив в (1.65) и (1.66) функции $u_I(x)$ и $u_{II}(x)$ (согласно выражениям (1.63) и (1.64)), получим систему из четырех уравнений, необходимых для определения значений постоянных коэффициентов: A, B, C, D . Чтобы рассматриваемая система уравнений имела решения для указанных коэффициентов A, B, C, D , отличные от нуля, необходимо, чтобы определитель системы уравнений был равен нулю. Последнее требование приводит к уравнению

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2 \cdot \alpha \cdot \beta} \cdot \sin(\alpha \cdot a) \cdot (sh(\beta \cdot b)) + \cos(\alpha \cdot a) \cdot (ch(\beta \cdot b)) = \cos k \cdot (a + b). \quad (1.67)$$

В целях упрощения дальнейшего анализа рассмотрим широко используемый предельный частный случай, в котором:

- ширина атомного потенциального барьера b (согласно рис. 1.11) устремляется к нулю ($b \rightarrow 0$);
- высота атомного потенциального барьера синхронно устремляется к бесконечности ($U_0 \rightarrow \infty$), причем таким образом, чтобы произведение $(b \cdot U_0)$ оставалось постоянной величиной (некий аналог дельта-функции).

Введем в рассмотрение характеристический параметр P – *прозрачность потенциального барьера* для реализации процесса движения микрочастицы по периодической структуре согласно рис. 1.11:

$$P = \frac{4 \cdot \pi^2 \cdot m \cdot a}{h^2} \cdot b \cdot U_0. \quad (1.68)$$

С учетом сделанных упрощений ($b \rightarrow 0; U_0 \rightarrow \infty$) и использованием (1.68) выражение (1.67) преобразуется к виду

$$P \cdot \frac{\sin(\alpha \cdot a)}{\alpha \cdot a} + \cos(\alpha \cdot a) = \cos(k \cdot a). \quad (1.69)$$

Выражение (1.69) отражает в неявном виде зависимость энергии электрона W (которая входит в состав параметра α , см. выражение (1.61)) от волнового вектора k и прозрачности потенциального барьера P .

На рис. 1.12 представлено графическое решение уравнения (1.69). По оси абсцисс отложен комплексный параметр $(\alpha \cdot a)$, а по оси ординат – фрагмент выражения (1.69):

$$\left(P \cdot \frac{\sin(\alpha \cdot a)}{\alpha \cdot a} + \cos(\alpha \cdot a) \right).$$

Поскольку функция $\cos(k \cdot a)$, стоящая в правой части выражения (1.69), не может быть (по определению) больше +1 и меньше -1, то параметр $(\alpha \cdot a)$ может принимать только такие значения, при которых левая часть уравнения (1.69) не может выходить за пределы значений ± 1 .

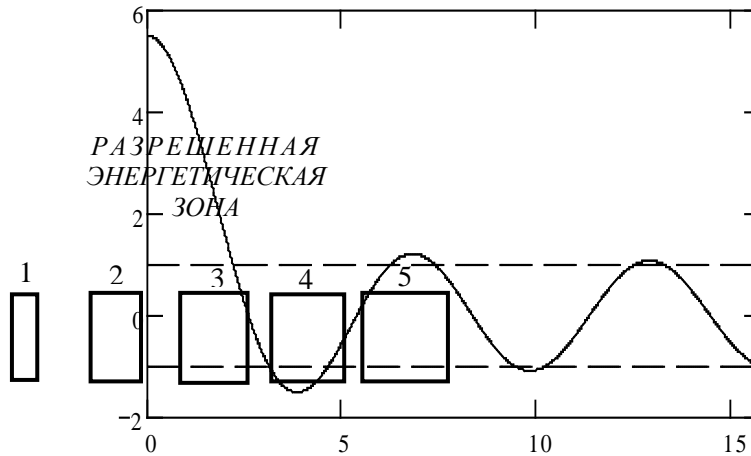


Рис. 1.12. Схематическое отображение процесса образования энергетических зон в структуре с периодической потенциальной энергией

Из рис. 1.12 следует, что вся шкала энергий (ось абсцисс) разделяется на ряд дискретных интервалов:

- *разрешенные энергетические зоны*, в которых значения энергий лежат в интервалах, ограниченных прямоугольниками;
- *запрещенные энергетические зоны*, в которых значения энергий лежат в интервалах, составляющих промежутки между прямоугольниками.

С увеличением энергии электрона (т.е. параметра $(\alpha \cdot a)$) ширина разрешенных энергетических зон увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается.

Как и следовало ожидать, ширина разрешенных и запрещенных энергетических зон является функцией прозрачности потенциального барьера P . При выполнении условия $P \rightarrow \infty$ разрешенные зоны сужаются, превращаясь в дискретные уровни, соответствующие условию $\alpha \cdot a = n \cdot \pi$, где параметр $n = \pm 1, \pm 2, \dots$, т.е. к значениям энергий, соответствующим изолированной потенциальной яме. При выполнении условия $P \rightarrow 0$ возникает противоположная ситуация, при которой исчезают запрещенные зоны и движение электрона становится практически свободным (аналог ПМВ де Бройля).

Согласно вышеизложенным моментам, внутри каждой разрешенной энергетической зоны (см. рис. 1.12) энергия электрона непрерывно возрастает с увеличением волнового вектора k . При значениях последнего, равных

$$k = n \cdot \frac{\pi}{a} ; (n = \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (1.70)$$

энергия электронов претерпевает разрыв, приводящий к появлению на энергетической диаграмме запрещенных зон (для преемственности анализа сравнить с материалами раздела 1.1.7,в).

Принимая во внимание, что волновой вектор $k = 2\pi/\lambda$, выражение (1.70) можно преобразовать к более явному виду с позиции представлений о ПМВ де Бройля и заодно получить известную формулу Вульфа-Брегга, выражающую условие дифракции волн де Бройля для случая, когда угол падения электронного луча на плоскость кристаллической решетки равен 90° :

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot a, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (1.71)$$

Для последующего рассмотрения важно отметить, что зависимость $E(k)$ вблизи нижней и верхней границ разрешенной зоны является квадратичной функцией волнового вектора, отсчитанного от численного значения этой границы [7]:

$$W = W_0 + A \cdot k^2, \quad (1.72)$$

где W_0 – энергия, соответствующая границе зоны; A – постоянный коэффициент.

У дна разрешенной зоны парабола (1.72) является *нормальной* – $A > 0$, а у потолка зоны парабола является *обращенной* – $A < 0$ (подробный анализ этого вопроса выходит за рамки настоящего пособия и приведен в источнике [8]).

*в) Изоэнергетические поверхности состояния электронов
в кристаллических структурах*

На рис. 1.12 представлено графическое отображение зависимости энергии электронов от волнового вектора, испытывающего вариации значений от 0 до $\pm\infty$ (на рисунке изображена только положительная ветвь (!)). Периодический характер поведения волнового вектора (см. выражение (1.70)) позволяет выразить энергию электронов, находящихся в различных разрешенных энергетических зонах, с помощью волновых векторов, лежащих в пределах первой зоны, т.е. принимающих значения в интервале от $-\pi/2$ до $+\pi/2$. Эта процедура представляется тем более возможной, если учесть тот факт, что выражению (1.60) удовлетворяет не только функция $\phi(x) = U(x) \cdot \exp(i \cdot k' \cdot x)$, где k' – волновой вектор, лежащий в пределах первой зоны, но и функция $\phi(x) = U(x) \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$, где вектор k , отображающий состояние электронов в любой другой энергетической зоне под номером n (см. рис 1.12.), удовлетворяет условию

$$k = k' + n \cdot \frac{2\pi}{a}. \quad (1.73)$$

Процедура построения всех энергетических зон в пределах первой энергетической зоны называется *приведением* зон, а сами зоны – *приведенными зонами*. Смысл процедуры приведения энергетических зон состоит в перемещении фрагментов зависимости функции $W(k)$, относящихся к различным зонам, к отрезку оси энергии с координатами $-\pi/2$ и $+\pi/2$.

На рис. 1.13 представлено схематическое отображение функций $W(k)$, приведенных в нормальном (сплошные линии) и приведенном (пунктирные линии) виде. Штрихпунктирной линией изображена зависимость $W(k)$ для случая свободного электрона (см. выражение (1.15)). Из рисунка следует, что у всех зон с нечетными значениями параметра n в центре расположены *минимумы энергии*, а с четными значениями n – *максимумы энергии*. Характерным моментом энергетической диаграммы является увеличение ширины разрешенных зон и уменьшение ширины запрещенных зон с возрастанием волнового вектора k , что нашло свое отражение на фрагменте, расположенном справа на рис. 1.13 для частных случаев $n = 1, 2, 3$.

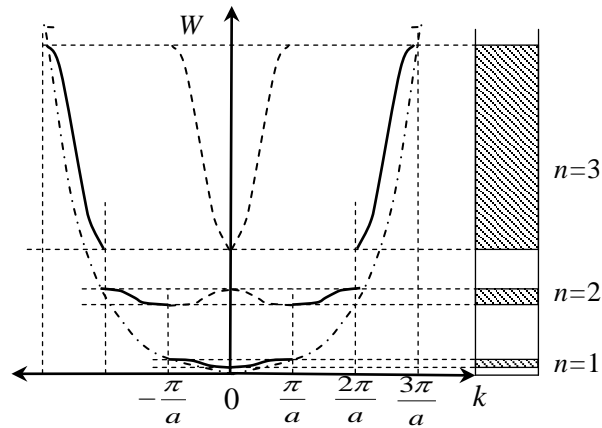


Рис. 1.13. Схематическое отображение функций $W(k)$, представленных в нормальном (сплошные линии) и приведенном (пунктирные линии) виде

Приведенные выше материалы могут быть распространены и на трехмерный случай, характерный для реальных кристаллических структур. Так как параметры решетки (т.е. периодичности), как правило, не одинаковы по разным направлениям в кристалле, то и значения волнового вектора k , при которых наступают разрывы в разрешенных энергетических зонах, будут также различны (см. выражение (1.70)):

$$k_x = n \cdot \frac{\pi}{a}; \quad k_y = n \cdot \frac{\pi}{b}; \quad k_z = n \cdot \frac{\pi}{c}, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (1.74)$$

где a, b, c – параметры кристаллической решетки соответственно по координатным направлениям x, y, z .

По аналогии с (1.73), для трехмерной кристаллической структуры вблизи дна разрешенной зоны, характеризуемой нечетными значениями параметра $n = 1, 3$, для функции $W(k)$ имеем

$$W(k) = W_0 + A \cdot k_x^2 + B \cdot k_y^2 + C \cdot k_z^2, \quad (1.75)$$

где W_0 – энергия электрона, соответствующая местоположению дна разрешенной зоны; A, B, C – постоянные коэффициенты, которые в случае минимума (т.е. нечетных значений параметра n) являются положительными величинами.

Для кристаллов кубического типа, в которых ввиду симметрии $A = B = C$, выражение (1.75) трансформируется к виду

$$W(k) = W_0 + A \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = W_0 + \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m_n} \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (1.76)$$

В выражении (1.76) постоянный коэффициент A представлен в виде, аналогичном случаю движения свободного электрона (см. выражение (1.15)), с тем лишь отличием, что масса свободного электрона заменена на *эффективную массу* электрона, значение которой характерно для каждого конкретного типа кристаллической структуры.

Для четных значений параметра n (в центре приведенной зоны находится максимум энергии) функция $W(k)$ также определяется с помощью выражений (1.75) и (1.76), однако в этом случае постоянные коэффициенты A, B, C являются *отрицательными* величинами. Интересно отметить, что для этого случая и эффективная масса электрона m_n также приобретает отрицательное значение, в силу того что фрагмент $(h^2)/(8 \cdot \pi^2)$ в выражении (1.76) является положительной величиной.

Физическая сущность и вытекающие практические следствия из этого парадоксального феномена рассмотрены в источнике [7].

Поверхность в координатном представлении $\{k_x, k_y, k_z\}$, отображающая энергетическое состояние системы и удовлетворяющая условию $W(k) = \text{const}$, называется *изоэнергетической поверхностью*. С учетом вышеизложенных моментов изоэнергетические поверхности в пространстве состояний $\{k_x, k_y, k_z\}$, в общем случае имеют вид *эллипсоидов* вращения (согласно выражению (1.75)), а в частном случае, для кристаллических структур кубического типа, – *сферический* вид (согласно выражению (1.76)).

На рис. 1.14 представлены характерные примеры отображения изоэнергетических поверхностей кристаллических структур.

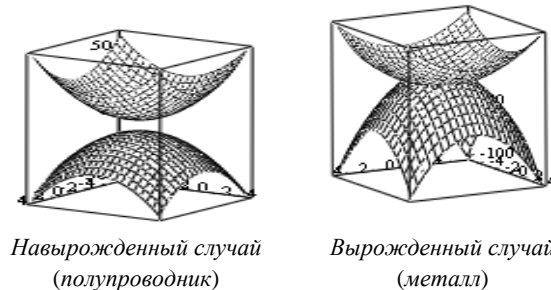


Рис. 1.14. Изоэнергетические поверхности состояния электрона (квантовые числа $n = 2$ и 3 выбраны согласно рис. 1.13)

При этом следует иметь в виду то обстоятельство, что экстремумы функции $W(k)$ не обязательно должны располагаться в центрах приведенных энергетических зон, поскольку последнее имеет место лишь в том случае, если граничные значения волновых векторов k_x, k_y, k_z в пределах индивидуальных зон имеют одинаковые величины.

з) Спектр энергетических состояний в наноразмерных структурах типа (0D)

В наноразмерных структурах типа (0D) движение электронов ограничено по всем трем координатным направлениям. Эти ограничения соответствуют случаю нахождения микрочастицы в трехмерном потенциальном ящике, который имеет весьма малую протяженность по всем координатным осям – $\{x, y, z\}$. В современной научно-технической практике диапазон этой протяженности сопоставим с интервалом значений характеристических длин порядка $1 - 100$ нм. Именно исходя из этого обстоятельства такие структуры получили название *квантовой точки*, несмотря на то что они могут содержать достаточно большое количество атомов.

На рис. 1.15 представлено модельное отображение квантовой точки с позиции общих представлений о трехмерном потенциальном ящике.

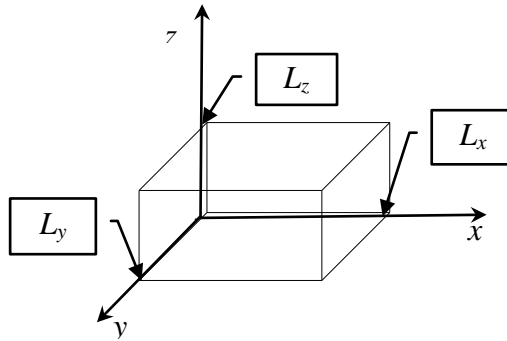


Рис. 1.15. Пространственное отображение квантовой точки с характеристическими размерными параметрами $\{L_x, L_y, L_z\}$

Беря за основу одномерную модель потенциального ящика (см. выражение (1.55)), для функции $W_{(0D)}$ применительно к квантовой точке в общем случае имеем

$$W_{(0D)}(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e} \cdot \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right), \quad (1.77)$$

где L_x, L_y, L_z – пространственная протяженность квантовой точки соответственно по координатным направлениям $\{x, y, z\}$; n_x, n_y, n_z – квантовые числа из набора целочисленных величин $\{1, 2, \dots, \infty\}$, характеризующие локальное состояние микрочастицы соответственно по координатным направлениям $\{x, y, z\}$.

Для квантовой точки кубического типа (т.е. при выполнении условия $L_x = L_y = L_z = L$) выражение (1.77) трансформируется к более симметричному виду:

$$W_{(0D)}(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (1.78)$$

Из выражений (1.77) и (1.78) следует, что энергия электронов, находящихся в пределах квантовой точки, может принимать только ряд дискретных значений, разделенных друг от друга конечными интервалами энергии. Этот феномен дискретизации значений энергии электронов, находящихся в квантовой точке наглядно представлен на рис. 1.16 с помощью двумерного отображения энергетического состояния электронов.

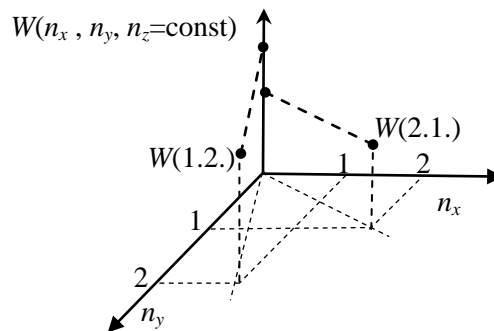


Рис. 1.16. Схематическое отображение фактора дискретизации энергии электронов в квантовой точке ($\{W(1,2): n_x = 1; n_y = 2\}$; $\{W(2,1): n_x = 2; n_y = 1\}$)

Выражение (1.78) свидетельствует о возможности появления в квантовых точках кубического типа вырожденных энергетических состояний, обусловленных вариациями значений совокупности квантовых чисел $\{n_x, n_y, n_z\}$ при одновременном выполнении условия $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \text{const}$.

Энергетические спектры (1.77) и (1.78) можно представить как функциональные зависимости от волновых векторов. Для этого воспользуемся представлением (согласно рис. 1.3) $L_i/n_i = \lambda_i/2$ и определением волнового вектора $k_i = (2 \cdot \pi)/\lambda_i$, где параметр i относится к геометрическим координатам $\{x, y, z\}$. После очевидных преобразований получим выражение $L_i/n_i = \pi/k_i$, на основании которого преобразуем выражение (1.77) к виду

$$W_{(0D)}(k_x, k_y, k_z) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot \pi^2} \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.79)$$

где волновые векторы $\{k_x, k_y, k_z\}$ могут принимать строго фиксированные численные значения, соответствующие квантовым числам $\{n_x, n_y, n_z\}$.

Интересно отметить, что выражение (1.79) справедливо в одинаковой мере к любым квантовым точкам, независимо от их геометрической конфигурации (в отличие от представления, основанного на квантовых числах).

Важным аспектом при проведении физико-химического анализа наноразмерных систем является функция плотности квантовых состояний электронов. По определению, плотность квантовых состояний $g(W)$ – отношение количества квантовых состояний ΔG , приходящихся на малый интервал энергий ΔW (в пределе бесконечно малый), к величине этого энергетического интервала ΔW : $g(W) = \Delta G / \Delta W$. В частности, функция $g(W)$ необходима для определения концентрации носителей зарядов в связи с рассмотрением вопроса электропроводности в наноразмерных системах.

Применительно к наноразмерным системам типа (0D) функция плотности квантовых состояний электронов имеет вид [5]

$$g_{(0D)}(W) = \frac{2}{L_x \cdot L_y \cdot L_z} \cdot \sum_{i,j,k} \delta(W - W_{i,j,k}), \quad (1.80)$$

где индексы $i, j, k = 1, 2, \dots, \infty$.

На рис. 1.17 представлено графическое отображение функции плотности квантовых состояний $g_{(0D)}(W)$, характерной для наноразмерной структуры типа квантовой точки.

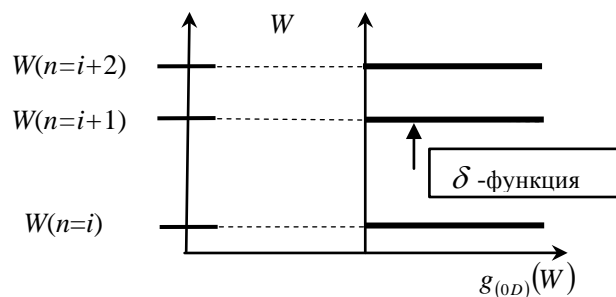


Рис. 1.17. Функция плотности квантовых состояний для случая квантовой точки (правый фрагмент) и соответствующий ей спектр разрешенных квантовых состояний (левый фрагмент)

Присутствие в выражении (1.80) δ -функции весьма характерно и свидетельствует о том, что энергетический спектр электронов представляет собой совокупность индивидуальных дискретных квантовых состояний. Именно благодаря подобному сходству энергетических спектров индивидуальных атомов и квантовых точек, эти наноразмерные структуры в ряде практических случаев называются *искусственными атомами*.

д) *Спектр энергетических состояний в наноразмерных структурах типа (1D)*

В наноразмерных структурах типа (1D) движение электронов ограничено по двум координатным направлениям. Эти ограничения соответствуют случаю нахождения микрочастицы в трехмерном потенциальном ящике, который имеет весьма малую протяженность по двум координатным осям $\{y, z\}$. В современной научно-технической практике диапазон этой протяженности так же, как было уже изложено выше, сопоставим с интервалом значений характеристических длин порядка 1 – 100 нм. Именно исходя из этого обстоятельства такие структуры получили название *квантовой проволоки (нити, шнура)*. Квантовые проволоки, как и квантовые точки, могут содержать в своем составе достаточно большое (в пределе бесконечное, при бесконечной протяженности проволоки) количество атомов.

На рис. 1.18 представлено модельное отображение квантовой проволоки с позиции общих представлений о трехмерном, протяженном в направлении одной из координат потенциальном ящике. Беря за основу анализа одномерную модель потенциального ящика для координатных направлений $\{y, z\}$ (см. выражение (1.55)) и модельное представление о движении свободного электрона по координатному направлению $\{x\}$ (см. выражение (1.15)), для функции $W_{(1D)}$ применительно к квантовой проволоке имеем (сравнить приводимое выражение(1.77):

$$W_{(1D)}(n_y, n_z, k_x) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e} \cdot \left(\frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) + \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot \pi^2} \cdot k_x^2, \quad (1.81)$$

где m_e – эффективная масса электрона при его поступательной форме движения по координатному направлению $\{x\}$; L_y, L_z – пространственная протяженность квантовой точки соответственно по координатным направлениям $\{y, z\}$; n_y, n_z – квантовые числа из набора целочисленных величин $\{1, 2, \dots, \infty\}$, характеризующие локальное состояние микрочастицы соответственно по координатным направлениям $\{y, z\}$; k_x – проекция волнового вектора поступательной формы движения электрона по направлению оси $\{x\}$.

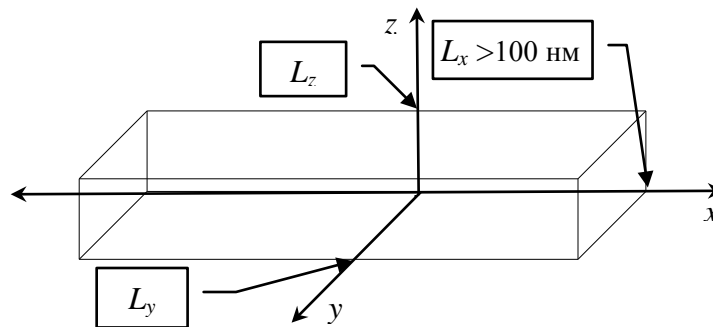


Рис. 1.18. Пространственное отображение квантовой проволоки с характеристическими размерными параметрами $\{L_x, L_y, L_z\}$ (L_x – микро-, мезо- или макроскопическая величина)

Из выражений (1.81) следует, что координатные составляющие допустимых значений энергии электронов, находящихся в пределах квантовой проволоки, могут принимать при движении электронов:

- по осям $\{y, z\}$ – только ряд дискретных значений, разделенных друг от друга конечными интервалами энергии (как это уже имело место для случая квантовой точки);
- по оси $\{x\}$ – практически непрерывный ряд значений (ввиду значительной протяженности наноразмерной структуры по данному направлению) в интервале величин $\{(2 \cdot \pi)/L_x - (2 \cdot \pi)/a\}$, где a – параметр кристаллической структуры в направлении оси $\{x\}$.

На рис. 1.19 представлено схематическое отображение энергетических спектров электронов в квантовой проволоке.

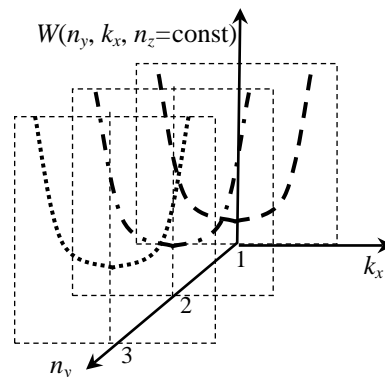


Рис.1.19. Схематическое отображение фрагмента энергетической диаграммы состояния электронов в квантовой проволоке

Для пояснения энергетической диаграммы рис. 1.19 уместно привести следующие комментарии:

- все энергетические зависимости параболического типа приведены для случая фиксированного значения квантового числа n_z ;
- пунктирные прямоугольники характеризуют плоскости, в которых сохраняется постоянное значение координатного квантового числа n_y , пробегающего от плоскости к плоскости ряд значений в диапазоне чисел (1, 2, 3);
- смещение индивидуальных параболических зависимостей вверх, наблюдаемое с ростом координатного квантового числа n_y , обусловлено постоянным вкладом (при одновременных вариациях значения волнового вектора k_x в диапазоне значений $\{(2 \cdot \pi)/L_x - (2 \cdot \pi)/a\}$ в энергию микрочастицы от фрагмента $[(\hbar^2/8m_e) \cdot (n_y^2/L_y^2)]$ формулы (1.81);
- различие в начертании приведенных параболических зависимостей использовано с целью облегчения зрительного восприятия изображения.

Из сравнительного анализа рис. 1.16 и 1.19 следует то обстоятельство, что в наноразмерных структурах типа квантовой проволоки имеет место частичный отход от эффекта полной дискретизации энергии электронов, как это имело место в наноразмерных структурах типа квантовой точки.

Энергетический спектр (1.81) можно представить как функциональную зависимость от волновых векторов $\{k_x, k_y, k_z\}$ (процедура подобного перехода аргументов представлена выше, при рассмотрении структур типа (0D)):

$$W_{(0D)}(k_x, k_y, k_z) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot \pi^2} \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.82)$$

где волновые векторы $\{k_y, k_z\}$ могут принимать строго фиксированные численные значения, соответствующие квантовым числам $\{n_y, n_z\}$, а волновой вектор $\{k_x\}$ – непрерывный ряд значений в диапазоне величин $\{(2 \cdot \pi)/L_x - (2 \cdot \pi)/a\}$, где a – параметр кристаллической решетки по координатному направлению $\{x\}$.

Применительно к наноразмерным системам типа (1D) функция плотности квантовых состояний электронов $g(W)$ в направлениях, связанных с проявлением квантовых ограничений, имеет вид [5]

$$g_{(1D)}(W) = \frac{2 \cdot (2 \cdot m_e)^{1/2}}{h \cdot L_y \cdot L_z} \cdot \sum_{i,j} (W - W_{i,j})^{-1/2}, \quad (1.83)$$

где индексы i, j – пробегает ряд дискретных значений в диапазоне величин $\{1, 2, \dots, \infty\}$.

На рис. 1.20 представлено схематическое отображение фрагмента функции плотности квантовых состояний электронов $g(W)$, находящихся в геометрических пределах наноразмерных структур типа (1D).

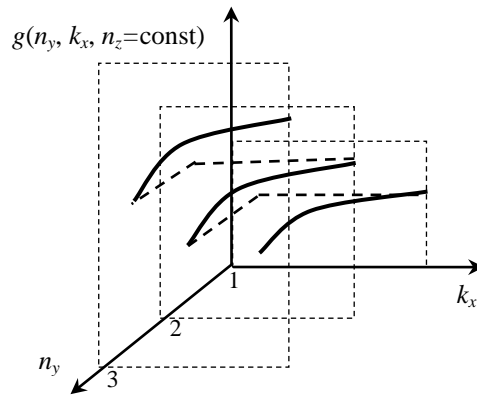


Рис. 1.20. Схематическое отображение фрагмента функции плотности квантовых состояний электронов $G(W)$ для структуры типа (1D)

Для пояснения энергетической диаграммы рис. 1.20 уместно привести следующие комментарии:

- все три фрагмента функции $g(W)$ (сплошные толстые линии) приведены для случая фиксированного значения квантового числа n_z ;
- пунктирные прямоугольники характеризуют плоскости, в которых сохраняется постоянное значение координатного квантового числа n_y , пробегающего от плоскости к плоскости ряд значений в диапазоне чисел (1, 2, 3);
- смещение индивидуальных параболических зависимостей вверх, наблюдаемое с ростом координатного квантового числа n_y , обусловлено постоянным вкладом (при одновременных вариациях значения волнового вектора k_x в диапазоне значений $\{(2 \cdot \pi)/L_x - (2 \cdot \pi)/a\}$) в энергию микрочастицы от фрагмента $[(h^2/8m_e) \cdot (n_y^2/L_y^2)]$ формулы (1.81);

- пунктирными линиями условно отображен фактор перехода от совокупности энергетических состояний, характеризуемых квантовым числом, от $n_y = j$ до состояний $n_y = j+1$.

Приведенное на рис. 1.20 отображение функции $g(W)$ соответствует случаю отсутствия вырождения энергетических состояний, поскольку при построении графика принято, что квантовое число $n_z = \text{const}$. В противном случае может иметь место пересечение индивидуальных фрагментов зависимости функции $g(W)$, что приведет к появлению фактора вырождения энергетических состояний электронов.

Совокупность электронов в квантовых проволоках принято называть *одномерным электронным газом*.

е) Спектр энергетических состояний в наноразмерных структурах типа (2D)

В наноразмерных структурах типа (2D) движение электронов ограничено по одному координатному направлению. Это ограничение соответствует случаю нахождения микрочастицы в трехмерном потенциальном ящике, который имеет весьма малую протяженность по двум координатным осям $\{y, z\}$ (рис 1.21). В современной научно-технической практике диапазон этой протяженности так же, как и было уже отмечено выше, сопоставим с интервалом значений характеристических длин порядка 1 – 100 нм. Именно исходя из этого обстоятельства такие структуры получили название *квантовой пленки*. Квантовые пленки, как и квантовые точки и проволоки, могут содержать в своем составе достаточно большое (в пределе бесконечное, при бесконечной протяженности пленки по координатным направлениям $\{x, y\}$) количество атомов.

Беря за основу одномерную модель потенциального ящика для координатного направления $\{z\}$ (см. выражение (1.55)) и модельное представление о движении свободного электрона по координатным направлениям $\{x, y\}$ (см. выражение (1.15)), для функции $W_{(2D)}$ применительно к квантовой пленке имеем (сравнить приводимое ниже выражение(1.81)

$$W_{(2D)}(k_x, k_y, n_z) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e} \cdot \left(\frac{n_z^2}{L_z^2} \right) + \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot \pi^2} \cdot k_x^2 + \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot \pi^2} \cdot k_y^2, \quad (1.84)$$

где m_e – эффективная масса электрона при его поступательной форме движения по координатному направлению $\{x\}$; L_z – пространственная протяженность квантовой пленки по координатному направлению с ограничением на фактор движения электрона $\{z\}$; n_z – квантовое число из набора целочисленных величин $\{1, 2, \dots, \infty\}$, характеризующих локальное энергетическое состояние электрона, по координатному направлению $\{z\}$; k_x, k_y – проекции волнового вектора поступательной формы движения электрона по координатным направлениям $\{x, y\}$.

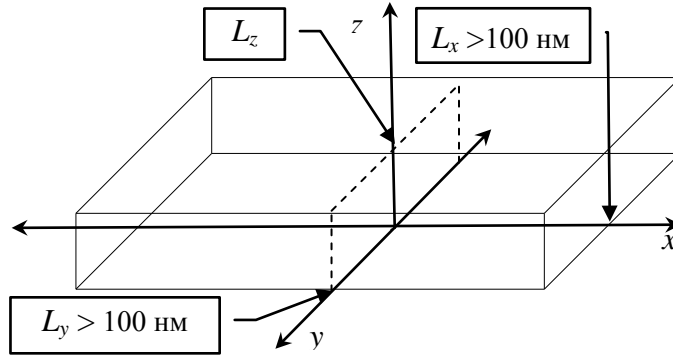


Рис. 1.21. Пространственное отображение квантовой пленки с характеристическими размерными параметрами $\{L_x, L_y, L_z\}$ (L_x, L_y, L_z – микро-, мезо- или макроскопическая величина)

Энергетический спектр (1.84) можно представить как функциональную зависимость от волновых векторов $\{k_x, k_y, k_z\}$ (процедура подобного перехода аргументов представлена выше, при рассмотрении структур типа (0D) и (1D)):

$$W_{(2D)}(k_x, k_y, k_z) = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot \pi^2} \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.85)$$

где волновой вектор $\{k_z\}$ может принимать строго фиксированные численные значения, соответствующие квантовому числу $\{n_z\}$, а волновые вектора $\{k_x, k_y\}$ – соответственно непрерывный ряд значений в диапазоне величин

$$\{(2 \cdot \pi)/L_x - (2 \cdot \pi)/a\} \text{ и } \{(2 \cdot \pi)/L_y - (2 \cdot \pi)/b\},$$

где a и b – параметры кристаллической решетки соответственно по координатным направлениям $\{x, y\}$.

На рис. 1.22 представлено схематическое отображение характерных моментов (фрагментов) энергетических спектров электронов, находящихся в пределах квантовой пленки.

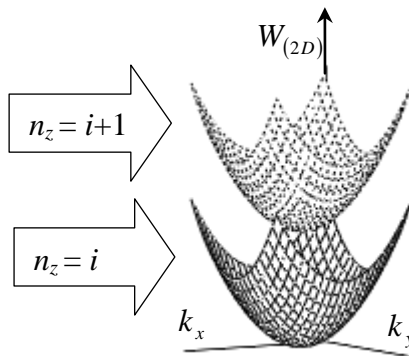


Рис.1.22. Схематическое отображение фрагмента энергетической диаграммы состояния электронов в квантовой пленке

Применительно к наноразмерным системам типа (2D) функция плотности квантовых состояний электронов $g(W)$ в направлениях, связанных с проявлением квантовых ограничений, имеет вид [5]

$$g_{(2D)}(W) = \frac{4 \cdot \pi \cdot m_e}{L_z} \cdot \sum_{k_z} \Theta(W - W_{k_z}), \quad (1.86)$$

где k_z – индекс, пробегающий ряд дискретных значений при изменении квантового числа n_z в диапазоне величин $\{1, 2, \dots, \infty\}$; $\Theta(W - W_{k_z})$ – условное обозначение ступенчато (k_z) – непрерывной (k_x, k_y) функции специальной формы.

На рис. 1.23 представлено схематическое отображение характерных фрагментов функции плотности квантовых состояний электронов $g(W)$, находящихся в геометрических пределах наноразмерных структур типа (2D).

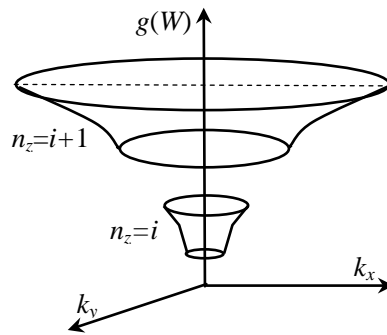


Рис. 1.23. Схематическое отображение фрагмента функции плотности квантовых состояний электронов $g(W)$ для структуры типа (2D)

Из рис. 1.23 видно, что в кристаллических структурах типа (2D) может иметь место появление запрещенной зоны на энергетической диаграмме состояния электронов, если размеры квантовой пленки и по пространственным направлениям $\{x, y\}$ будут в определенной мере ограничены (в этом случае следует обратить внимание на фрагменты $(2 \cdot \pi)/L_x$ и $(2 \cdot \pi)/L_y$).

Ввиду отмеченного выше, своеобразия энергетических диаграмм совокупность электронов в квантовых пленках в ряде случаев принято в научно-технической практике называть *двумерным электронным газом*.

Квантовые пленки уже в настоящее время нашли достаточно широкое практическое применение при создании широкого круга гетеропереходов на основе полупроводниковых и диэлектрических материалов, используемых в элементах конструкций микроэлектронных устройств.

Глава 2. СПЕЦИФИКА МЕХАНИЗМОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

2.1. Элементы теории электропроводности конденсированных сред

2.1.1. Проблематика и актуальность процессов транспорта носителей заряда в наноразмерных структурах

Значительный фронт современных научных и прикладных работ в направлении наноинженерии прямым или косвенным образом связаны с проблематикой создания перспективных высокопроизводительных (быстродействие, объем памяти, массово-габаритные параметры) вычислительных систем, обладающих чрезвычайно высокой степенью интеграции элементов (*степень интеграции элементов* – количество элементов конструкций, содержащихся в единице объема изделия). В табл. 2.1 представлены сведения о реальной и прогнозируемой динамике повышения степени интеграции элементов в вычислительных системах.

Т а б л и ц а 2.1. Динамика уменьшения размеров элементов конструкций электронных устройств в вычислительных системах

Год выпуска изделия	Степень интеграции Элемент / мм ³	Минимальный размер элемента, мкм	Допуск на изготовление, мкм
1960	10 ⁻² (биполярный транзистор)	3·10 ³	> 10
1970	0.1 – 1.0 (микросборка элементов)	10 ³	5 – 10
1980	10 ³ (ИС на биполярных структурах)	10 ²	2 – 5
1990	10 ⁶ (ИС на МОП структурах)	2 – 10	0.2 – 1.0
2000	10 ⁹ (СБИС – 1 ^е поколение)	0.5 – 1.0	0.05
2010	10 ¹² (СБИС – 2 ^е поколение)	10 ⁻¹	10 ⁻²
2020-2030	10 ¹⁴ – 10 ¹⁵ (прогноз)	10 ⁻²	10 ⁻³
Технология атомной сборки	10 ¹⁹ – 10 ²⁰ (без учета элементов коммутации)	10 ⁻⁴	Теоретический предел атомных технологий

Примечание: ИС – «интегральная схема»; СБИС – «сверхбольшая интегральная схема»; МОП – структура типа «металл – окисел – полупроводник».

Согласно данным табл. 2.1, в этом научно-техническом направлении можно говорить о вхождении в область наноразмерных масштабов уже с 2000 г., по крайней мере в части обеспечения необходимых допусков на изготовление индивидуальных элементов конструкций вычислительных систем.

Столь малые размеры элементов конструкций современных и перспективных устройств электронной техники накладывают определенную специфику на процессы электропроводности в конструкционных материалах, применяемых при создании этих устройств. В частности, представляется весьма проблематичным использование в физико-технической практике традиционных и широко используемых теоретических моделей и подходов, основанных на макроскопических представлениях физики сплошных сред (термодинамика, статистическая и молекулярная физика).

Такое пристальное внимание к вопросам электропроводности указанных конструкционных материалов обусловлено их ключевой ролью при рассмотрении проблематики обеспечения функционального назначения изделий электронной техники. В общем случае при анализе электрической проводимости σ конструкционных материалов (в рамках макроскопического подхода) принято оперировать уравнением электропроводности вида

$$\sigma = \sum_i q_i \cdot n_i \cdot \mu_i, \quad (2.1)$$

где i – индекс, характеризующий вклад в общую электропроводимость материала носителей зарядов $i^{\text{го}}$ типа; n_i – концентрация носителей зарядов $i^{\text{го}}$ типа; μ_i – подвижность носителей заряда $i^{\text{го}}$ типа; q_i – модуль значения электрического заряда для индивидуального носителя заряда $i^{\text{го}}$ типа.

В случае макроскопических систем установление типа и величины q_i индивидуальных носителей заряда, участвующих в процессе формирования электрического тока, не вызывает особых затруднений, поскольку они, как правило, известны для большинства используемых на практике конструкционных материалов. Для случая наноразмерных (хотя бы по одной пространственной координате) элементов конструкции, выполненных на основе материалов с электронным типом проводимости, этот аспект может существенно усложниться. Это связано со спецификой рассмотренных выше зонных энергетических диаграмм наноструктур, обусловленной наличием размерных ограничений на процессы движения микрочастиц и порой недостаточным (для реализации процесса векторизации энергии поступательного движения с помощью электрического поля) количеством свободных энергетических состояний. Вопрос о том, какие именно электроны из их общего количества в материале в этом случае можно отнести к носителям заряда, будет рассмотрен ниже. Этот важный для практики создания электронных устройств аспект самым непосредственным образом связан и с вопросами установления концентрации носителей заряда n_i .

Более прозрачной представляется взаимосвязь подвижности носителей заряда μ_i с пространственными ограничениями наноразмерных структур. Очевидным следствием ограничительных факторов является появление ярко выраженной *анизотропии*, т.е. зависимости свойств конструкционных материалов от рассматриваемого пространственного направления. Следует отметить, что фактор анизотропии наблюдается и у макроскопических материалов, однако в этих средах он проявляется, как правило, в весьма незначительных масштабах (за исключением узкого круга конструкционных материалов специального назначения: сегнетоэлектрики; ферромагнетики; композиты).

В разд. 1 показано определяющее влияние вида потенциальной функции электронов (т.е. конфигурация барьеров на пути следования микрочастиц) в атомных и регулярных (кристаллических) структурах на характер движения последних, которая (функция) формирует специфику процессов квантования элементарных энергетических состояний электронов. В рассматриваемых наноразмерных структурах потенциальная функция электронов может кардинально отличаться для различных пространственных направлений (в особенности для структур типа (1D) и (2D)), что, собственно, и составляет их главное отличие от макроскопических кристаллических структур. С учетом вышеизложенного фактора резкой анизотропии потенциальной функции электронов в наноразмерных структурах представляет интерес рассмотрение двух специфических вариантов процесса переноса носителей заряда:

- вдоль совокупности дискретных атомных потенциальных барьеров, т.е. в направлении отсутствия ограничений размерного характера;
- поперек совокупности дискретных атомных потенциальных барьеров, т.е. в направлении наличия ограничений размерного характера.

Первый, более простой вариант соответствует случаю практически свободного движения электрона (при большой длине цепочки атомов образующих наноразмерную структуру в направлении движения), при реализации которого волновой вектор k пробегает непрерывный ряд значений в диапазоне величин $\{(2 \cdot \pi)/L - (2 \cdot \pi)/a\}$ (см. разд. 1.2.2, пункты д; е), где L – длина атомной цепочки. В этом варианте движение индивидуального электрона происходит путем

последовательного чередования этапов свободного пролета на *длине свободного пробега* по пути следования электрона (обратить внимание на факт перекрытия волновых функций электрона согласно рис. 1.9) с этапами ее неупругого взаимодействия с атомами среды (электропроводимость по механизму «*пролетного типа*»). Этот тип движения аналогичен поведению индивидуального электрона в совершенных макроскопических кристаллических структурах, в которых процессы рассеяния векторизованного движения электронов происходят на дефектах точечного (вакансии, атомы внедрения и замещения) или линейного (краевые и винтовые дислокации) типа и на *фононах* (совокупности взаимосвязанных элементарных колебательных движений атомов, образующих кристаллическую структуру).

Второй, более сложный для анализа вариант соответствует случаю жесткой локализации местонахождения электрона в ограниченной области пространства, которому можно поставить в соответствие дискретный набор волновых векторов k , т.е. дискретный спектр энергетических состояний (см. разд. 1.2.2, пункт г). В этом случае движение индивидуального электрона происходит в виде последовательности дискретных «прыжков» («переходов»), которые могут быть реализованы путем:

- преодоления максимальной высоты потенциального барьера при реализации элементарного акта движения, для чего индивидуальным электронам необходимо обладать энергией большей, чем высота барьера (электропроводимость по кативационному механизму «*прыжкового типа*»);
- своеобразного «просачивания» индивидуального электрона сквозь потенциальный барьер, исключая необходимость преодоления этого барьера по механизму прыжкового (см. предыдущий пункт) типа (электропроводимость по механизму «*туннельного типа*»).

Приведенная классификация в определенной мере, в общих чертах, прослеживает основополагающие принципы и методы анализа процессов электронного и ионного транспорта в наноразмерных кристаллических структурах.

2.1.2. Элементы теории подвижности носителей заряда

а) Подвижность носителей заряда в атомно-молекулярных системах

В отсутствие внешнего электрического поля микрочастицы, находящиеся в атомно-молекулярных системах, совершают хаотическое (броуновское) движение, обусловленное наличием у них тепловой энергии $(k \cdot T)/2$ на каждую степень свободы движению [1]. Наложение на систему внешнего электрического поля приводит к тому, что микрочастицы, обладающие электрическим зарядом, приобретают на пути своего движения дополнительную энергетическую составляющую, имеющую векторизованный характер. Именно благодаря этому фактору векторизации движения микрочастиц имеет место появление электрического тока в макроскопических атомно-молекулярных системах.

В качестве количественной меры векторизации движения микрочастицы в электрическом поле общепринято использовать специальный параметр μ – *подвижность носителя заряда*, который определяется в виде

$$\mu = \frac{dv}{dE}, \quad (2.2)$$

где dv – изменение *средней скорости* движения носителя заряда при изменении напряженности электрического поля на величину dE .

По своей физической сути численное значение подвижности носителя заряда характеризует среднюю скорость векторизованного движения микрочастицы в электрическом поле со значением напряженности, равным 1 В/м. В общем случае параметр μ является нетривиальной функцией от напряженности электрического поля. Однако для подавляющего числа практических случаев, в

которых, как правило, выполняется условие $E < 10^3$ В/м, его принято считать постоянной величиной.

Практическая целесообразность введения параметра μ состоит в том, что с его помощью можно определить среднюю скорость направленного движения носителя заряда при любом (с учетом оговоренного выше условия) значении напряженности электрического поля E с помощью выражения

$$v(E) = \mu \cdot E. \quad (2.3)$$

Интересно оценить масштабный фактор процесса векторизации движения микрочастицы в электрическом поле. Для этого проведем сравнительный анализ броуновской и векторизованной составляющих скоростей движения микрочастицы. Для упрощения анализа примем, что векторизованная составляющая скорости движения микрочастицы соответствует механизму электропроводности *пролетного типа* при длине свободного пробега микрочастицы $\lambda = 10^{-8}$ м (типичное, по порядку величины, значение для монокристаллических структур металлического типа). Оценка величины векторизованной v_E и броуновской (тепловой) v_T составляющих скорости движения микрочастицы производится на основе очевидных энергетических соотношений (использован подход классической физики):

$$W_k(E) = \frac{m \cdot v_E^2}{2} = q \cdot \lambda \cdot E; \quad (2.4)$$

$$W_k(T) = \frac{m \cdot v_T^2}{2} = \frac{3 \cdot k \cdot T}{2}, \quad (2.5)$$

где $W_k(E)$, $W_k(T)$ – значения кинетической энергии движения микрочастицы соответственно для случая векторизованной и броуновской форм ее движения; q – величина электрического заряда носителя заряда; k – постоянная Больцмана. В табл. 2.2 приведены данные сравнительного анализа параметров векторизованной и броуновской (тепловой) форм движения микрочастицы.

Т а б л и ц а 2.2. Зависимость отношения скоростей $(v_E)/(v_T)$ и кинетической энергии $w_k(E)$ от напряженности электрического поля E ($T = 300$ К ($3kT/2 = 0.039$ эВ); $\lambda = 10^{-8}$ м)

Параметр	Напряженность электрического поля E , В/м					
	10	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6
$W_k(E)$, эВ	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
$(v_E)/(v_T)$	$\approx 10^{-6}$	$\approx 10^{-5}$	$\approx 10^{-4}$	$\approx 10^{-3}$	$\approx 10^{-2}$	$\approx 10^{-1}$

Из данных табл. 2.2 следует, что для большинства практических случаев ($E < 10^5$ В/м; $T = 300$ К) векторизованная составляющая скорости движения микрочастиц не превышает одного процента от значения броуновской составляющей скорости. В этой связи зачастую принято считать, что процесс токопрохождения не нарушает равновесную функцию распределения микрочастиц по энергиям (скоростям), а приводит лишь к появлению весьма незначительного дрейфа всего ансамбля микрочастиц в пространстве в направлении воздействия на носители заряда внешнего электрического поля.

В общем случае подвижность носителей заряда в материалах является достаточно сложной функцией от температуры и концентрации дефектов (точечного, линейного и поверхностного типов), имеющих в кристаллической структуре. Характерный вид этой функции для случая материалов металлического и полупроводникового типа представлен на рис. 2.1.

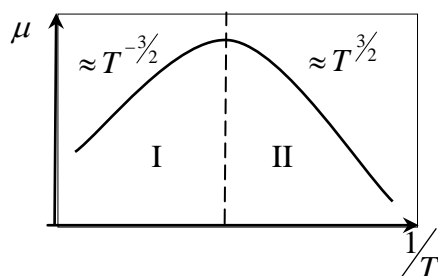


Рис.2.1. Температурная зависимость подвижности носителей заряда для случая материалов металлического и полупроводникового типа

В температурной зависимости подвижности носителей заряда $\mu(T)$ достаточно четко просматриваются два характерных участка:

- I – область *высоких температур*, в которой определяющую роль в процессах рассеяния векторизованного типа движения электронов проводимости играют колебательные процессы атомов кристаллической решетки, интенсивность которых (фононов) возрастает с повышением температуры;
- II – область *низких температур*, в которой определяющую роль в процессах рассеяния векторизованного типа движения электронов играют процессы неупругого взаимодействия электронов проводимости с различными дефектами (точечного и линейного типа) и ионизированными атомами (как правило, примесной природы – обладающих небольшим значением энергии (потенциала) ионизации атомов) кристаллической структуры.

Следует отметить, что из всех типов точечных дефектов (вакансии, атомы внедрения и замещения), которые имеются в кристаллических структурах, наибольшее рассеивающее воздействие оказывают ионизированные примеси. Столь сильное влияние на процессы рассеивания со стороны ионизированных примесей обусловлено тем обстоятельством, что активная (с точки зрения возможности реализации неблагоприятного воздействия на векторизованное движение электрона, принимающего участие в процессе образования электрического тока проводимости) область электрического поля точечного заряда имеет значительную пространственную протяженность (*радиус экранирования* электрического поля – более 10 ангстрем). Отсюда следует, что электрическое возмущение параметров состояния среды, обусловленное присутствием всего лишь одного зарядового центра атомного масштаба, может быть распространено на элемент объема кристалла, содержащего более 10^3 атомов, образующих рассматриваемую кристаллическую структуру.

В случае макроскопических сред (объектов) негативное проявление рассмотренного выше момента в определенной мере нивелируется (с позиции критериев обеспечения функционального назначения материала или устройства) наличием в системе весьма значительного количества «нужных» атомов. В случае же наноразмерных объектов столь значительная величина радиуса экранирования может привести к губительным последствиям уже при наличии единичных зарядовых центров (ионов) примесного характера. Последнее обстоятельство налагает весьма строгие требования к технологическим аспектам производства наноразмерных устройств электронной техники.

б) Подвижность носителей заряда при механизме движения пролетного типа

Как уже отмечалось выше, пролетная модель подвижности носителей заряда может быть применима для проводящих сред, для которых уместно ввести в рассмотрение понятие длины свободного пробега носителей заряда λ . Типичными представителями таких сред являются:

- газовые среды, в которых в качестве основных носителей заряда выступают электроны и ионы различного зарядового состояния;

- совершенные (с точки зрения фактора регулярности атомной потенциальной диаграммы) монокристаллические структуры металлического и полупроводникового типа, в которых в качестве основных носителей заряда выступают электроны, находящиеся в зоне проводимости и «дырки» – в валентной зоне (см. рис. 1.10).

В свете рассматриваемой проблематики электропроводности кристаллических наноразмерных структур наибольший интерес представляет второй случай. В этих конденсированных средах длина свободного пробега носителей заряда может достигать величин порядка 100 – 300 ангстрем. Из этого следует тот факт, что носители заряда этих сред могут практически беспрепятственно преодолевать указанное выше значительное расстояние между очередными этапами рассеяния векторизованного движения носителя заряда на дефектах кристаллической структуры и фононах (т.е. колебательных движениях отдельных атомов, образующих кристаллическую структуру).

Проведем анализ характерных моментов модели подвижности носителей заряда, перемещающихся в проводящих средах по механизму (модели) пролетного типа на основе общих принципов и подходов, принятых в классической физике.

В целях упрощения анализа будем считать, что напряженность электрического поля E достаточно мала с точки зрения выполнения условия $v_T \gg v_E$ (см. табл. 2.2), где v_T и v_E – соответственно скорости движения носителя заряда хаотического (теплого) и векторизованного (дрейфового, обусловленного наличием внешнего электрического поля) типа. Считается, что носитель заряда (с величиной электрического заряда, равной q) совершает хаотическое движение в проводящей среде со скоростью v_T , на которое накладывается векторизованная составляющая движения со средней скоростью v_E (рис. 2.2.).

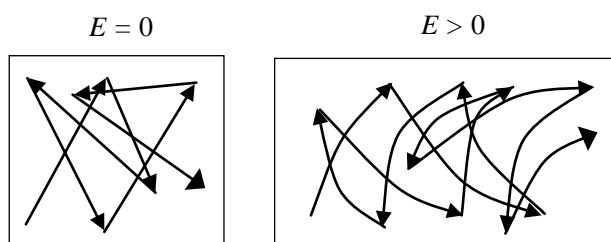


Рис 2.2. Схематическое отображение броуновского ($E = 0$) и векторно-броуновского ($E > 0$) движения носителя заряда

В общем случае векторизованная составляющая движения v_E может быть определена в виде

$$v_E = a / (2 \cdot \tau), \quad (2.6)$$

где $a = (E \cdot q) / m$ – ускорение, испытываемое носителем заряда при значении напряженности электрического поля, равном E ; m – эффективная масса носителя заряда; τ – средняя продолжительность движения носителя заряда между очередными соударениями (рассеянием) с атомами среды.

Значение средней продолжительности движения носителя заряда τ (между соударениями) можно определить исходя из выражения

$$\tau = \frac{\lambda}{|v_T + v_E|} \approx \frac{\lambda}{v_T}, \quad (2.7)$$

при выводе которого было использовано сформулированное выше допущение о малости векторизованной скорости движения носителя заряда относительно хаотической составляющей движения.

Из выражений (2.6) и (2.7) нетрудно определить, что векторизованная составляющая движения носителя заряда v_E определяется выражением

$$v_E = \left(\frac{\lambda \cdot q}{2 \cdot m \cdot v_T} \right) \cdot E. \quad (2.8)$$

С учетом выражения (2.3), для подвижности носителей заряда при механизме движения пролетного типа имеем

$$\mu_{\text{прол}} = \frac{\lambda \cdot q}{2 \cdot m \cdot v_T}. \quad (2.9)$$

Выражение (2.9) с учетом того обстоятельства, что скорость хаотического движения $v_T = \sqrt{(3 \cdot k \cdot T)/m}$, можно представить в более удобном для расчетной практики виде:

$$\mu_{\text{прол}} = \frac{\lambda \cdot q}{2 \cdot \sqrt{3 \cdot k \cdot m \cdot T}}. \quad (2.10)$$

Определим область применимости выражения (2.10) исходя из принятого ранее допущения: $v_T \gg v_E$. Для этого определим область значений критической напряженности электрического поля $E_{кр}$, при которых это допущение выполняется. Принятое допущение эквивалентно выполнению условия $W_T \gg W_E$, где W_T и W_E – кинетическая энергия соответственно для хаотического и векторизованного типа движения носителей заряда. Полагая $W_T = (3 \cdot k \cdot T)/2$ и $W_E = q \cdot \lambda \cdot E$, искомую напряженность электрического поля $E_{кр}$ определяем согласно выражению

$$E_{кр} = \frac{3 \cdot k \cdot T}{2 \cdot \lambda \cdot q}. \quad (2.11)$$

В табл. 2.3 представлена зависимость критической напряженности электрического поля $E_{кр}$ (по порядку величины) от длины свободного пробега носителей заряда λ , основанная на выражении (2.11).

Т а б л и ц а 2.3. *Зависимость критической напряженности электрического поля $E_{кр}$ от длины свободного пробега λ носителя заряда*

λ , м	10^{-10} (1 ангстрем)	10^{-9} (10 ангстрем)	10^{-8} (10^2 ангстрем)	10^{-7} (10^3 ангстрем)
$E_{кр}$, В / м	10^8	10^7	10^6	10^5

Согласно представленным данным, пролетная модель подвижности носителей заряда может быть использована в практических приложениях для случая макроскопических монокристаллических структур с электронным типом проводимости, при значениях напряженностей внешнего электрического поля не более 10^5 Вм⁻¹.

Использование пролетной модели подвижности для случая наноразмерных кристаллических структур в большинстве случаев представляется проблематичным. Причиной этого является не столько недостаточность величины λ относительно размеров структуры в направлении пространственных ограничений, сколько сильное негативное влияние поверхности раздела сред (ввиду появления нарушений в периодичности (регулярности) атомной потенциальной диаграммы) на характеристики материала, ответственные за процессы рассеяния векторизованной составляющей движения носителей заряда. По той же причине с большой осторожностью эту модель можно использовать на практике и при проведении качественного (а уж тем более – количественного) анализа процессов токопрохождения в пространственных направлениях, в которых отсутствуют размерные ограничения кристаллических структур.

в) *Подвижность носителей заряда при механизме движения прыжкового типа*

При механизме движения прыжкового типа, в отличие от рассмотренного выше пролетного типа, элементарный акт перемещения носителя заряда имеет атомарные масштабы. Сам процесс движения носителя заряда можно представить в виде последовательности прыжков (переходов) из одного положения равновесия в другое, пространственное расположение которых совпадает с расположением минимумов на функции потенциальной энергии носителя заряда. Носитель заряда может изменить свое местоположение (совершить прыжок) только лишь в том случае, если его кинетическая энергия в форме колебательного движения превосходит некоторое пороговое значение W_a , получившее название *энергии активации процесса перехода* [2].

Схематическое отображение потенциальной функции кристаллической структуры и диффузионного механизма пространственного перемещения носителя заряда в условиях отсутствия внешнего электрического поля представлено на рис. 2.3.

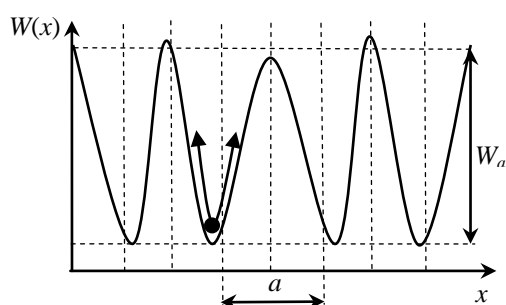


Рис. 2.3. Потенциальная диаграмма регулярной структуры в условиях отсутствия внешнего электрического поля

Для дальнейшего рассмотрения модели энергетической диаграммы, представленной на рис. 2.3, уместно привести следующие комментарии:

- черным кружком, находящимся на дне потенциальной ямы, условно обозначен элементарный носитель заряда, который находится (некоторое время) в положении энергетического равновесия;
- стрелками, исходящими от носителя заряда вправо и влево, условно отображен фактор колебательного движения носителя заряда, инициированного с помощью энергии микрочастицы термического характера (считается, что система в целом находится в состоянии термодинамического равновесия);
- W_a (*энергия активации*) – энергия, необходимая для обеспечения процесса перехода (по механизму термической активации) носителя заряда из одного положения равновесия в другое (соседнее) положение равновесия (равновесные состояния соответствуют минимальным значениям потенциальной энергии на диаграмме);
- a (*параметр решетки*) – расстояние между соседними атомами кристаллической структуры, в которой инициируется векторизованное движение носителя заряда по пространственному направлению, соответствующему геометрической координате $\{x\}$ (рассматривается одномерное приближение);
- частичное отклонение местоположения по оси x минимумов функции потенциальной диаграммы от регулярного расположения (отображены с помощью вертикальных пунктирных линий, отстоящих друг от друга на расстоянии, равном параметру решетки a) обусловлено проявлением влияния тепловых колебательных движений атомов кристаллической решетки;

- частичное расхождение положения максимумов функции потенциальной диаграммы от регулярного расположения (отображены с помощью верхней горизонтальной пунктирной линии) обусловлено вышеизложенным обстоятельством (зависимость максимумов потенциальной энергии атомов от их взаимного расположения представлена на рис. 1.7 и 1.9).

Характерной особенностью представленной на рис. 2.3 потенциальной диаграммы является то обстоятельство, что она *симметрична по отношению к возможности реализации прыжка носителя заряда как вправо, так и влево*, относительно начального местоположения носителя заряда. Из этого следует, что *вероятности* реализации прыжка вправо и влево будут равны, что исключает возможность проявления движения носителя заряда в векторизованной форме. Для определения указанных вероятностей реализации прыжков можно воспользоваться статистикой Максвелла-Больцмана (в этом случае речь идет о носителях заряда, обладающих целочисленными значениями спина (*собственный момент импульса элементарных частиц*)). В этом случае для вероятностей индивидуальных прыжков носителя заряда имеем [3]

$$P_{\text{право}}(E=0) = P_{\text{лево}}(E=0) = \exp\left(-\frac{W_a}{k \cdot T}\right), \quad (2.12)$$

где E – напряженность внешнего электрического поля; $P_{\text{право}}(E=0)$ и $P_{\text{лево}}(E=0)$ – вероятности прыжка носителя заряда соответственно вправо и влево относительно начального расположения.

Таким образом, ввиду равенства вероятностей переходов можно заключить, что при отсутствии внешнего электрического поля носитель заряда будет совершать хаотическое движение (в форме индивидуальных прыжков), что исключает возможность появления электрического тока.

В условиях наличия внешнего электрического поля потенциальная диаграмма кристаллической структуры претерпевает принципиальное изменение (появление наклона), которое отображено на рис. 2.4 (тепловое колебательное движение атомов кристаллической структуры исключено из рассмотрения с целью повышения наглядности при отображении фактора сдвига максимумов потенциальной энергии). Фрагмент $q \cdot U$ (где U — разность потенциалов, приложенная к проводнику от внешнего источника) характеризует степень наклона потенциальной диаграммы под воздействием внешнего электрического поля.

В электрическом поле рассматриваемая регулярная кристаллическая структура теряет симметрию относительно возможности перемещения (прыжка) носителя заряда вправо и влево. В частности, для прыжка по направлению вправо потребуется несколько меньшая энергия (на величину $(-q \cdot a \cdot E/2)$ относительно начального значения энергии активации W_a), чем для прыжка по направлению влево $(+q \cdot a \cdot E/2)$. Следовательно, прыжки по направлению вправо будут происходить несколько чаще, чем прыжки по направлению влево, а значит, появляется возможность реализации векторизованной формы движения носителя заряда в рассматриваемой регулярной структуре.

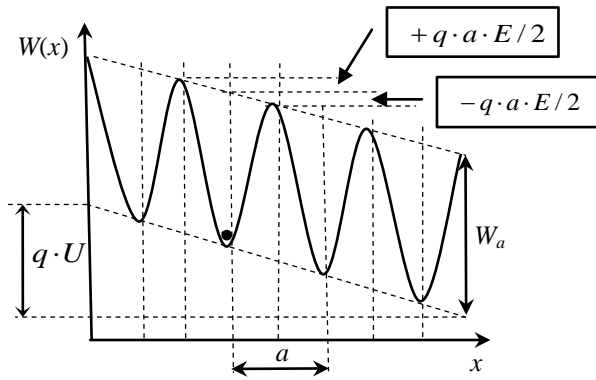


Рис. 2.4. Потенциальная диаграмма регулярной структуры в условиях внешнего электрического поля

Проведем оценку величины разности вероятностей реализации прыжков носителя заряда по направлениям вправо и влево. Для этого обратим внимание на тот факт, что энергетические барьеры, препятствующие прыжку носителя заряда по направлениям вправо и влево, стали разными:

$$P_{\text{право}}(E \neq 0) = \exp\left(-\frac{(W_a - \frac{q \cdot a \cdot E}{2})}{k \cdot T}\right); \quad (2.13a)$$

$$P_{\text{лево}}(E \neq 0) = \exp\left(-\frac{(W_a + \frac{q \cdot a \cdot E}{2})}{k \cdot T}\right); \quad (2.13б)$$

где E – напряженность внешнего электрического поля; q – величина электрического заряда носителя заряда.

Зная вероятности прыжков $P_{\text{право}}(E \neq 0)$ и $P_{\text{лево}}(E \neq 0)$, можно определить частоту переходов носителя заряда по направлениям вправо и влево:

$$\nu_{\text{право}}(E \neq 0) = \nu_0 \cdot \exp\left(-\frac{(W_a - \frac{q \cdot a \cdot E}{2})}{k \cdot T}\right); \quad (2.14a)$$

$$\nu_{\text{лево}}(E \neq 0) = \nu_0 \cdot \exp\left(-\frac{(W_a + \frac{q \cdot a \cdot E}{2})}{k \cdot T}\right); \quad (2.14б)$$

где ν_0 – частота тепловых колебаний носителя заряда в потенциальной яме (параметр ν_0 по порядку величины равен: 10^{15} Гц – электроны; $10^{10} - 10^{12}$ Гц – атомы; $10^6 - 10^8$ Гц – молекулы).

(В выражениях (2.14a) и (2.14б) использовано то представление, что каждый носитель заряда ежесекундно совершает ν_0 попыток преодолеть потенциальный барьер, из которых удачными являются те из них, при которых он обладает необходимой для реализации перехода кинетической энергией).

Из выражений (2.14а) и (2.14б) следует, что $v_{\text{право}}(E \neq 0) > v_{\text{лево}}(E \neq 0)$, и эту разницу частот перехода (прыжков) $\Delta \nu = v_{\text{право}}(E \neq 0) - v_{\text{лево}}(E \neq 0)$ можно определить в виде

$$\Delta \nu = v_0 \cdot \exp\left(-\frac{W_a}{k \cdot T}\right) \cdot \left[\exp\left(\frac{q \cdot a \cdot E}{2 \cdot k \cdot T}\right) - \exp\left(-\frac{q \cdot a \cdot E}{2 \cdot k \cdot T}\right) \right]. \quad (2.15)$$

В целях упрощения анализа выражения (2.15) примем допущение, что выполняется условие $(q \cdot a \cdot E) \ll (2 \cdot k \cdot T)$. В этом случае с помощью представления аналитических функций в виде степенного ряда можно получить выражения:

$$\exp\left(\frac{q \cdot a \cdot E}{2 \cdot k \cdot T}\right) \approx 1 + \frac{q \cdot a \cdot E}{2 \cdot k \cdot T}; \quad (2.16)$$

$$\exp\left(-\frac{q \cdot a \cdot E}{2 \cdot k \cdot T}\right) \approx 1 - \frac{q \cdot a \cdot E}{2 \cdot k \cdot T}.$$

Подставляя выражение (2.16) в выражение (2.15) для определения разности частот перехода носителя заряда, получим

$$\Delta \nu = \left[v_0 \cdot \exp\left(-\frac{W_a}{k \cdot T}\right) \right] \cdot \left(\frac{q \cdot a}{k \cdot T} \right) \cdot E. \quad (2.17)$$

С помощью выражения (2.17) можно определить среднюю скорость движения носителя заряда в электрическом поле:

$$v(E) = a \cdot \Delta \nu = \left[a \cdot v_0 \cdot \exp\left(-\frac{W_a}{k \cdot T}\right) \right] \cdot \left(\frac{q \cdot a}{k \cdot T} \right) \cdot E. \quad (2.18)$$

Согласно определению понятия подвижности носителя заряда (см. выражение(2.3)), среднюю скорость движения носителя заряда в рамках прыжкового механизма перемещения микрочастиц можно определить в виде

$$v(E) = \mu_{\text{прыжк}} \cdot E. \quad (2.19)$$

Сравнивая выражения (2.18) и (2.19), для прыжковой подвижности носителя заряда $\mu_{\text{прыжк}}$ имеем

$$\mu_{\text{прыжк}} = \frac{v_0 \cdot q \cdot a^2}{k \cdot T} \cdot \exp\left(-\frac{W_a}{k \cdot T}\right). \quad (2.20)$$

При выводе выражения (2.20) было использовано допущение, что $(q \cdot a \cdot E) \ll (2 \cdot k \cdot T)$. Исходя из этого обстоятельства, определим область применимости выражения (2.20). Для этого определим область значений критической напряженности электрического поля $E_{\text{кр}}$ согласно выражению

$$E_{\text{кр}} = \frac{2 \cdot k \cdot T}{q \cdot a}. \quad (2.21)$$

В табл. 2.4 представлена зависимость критической напряженности электрического поля $E_{\text{кр}}$ от температуры среды T , в которой происходит движение носителя заряда по прыжковому механизму (использовано выражение (2.21)).

Т а б л и ц а 2.4. *Зависимость критической напряженности электрического поля $E_{\text{кр}}$ от температуры проводящей среды ($q = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл; $a = 10^{-10}$ м)*

T, K	3	30	300	600	900	1200
$E_{кр}, В / м$	$5 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^7$	$5 \cdot 10^8$	10^9	$1.5 \cdot 10^9$	$2 \cdot 10^9$

Согласно представленным данным, прыжковая модель подвижности носителей заряда может быть использована для случая макроскопических монокристаллических структур (с ионным механизмом электропроводности) при значениях напряженностей внешнего электрического поля не более $10^6 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$. Это условие выполняется для большинства практических приложений, связанных с созданием элементов конструкций устройств электронной техники.

г) *Механизм движения носителей заряда туннельного типа*

При механизме движения туннельного типа элементарный акт перемещения носителя заряда в определенной мере сходен с рассмотренным выше механизмом прыжкового типа, но протяженность элементарного прыжка имеет пространственную протяженность более чем атомного масштаба. Сам процесс движения носителя заряда можно представить в виде своеобразного «просачивания» носителя заряда сквозь потенциальный барьер, минуя необходимость его преодоления по рассмотренному выше активационному механизму. Иными словами, для этого механизма движения свойственно то обстоятельство, что носителю заряда не требуется для реализации процесса перехода обладать энергией, большей чем максимальная высота потенциального барьера.

Следует отметить тот факт, что туннельный принцип преодоления носителем заряда потенциального барьера, стоящего на пути движения микрочастицы, имеет исключительно квантовую природу. Согласно основным принципам классической физики, микрочастица может находиться лишь в тех областях пространства, в которых ее потенциальная энергия не превышает полную энергию. Это следует из того обстоятельства, что кинетическая энергия частицы не может быть отрицательной, т.к. в этом случае импульс частицы становится мнимой величиной. Исходя из этого обстоятельства следует, что если две области пространства разделены потенциальным барьером конечной протяженности (таким, что выполняется условие $W_{потенц} > W_{полной}$), то просачивание частицы сквозь него в рамках представлений классической теории оказывается невозможным.

С физической точки зрения туннельный эффект можно объяснить как своеобразное проявление принципа неопределенностей В. Гейзенберга (см. выражение 1.21). Согласно этому принципу следует, что при ограничении местоположения квантовой частицы по некоторой координате (например x), т.е. увеличении степени определенности ее нахождения по указанной координате x , её импульс p_x становится все менее определенным. Неопределенность импульса Δp_x (что приводит также к появлению неопределенности кинетической энергии ΔW_x) может добавить частице недостающую для преодоления барьера часть энергии. Таким образом, можно сделать вывод о том, что квантовая микрочастица с *некоторой вероятностью* может проникнуть через потенциальный барьер, обладая энергией, значительно меньшей чем высота преодолеваемого потенциального барьера W_a .

Рассмотрим в одномерном приближении процесс прохождения микрочастицы через потенциальный барьер на основании вероятностных волновых представлений, представленных в разд. 1.1. Допустим, что микрочастица движется вдоль оси x в области пространства, в которой потенциальная диаграмма претерпевает изменения согласно рис. 2.5. Характерной особенностью потенциальной диаграммы является следующее обстоятельство:

- в области (1), простирающейся по координате x от $-\infty$ до 0 , потенциальная энергия рассматриваемой системы $U(x) = 0$;

- в области (2), простирающейся по координате x от 0 до $+\infty$, потенциальная энергия рассматриваемой системы $U(x) = U_0$.

В общем случае, процесс движения квантовой микрочастицы описывается одномерным амплитудным уравнением Шредингера (см. разд. 1):

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (W - U(x)) \cdot \phi(x) = 0, \quad (2.22)$$

которое для рассматриваемых областей пространства (1) и (2) трансформируется в амплитудные уравнения вида

$$\frac{d^2\phi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \cdot \phi_1(x) = 0; \quad (2.23)$$

$$\frac{d^2\phi_2(x)}{dx^2} + k_2^2 \phi_2(x) = 0, \quad (2.24)$$

где $k_1 = \frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot W}$; $k_2 = \frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot (W - U_0)}$; W – кинетическая энергия движения микрочастицы в рассматриваемом силовом поле.

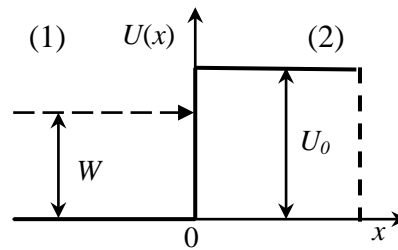


Рис.2.5. Схематическое отображение потенциальной диаграммы бесконечно протяженного энергетического барьера

Согласно материалам разд. 1, общие решения уравнений (2.23) и (2.24) имеют следующий вид:

$$\phi_1(x) = A_1 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot x) + B_1 \cdot \exp(-i \cdot k_1 \cdot x), \text{ при } x < 0; \quad (2.25)$$

$$\phi_2(x) = A_2 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot x) + B_2 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot x), \text{ при } x > 0. \quad (2.26)$$

Фрагмент $A_1 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot x)$ характеризует волну де Бройля, распространяющуюся в области (1) в положительном направлении оси x , где A_1 – амплитуда волны вероятности местоположения микрочастицы. Соответственно, фрагмент $B_1 \cdot \exp(-i \cdot k_1 \cdot x)$ характеризует волну вероятности, распространяющуюся в области (1) в отрицательном направлении оси x , где B_1 – амплитуда волны, отраженной от потенциального барьера.

Поскольку квадрат амплитуды волны де Бройля равен вероятности нахождения микрочастицы в определенной точке пространства, то отношение

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad (2.27)$$

характеризует отражательную способность барьера, а параметр R получил название *коэффициента отражения* движения микрочастицы от потенциального барьера (ранее, при рассмотрении движения частицы в потенциальной яме, по умолчанию считалось, что $R = 1$).

Фрагмент $A_2 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot x)$ характеризует волну де Бройля, распространяющуюся в области (2) в положительном направлении оси x . Квадрат амплитуды этой волны характеризует вероятность проникновения микрочастицы в область пространства (2). Отношение вида

$$D = n \cdot \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} \quad (2.28)$$

характеризует проникающую способность барьера, а параметр D получил название *коэффициента прозрачности* движения микрочастицы. Параметр $n = \lambda_1/\lambda_2$ получил название *показателя преломления* вероятностных волн де Бройля.

Фрагмент $B_2 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot x)$ характеризует волну вероятности, распространяющуюся в области (2) в отрицательном направлении оси x . Поскольку в области (2) отсутствует как таковая отражающая граница, а следовательно, нет отраженной волны, то следует принять, что амплитуда волны $B_2 = 0$.

Для *низких потенциальных барьеров*, для которых справедливо выполнение условия $W > U_0$, коэффициент отражения R равен [4]

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right). \quad (2.29)$$

Выражение (2.29) представляется весьма примечательным в том плане, что оно свидетельствует о принципиальном расхождении подходов классической и квантовой физики. Согласно классической физике, при выполнении условия $W > U_0$ коэффициент отражения R должен быть тождественно равен нулю. Согласно квантовой физике, при выполнении этого же условия коэффициент отражения $R > 0$, даже если W значительно превосходит U_0 . Для иллюстрации этого момента в табл. 2.5 приведены значения коэффициента отражения R для различных значений отношения $W/U_0 \geq 1$.

Таблица 2.5. Зависимость коэффициента отражения R от значения отношения w/u_0 [4]

W/U_0	1.0	1.11	1.25	2.0	10
R	1.0	0.27	0.146	0.03	0.0007

Для *высоких потенциальных барьеров*, для которых справедливо выполнение условия $W < U_0$, волновое число k_2 в выражении (2.26) является мнимым числом: $k_2 = i \cdot k$, где $k = \frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m_e \cdot (U_0 - W)}$ – действительное число. В этом случае для волновой функции в области (2) имеем (обратить внимание на тот факт, что волновая функция уже не является ПМВ, как это имело место выше) выражение: $\phi_2(x) = A_2 \cdot \exp(-k \cdot x)$.

Для потенциального барьера конечной толщины d (в области (2) появляется задняя стенка, отображенная на рис. 2.5 в виде утолщенной вертикальной пунктирной линии) вероятность обнаружения микрочастицы (прошедшей сквозь переднюю стенку барьера) у задней стенки барьера равна

$$P_d = |\phi_2|^2 = A_2^2 \cdot \exp\left(-\frac{4 \cdot \pi \cdot d}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m_e \cdot (U_0 - W)}\right). \quad (2.30)$$

Отличие вероятности P_d от нуля свидетельствует о возможности прохождения (просачивания) микрочастицы сквозь потенциальный барьер конечной толщины d даже при выполнении условия $W < U_0$.

Этот неожиданный (для классической физики) квантовый феномен получил название *туннельного эффекта*.

Рассмотренный выше коэффициент прозрачности D для случая потенциального барьера конечной толщины равен [4]

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{4 \cdot \pi \cdot d}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m_e \cdot (U_0 - W)}\right), \quad (2.31)$$

где D_0 – постоянный коэффициент, близкий по порядку величины единице.

Выражение (2.31) может быть обобщено и для потенциальных барьеров произвольной геометрической конфигурации:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{4 \cdot \pi \cdot d}{h} \cdot \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2 \cdot m_e \cdot (U_0 - W)} \cdot dx\right). \quad (2.32)$$

В табл. 2.6 в качестве примера, характеризующего масштабы проявления туннельного механизма преодоления потенциального барьера, представлены значения коэффициента прозрачности D (рассчитанные согласно выражению (2.31)), соответствующие различным значениям толщины барьера d и разности между значениями максимума потенциальной энергии (см. рис. 2.5) и кинетической энергии поступательного движения микрочастицы – $(U_0 - W)$.

Т а б л и ц а 2.6. *Зависимость коэффициента прозрачности D потенциального барьера от толщины барьера d и разности энергий $(U_0 - W)$*

$D, \cdot 10^{-10}$ м	1.0	1.5	2.0	5.0	10
$D(U_0 - W = 0.5эВ)$	0.49	0.34	0.24	0.027	$7 \cdot 10^{-4}$
$D(U_0 - W = 1.0эВ)$	0.36	0.22	0.13	$6 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-5}$
$D(U_0 - W = 2.5эВ)$	0.20	0.089	0.04	$3 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-7}$
$D(U_0 - W = 5.0эВ)$	0.10	0.032	0.01	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-10}$

Исходя из данных табл. 2.6, можно сделать ряд выводов, представляющих практический интерес:

- потенциальные барьеры, расположенные между индивидуальными атомами кристаллической структуры и имеющие, как правило, протяженность порядка 10^{-10} м, обладают достаточно высокой прозрачностью при прохождении через них квантовых микрочастиц;
- коэффициент прозрачности D очень сильно уменьшается при увеличении протяженности потенциального барьера d и, в частности, может быть принят равным нулю при значениях d , превышающих 10^{-9} м.

Еще один примечательный фактор квантового подхода (расходящийся с классическим подходом) состоит в том, что при туннельном механизме прохождения сквозь потенциальный барьер энергия микрочастицы не претерпевает изменения, т.е. *квантовая микрочастица покидает потенциальный барьер с тем же значением энергии, с какой она изначально входила в него*.

2.1.3. Концентрация носителей заряда в проводниках электронного типа

- а) Механизм электропроводности кристаллических структур с позиции зонных энергетических диаграмм

В общем случае в конструкционных материалах с электронным типом проводимости *общая концентрация электронов* превышает величину $10^{22} - 10^{23}$ электронов/см³ (в том числе и в диэлектрических материалах). Если все эти электроны будут задействованы в процессе электропроводности, то электрическая проводимость всех типов материалов будет достигать чрезвычайно высоких значений, что не наблюдается в реальной научно-технической практике.

В этой связи возникает вопрос, какие из оговоренных выше электронов следует считать непосредственными участниками процесса электрической проводимости? Ответ на этот вопрос позволит сформировать механизмы электропроводности кристаллических структур, обладающих электронным типом проводимости. Этот вопрос тем более важен, если учесть то обстоятельство, что без ответа на него невозможно поставить на научную основу методы проектирования современных электронных устройств.

В настоящем разделе анализ вышеизложенного вопроса представлен на качественном уровне рассмотрения и в дальнейшем его результаты будут перекрыты более корректным количественным анализом, основанном на использовании статистики заполнения электронами энергетических уровней зонной диаграммы.

Рассмотренные выше (см. разд. 1, рис. 1.10) зонные энергетические диаграммы кристаллических структур позволяют ответить на этот вопрос. Для определения (на качественном уровне анализа) понятия о концентрации носителей заряда в кристаллических структурах, обладающих электронным типом проводимости, обратимся к более детальному рассмотрению зонной энергетической диаграммы собственного полупроводника (т.е. в отсутствие легирующей примеси донорного или акцепторного типа).

На рис. 2.6 представлен характерный вид энергетической диаграммы собственного полупроводника при температуре окружающей среды $T \approx 0$ К и в условиях отсутствия внешнего электрического поля ($E = 0$ В/м).

Для уяснения физической сути рассматриваемого вопроса прокомментируем некоторые позиции рис. 2.6:

- точками отображены электроны (не более двух – согласно принципу Паули), расположенные на индивидуальном энергетическом уровне;
- векторами, исходящими от отдельных электронов, отображены направление и величина скорости поступательного движения электрона, находящегося на рассматриваемом энергетическом уровне;
- W_c – значение энергии, соответствующее наиболее низко расположенному энергетическому уровню в зоне проводимости собственного полупроводника;
- W_v – значение энергии, соответствующее наиболее высоко расположенному энергетическому уровню в валентной зоне собственного полупроводника;
- ΔW – ширина запрещенной зоны собственного полупроводника;
- посредством равенства модулей векторов движения электронов, находящихся на конкретном энергетическом уровне, отражен тот факт, что движение электронов по направлениям вправо и влево компенсируется в части переноса электрического заряда (из этого следует, что в целом не будет иметь место перенос заряда в веществе, а следовательно, и не будет макроскопического электрического тока);
- посредством неравенства модулей векторов движения электронов, находящихся на разных энергетических уровнях, отражено то обстоятельство, что движение ансамбля электронов имеет хаотический характер, обусловленный влиянием тепловых факторов.

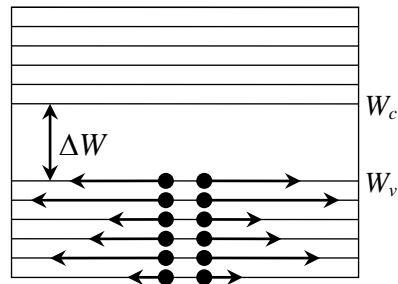


Рис. 2.6. Зонная энергетическая диаграмма собственного полупроводника при температуре $T \approx 0$ К

Согласно модельному представлению (см. рис. 2.6) состояния электрона в кристаллической структуре необходимо отметить следующие моменты:

- каждый электрон, находящийся на энергетическом уровне, расположенном в разрешенной энергетической зоне полупроводника, обладает кинетической энергией, реализуемой в форме хаотического *поступательного движения* в пространственных пределах кристаллической структуры;
- движение электронов имеет симметричный характер, с той точки зрения, что интенсивности движения ансамблей электронов проводимости по направлениям «вправо» и «влево» являются одинаковыми, т.е. вносящими эквивалентный вклад в процесс переноса носителей заряда в материале;
- средняя кинетическая энергия теплового движения электронов (которая равна по порядку величины $W_T = kT = 0,025$ Эв, при $T = 300$ К) считается настолько малой по сравнению с шириной запрещенной зоны ΔW (более 1 Эв), что можно исключить из рассмотрения процессы перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости, стимулированные тепловыми флуктуациями.

Поместим полупроводник в электрическое поле с напряженностью E . В этом случае на каждый электрон, расположенный в валентной зоне, будет действовать механическая сила $F = q \cdot E$, под воздействием которой он, следуя логике представлений классической физики, должен получить ускорение $a = (q \cdot E)/m$. Следствием подобного рода ускоренного движения электрона в электрическом поле будет нарушение вышеупомянутой симметрии макроскопического переноса носителей заряда по направлениям «вправо» и «влево» (к примеру, все стрелки на рис. 2.6 по направлению «вправо» должны удлиниться, а по направлению «влево» – укоротиться).

Однако возможна ли такая ситуация в рассматриваемой системе? Ведь если электроны изменят скорость своего движения, то они тем самым изменят свою кинетическую, а следовательно, и полную энергию (она отложена по оси ординат зонной энергетической диаграммы). В этом случае они уже не могут оставаться на прежних энергетических уровнях и должны перейти на другие *свободные энергетические уровни* (с большей или меньшей энергией, в зависимости от того, увеличилась или уменьшилась скорость движения электрона под воздействием электрического поля). Фактор отсутствия свободных энергетических уровней в валентной зоне *в принципе исключает возможность изменения скорости* находящегося в ней электрона и в этой связи возникает парадоксальная ситуация, при которой электрон «игнорирует» факт наличия внешнего электрического поля (принято считать, что при отсутствии свободных энергетических уровней эффективная масса электрона стремится к бесконечности).

Ситуация меняется коренным образом, если часть электронов перемещается из валентной зоны в зону проводимости полупроводника. Такое перемещение электронов вполне возможно, если часть электронов валентной зоны получит дополнительную энергию, достаточную для преодоления запрещенной зоны полупроводника (в рассматриваемом случае запрещенная зона выступает в качестве потенциального барьера, имеющего высоту ΔW (см. рис. 2.6)). В этом случае *в собственном полупроводнике появятся две, частично заполненные электронами*

энергетические зоны (валентная и проводимости). Сам факт частичного заполнения энергетических зон электронами открывает возможность изменения энергетического состояния этих электронов под воздействием внешнего электрического поля.

Это обстоятельство нашло свое отражение на рис. 2.7, иллюстрирующем механизм процессов ускорения (и замедления) движения электрона, находящегося в пределах отдельной энергетической зоны.

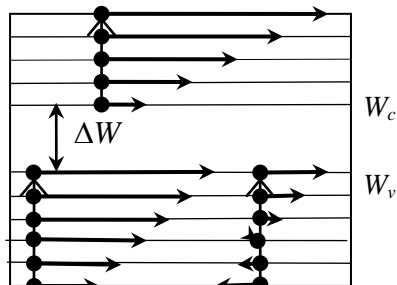


Рис. 2.7. Схематическое отображение эволюции энергетического состояния электронов при их движении во внешнем электрическом поле

Обращаясь к рис. 2.7, следует заострить внимание на трех принципиальных моментах, отражающих специфику процесса электронной проводимости в кристаллических структурах полупроводникового и металлического типа:

- обеспечение процесса электропроводности сопряжено с необходимостью создания благоприятных условий, при которых становится возможным изменение энергетического состояния электронов (наличие незаполненных энергетических уровней в рассматриваемой энергетической зоне);
- реализация процесса электрической проводимости происходит путем последовательности прыжков электронов с одного энергетического уровня на другой, расположенный выше или ниже исходного уровня (расстояние между соседними уровнями, по порядку величины, равно 10^{-23} Эв, поэтому такие прыжки по энергетической шкале сравнительно легко осуществимы);
- с помощью фактора неравенства изменения скоростей при осуществлении единичного прыжка *условно* отображено расхождение величин подвижностей носителей заряда в зоне проводимости и в валентной зоне (в зоне проводимости величина подвижности носителей заряда несколько больше).

На основании вышеизложенных моментов можно сформулировать итоговый вывод: *электропроводность кристаллических тел с электронным типом проводимости возможна лишь в том случае, когда реализуется частичное заполнение электронами энергетических уровней в разрешенной энергетической зоне.*

С этой точки зрения в качестве носителей заряда следует рассматривать не все электроны, которые содержатся в кристаллической структуре, а лишь часть из них, а именно:

А) для собственных полупроводников это:

- совокупность электронов, появившихся в зоне проводимости в результате их перемещения туда из валентной зоны;
- совокупность электронов в валентной зоне, численно равная (по порядку величины) количеству незаполненных энергетических уровней (дырки) в этой зоне, появившихся в результате перехода электронов в зону проводимости.

Б) для легированных (примесного типа) полупроводников это:

- совокупность электронов (полупроводники «*n*-типа»), находящихся в зоне проводимости в результате их перемещения туда из донорного уровня (фактически узкой энергетической зоны);

- совокупность электронов (полупроводники «*p*-типа») в валентной зоне, численно равная (по порядку величины) количеству уровней в акцепторной зоне (ввиду ее узости часто называемой – уровнем), на которые переходят электроны валентной зоны.

В материалах металлического типа ситуация незаполненной энергетической зоны возникает автоматически, поскольку у них имеет место пересечение (смыкание) зоны проводимости и валентной зоны (т.е. запрещенная зона отсутствует как таковая). Именно поэтому в этих материалах не наблюдается недостатка в носителях заряда, что, собственно, и обуславливает достаточно высокие показатели электропроводности конструкционных материалов металлического типа.

В материалах полупроводникового типа ситуация незаполненной энергетической зоны создается искусственно, путем [5]:

- интенсивного энергетического воздействия (теплового, светового, радиационного или электрического (случай сильного поля) характера) на электроны, расположенные в валентной зоне, с целью их перемещения в зону проводимости;

- диффузионного (термического) или радиационного (ионная имплантация) внедрения в кристаллическую решетку материала совокупности специфических инородных атомов (легирование материала), образующих в запрещенной зоне полупроводника дополнительную разрешенную энергетическую зону вблизи дна зоны проводимости (изначально заполненную электронами; полупроводник «*n*-типа») или вблизи потолка валентной зоны (изначально свободную от электронов; полупроводник «*p*-типа»).

Рассмотрим еще одну точку зрения на возможный механизм токопрохождения, не приводящую к необходимости наличия незаполненных энергетических зон (при всей ее ошибочности, она, тем не менее, полезна в той части, что позволяет высветить ряд полезных количественных представлений и аргументов в пользу рассмотренной выше позиции). В принципе, можно допустить гипотетический механизм «обменного» способа перемещения, при котором одна группа носителей заряда будет перескакивать вниз, на соседние энергетические уровни (уменьшая тем самым скорость своего движения под воздействием электрического поля), на смену ушедших *синхронно* с ними вверх (увеличивая тем самым скорость своего движения) другой группы носителей заряда. В этом случае не возникает необходимости в наличии свободных уровней в энергетической зоне. Рассмотрим вопрос об оговоренной выше синхронности процесса обмена местоположениями электронов с конструктивной точки зрения. Примем, что длина свободного пробега электронов в материале равна $\lambda = 10^{-8}$ м (типичное значение). В этом случае значение дополнительной энергии, приобретаемой электроном от электрического поля с напряженностью $E = 10^2$ В/м, составит $W_E = q \cdot \lambda \cdot E = 10^{-5}$ Эв. Учитывая тот факт, что расстояние между соседними энергетическими уровнями равно (по порядку величины) $\Delta W = 10^{-23}$ Эв, получим, что для обеспечения длины свободного пробега $\lambda = 10^{-8}$ Эв электрону необходимо осуществить 10^{18} (!) синхронизированных обменных перемещений (процессов). Столь грандиозное количество необходимых обменных процессов ставит под сомнение правомерность использования гипотезы об «обменном» характере механизма электропроводности для случая кристаллических структур.

б) Функция плотности и количества квантовых состояний

Определим число индивидуальных квантовых состояний, которые может занимать микрочастица, обладающая энергией в интервале значений $W - (W+dW)$.

Рассмотрение этого вопроса удобно начать с позиции представлений классической физики, в которой энергетическое состояние микрочастиц *однозначно* определяется заданием ее трех координат $\{x, y, z\}$ и трех проекций импульса $\{p_x, p_y, p_z\}$. Действительно, задание координат микрочастицы позволяет однозначно определить ее потенциальную энергию W_n , а проекций

импульса – ее кинетическую энергию W_k , а следовательно, и полную энергию микрочастицы $W = W_n + W_k$. Именно в связи с последним обстоятельством принято отображать энергетическое состояние микрочастицы в виде местоположения *фазовой* точки в воображаемом шестимерном пространстве $\{x, y, z, p_x, p_y, p_z\}$, получившем название *фазового пространства* состояния системы. Дальнейшая эволюция системы может быть отображена в этом фазовом пространстве посредством перемещения указанной фазовой точки по однозначно определенной *фазовой траектории*.

Введем в рассмотрение понятие об элементарном объеме фазового пространства состояния микрочастицы:

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_V \cdot \Delta\Gamma_P = dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z, \quad (2.33)$$

где $\Delta\Gamma_V = dx \cdot dy \cdot dz$ – элемент объема в координатном подпространстве; $\Delta\Gamma_P = dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z$ – элемент объема в импульсном подпространстве.

Поскольку в классической физике не накладывается никаких ограничений на допустимые энергетические состояния микрочастицы, то элементы объемов $\Delta\Gamma_V$ и $\Delta\Gamma_P$, а следовательно и $\Delta\Gamma$, могут быть бесконечно малыми величинами. Что, собственно, и отражает фактор однозначности определения состояния микрочастицы.

Для упрощения дальнейшего анализа остановимся на случае свободных частиц, для которого характерно отсутствие внешних потенциальных (силовых) полей. В этом случае энергетическое состояние микрочастицы становится не зависимым от местоположения микрочастицы в физическом объеме V (однако предполагается, что заведомо известно о нахождении микрочастицы в пределах этого объема). Исходя из сделанного допущения, можно принять, что элементарный фазовый объем $\Delta\Gamma_V = V$ и в связи с этим выражение (2.33) можно преобразовать к виду

$$\Delta\Gamma = V \cdot \Delta\Gamma_P = V \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z. \quad (2.34)$$

Следуя материалам разд. 1, движение микрочастиц описывается в рамках волновых (вероятностных) представлений, согласно которым их состояние подчиняется принципу неопределенностей Гейзенберга (см. выражение (1.25)). Принципиальное отличие квантово-механического подхода от классического состоит в том, что в этом случае состояние микрочастицы отображается в фазовом объеме не в виде точки (классический подход), а посредством конечной области фазового пространства объемом h^3 . С учетом этого обстоятельства элементарный фазовый объем $\Delta\Gamma$ можно представить в виде

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_V \cdot \Delta\Gamma_P = V \cdot \Delta\Gamma_P = h^3. \quad (2.35)$$

Из выражения (2.35) можно определить объем элементарного фазового импульсного подпространства $\Delta\Gamma_P$, приходящегося на одну микрочастицу:

$$\Delta\Gamma_P = \frac{h^3}{V}. \quad (2.36)$$

Процедура деления общего фазового пространства на индивидуальные фазовые ячейки (объемом h^3/V или в общем случае – h^3), определяющие возможные квантовые состояния микрочастицы, называется *квантованием фазового пространства*. На рис. 2.8 приведено схематическое представление импульсного фазового подпространства энергетического состояния микрочастицы с учетом фактора сферической симметрии при отображении импульса микрочастицы в части выполнения соотношения:

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2.$$

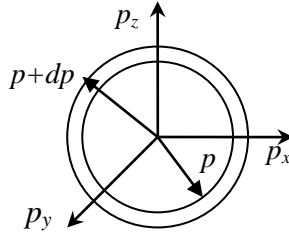


Рис. 2.8. Импульсное фазовое подпространство энергетического состояния микрочастицы

Определим число квантовых состояний, которые может иметь микрочастица, имеющая энергию, заключенную в интервале значений $W - (W+dW)$. Для этого выделим в фазовом пространстве (см. рис. 2.8) две сферические поверхности, соответствующие значениям импульса p (энергии W) и $(p+dp)$ (энергии $(W+dW)$). Между указанными сферическими поверхностями заключен шаровой слой объемом $\Delta\Gamma_c = 4 \cdot \pi \cdot p^2 \cdot dp$. Общее количество квантовых состояний dG_c (т.е. фазовых ячеек объемом $\Delta\Gamma_p$, см. выражение (2.36)), заключенных в этом шаровом слое, будет равно

$$dG_c = \frac{\Delta\Gamma_c}{\Delta\Gamma_p} = \frac{4 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot p^2 \cdot dp. \quad (2.37)$$

Введем в рассмотрение функцию плотности квантовых состояний $g(p)$ в импульсном пространстве, такую, чтобы выполнялось условие

$$dG_c = g(p) \cdot dp = \frac{4 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot p^2 \cdot dp. \quad (2.38)$$

Для перехода от параметра p к параметру W воспользуемся очевидными выражениями (с учетом того обстоятельства, что микрочастица является свободной, а следовательно, ее кинетическая энергия равна полной энергии): $W = (p^2)/(2m)$; $dW = \left(\frac{p}{m}\right) \cdot dp$. Переходя к энергетическому представлению функции плотности квантовых состояний, имеем

$$g(W) \cdot dW = \frac{2 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot W^{1/2} \cdot dW. \quad (2.39)$$

Из выражения (2.39) следует, что *плотность квантовых состояний* $g(W)$, выражающая число состояний микрочастицы, приходящееся на единичный интервал энергий, определяется выражением

$$g(W) = \frac{2 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot W^{1/2}. \quad (2.40)$$

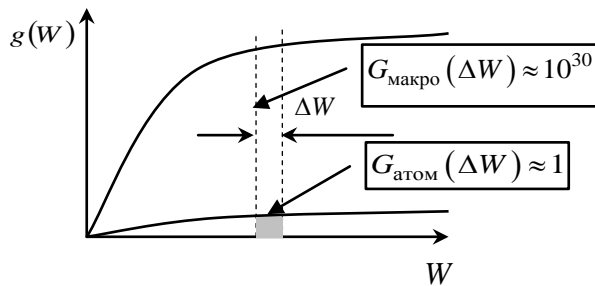
Интегрируя выражение (2.40) в пределах от W_1 до W_2 ($W_1 < W_2$), можно получить количество квантовых состояний $G(W_1, W_2)$ электронов, содержащихся в указанном интервале энергий:

$$G(W_1, W_2) = \frac{8 \cdot \pi \cdot V}{3 \cdot h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot \left(W_2^{3/2} - W_1^{3/2} \right). \quad (2.41)$$

Из выражения (2.40) следует, что с ростом массы микрочастицы плотность квантовых состояний $g(W)$ возрастает. Именно с учетом этого обстоятельства *считается, что макроскопические тела имеют практически непрерывный (а не дискретный, как это имеет место для случая единичного атома или наноразмерных структур) спектр энергетических*

состояний и в их поведении, как правило, не наблюдается проявлений квантово-механического характера. Именно благодаря фактору этой непрерывности спектра энергетических состояний, макроскопические объекты становятся предметом рассмотрения методами классической физики. Этот переход от случая дискретного спектра энергетических состояний (объект – единственный атом) к случаю непрерывного спектра (объект – макроскопическое тело объемом в 1 см^3 , с количеством атомов порядка 10^{23}) условно отображен на рис. 2.9. На рисунке отражен акцент на величину масштабного фактора расхождения количества квантовых состояний единичного атома и макроскопического объекта, приходящихся на определенный (достаточно малый) энергетический интервал.

Рис.2.9. Плотность и количество квантовых состояний для атомных и макроскопических объектов



В случае рассмотрения электронов в качестве микрочастиц каждой фазовой ячейке отвечает не одно, а два состояния, отличающихся друг от друга направлением спина (принцип Паули). С учетом этого для плотности квантовых состояний электронов имеем

$$g(W) = \frac{4 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot W^{1/2}.$$

Весьма важным и удобным для практических целей является то обстоятельство, что вид функции плотности квантовых состояний $g(W)$ (см. выражение (2.40)) является *одинаковым* для всех типов микрочастиц (электроны, фотоны, атомы). Однако эта функция может отслеживать специфику ограничений на вид энергетического спектра разрешенных состояний кристаллических структур.

В частности, для случая собственного полупроводника, зонная диаграмма которого содержит запрещенную зону, функция плотности квантовых состояний $g(W)$ имеет вид, представленный на рис. 2.10.

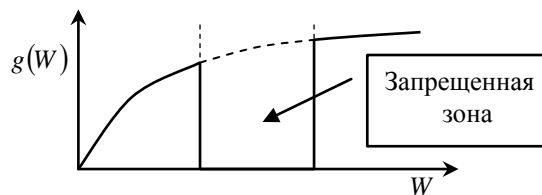


Рис. 2.10. Функция плотности квантовых состояний $g(W)$ для случая собственного полупроводника

Для общности рассмотрения и в силу их большой практической значимости на рис. 2.11 представлены функции плотности квантовых состояний $g(W)$ для случая примесных полупроводников донорного и акцепторного типа.

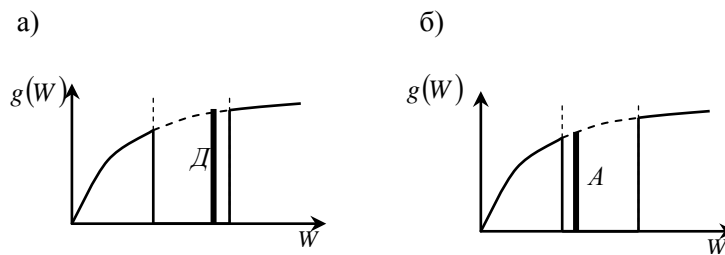


Рис. 2.11. Функции плотности квантовых состояний $g(W)$ для случая донорного (а) и акцепторного (б) полупроводника

На рис. 2.11 использованы следующие условные обозначения: А – акцепторный уровень; Д – донорный уровень (*под понятием «уровень» следует понимать очень узкую энергетическую зону с количеством энергетических уровней, соизмеримым с количеством внесенных в полупроводник атомов легирующей примеси*).

в) Вероятность заполнения квантовых состояний в кристаллических структурах

В предыдущем разделе рассматривался вопрос о плотности и количестве квантовых состояний, рассматриваемых в качестве своеобразных энергетических «квартир», которые заселяются микрочастицами. В настоящем разделе рассматривается вопрос о вероятностях заселения этих «квартир» в зависимости от энергии квантового состояния. Общим физическим принципом, используемым при анализе данного вопроса, является «*принцип минимальной энергии*», согласно которому считается, что ансамбль микрочастиц в целом выбирает из всей совокупности энергетических состояний такое состояние (или группу состояний), при котором его энергия будет иметь минимальное значение. Особенно наглядно этот принцип проявляется при температуре системы $T = 0$ К, при которой микрочастицы занимают только нижние (малоэнергетические) квантовые состояния.

С учетом специфики своего поведения в ансамбле все микрочастицы принято подразделять на два класса:

- *фермионы* – которые проявляют ярко выраженное стремление к «уединению», т.е. не могут находиться в данном квантовом состоянии, если оно уже занято другой микрочастицей (к ним относятся электроны, протоны и другие микрочастицы, обладающие полуцелым спином: $(\frac{h}{4\pi}), (\frac{3h}{4\pi}), \dots$);
- *бозоны* – которые проявляют ярко выраженное стремление к «объединению» своего положения по энергетической шкале, т.е. могут заселять конкретное квантовое состояние в неограниченном количестве (к ним относятся фотоны и другие микрочастицы, обладающие целочисленным спином: $0, (\frac{h}{2\pi}), (\frac{h}{\pi}), \dots$).

При рассмотрении вероятностных характеристик фактора заселенности энергетических состояний (при $T > 0$ К) большое значение имеет величина отношения количества микрочастиц N , имеющих в системе, к количеству квантовых состояний в системе G . С этой точки зрения ансамбли микрочастиц подразделяются на два типа:

- $\frac{N}{G} \ll 1$ – *невыврожденный ансамбль*, в котором у микрочастиц есть определенная возможность собственного «выбора» квантового состояния («квартиры»), а следовательно, *вероятность заселения конкретного квантового состояния становится достаточно малой величиной*;

- $\frac{N}{G} \approx 1$ (при этом предполагается, что $N \leq G$) – вырожденный ансамбль, в котором у

микрочастиц весьма ограничена возможность собственного «выбора» квантового состояния, а следовательно, *вероятность заселения конкретного квантового состояния приобретает значения, близкие к единице.*

Деление ансамблей микрочастиц на вырожденные и невырожденные случаи может содержать элемент некоторой неоднозначности. Например, ансамбль электронов в кристаллических структурах (металлы, полупроводники) является вырожденным при низких температурах и невырожденным при высоких температурах.

В соответствии с приведенной выше классификацией ансамблей микрочастиц проводится и классификация физических статистик (подробнее смотри в источнике [3]):

- статистика, отражающая поведение невырожденных ансамблей микрочастиц, называется *классической статистикой*, или *статистикой Максвелла-Больцмана*;
- статистика, отражающая поведение вырожденных ансамблей микрочастиц, называется *квантовой статистикой*, или *статистикой Ферми-Дирака*.

Следует отметить, что квантовая статистика применима только к квантовым системам, в то время как в классической статистике могут рассматриваться как классические, так и квантовые системы. Последнее обстоятельство находит свое наглядное проявление для случая ансамбля электронов, находящегося в кристаллической структуре (металлы, полупроводники), который, в зависимости от температуры, может менять степень своего вырождения (подробнее условие снятия вырождения рассмотрено ниже).

Введем в рассмотрение понятие о функции распределения частиц по энергии $f(W)$. Физический смысл указанной функции состоит в том, что произведение вида $[f(W) \cdot dW]$ равно вероятности заполнения микрочастицами квантовых состояний с энергиями, заключенными в интервале значений $W - (W + dW)$. Отметим, что речь идет о вероятности заполнения квантовых состояний, если они действительно содержатся в интервале энергий dW . Последнее наблюдается не всегда. Например, если интервал энергий dW расположен в запрещенной зоне собственного полупроводника, то определенная вероятность нахождения электронов в этом интервале энергий теоретически существует, а фактически электронов в этом интервале быть не может.

В классической (Максвелла-Больцмана) статистике функция распределения микрочастиц по энергиям $f_{MB}(W)$ имеет вид

$$f_{MB}(W) = e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{W}{kT}}, \quad (2.42)$$

где k – постоянная Больцмана; μ – химический потенциал.

Физический смысл химического потенциала системы состоит в том, что он отражает энергию, которую микрочастица вносит (выносит) в систему при ее вхождении (выходе) в состав системы. Для случая невырожденного ансамбля микрочастиц химический потенциал равен

$$\mu = k \cdot T \cdot \ln \left[\frac{N}{V} \cdot \left(\frac{h^2}{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T} \right)^{\frac{3}{2}} \right]. \quad (2.43)$$

Подставив (2.43) в выражение (2.42), получим

$$f_{MB}(W) = \frac{N}{V} \cdot \left(\frac{h^2}{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{W}{kT}}. \quad (2.44)$$

Согласно выражению (2.44) функция распределения частиц по энергиям $f_{MB}(W)$ является монотонно убывающей функцией от энергии микрочастиц, имеющей максимальное значение $e^{\mu/kT}$ при значении энергии микрочастицы $W = 0$.

В квантовой (Ферми-Дирака) статистике функция распределения микрочастиц по энергиям $f_{\Phi D}(W)$ имеет вид

$$f_{\Phi D}(W) = \left(e^{\frac{W-\mu}{kT}} + 1 \right)^{-1}. \quad (2.45)$$

В выражении (2.45) символом μ , как и для рассмотренного выше случая, обозначен химический потенциал системы, который для вырожденного газа принято называть *энергией (или уровнем) Ферми* (W_F). Применительно к кристаллическим структурам металлического и полупроводникового типа энергия Ферми имеет вполне определенный физический смысл, а именно – *работы выхода электронов* из указанных материалов. Следует отметить, что энергия Ферми и, как следствие, работа выхода электронов в несобственных полупроводниках зависит от величины концентрации и типа (донорная, акцепторная) легирующей примеси. В частности, в полупроводниках донорного типа энергия Ферми меньше, чем в собственных полупроводниках, а в полупроводниках акцепторного типа – больше. Этот фактор положен в основу проектирования полупроводниковых приборов (структур диодного и транзисторного типа) и современных интегральных схем.

Характерный вид функции распределения частиц по энергиям $f_{\Phi D}(W)$ легко просматривается при обращении к частному случаю: $T \approx 0$. Нетрудно видеть, что в этом случае выражение (2.45) можно заменить аналитическим представлением вида

$$f_{\Phi D}(W) = \begin{cases} 1 & \text{при } W < \mu ; \\ 0 & \text{при } W > \mu ; \\ 1/2 & \text{при } W = \mu . \end{cases} \quad (2.45a)$$

Из выражения (2.45a) следует, что при выполнении условия $T \approx 0$ вероятность заполнения квантовых состояний равна единице при всех значениях энергии микрочастиц, не превосходящих энергию Ферми (случай полного вырождения энергетического состояния ансамбля микрочастиц).

Вид функций распределения частиц по энергиям $f_{MB}(W)$ и $f_{\Phi D}(W)$ представлен на рис. 2.12.

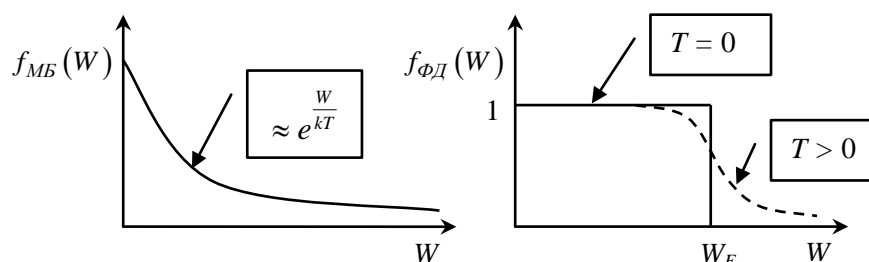


Рис. 2.12. Схематическое отображение функций распределения частиц по энергиям $f_{MB}(W)$ и $f_{\Phi D}(W)$

Проведем сопоставительный анализ функций распределения частиц по энергиям $f_{MB}(W)$ (невыврожденный ансамбль микрочастиц) и $f_{\Phi D}(W)$ (вырожденный ансамбль микрочастиц). Нетрудно заметить, что при выполнении условия

$$e^{\frac{W-\mu}{kT}} \gg 1 \quad (2.46)$$

обе функции распределения частиц по энергиям $f_{MB}(W)$ и $f_{ФД}(W)$ приобретают тождественный вид. Отсюда следует, что выполнение условия $(W - \mu) \gg kT$ приводит к снятию вырождения по распределению микрочастиц по энергиям. Это обстоятельство представляет определенное удобство в практическом плане, поскольку из него следует, что при больших значениях энергий микрочастиц W можно использовать (ввиду устранения фактора вырожденности ансамбля микрочастиц) статистику Максвелла-Больцмана.

Относительно фактора вырождения ансамбля микрочастиц в кристаллических структурах можно сделать ряд общих заключений:

- в металлах, ввиду чрезвычайно высокой (порядка 10^{28} м^{-3}) концентрации свободных электронов, т.е. способных перемещаться на значительные расстояния, ансамбль электронов всегда находится в вырожденном состоянии и поэтому его поведение подчиняется квантовой статистике Ферми-Дирака;
- в собственных и слаболегированных полупроводниках концентрации свободных электронов значительно ниже ($10^{18} - 10^{24} \text{ м}^{-3}$ – в зависимости от содержания легирующей примеси донорного или акцепторного типа) относительно металлов, поэтому ансамбль электронов, как правило, находится в невырожденном состоянии и его поведение подчиняется классической статистике Максвелла-Больцмана.

Характерные моменты в различии поведения идеального невырожденного (статистика Максвелла-Больцмана) и вырожденного (статистика Ферми-Дирака) ансамблей микрочастиц представлены в табл. 2.7.

Т а б л и ц а 2.7. *Средняя кинетическая энергия и среднеквадратичная скорость движения в вырожденном и невырожденном ансамбле микрочастиц [4]*

Параметр		Тип ансамбля микрочастиц	
		невырожденный	вырожденный
W	T = 0 К	0	$\left(\frac{3}{2}\right) \cdot W_F$
	T > 0 К	$\frac{3}{2} \cdot k \cdot T$	$\frac{3}{5} \cdot W_F \cdot \left[1 + \frac{5 \cdot \pi^2}{12} \cdot \left(\frac{k \cdot T}{W_F} \right)^2 \right] \approx \frac{3}{5} \cdot W_F$
v _{кв}	T = 0 К	0	$\approx \sqrt{\frac{W_F}{m}}$
	T > 0 К	$\sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot T}{m}}$	

Примечание: типичные значения энергии Ферми (W_F) приведены в приложении № 2 (см. пункт «Г»).

На основании данных, приведенных в табл. 2.7, можно сделать ряд выводов, представляющих практический интерес:

- в невырожденном ансамбле микрочастиц средняя энергия и среднеквадратичная скорость микрочастиц являются функциями температуры и при абсолютном нуле обращаются в нуль;
- в вырожденном ансамбле микрочастиц средняя энергия и среднеквадратичная скорость микрочастиц уже при абсолютном нуле имеют огромные значения (по сравнению с тепловой составляющей) и практически не зависят от температуры, что свидетельствует о нетермической природе их происхождения.

з) Полная функция распределения ансамбля микрочастиц по энергиям

В приведенных выше разделах рассмотрены функции плотности и вероятностей заполнения микрочастицами квантовых состояний, но ни в коей мере не рассмотрен вопрос о фактическом заселении микрочастицами индивидуальных энергетических состояний зонной диаграммы.

Представляется очевидным, что количество микрочастиц dN , находящихся на энергетических уровнях, расположенных в пределах энергетического интервала dW , будет пропорционально:

- протяженности указанного энергетического интервала dW на зонной энергетической диаграмме (очевидно, что расположенного только в разрешенных зонах);
- значению функции плотности квантовых состояний $g(W)$ в указанном энергетическом интервале dW ;
- вероятности заполнения индивидуальных квантовых состояний $f_{MB}(W)$ или $f_{ФД}(W)$ (в зависимости от типа ансамбля микрочастиц: невырожденный или вырожденный):

$$dN = f_{MB(илиФД)}(W) \cdot g(W) \cdot dW. \quad (2.47)$$

Функция вида $N(W) = dN / dW$ получила название *полной функции распределения* микрочастиц по энергиям

$$N(W) = \frac{dN}{dW} = f_{MB(илиФД)}(W) \cdot g(W) \quad (2.48)$$

и характеризует фактическую плотность распределения микрочастиц по энергиям.

В классической (Максвелла-Больцмана) невырожденной статистике для полной функции распределения микрочастиц по энергиям $N_{MB}(W)$ на основании выражений (2.40) и (2.42), имеем

$$N_{MB}(W) = \frac{2 \cdot N}{\sqrt{\pi \cdot (k \cdot T)^3}} \cdot \sqrt{W} \cdot e^{-\frac{W}{k \cdot T}}. \quad (2.49)$$

Следует отметить, что на вид полной функции распределения микрочастиц по энергиям $N_{MB}(W)$ оказывают влияние два конкурирующих фактора:

- фактор возрастания $N_{MB}(W)$ с увеличением W , обусловленный проявлением влияния функции плотности квантовых состояний в системе $g(W)$;
- фактор убывания $N_{MB}(W)$ с увеличением W , обусловленный проявлением влияния функции вероятности заполнения квантовых состояний в системе.

Практическая значимость полной функции распределения микрочастиц по энергиям $N_{MB}(W)$ состоит в том, что с ее помощью можно определить количество микрочастиц $N(W_1, W_2)$, энергия которых находится в определенном энергетическом интервале ($W_1 - W_2$):

$$N(W_1, W_2) = \int_{W_1}^{W_2} N_{MB}(W) \cdot dW = \frac{2 \cdot N}{\sqrt{\pi \cdot (k \cdot T)^3}} \int_{W_1}^{W_2} \sqrt{W} \cdot e^{-\frac{W}{k \cdot T}} \cdot dW. \quad (2.50)$$

Графическое отображение полной функции распределения микрочастиц по энергиям $N_{MB}(W)$ представлено на рис. 2.13.

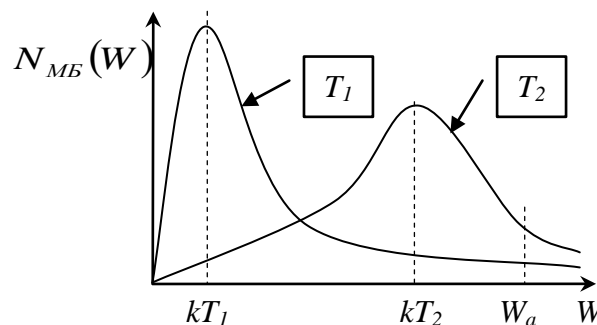


Рис. 2.13. Полная функция распределения микрочастиц по энергиям для невырожденного ансамбля частиц ($T_2 > T_1$)

Относительно некоторых фрагментов рис. 2.13 уместно привести ряд замечаний, имеющих практическую значимость:

- численное значение полной площади под кривой распределения по энергиям $N_{MB}(W)$ представляет собой общее количество частиц N_0 , входящих в состав рассматриваемого ансамбля микрочастиц (это следует из того очевидного факта, что интеграл (2.50) при значениях $W_1 = 0$ и $W_2 = \infty$ охватывает всю совокупность микрочастиц в ансамбле);
- положение максимума полной функции распределения по энергиям $N_{MB}(W)$ по шкале энергий соответствует значению средней энергии микрочастиц в ансамбле, равной по порядку величины $\approx kT$;
- повышение температуры ансамбля микрочастиц (например, от температуры T_1 до температуры T_2) приводит к сдвигу максимума полной функции распределения микрочастиц $N_{MB}(W)$ в направлении больших значений энергии (при сохранении общей площади поверхности под кривой распределения $N_{MB}(W)$);
- с повышением температуры полная функция распределения микрочастиц по энергиям $N_{MB}(W)$ приобретает все более «размытый» характер, из чего следует, что микрочастицы в этом случае имеют более высокую степень свободы при выборе своего энергетического состояния;
- площадь поверхности, расположенной правее значения энергии W_a (энергия активации) и простирающейся вплоть до значений $W \rightarrow \infty$, численно равна количеству микрочастиц, способных реализовать (по своим энергетическим возможностям) определенный элементарный физико-химический процесс.

В прикладных задачах довольно часто встречаются случаи, когда энергия активации элементарных физико-химических процессов W_a существенно превышает среднюю тепловую энергию микрочастиц в ансамбле – kT . Это следует из того, что на практике параметр W_a , как правило, соизмерим со значением 1 эВ, в то время как $kT = 0,025$ эВ (при $T = 300^\circ \text{C}$). Такой уровень расхождения ($W_a / kT = 40$) позволяет считать определяющим фактором функцию $f_{MB}(W)$ (полагая при этом, что функция $g(W) = \text{const}$), что способствует существенному упрощению выражения (2.49). В этом случае для проведения оценочных расчетов концентрации активных (в энергетическом плане) микрочастиц вместо выражения (2.50) можно использовать более простое аналитическое выражение:

$$N_{MB}(W_1, W_2) = C \cdot \int_{W_1}^{W_2} e^{-\frac{W}{k \cdot T}} \cdot dW, \quad (2.51)$$

где C – постоянная величина.

Наибольший практический интерес представляет случай, когда $W_1 = W_a$, а $W_2 \rightarrow \infty$. Для этого случая на основании выражения (2.51), можно определить концентрацию активных микрочастиц $N_{MB}(W > W_a)$, энергия которых больше W_a , а следовательно, эти микрочастицы способны реализовать рассматриваемый элементарный физико-химический процесс посредством механизма термической активации:

$$N_{MB}(W > W_a) = N_0 \cdot e^{-\frac{W_a}{k \cdot T}}, \quad (2.52)$$

где N_0 – полная концентрация микрочастиц в ансамбле.

Некоторое представление о масштабе величин параметра $N_{MB}(W > W_a)$ можно составить на основании данных, приведенных в табл. 2.8.

Т а б л и ц а 2.8. *Зависимость относительной концентрации активных микрочастиц от энергии активации W_a и температуры T*

$\frac{N_{MB}(W \geq W_a)}{N_0}$	W_a , эВ	Температура, К				
		50	100	300	600	900
0.5		$\approx 10^{-51}$	$9.36 \cdot 10^{-14}$	$2.06 \cdot 10^{-9}$	$4.54 \cdot 10^{-5}$	$1.27 \cdot 10^{-3}$
1.0		0	$\approx 10^{-51}$	$\approx 10^{-17}$	$2.06 \cdot 10^{-9}$	$1.62 \cdot 10^{-6}$
1.5		0	0	$\approx 10^{-26}$	$9.36 \cdot 10^{-14}$	$2.06 \cdot 10^{-9}$

В квантовой (Ферми-Дирака) вырожденной статистике для полной функции распределения электронов (с учетом их спиновых состояний) по энергиям $N_{\Phi D}(W)$ на основании выражений (2.40) и (2.45) имеем

$$N_{\Phi D}(W) = \frac{4 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot \sqrt{W} \cdot \left(e^{\frac{W-W_F}{k \cdot T}} + 1 \right)^{-1}. \quad (2.53)$$

При очень низких температурах ($T \approx 0$) вероятность заполнения квантовых состояний практически равна единице для совокупности малоэнергетических уровней и в этой связи выражение (2.53) приобретает более простой вид:

$$N_{\Phi D}(W) = \frac{4 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot \sqrt{W}. \quad (2.54)$$

Интегрируя выражение (2.54) в энергетическом интервале $\{0 - W_F\}$, определяем общее количество электронов, имеющих энергию в указанном энергетическом интервале:

$$N_{\Phi D}(0, W_F) = \frac{8 \cdot \pi \cdot V}{3 \cdot h^3} \cdot (2 \cdot m)^{3/2} \cdot W_F. \quad (2.55)$$

Из выражения (2.55) можно определить энергию Ферми W_F :

$$W_F = \frac{h^2}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{3 \cdot n}{8 \cdot \pi} \right)^{2/3}, \quad (2.56)$$

где $n = N(0, W_F)/V$ – концентрация электронного газа в системе.

Любопытно сравнить родственные понятия химического потенциала μ (невырожденная статистика, см. выражение (2.43)) и энергии Ферми W_F (вырожденная статистика, см. выражение (2.56)). Оба эти понятия имеют одинаковый физический смысл, а именно – *это энергия, которую микрочастица вносит (выносит) в систему при ее вхождении (выходе) в состав системы*. Однако в первом случае параметр μ является функцией температуры, а во втором – параметр W_F не является функцией температуры. Последнее обстоятельство следует из того, что энергия Ферми, характеризующая поступательное движение электрона в системе, не является энергией теплового движения и имеет исключительно квантовую природу.

Зная значение энергии Ферми W_F , можно определить максимальную скорость поступательного движения электронов v_F , находящихся на верхнем энергетическом уровне в разрешенной зоне:

$$v_F = \sqrt{\frac{2 \cdot W_F}{m}}, \quad (2.57)$$

и температуру Ферми T_F (условная величина, которая показывает, при какой температуре невырожденный газ имел бы энергию теплового движения, равную энергии Ферми):

$$T_F = \frac{W_F}{k}. \quad (2.58)$$

В табл. 2.9 представлены значения энергии Ферми W_F , температуры Ферми T_F и скорости поступательного движения v_F для некоторых металлов.

Т а б л и ц а 2.9. *Квантово-механические характеристики некоторых металлов [4]*

Металл	W_F , эВ	$T_F \cdot 10^4$	$v_F \cdot 10^6$ мс ⁻¹ ; (v_F/v_T)
Li	4.7	5.5	1.3 (13.7)
Na	3.1	3.7	1.1 (11.1)
Cu	7.1	8.2	1.6 (16.9)
Ag	5.5	6.4	1.4 (14.8)

Примечание: Значения v_T соответствуют температуре $T = 300$ К.

Из данных табл. 2.9 следует, что при температуре $T = 300$ К скорость поступательного движения микрочастицы v_F превосходит более чем на порядок скорость теплового движения v_T . Очевидно, что величина этого расхождения между скоростями v_F и v_T будет возрастать с уменьшением температуры.

*д) Концентрация носителей заряда и электропроводность
в кристаллических структурах металлического
и полупроводникового типа*

Анализ вопроса о концентрации носителей заряда в кристаллических структурах с электронным типом проводимости проводится на основе вышеизложенных материалов (см. пункты настоящего раздела: а, б, в, г). С методической точки зрения целесообразно начать рассмотрение этого вопроса с материалов металлического типа.

В материалах металлического типа зонная энергетическая диаграмма не имеет запрещенной зоны, а следовательно, в них зона проводимости непосредственно примыкает к валентной зоне. При температуре $T = 0$ К зона проводимости металла полностью свободна от электронов, а валентная зона, напротив, полностью заполнена. С повышением температуры металла ($T > 0$ К) часть электронов, находящихся в *верхней части* валентной зоны, подвергаются тепловому возбуждению (т.е. электроны увеличивают свою энергию) и под действием этого фактора переходят на более высоко расположенные энергетические уровни, находящиеся в *нижней части* зоны проводимости. Поскольку тепловому возбуждению подвергаются не все электроны валентной зоны, а только часть из них (которые и являются носителями заряда при реализации процесса электропроводности), то вопрос об их количестве приобретает исключительно практический интерес.

Энергетическому воздействию подвергаются электроны, находящиеся на энергетических уровнях валентной зоны в интервале энергий протяженностью kT , непосредственно примыкающем к уровню Ферми. Электроны, находящиеся на более глубоких энергетических уровнях валентной зоны, практически не подвергаются тепловому возбуждению. Проведем оценку количества этих возбужденных (т.е. перешедших в зону проводимости) электронов. Примем, что в валентной зоне изначально находится N электронов, расположенных на $N/2$ энергетических уровнях (на каждом уровне может находиться, согласно принципу Паули, не более двух электронов). Протяженность валентной зоны определяется интервалом энергий $\{0 - W_F\}$. В целях упрощения примем допущение, что энергетические уровни расположены в валентной зоне на одинаковом расстоянии друг от друга, равном ΔW_i :

$$\Delta W_i = \frac{W_F}{(N/2)} = \frac{2 \cdot W_F}{N} \approx 10^{-23} \text{ эВ.} \quad (2.59)$$

(Столь малое значение интервала ΔW_i позволяет считать, что энергетические зоны являются не дискретными, а непрерывными.)

Как отмечалось выше, тепловому возбуждению подвергаются электроны в энергетическом интервале с протяженностью kT , расположенном ниже уровня Ферми W_F . В этом энергетическом интервале валентной зоны изначально находится количество энергетических уровней ΔN_{kT} , равное

$$\Delta N_{kT} = \frac{k \cdot T}{\Delta W_i} = \frac{k \cdot T \cdot N}{2 \cdot W_F}. \quad (2.60)$$

На этих ΔN_{kT} энергетических уровнях валентной зоны располагается ΔN_0 термически возбужденных электронов, количество которых можно оценить с помощью выражения (принимая во внимание принцип Паули):

$$\Delta N_0 = \frac{k \cdot T \cdot N}{W_F}. \quad (2.61)$$

Термически возбужденные электроны валентной зоны переходят на нижние уровни зоны проводимости, которые по определению расположены выше уровня Ферми. Эти перешедшие электроны находятся в состоянии *динамического равновесия* с оставшимися в валентной зоне дырками. Последнее означает, что термически возбужденные электроны, перешедшие в зону проводимости, могут потерять свою избыточную (тепловую) энергию путем ее передачи атомам кристаллической решетки и вернуться в валентную зону. В этой связи их равновесное количество будет меньше общего количества возбужденных электронов в валентной зоне ΔN_0 . Полагая, что за уровень Ферми переходит не более половины возбужденных электронов ΔN_0 , для оценки количества носителей заряда ΔN в проводниках металлического типа получим

$$\Delta N \approx \frac{k \cdot T \cdot N}{2 \cdot W_F}. \quad (2.62)$$

В табл. 2.10 представлена зависимость относительной концентрации носителей заряда $\Delta N / N$ в металлах от температуры, полученная на основании выражения (2.62).

Таблица 2.10. Зависимость $\Delta N / N$ от температуры в проводниках металлического типа (при значении энергии Ферми $W_F = 5 \text{ эВ}$)

$T, \text{ К}$	10	50	100	150	200	250
$\Delta N / N$	$8 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$1.6 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$
$T, \text{ К}$	300	350	400	450	500	600
$\Delta N / N$	$2.4 \cdot 10^{-3}$	$2.8 \cdot 10^{-3}$	$3.2 \cdot 10^{-3}$	$3.6 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$4.8 \cdot 10^{-3}$
$T, \text{ К}$	800	1000	1200	1400	1600	2000
$\Delta N / N$	$6.4 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-3}$	$9.6 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$

Согласно данным табл. 2.10 можно сформулировать ряд важных, с практической точки зрения, выводов:

- вплоть до температур 2000 К, относительное количество электронов, перешедших выше уровня Ферми, не превышает 2%, что позволяет считать электронный газ в металле вырожденным и принять точку зрения, что его распределение мало отличается от распределения при абсолютном нуле;

- в рабочем диапазоне функционирования технических устройств (250 – 400 К) относительное количество свободных электронов (т.е. находящихся выше уровня Ферми) составляет по порядку величины 0,1 %;

- несмотря на малые величины относительного количества свободных электронов $\Delta N/N$, абсолютные значения концентрации носителей заряда в металлах могут достигать весьма больших значений (порядка $10^{20} - 10^{21} \text{ см}^{-3}$).

С учетом вышеизложенного можно считать, что концентрация носителей заряда в проводниках металлического типа весьма слабо зависит от температуры, а температурная зависимость электропроводности этих конструкционных материалов всецело определяется вариацией подвижности носителей заряда (см. выражение (2.1)).

В собственных полупроводниках зонная энергетическая диаграмма имеет запрещенную зону, а следовательно, у них нижний уровень зоны проводимости отстоит от верхнего уровня валентной зоны на расстоянии, равном ширине запрещенной зоны $\Delta W_{зз}$. При температуре $T = 0 \text{ К}$ зона проводимости полупроводника полностью свободна от электронов (как и у металла), а валентная зона, напротив, полностью заполнена. С повышением температуры полупроводника ($T > 0 \text{ К}$) часть электронов, находящихся в *верхней части* валентной зоны, подвергаются тепловому возбуждению и под действием этого фактора переходят на более высоко расположенные энергетические уровни, находящиеся в *нижней части* зоны проводимости. Однако в случае собственных полупроводников эти переходы связаны с необходимостью преодоления энергетического барьера $\Delta W_{зз}$, поэтому *количество перешедших электронов будет гораздо меньше*, чем в случае металлов (т.е. при отсутствии энергетического интервала $\Delta W_{зз}$).

В результате перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости полупроводника на зонной диаграмме последнего образуется *две частично заполненные энергетические зоны* (в определенной мере аналогичные рассмотренному выше случаю металлов). В обеих этих частично заполненных энергетических зонах носителями заряда являются электроны, однако ввиду разной подвижности носителей заряда (в зоне проводимости она больше) механизмы проводимости в этих зонах получили различное название: электронный (в зоне проводимости) и дырочный (в валентной зоне). Последним отмечается тот факт, что концентрация носителей заряда соизмерима с концентрацией пустых мест (дырок) на энергетических уровнях валентной зоны. Представляется очевидным, что в собственных полупроводниках концентрации электронов в зоне проводимости n_i и дырок в валентной зоне p_i одинаковы (с учетом фактора их происхождения):

$$n_i = p_i, \quad (2.63)$$

где i – индекс, обозначающий, что рассматривается случай собственных полупроводников.

В собственных полупроводниках для энергетических уровней зоны проводимости, как правило, выполняется условие $(W - \mu) \gg kT$ ($\mu = W_F$), что приводит к снятию вырождения по распределению микрочастиц по энергиям (см. выражение (2.46)). Таким образом, электронный газ, находящийся в зоне проводимости, можно считать невырожденным и в этой связи использовать (ввиду устранения фактора вырожденности ансамбля микрочастиц) статистику Максвелла-Больцмана. С учетом этого обстоятельства для концентрации электронов n_i (в зоне проводимости) и дырок p_i (в валентной зоне) имеем [4]

$$n_i = p_i = 2 \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot k \cdot T \cdot \sqrt{m_n \cdot m_p}}{h^3} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_i}{2 \cdot k \cdot T}}, \quad (2.64)$$

где m_n и m_p – эффективная масса соответственно для электрона (в зоне проводимости) и дырки (в валентной зоне); W_i – ширина запрещенной зоны собственного полупроводника.

При выводе выражения (2.64) использовано то обстоятельство, что температурное смещение уровня Ферми столь незначительно, что им можно пренебречь и считать $W_F \approx -(W_i/2)$. Для большинства собственных полупроводников это допущение является правомерным. Однако следует иметь в виду, что для полупроводников с малой шириной запрещенной зоны этим смещением нельзя пренебрегать уже при комнатной температуре (например, у полупроводника типа InSb, у которого $W_i = 0.17$ эВ).

Поскольку в собственном полупроводнике имеется два типа носителей заряда (электроны и дырки), то выражение для электропроводности (2.1) этого типа конструкционных материалов приобретает вид

$$\sigma_i = q \cdot n_i \cdot \mu_n + q \cdot n_p \cdot \mu_p = q \cdot n_i \cdot (\mu_n + \mu_p), \quad (2.65)$$

где q – заряд электрона (дырки); μ_n и μ_p – подвижность соответственно для электрона (в зоне проводимости) и дырки (в валентной зоне).

С учетом выражений (2.64) и (2.65) в первом приближении можно считать, что температурная зависимость электропроводности собственных полупроводников определяется выражением

$$\sigma_i = \sigma_0 \cdot e^{-\frac{W_i}{2kT}}, \quad (2.66)$$

где σ_0 – постоянная, равная электропроводности собственного полупроводника при температуре $T \rightarrow \infty$.

Температурную зависимость электропроводности собственных полупроводников удобно представлять в полулогарифмических координатах вида $\lg \sigma_i = \varphi(1/T)$:

$$\ln \sigma_i = \ln \sigma_0 - \left(\frac{W_i}{2 \cdot k} \right) \cdot \frac{1}{T}. \quad (2.67)$$

Типичный вид температурной зависимости собственных полупроводников представлен на рис. 2.14.

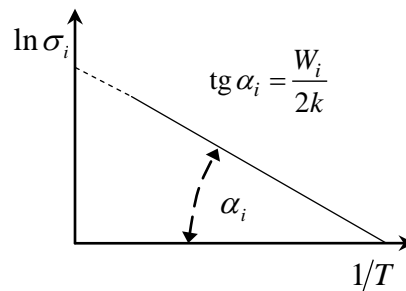


Рис.2.14. Температурная зависимость собственных полупроводников

С помощью экспериментальной зависимости, отображенной на рис. 2.14, можно определить основные характеристические параметры электропроводности собственных полупроводников W_i и σ_0 .

Из выражения (2.66) следует, что концентрация носителей заряда (выражение (2.64)), а следовательно, и электропроводность (выражение (2.67)) собственных полупроводников должны существенно зависеть от ширины запрещенной зоны полупроводника W_i и температуры T (табл. 2.11).

Т а б л и ц а 2.11. *Зависимость концентрации носителей заряда от параметров W_i и T*

W_i , эВ	Концентрация носителей заряда n_i , см ⁻³		
	0.5	1.0	1.5
$T = 100$ К	$8.7 \cdot 10^{-4}$	0	0
$T = 300$ К	$2.1 \cdot 10^{14}$	$4.2 \cdot 10^5$	$8.7 \cdot 10^{-4}$
$T = 600$ К	$4.5 \cdot 10^{18}$	$2.1 \cdot 10^{14}$	$9.4 \cdot 10^9$

Данные табл. 2.11 позволяют оценить масштабный фактор в изменении концентрации носителей заряда (и электропроводности) при вариациях ширины запрещенной зоны собственного полупроводника (W_i) и его температуры (T). В частности, следует отметить тот немаловажный факт, что при изменении ширины запрещенной зоны собственного полупроводника или его температуры всего в два раза концентрация носителей заряда может измениться на несколько порядков.

В примесных полупроводниках *донорного типа* зонная энергетическая диаграмма имеет в запрещенной зоне дополнительную узкую донорную зону, изначально заполненную электронами. Протяженность этой дополнительной донорной зоны ΔW_δ можно оценить согласно выражению

$$\Delta W_\delta \approx N_\delta \cdot \Delta W_1, \quad (2.68)$$

где N_δ – концентрация донорной примеси в собственном полупроводнике; ΔW_1 – среднее расстояние между соседними энергетическими уровнями в пределах зоны. Полагая $N_\delta = 10^{17}$ см⁻³ (достаточно высокий уровень легирования) и $\Delta W_1 = 10^{-23}$ эВ, получаем $\Delta W_\delta = 10^{-5}$ эВ. Отсюда следует, что протяженность ΔW_δ в 10^5 раз меньше, чем протяженность зоны проводимости или валентной зоны, которые равны по порядку величины 1 эВ. Ввиду незначительной протяженности донорной зоны по энергетической шкале ее принято называть *донорным уровнем*. Другой характерной и важной для практических приложений особенностью донорного уровня является то обстоятельство, что он, как правило, располагается в *непосредственной близости от дна зоны проводимости* (на расстоянии порядка 0.05 – 0.1 эВ).

Дальнейшее рассмотрение температурной зависимости электропроводности донорных полупроводников проводится на основе схематического отображения зонной энергетической диаграммы, представленной на рис. 2.15.

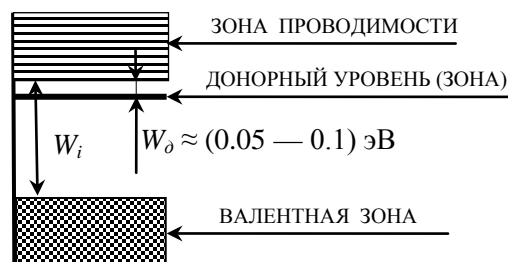


Рис.2.15. Энергетическая диаграмма донорного полупроводника

В области низких температур, т.е. при выполнении условия $W_i > kT$, переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости можно пренебречь (ввиду того, что $W_i \approx 1$ эВ $\gg W_\delta$) и считать, что все электроны в зоне проводимости появились там благодаря переходам электронов с донорного уровня. В этой связи в первом приближении

можно принять, что равновесная концентрация электронов в зоне проводимости, попавших туда с донорного уровня, определяется выражением (сопоставить с выражением (2.64))

$$n_{\partial} = N_{\partial} \cdot e^{-\frac{W_{\partial}}{2 \cdot k \cdot T}}. \quad (2.69)$$

В более корректной постановке равновесная концентрация электронов в зоне проводимости определяется более сложным выражением [5]

$$n_{\partial} = (N_{\partial} \cdot N_c)^{1/2} \cdot e^{-\frac{W_{\partial}}{2 \cdot k \cdot T}} = \sqrt{2 \cdot N_{\partial}} \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{3/4} \cdot e^{-\frac{W_{\partial}}{2 \cdot k \cdot T}}, \quad (2.69a)$$

где N_c – эффективное число энергетических состояний в зоне проводимости собственного полупроводника.

В табл. 2.12 представлена зависимость равновесной относительной концентрации электронов в зоне проводимости $n_{\partial} / N_{\partial}$ от фактора $W_{\partial} / (kT)$, полученная на основании выражения (2.69).

Т а б л и ц а 2.12. Зависимость $n_{\partial} / N_{\partial}$ от параметра $W_{\partial} / (kT)$

$W_{\partial} / (kT)$	15	10	5	4	3	2	1
$n_{\partial} / N_{\partial}$	$5.5 \cdot 10^{-4}$	$6.7 \cdot 10^{-3}$	0.082	0.135	0.223	0.368	0.607

Из данных табл. 2.12 следует, что даже при относительно малых значениях температуры в зону проводимости полупроводника переходит с донорного уровня значительное количество электронов от числа имеющихся на данном уровне.

В области высоких температур переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости в общем случае пренебрегать нельзя. Действительно, по мере повышения температуры подавляющее большинство электронов донорного уровня переходит в зону проводимости и наблюдается эффект истощения примесного уровня, с точки зрения его роли в качестве поставщика электронов. В этом случае концентрация электронов в зоне проводимости, обусловленная наличием донорной примеси, достигнет своего предельного значения:

$$n_{\partial} = N_{\partial}. \quad (2.70)$$

При более высоких температурах начинается процесс перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости. Поскольку концентрация электронов в валентной зоне гораздо выше концентрации донорной примеси, вклад этих электронов в общую концентрацию носителей заряда полупроводника может быть существенным. С учетом этого дополнительного обстоятельства для концентрации носителей заряда в полупроводниках донорного типа имеем выражение вида

$$n = N_{\partial} + n_i = N_{\partial} + 2 \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot k \cdot T \cdot \sqrt{m_n \cdot m_p}}{h^3} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_i}{2 \cdot k \cdot T}}. \quad (2.71)$$

С учетом всех вышеизложенных моментов можно построить обобщенную температурную зависимость концентрации носителей заряда в полупроводниках донорного типа в виде, представленном на рис. 2.16.

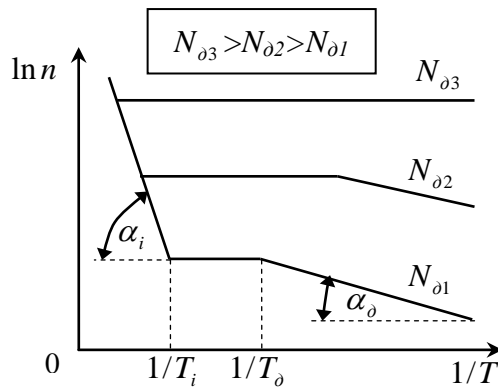


Рис. 2.16. Температурная зависимость концентрации носителей заряда в полупроводниках донорного типа

Для пояснения температурной зависимости концентрации носителей заряда в донорном полупроводнике уместно привести следующие комментарии:

- область, расположенная правее точки $1/T_d$ по оси абсцисс, характеризует вклад в концентрацию носителей заряда от донорного уровня (см. зависимость с концентрацией донорной примеси N_{d1});
- область, расположенная левее точки $1/T_i$ по оси абсцисс, характеризует вклад в концентрацию носителей заряда от валентной зоны полупроводника (см. зависимость с концентрацией донорной примеси N_{d1});
- горизонтальная прямая (см. зависимость с концентрацией донорной примеси N_{d1}), расположенная между точками $1/T_i$ и $1/T_d$ по оси абсцисс, свидетельствует о наличии фактора истощения донорной примеси и недостаточном уровне нагрева полупроводника (для осуществления энергетической активизации процесса перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости);
- углы наклона α_i и α_d прямолинейных участков зависимости характеризуют соответственно энергетические параметры W_i и W_d , определяемые согласно выражениям:

$$W_i = 2 \cdot k \cdot \operatorname{tg} \alpha_i, \quad (2.72a)$$

$$W_d = 2 \cdot k \cdot \operatorname{tg} \alpha_d; \quad (2.72б)$$

- температура перехода T_i механизма электропроводности от примесной к собственной проводимости тем выше, чем шире запрещенная зона полупроводника W_i и больше концентрация легирующей примеси N_d в собственном полупроводнике.

В примесных полупроводниках акцепторного типа зонная энергетическая диаграмма имеет в запрещенной зоне дополнительную узкую акцепторную зону (ее также принято называть «уровнем» – ввиду малой протяженности по энергетической шкале), изначально пустую, т.е. в ней отсутствуют электроны. Характерной и важной для практических приложений особенностью акцепторного уровня является то обстоятельство, что он, как правило, располагается в непосредственной близости от потолка валентной зоны (на расстоянии порядка 0.05 – 0.1 эВ).

Относительно этого случая легирования собственных полупроводников можно повторить все выкладки, изложенные для донорных полупроводников, с тем принципиальным отличием, что ситуация частично занятой энергетической зоны образуется в валентной зоне, в результате перехода части электронов валентной зоны на акцепторный уровень.

В области низких температур концентрация носителей заряда (дырок) p в валентной зоне полупроводника в первом приближении равна

$$p = N_a \cdot e^{-\frac{W_a}{kT}}, \quad (2.73)$$

где W_a – расстояние от потолка валентной зоны до акцепторного уровня; N_a – концентрация акцепторной примеси в полупроводнике.

В области высоких температур концентрация носителей заряда (дырок) p в валентной зоне полупроводника равна

$$p = N_a + n_i = N_a + 2 \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot k \cdot T \cdot \sqrt{m_n \cdot m_p}}{h^3} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_i}{2 \cdot kT}}. \quad (2.74)$$

Температурная зависимость концентрации носителей заряда (дырок) p в валентной зоне полупроводника отображается графиком, аналогичным графику, представленному на рис. 2.16 (с заменой соответствующих индексов: « n » на « p » и « d » на « a »). Более подробное рассмотрение вопросов электропроводности полупроводниковых материалов донорного и акцепторного типов в статических и динамических электрических полях представлено в литературных источниках [4,5].

2.2. Элементы теории электропроводности наноразмерных структур

2.2.1. Общие ограничения применимости статистических методов анализа для случая наноразмерных структур

а) Статистические флуктуации характеристических параметров макро- и микросистем

В вышеизложенных материалах широко использовались статистические методы анализа, свойственные макроскопическим системам, содержащим *чрезвычайно большое количество* микрочастиц. Из общих принципов статистической физики с неизбежностью вытекает возможность проявления в системе флуктуаций, в результате которых система может самопроизвольно перейти из наиболее вероятного равновесного состояния (с *максимальной энтропией*) в одно из менее вероятных состояний. При этом ход этого флуктуационного процесса будет обратным тому, при котором происходит возрастание энтропии системы.

На практике явление флуктуации параметров системы может наблюдаться в явном виде в двух полярных случаях:

- когда *размеры системы очень малы* (фактор, характерный для рассматриваемых наноразмерных структур); в этом случае явление флуктуации параметров будет наблюдаться во времени часто и масштаб флуктуации будет относительно велик;
- *размеры системы очень велики* (макроскопические системы), но фиксируются чрезвычайно малые вариации параметров системы (например: шумовая составляющая информационных сигналов в современных электронных устройствах).

Пусть имеется *замкнутая система*, находящаяся в состоянии статистического равновесия и имеющая в этом состоянии равновесную энтропию S_0 . Система считается замкнутой, если она не обменивается с окружающей средой энергией и веществом (в более широкой трактовке сюда же можно отнести и обмен информацией). Будем считать, что текущее состояние системы может быть охарактеризовано с помощью некоторого *внутреннего параметра* δ , который в состоянии термодинамического равновесия принимает значение δ_0 . В этом случае энтропия системы будет

некоторой функцией параметра δ и можно принять $S = S(\delta)$. Вероятность того, что рассматриваемая замкнутая система находится в состоянии, характеризуемом значением параметра δ , находящимся в интервале значений $\{\delta - (\delta + \Delta\delta)\}$, можно определить на основании формулы Больцмана [6]:

$$d\omega = C \cdot e^{\frac{S(\delta) - S(\delta_0)}{k \cdot T}} \cdot d\delta, \quad (2.75)$$

где C – постоянная величина, удовлетворяющая условию нормировки вероятностей состояния системы: $\oint d\omega = 1$. Поскольку представление о полной замкнутости системы является весьма сильной абстракцией реальных систем, этот случай представляет довольно ограниченный практический интерес.

Более реалистичным представляется случай квазизамкнутой системы, являющейся некоторой малой подсистемой, погруженной в большой термостат с постоянной температурой. Принято считать, что флуктуации происходят только в рассматриваемой подсистеме (учитывая ее малый объем относительно термостата) и не затрагивают сам термостат. Ввиду имеющего место обмена энергией и микрочастицами между подсистемой и термостатом состояние подсистемы будет функцией некоторого внешнего макроскопического параметра ζ . Предполагается, что изменение (флуктуация) макроскопического параметра ζ происходит столь медленно, что подсистема постоянно находится в состоянии текущего статистического равновесия. Поскольку подсистема вместе с термостатом составляют (по определению) рассмотренную выше замкнутую систему, то к ним в целом применимо выражение (2.75). Однако в этом случае суммарное изменение энтропии рассматриваемой объединенной системы можно представить в виде

$$\Delta S = \Delta S_0 + \Delta S', \quad (2.76)$$

где ΔS_0 и $\Delta S'$ – изменение термодинамической энтропии соответственно у термостата и подсистемы.

Опуская нетривиальные математические преобразования, для статистического распределения флуктуации макроскопического параметра ζ имеем [6]

$$d\omega = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \Delta^2}} \cdot e^{-\frac{(\zeta - \zeta_0)^2}{2 \cdot \Delta^2}} \cdot d\zeta, \quad (2.77)$$

где Δ^2 – величина среднеквадратического отклонения внешнего параметра ζ , оказывающего влияние на состояние подсистемы и определяемого согласно выражению

$$\Delta^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (\zeta - \zeta_0)^2 \cdot e^{-\frac{W(\zeta_0)(\zeta - \zeta_0)^2}{2 \cdot k \cdot T}} \cdot d\zeta}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{W(\zeta_0)(\zeta - \zeta_0)^2}{2 \cdot k \cdot T}} \cdot d\zeta}, \quad (2.78)$$

где $W(\zeta_0)$ – потенциальная энергия при перемещении системы в некотором воображаемом (а в ряде случаев реальном) поле сил.

Из выражения (2.77) следует, что вероятность флуктуации резко уменьшается с ростом ее абсолютной величины и уменьшением параметра Δ^2 . Последняя величина пропорциональна концентрации микрочастиц и абсолютной температуре объединенной системы «термостат – подсистема». В этой связи можно ожидать, что интенсивность флуктуационных процессов будет уменьшаться с уменьшением температуры системы. Это важное обстоятельство составляет

физическую основу большинства практических методов подавления шумовой составляющей информационных сигналов в современных устройствах электронной техники.

Важность параметра Δ^2 требует более пристального внимания к нему с позиции ожидаемых флуктуаций характеристических (в макроскопических системах – термодинамических, таких как концентрация, давление, химический потенциал и т.д.) параметров наноразмерных структур. Действительно, в этих структурах, физические объемы которых чрезвычайно малы, содержится весьма *малое количество атомов*, реализующих их функциональное назначение. Поэтому незначительные изменения в наноразмерных структурах количества и типа микрочастиц или их местоположения, происшедшие в результате проявления факторов флуктуационной природы, приводит к значительному нарушению исходного атомно-молекулярного порядка, необходимого для обеспечения требуемого функционального назначения (качества) изделия.

Здесь уместно отметить, что ключевой особенностью статистических закономерностей является их вероятностный характер, позволяющий предсказать степень ожидания (вероятность) наступления определенного события из совокупности возможных событий, составляющих полную группу. В этой связи достоверность вероятностных прогнозов будет тем выше, чем большее количество микрочастиц составляет статистический ансамбль. Для системы, состоящей из N микрочастиц, относительное отклонение наблюдаемого физического параметра A , являющегося функцией N , определяется выражением [6]

$$\frac{\Delta A}{A_0} = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (2.79)$$

где ΔA – среднеквадратическое отклонение от математического ожидания A_0 .

В табл. 2.13 приведена зависимость $\Delta A/A_0 = \varphi(N)$ от числа индивидуальных атомов, входящих в состав физической системы. Эта зависимость представляет практический интерес с точки зрения возможности использования и установления границ применимости статистических методов при проведении анализа наноразмерных структур.

Согласно данным табл. 2.13 видно, что с увеличением числа микрочастиц физические параметры испытывают все меньшие относительные отклонения, и таким образом при очень больших значениях N эти параметры могут считаться постоянными величинами во времени.

Т а б л и ц а 2.13. Зависимость $\Delta A/A_0 = \varphi(N)$

Параметр	Физический объем системы, нм ³ (по порядку величины)							
	0.03	0.09	1.0	10	100	10 ³	10 ⁴	10 ⁹ (1 мкм ³)
N	10	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁹	10 ¹²
$\Delta A/A_0$	0.32	0.10	0.03	0.01	0.003	0.001	3·10 ⁻⁵	10 ⁻⁶

К примеру, оценка погрешности (обусловленной факторами флуктуационной природы) при определении концентрации газовых молекул в стандартной атмосфере (при нормальных условиях $N \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$) приводит к величине порядка 10⁻¹¹ %. Измерение этой величины произвести практически невозможно, поскольку этот показатель намного превышает метрологические возможности современных измерительных средств. В этой связи можно утверждать, что для *макроскопических систем результаты статистического анализа имеют практически достоверный характер*. Однако эта ситуация изменяется радикальным образом, если наноразмерная структура содержит весьма незначительное количество частиц (см. столбцы со значениями N , заключенными в интервале величин 10 – 10⁴ микрочастиц).

В литературных источниках довольно часто встречаются сообщения о попытках создания наноразмерных конструкций, состоящих всего из 10 – 100 атомов (в ряде случаев речь идет об изделиях, состоящих всего из одного атома!). В свете данных табл. 2.13, успешность реализации функционального назначения (качества) подобного рода устройств представляется довольно проблематичной, если речь идет о температурах эксплуатации этих изделий, превышающих несколько градусов Кельвина.

б) Статистическая энтропия наноразмерных структур

Характерной особенностью развития технических изделий как на современном этапе их создания, так и в историческом разрезе, является повышение их сложности в структурном и материальном плане. Эта сложность, в первую очередь, ассоциируется в конструкторско-технологической практике с необходимостью использования все более упорядоченных, с атомно-молекулярной точки зрения, материальных сред.

В максимальной мере фактор упорядоченности материальных сред проявляется в изделиях современной электронной техники, для конструкционных материалов которых допустимый уровень примесных включений (в настоящее время) не превышает 10^{-4} % (подробнее этот вопрос рассмотрен в разд. 3). Следует также отметить, что характерный объем элементов конструкций современных электронных приборов приближается к значению $\Delta V = 10^{-3}$ мкм³ (в промышленной практике), из чего следует, что эти элементы содержат в своем составе не более $\Delta N = 10^9$ атомов. В опытно-конструкторских разработках, основанных на использовании традиционной планарной технологии, эти показатели соответственно равны $\Delta V = 10^{-6}$ мкм³; $\Delta N = 10^6$. В настоящее время на этапе становления находится революционно новая технология атомной сборки изделий наноразмерного масштаба, охватывающих широкую отраслевую направленность (электроника, химия, биология, робототехника и т.д.). В этих наноразмерных элементах конструкций и изделий количество индивидуальных атомов исчисляется значениями 10^2 – 10^4 . В этой связи представляется очевидным, что проблематика обеспечения порядка в пространственном расположении и избирательности атомов определенного типа при создании изделий приобретает исключительный интерес.

В свете вышеизложенных моментов следует отметить, что наиболее близко к представлениям о мере порядка в атомно-молекулярных средах подошла современная статистическая физика. Именно ее подходы позволили сформировать конструктивные представления, необходимые для введения в рассмотрение меры упорядоченности физических сред. В качестве такой меры упорядоченности материальных сред выступает статистическая энтропия физических систем (понятие энтропии ранее было сформировано в рамках равновесной термодинамики, но ввиду ее формального (феноменологического) характера и применимости исключительно к макроскопическим системам оно представляется малоприменимым для рассматриваемого круга вопросов).

Составить представление о физической сущности статистической энтропии можно на основе конкретного примера, в котором рассматривается достаточно простая физическая система – «идеальный газ». Пусть имеется замкнутый объем газа V с общим количеством одинаковых микрочастиц N , который перегороден проницаемой для микрочастиц мембраной на два одинаковых объема $V/2$. В принципе, эти два объема могут поделить между собой общее количество микрочастиц в любой пропорции (в том числе теоретически допустимо, но маловероятно, что все микрочастицы N соберутся в одном из указанных объемов).

Для определенности обозначим условно эти объемы соответственно индексами A и B и определим вероятность P_n события, состоящего в том, что n микрочастиц из N будет обнаружено в объеме A и $(N - n)$ микрочастиц – в объеме B . Общее количество вариантов

$\omega(n, N - n)$, с помощью которых можно реализовать ситуацию $A(n)$ и $B(N - n)$, определяется выражением [7]

$$\omega(n, N - n) = \frac{N!}{n!(N - n)!} \quad (2.80)$$

В табл. 2.14 представлены значения функции $\omega(n, N - n)$, рассчитанные с помощью выражения (2.80) для случая $N = 20$.

Таблица 2.14. Значения функции $\omega(n, N - n)$, вероятности макросостояний P_i и частной энтропии макросостояний S_i для случая $N = 20$

(i) – № макросостояния системы	Тип макросостояния системы		Количество вариантов $\omega_i(n, N - n)$	Вероятность P_i	Энтропия макросост. S_i , Дж/К
	$A(n)$	$B(N - n)$			
1	0	20	1	$\approx 10^{-6}$	0
2	1	19	20	$\approx 2 \cdot 10^{-5}$	$4.1 \cdot 10^{-23}$
3	2	18	190	$\approx 2 \cdot 10^{-4}$	$7.2 \cdot 10^{-23}$
4	3	17	$1.14 \cdot 10^3$	0.001	$9.7 \cdot 10^{-23}$
5	4	16	$4.85 \cdot 10^3$	0.005	$1.2 \cdot 10^{-22}$
6	5	15	$1.55 \cdot 10^4$	0.015	$1.3 \cdot 10^{-22}$
7	6	14	$3.88 \cdot 10^4$	0.037	$1.5 \cdot 10^{-22}$
8	7	13	$7.75 \cdot 10^4$	0.074	$1.6 \cdot 10^{-22}$
9	8	12	$1.26 \cdot 10^5$	0.120	$1.7 \cdot 10^{-22}$
10	9	11	$1.68 \cdot 10^5$	0.160	$1.8 \cdot 10^{-22}$
«11»	10	10	$1.85 \cdot 10^5$	0.176	$1.9 \cdot 10^{-22}$
Далее результаты повторяются в убывающем порядке					
-	-	-	$\sum = 1$	$\sum = 1.0$	$S = 2.0 \cdot 10^{-22}$

Для дальнейшего рассмотрения уместно привести ряд комментариев относительно отдельных позиций данных табл. 2.14:

- в первом столбце перечислены различные *макросостояния системы* (обозначенные индексом i), характеристика которых представлена в объединенном столбце № 2;
- в третьем столбце приведено полное количество *микросостояний системы* (т.е. произведение количества различных вариантов размещения n микрочастиц в объеме A на количество вариантов размещения $(N - n)$ микрочастиц в объеме B), реализующих определенное макросостояние системы $i^{\text{го}}$ типа;
- в четвертом столбце приведена *вероятность реализации макросостояния системы $i^{\text{го}}$ типа* (т.е. размещения n микрочастиц в объеме A и размещения $(N - n)$ микрочастиц в объеме B), определяемая согласно выражению

$$P_i = \frac{\omega_i(n, N - n)}{\sum_i \omega_i(n, N - n)}; \quad (2.81)$$

- в пятом столбце приведена *частная статистическая энтропия макросостояния $i^{\text{го}}$ типа* (характеризующая меру неопределенности обнаружения макросостояния « $A(n) - B(N - n)$ »), определяемая зависимостью

$$S_i = k \cdot \ln \omega_i(n, N - n), \quad (2.82)$$

где k – постоянная Больцмана;

- в нижней строке представлены сводные данные по всем рассматриваемым статистическим параметрам макроскопической системы, и в частности, *полная статистическая энтропия* S макроскопической системы в целом (от суммарного количества вариантов размещения не взаимодействующих между собой микрочастиц, с учетом всех возможных частных реализаций при заполнении объемов $A(n)$ и $B(N-n)$, с общим количеством микрочастиц N):

$$S_i = k \cdot \ln \sum_i \omega_i(n, N-n); \quad (2.83)$$

- вероятность реализации макросостояний с номерами $i = 1, 2, 3, 19, 20, 21$ исчезающе мала уже при столь незначительных значениях $N = 20$, и эта тенденция будет неизмеримо усугубляться с возрастанием количества микрочастиц в системе N ;

- суммарная вероятность реализации ряда макросостояний, расположенных в центральной части таблицы с номерами $i = 9, 10, 11$ (равновесное), 12, 13, составляет 0.74, что свидетельствует о том обстоятельстве, что рассматриваемая макроскопическая система, как правило, чаще всего будет находиться в одном из макросостояний из этой указанной группы.

Следует отметить, что большие значения вероятностей обнаружения центральных макросостояний имеют место не потому, что природа «любит» эти равновесные макросостояния по каким-то дополнительным признакам, а по той простой причине, что эти макросостояния реализуются с помощью *огромного количества микросостояний* (вариантов). При этом каждое микросостояние, независимо от его принадлежности к каждому конкретному макросостоянию, имеет одинаковую вероятность P_{micro} своего проявления. Для рассмотренного примера эта вероятность проявления индивидуального микросостояния P_{micro} имеет значение весьма близкое к нулю:

$$P_{micro} = \frac{1}{\sum_i \omega_i(n, N-n)} \approx 10^{-6}. \quad (2.84)$$

В реальной физико-технической практике оперируют с минимальным объемом физических сред порядка 10^{-9} мкм³ (содержащих в своем составе не 20 атомов, как это было в рассмотренном примере, а $N = 10^3$ атомов), и в этом случае, согласно выражениям (2.80) и (2.84), вероятность проявления индивидуального микросостояния P_{micro} можно считать практически равной нулю.

Довольно близкие значения вероятностей появления макросостояний с номерами № 9, 10, 11 (близких к равновесному состоянию) обусловлены достаточно малым количеством атомов в системе. С ростом количества атомов в системе это различие будет проявляться в более отчетливой форме. Это обстоятельство представлено в табл. 2.15, в которой приведены значения отношения вероятности равновесного макросостояния $P_{равнов} = P\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right)$ (количество атомов в ящиках A и B одинаково) к вероятности макросостояния $P_{10\%} = P\left[\left(\frac{N}{2} - 0.1 \cdot \frac{N}{2}\right), \left(\frac{N}{2} + 0.1 \cdot \frac{N}{2}\right)\right]$ (т.е. при 10% отклонении от равновесного макросостояния) при различных значениях общего количества атомов в системе N .

Из данных табл. 2.15 следует, что при значениях параметра $N > 1000$ можно считать, что вероятность появления равновесного макросостояния $P_{равнов} = P\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right)$ становится практически равной единице, а появление остальных макросостояний становится весьма маловероятным событием.

Т а б л и ц а 2.15. Зависимость отношения $\frac{P_{равнов}}{P_{10\%}}$ от значения параметра N

N	20	100	200	500	1000
-----	----	-----	-----	-----	------

$P_{\text{равнов}} / P_{10\%}$	1.10	1.64	2.71	12.2	149
--------------------------------	------	------	------	------	-----

Интересно применить результаты, представленные в табл. 2.14 и 2.15, к процессу создания технических изделий (конструкций). Характерной особенностью этих изделий является ярко выраженный неравновесный характер физических сред, используемых для обеспечения функционального качества изделия.

Например, в диодной структуре, основанной на базе резкого ($p-n$) перехода, с одной стороны от границы раздела находится донорная примесь, а с другой – акцепторная примесь, что свидетельствует о ярко выраженном неравновесном состоянии структуры в целом. Этому неравновесному состоянию структуры, обеспечивающему эффект выпрямления электрических сигналов, можно, с некоторой долей условности, поставить в соответствие макросостояние №1 табл. 2.14. Представляется очевидным, что ожидать от «природы» спонтанного возникновения указанной диодной структуры, реализуемой с помощью всего лишь одного микросостояния, не представляется возможным ввиду чрезвычайно малой вероятности ее проявления. Именно по этой причине в производственно-технической практике приходится использовать различного рода технологии по преобразованию рабочих сред из равновесного состояния, характерного для сырьевых ресурсов, в требуемое неравновесное состояние, характерное для изделия (подробнее этот вопрос с учетом аспектов производственного характера рассмотрен в разд. 3).

В процессе эксплуатации изделия указанная начальная неравновесность состояния физических сред изделия является причиной активизации процессов диффузионного перехода примесей в соседние области, что в итоге приводит к перемешиванию донорной и акцепторной примесей. Конечным итогом этого процесса перемешивания примеси является образование однородной (равновесной) рабочей среды (с полной потерей функционального назначения диодной структуры), которой можно поставить в соответствие равновесное макросостояние позиции №11 табл. 2.14, с учетом фактора головизны этого равновесного состояния, зависимость вероятности которого от количества микрочастиц в системе представлена в табл. 2.15.

2.2.2. Носители заряда для случая наноразмерных структур кристаллического типа

а) Специфика формализма зонных энергетических диаграмм для случая наноразмерных структур

В разд. 2.1.3 (пункт а) рассмотрен механизм изменения скорости электрона при его движении в кристаллических структурах электронного типа под воздействием внешнего электрического поля. Показано, что ключевым моментом при реализации векторизованной формы движения (а следовательно, и образования электрического тока), обеспечивающим возможность изменения скорости электрона под воздействием электрического поля, является фактор *частичного заполнения* электронами разрешенной энергетической зоны (проводимости и валентной). Указанное частичное заполнение энергетических зон позволяет практически непрерывное изменение энергии электрона при его нахождении в пределах рассматриваемой энергетической зоны (с учетом того обстоятельства, что расстояние между соседними энергетическими уровнями в зоне имеет очень малую величину и составляет по порядку 10^{-23} эВ). Именно в этой связи можно утверждать о квазинепрерывном характере динамики векторизованного движения электрона проводимости в веществе.

Для макроскопических кристаллических структур характерным фактором является чрезвычайно большое количество энергетических состояний в разрешенных энергетических зонах, а следовательно, и значительная их протяженность по энергетической шкале. В этой связи частичное заполнение энергетических зон электронами оставляет определенную возможность

(благодаря наличию большого количества свободных энергетических уровней) для изменения энергетических состояний указанных электронов под воздействием внешнего электрического поля, что и приводит в конечном счете, к реализации векторизованной формы движения электронов (т.е. электрического тока).

Распространим рассмотренное выше модельное представление зонного механизма электронной проводимости на случай наноразмерных структур кристаллического типа. Сразу же необходимо отметить, что дискретный (а не квазинепрерывный) характер распределения энергетических уровней, свойственный наноструктурам с ограничениями размерного характера, не позволяет в полной мере воспользоваться формализмом зонных энергетических диаграмм, свойственным макроскопическим структурам. Поэтому речь может идти только о ряде качественных аспектов зонных диаграмм наноструктур, представляющих практический интерес при рассмотрении вопроса электрической проводимости в наноразмерных кристаллических структурах.

В упрощенном (примитивном) виде зонное энергетическое представление возможных состояний наноразмерной структуры отображено на рис. 2.17 (на примере наноструктуры типа «квантовой пленки» – (2D)).

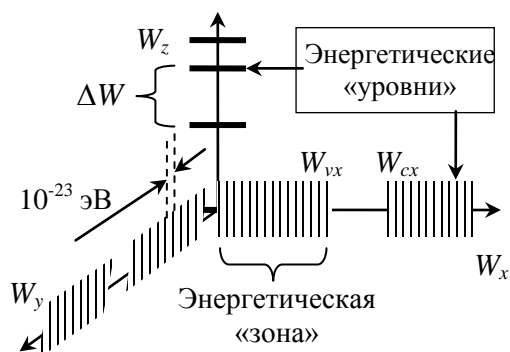


Рис. 2.17. Схематическое «координатное» представление зонной энергетической диаграммы наноразмерной кристаллической структуры

На рисунке каждому координатному направлению поставлен в соответствие фрагмент зонной энергетической диаграммы, ответственный за реализацию векторизованной формы движения по данному координатному направлению. Количество энергетических уровней, содержащихся в каждой энергетической «зоне», соизмеримо с количеством атомов в линейной цепочке атомов по рассматриваемому координатному направлению. Жирными линиями условно отражены узкие зоны в координатном направлении с пространственным ограничением наноразмерной кристаллической структуры, характерным для квантовой точки.

Согласно схематическому представлению рис. 2.17, элементарный процесс векторизованного изменения скорости носителя заряда, сопровождаемый переходами электрона (под воздействием внешнего электрического поля) на соседние энергетические уровни, имеет:

- практически *безактивационный* характер ($W_{axy} \approx 10^{-22}$ эВ, где W_{axy} – энергия активации элементарного акта энергетического перехода на зонной диаграмме) для координатных направлений x и y ;
- ярко выраженный *активационный* характер при движении носителя заряда вдоль координатного направления z .

(Под понятием «*активационный*» подразумевается такой механизм протекания элементарного физико-химического процесса, при котором успешная реализация этого процесса становится возможной лишь в том случае, если энергия микрочастиц превышает некоторое пороговое

значение (потенциальный барьер) W_{axy} , называемое *энергией активации* рассматриваемого физико-химического процесса.)

Интересно оценить масштабы значений вероятности реализации энергетических переходов, стимулированных влиянием внешнего электрического поля, для рассмотренных выше частных случаев. Полагая, что электронный газ в энергетических зонах является невырожденным (фактор частичного заполнения зон), воспользуемся классической статистикой Максвелла-Больцмана, согласно которой вероятности переходов (а следовательно, и изменения скорости носителя заряда) P_E можно в первом приближении оценить с помощью выражения

$$P_E = \exp\left(-\frac{W_a - q \cdot \lambda \cdot E}{k \cdot T}\right), \quad (2.85)$$

где λ – длина свободного пробега электрона в проводящей среде; q – электрический заряд носителя; E – напряженность электрического поля.

В выражении (2.85) находит свое отражение тот томент, что энергетическая составляющая от движения электрона в электрическом поле способствует снижению (преодолению) потенциального барьера W_a , стоящего на пути процесса изменения энергетического состояния электрона в рамках зонной диаграммы.

Для случаев координатных направлений x и y (т.е. в условиях полного отсутствия ограничений размерного характера) вероятность перехода $P_{Ex} = P_{Ey}$, ввиду чрезвычайной малости параметра W_{axy} (соответственно нет никакой необходимости принимать меры для уменьшения энергии активации W_{axy}), составит (при $T = 300$ К):

$$P_{Ex} = P_{Ey} \approx \exp\left(-\frac{W_{axy}}{k \cdot T}\right) = \exp\left(-\frac{10^{-22} \text{ эВ}}{0.025 \text{ эВ}}\right) \approx 1. \quad (2.86)$$

Именно исходя из полученного выше результата, можно утверждать о безактивационном характере механизма электропроводности (переходов) для случая координатных направлений, не имеющих ограничений размерного характера.

Проведем аналогичную оценку вероятностей переходов по координатному направлению z , имеющему ограничения размерного характера. В этом случае *значительные* изменения скорости могут иметь место при реализации перехода на соседний энергетический уровень, отстоящий от исходного уровня на значительном (по сравнению с W_{axy}) расстоянии ΔW (см. рис. 2.17). Вероятность подобного перехода P_{Ez} в соответствии с выражением (2.86) определяется в виде

$$P_{Ez} = \exp\left(-\frac{\Delta W - q \cdot \lambda \cdot E}{k \cdot T}\right). \quad (2.87)$$

В табл. 2.16 представлена зависимость вероятности перехода P_{Ez} от величины энергетического интервала ΔW и напряженности электрического поля E при длине свободного пробега микрочастиц $\lambda = 10^{-8}$ м (типичное значение для твердотельных кристаллических структур).

Т а б л и ц а 2.16. *Зависимость вероятности перехода P_{Ez} от величины энергетического интервала ΔW и напряженности электрического поля E ($\lambda = 10^{-8}$ м ; $T = 300$ К)*

ΔW , эВ	Напряженность электрического поля, В/м					
	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7	10^8
0.01	0.671	0.673	0.698	1.0	1.0	1.0
0.05	0.135	0.136	0.141	0.202	1.0	1.0
0.10	0.018	0.018	0.019	0.027	1.0	1.0
0.50	$2.0 \cdot 10^{-9}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	$2.1 \cdot 10^{-9}$	$3.1 \cdot 10^{-9}$	$1.1 \cdot 10^{-7}$	1.0

Приведенные в табл. 2.16 данные свидетельствуют о том, что в направлениях с размерными ограничениями кристаллической структуры реализация векторизованной формы движения носителя заряда (по рассматриваемому прямому межзонному механизму процесса электропроводности):

- представляется достаточно маловероятным событием при напряженностях внешнего электрического поля $E < 10^5 - 10^6$ В/м (электрические режимы, характерные для обеспечения функционирования назначения современных полупроводниковых структур в устройствах микроэлектроники) и при значениях энергетического интервала между соседними уровнями $\Delta W > 0.1$ эВ;

- представляется весьма вероятной при напряженностях внешнего электрического поля $E > 10^6 - 10^7$ В/м (значение, сопоставимое с показателями электрической пробивной прочности для широкого круга конструкционных диэлектрических материалов).

Обращение к межзонному механизму процесса электропроводности обусловлено тем обстоятельством, что в направлениях с размерными ограничениями кристаллической структуры ширина энергетических зон крайне мала (этот факт условно отображен на рис. 2.17 – «жирные» штрихи на оси W_z вместо зон конечной ширины). Протяженность ΔW_z этих энергетических зон можно оценить согласно выражению

$$\Delta W_z = W_{axy} \cdot N_z \approx 10^{-22} \cdot N_z, \quad (2.88)$$

где N_z – количество атомов (в цепочке) в направлении с размерными ограничениями кристаллической структуры, эВ.

Для типичных наноразмерных кристаллических структур ($N_z < 10^3$) протяженность ΔW_z , согласно выражению (2.88), не превышает 10^{-19} эВ. Именно в таких незначительных масштабах следует ожидать проявление эффектов векторизации движения электрона, основанных на базе зонных механизмов токопрохождения.

Представленные выше материалы не преследуют цель строгого анализа вопроса, а лишь способствуют его пониманию на качественном уровне рассмотрения. Строгое рассмотрение энергетических состояний и динамики движения электронов в реальных кристаллических структурах предполагает использование более сложных модельных представлений, и в частности, о зонах Бриллюэна [9]. Зона Бриллюэна определяется как область в обратном пространстве кристаллической решетки, окружающей один из узлов обратной решетки и ограниченной совокупностью плоскостей, проходящих через середины векторов, соединяющих эту точку с ее ближайшими соседями в обратной решетке. Подобный подход особенно эффективен для кристаллических структур, в которых поверхности постоянной энергии (см. разд. 1.2.2, в) в формализации « k -пространства» сильно отличаются от сферической формы, характерной только для ряда простых кристаллических структур кубического типа. Детальное рассмотрение этого подхода требует достаточно высокой специальной физико-математической подготовки и в этой связи этот подход вынесен за рамки целевых задач настоящего пособия.

б) Анализ возможных скоростей движения носителя заряда в электрическом поле

В модели свободных электронов можно было говорить о взаимосвязи энергии и волнового вектора индивидуального электрона (см. разд. 1), не рассматривая ограничений, накладываемых фактором периодического потенциального поля, обусловленного наличием кристаллической структуры. В теории свободных электронов (т.е. при полном отсутствии потенциальных полей) эта взаимосвязь выглядит достаточно просто (дисперсионное уравнение, см. выражение (1.15)):

$$W_k = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot \pi^2} \cdot k^2. \quad (2.89)$$

В рамках модели *свободных* электронов им разрешено иметь *любое значение энергии*, отвечающее некоторому вещественному значению волнового вектора k .

Наличие внутреннего периодического потенциального поля, свойственного кристаллическим структурам, усложняет вид зависимости $W_k = \varphi(k)$, и в частности:

- приводит к появлению на дисперсионных зависимостях разрешенных и запрещенных энергетических зон;
- некоторым образом изменяет вид дисперсионной зависимости (см. рис. 1.13) от параболического вида (выражение (2.89)), в особенности на верхней границе индивидуальной разрешенной энергетической зоны.

В этом случае электроны, находящиеся в рамках кристаллической структуры, уже не могут рассматриваться в качестве свободных микрочастиц, с той точки зрения, что на энергию их движения распространяется ограничение (запрещенные энергетические зоны). При этом электроны могут считаться «свободными» в том смысле, что, обладая определенной кинетической энергией в пределах разрешенной зоны, они могут беспрепятственно двигаться по кристаллу сколь угодно долго (практически без рассеяния, в случае отсутствия точечных, линейных и поверхностных дефектов), пока не достигнут границы кристаллической структуры, т.е. нарушения периодичности потенциала.

Если все энергетические состояния в разрешенной зоне *заполнены электронами*, то принцип запрета Паули не допускает *никакого отклика* системы на внешнее электрическое поле (см. модельное представление, разд. 2.1.3,а). Последнее означает, что указанные электроны просто «игнорируют» наличие внешнего электрического поля и по этой причине не являются участниками процесса токопрохождения (квантово-механический феномен, не имеющий своего аналога в классической физике).

Для случая энергетической зоны, которая частично заполнена электронами, реакция на внешнее энергетическое воздействие, коим является и электрическое поле, затрагивает преимущественно те электроны, которые обладают максимальной энергией, т.е. занимают энергетические состояния близкие к энергии Ферми (в целях упрощения, рассматриваются кристаллические структуры металлического типа). Последнее объясняется тем, что именно для этих электронов имеется большое количество свободных энергетических уровней в разрешенной зоне, которые могут быть задействованы в процесс изменения энергии (а следовательно, и скорости движения) электронов.

Рассмотрим поведение электронов, находящихся в кристаллической структуре, в условиях воздействия на них внешнего электрического поля. В целях упрощения анализа и не умаляя общности рассмотрения, примем, что в пустой разрешенной зоне находится всего лишь один электрон. Примем также, что этот электрон может, благодаря воздействию внешнего электрического поля, иметь векторизованную форму движения по кристаллической структуре, не испытывая при этом процессов рассеяния.

В одномерном приближении и при использовании допущения, что периодический потенциал имеет такой вид, что энергия электрона минимальна (W_{\min}) в центре разрешенной зоны (при $k = 0$) и максимальна (W_{\max}) на границах зоны (при значениях волнового вектора $k = \pm(\pi/a)$, где a – параметр решетки), зависимость $W(k)$ может быть отображена в виде, представленном на рис. 2.18 [8].

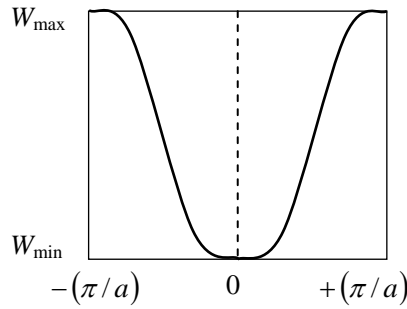


Рис.2.18. Зависимость энергии электрона в разрешенной энергетической зоне от волнового вектора

Следует обратить внимание на тот факт (см. рис. 2.18), что зависимость $W(k)$ весьма сильно отличается от параболического вида (см. выражение (2.89)) на краях энергетической зоны, т.е. при значениях волнового вектора близких $k \pm (\pi/a)$. Это обстоятельство имеет большое значение для последующего рассмотрения.

На дне энергетической зоны (т.е. в области значений $k < | \pm (\pi/a) |$) зависимость $W(k)$ можно представить в виде

$$W(k) = W_{\min} + \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot \pi^2} \cdot k^2. \quad (2.90)$$

Скорость движения электрона на этом энергетическом интервале линейно зависит от волнового вектора k и может быть определена на основании выражения (2.90) в виде [Блейкмор]

$$v(k) = \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot \frac{dW}{dk} = \frac{h \cdot k}{2 \cdot \pi \cdot m}. \quad (2.91)$$

Своего максимального значения скорость электрона достигает не на границе энергетической зоны (как это можно ожидать из модели движения свободного электрона, согласно выражению (2.89)), а при некотором промежуточном значении волнового вектора k , соответствующем середине зоны. Это следует из того, что вблизи потолка энергетической зоны зависимость $W(k)$ имеет вид

$$W(k) = W_{\max} - \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot \pi^2} \cdot \left(k \pm \frac{\pi}{a} \right)^2, \quad (2.92)$$

а, соответственно, скорость электрона описывается выражением

$$v(k) = -\frac{h}{2 \cdot \pi \cdot m} \cdot \left(k \pm \frac{\pi}{a} \right). \quad (2.93)$$

Из выражения (2.93) следует, что по мере приближения волнового вектора k к граничным значениям $k = \pm(\pi/a)$ скорость движения электрона уменьшается и в пределе (т.е. при $k = \pm(\pi/a)$) обращается в ноль. Подобное («парадоксальное», с позиций представлений классической физики) поведение скорости электрона объясняется тем обстоятельством, что при значениях $k < \pm(\pi/a)$ состояние электрона описывается бегущей волной де Бройля (при этом символы (\pm) характеризуют направление скорости движения), а при значениях $k = \pm(\pi/a)$ состояние электрона описывается стоячей волной [8].

В свете вышеизложенных моментов зависимость скорости движения электрона $v(k)$, находящегося в разрешенной энергетической зоне, от волнового вектора k может быть представлена в виде, приведенном на рис. 2.19.

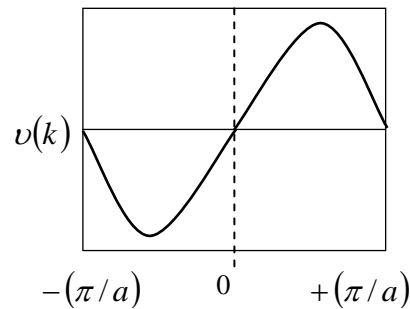


Рис.2.19. Зависимость скорости движения электрона в разрешенной энергетической зоне от волнового вектора

Рис. 2.19 демонстрирует следующие принципиальные моменты, важные в части их использования при анализе вопроса электропроводности кристаллических структур, обладающих электронным механизмом проводимости:

- максимальная скорость движения электрона соответствует не граничным значениям волнового вектора $k = \pm(\pi/a)$, а некоторому промежуточному значению волнового вектора, находящемуся в диапазоне значений: $(\pi/a) < k < 0$ (прямая волна); $0 < k < (\pi/a)$ (обратная волна);
- значениям волнового вектора, удовлетворяющим условию $dv(k)/dk = 0$, соответствует максимальная скорость движения электронов, энергия которых находится в пределах разрешенной энергетической зоны;
- характер поведения скорости движения электрона на участке от v_{\max} до границ энергетической зоны (по координатной шкале k) не имеет классического аналога и, более того, принципиально расходится с известными представлениями классической физики.

Если внешнее электрическое поле приложено в течение длительного периода времени, то электрон будет двигаться по кристаллической структуре (с возрастанием волнового вектора k) до тех пор, пока не будет выполнено условие $k = \pm(\pi/a)$, при котором $v(\pm(\pi/a)) = 0$. Возможность дальнейшей эволюции скорости движения электрона зависит от того, насколько велико значение напряженности электрического поля.

В том случае, если напряженность внешнего электрического поля E будет слишком велика (конкретизация понятия «велика» дана ниже), то существует конечная вероятность события, что электрон осуществит переход (прыжок) через запрещенную зону в энергетическое состояние с волновым вектором $k = -(\pi/a)$, которое находится в следующей, более высоко расположенной на энергетической диаграмме разрешенной зоне. Вероятность такого (туннельного) перехода электрона через запрещенную зону достаточно велика, если выполняются условия [9]:

$$[\Delta W / (q \cdot E)] \leq \lambda ; [\Delta W / (q \cdot E)] \leq a , \quad (2.94)$$

где ΔW – ширина запрещенной зоны; λ – длина волны де Бройля; q – заряд электрона; a – параметр кристаллической решетки.

Вероятность туннельного перехода электрона $P_{\text{тун}}$ через запрещенную зону под воздействием внешнего электрического поля (туннелирование Зинера) определяется выражением [9]:

$$P_{\text{тун}} \approx \exp\left(-\frac{a \cdot m_e \cdot \Delta W}{h^2 \cdot q \cdot E}\right), \quad (2.95)$$

где m_e – эффективная масса электрона.

Характерной особенностью процесса генерации новых носителей заряда по туннельному механизму является независимость вероятности перехода электрона через запрещенную зону от температурного фактора. Этим электростатическая генерация носителей заряда отличается от традиционного термоэлектронного типа.

Согласно выражению (2.95), вероятность туннельного перехода электрона через запрещенную зону при значениях параметров $\Delta W = 1$ эВ и $a = 10^{-10}$ м (типичные величины для широкого круга конструктивных материалов полупроводникового типа) становится пренебрежимо малой величиной, если напряженность электрического поля составляет значение менее $E = 10^7 - 10^8$ В/м (в части приемственности анализа уместно сравнить приведенное значение напряженности поля с аналогичными оценочными данными, представленными выше в табл. 2.15).

Интересно отметить, что, вопреки ожиданиям, при туннельном переходе не происходит скачкообразного повышения энергии перешедшего электрона, несмотря на то что электрон при этом переходит на значительно более высоко расположенный на зонной диаграмме энергетический уровень. Этот момент представлен на рис. 2.20, на котором отображены две соседние энергетические зоны, которые, в отличие от всех предыдущих отображений зонных энергетических диаграмм, имеют *наклонный* вид. Последнее обстоятельство объясняется проявлением влияния внешнего источника электрического потенциала (подключенного к конечным точкам проводящей среды) на энергетические состояния индивидуальных электронов.

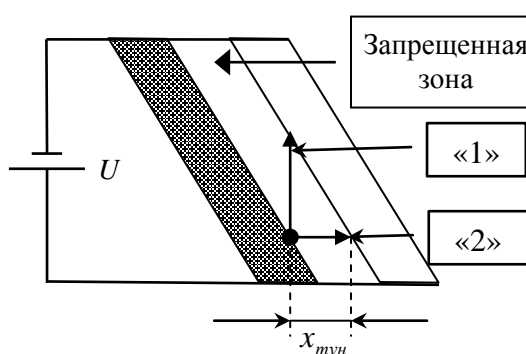


Рис.2.20. Схематическое отображение прямого и туннельного перехода электрона через запрещенную зону (U – внешний источник напряжения)

Согласно модельному представлению рис. 2.20, у электронов существует две альтернативные возможности преодоления запрещенной зоны:

- с помощью *прямого* перехода электрона (обозначен индексом «1» на рис. 2.20), реализация которого имеет ярко выраженный активационный характер и связана с необходимостью дополнительных энергетических затрат ΔW ;
- с помощью *туннельного* перехода электрона (обозначен индексом «2» на рис. 2.20), который имеет безактивационный характер и в этой связи не связан с необходимостью каких-либо энергетических затрат.

Из рисунка следует, что чем больше наклон энергетической диаграммы (т.е. величина приложенного внешнего электрического потенциала), тем меньше длина пути туннельного прохождения $x_{\text{тун}}$, а следовательно, и большей становится вероятность реализации этого

механизма преодоления запрещенной зоны. Увеличение концентрации носителей заряда за счет туннельного механизма токопрохождения не носит на первых порах лавинообразного характера, так как этот процесс компенсируется процессом рекомбинации (обратными переходами) носителей заряда. Однако при очень высоких значениях напряженности электрического поля ($E = 10^8 - 10^9$ В/м) процесс генерации носителей заряда по туннельному механизму приобретает лавинообразный характер, что, как правило, приводит к электрическому пробое проводника электричества.

Другим, интересным с практической точки зрения, фактором при туннельном механизме генерации (переходов) носителей заряда является возможность реализации *отрицательной дифференциальной проводимости* (эффект Гана) в полупроводниках. В обычных резистивных элементах (с положительной проводимостью) векторизованное движение носителя заряда в конечном итоге превращается в броуновское (хаотическое) движение, т.е. имеет место процесс «деградации» энергии от начальной организованной электрической формы в неорганизованную – тепловую. В резистивных элементах с отрицательной дифференциальной проводимостью происходит обратный процесс – повышение степени векторизации энергии в части превращения постоянного тока в переменный ток упорядоченного (в частности, синусоидального) типа.

В общем случае электрический ток в веществе I на основании выражения для статической проводимости (2.1) может быть выражен в виде (закон Ома):

$$I = q \cdot n \cdot \mu \cdot E = \sigma_0 \cdot E, \quad (2.96)$$

где σ_0 – статическая электропроводность вещества.

В соответствии с выражением (2.96) дифференциальная электропроводность вещества будет равна

$$\sigma_\partial = \frac{dI}{dE} = q \cdot n \cdot \mu + q \cdot n \cdot E \cdot \frac{d\mu}{dE} = \sigma_0 \left[1 + \frac{E}{\mu} \cdot \frac{d\mu}{dE} \right]. \quad (2.97)$$

В принципе, выражение, представленное в квадратной скобке, может иметь как положительный, так и *отрицательный* знак. Второй вариант имеет место в том случае, если с ростом напряженности электрического поля подвижность носителя заряда уменьшается

настолько, что выполняется не только условие $\frac{E}{\mu} \cdot \frac{d\mu}{dE} < 0$, но и условие $\left| \frac{E}{\mu} \cdot \frac{d\mu}{dE} \right| > 1$.

С физической точки зрения выполнение этих условий свидетельствует о том, что внешнее электрическое поле «разогревает» электронный газ, вследствие чего его температура T_e может существенно превышать равновесную температуру T кристаллической структуры. Это обстоятельство приводит к деформации функции плотности распределения электронов по энергиям, т.е. сдвигу максимума функции распределения электронов в сторону более высоких значений энергии.

в) Влияние поверхности раздела физических сред на вид зонных энергетических диаграмм наноразмерных структур

В наноразмерных кристаллических структурах доля поверхностных атомов по отношению к количеству атомов, расположенных непосредственно в объеме структуры, может достигать довольно большого значения. В то же время наличие поверхностных атомов как таковых свидетельствует о факторах:

- *нарушения периодичности* потенциальной энергии кристаллической решетки в областях пространства, прилегающих к поверхностям раздела сред;
- появления на поверхностях раздела сред атомов, обладающих *ненасыщенными валентными связями*.

Оба эти фактора вносят свои коррективы на вид зонных энергетических диаграмм в наноразмерных кристаллических структурах. К общим моментам указанных корректив следует отнести факты появления на зонных энергетических диаграммах наноразмерных структур:

- большого количества энергетических уровней (*поверхностных состояний*), расположенных в запрещенной зоне энергетической диаграммы, в пространственном отношении – в непосредственной близости от поверхности раздела сред;
- изгиба (вверх или вниз) энергетических уровней (*изгиб зон*) на зонных диаграммах (обусловленный электростатическими силами), в областях пространства, непосредственно прилегающих к поверхностям раздела сред.

Поверхностные состояния Тамма

Этот тип поверхностных состояний характерен для *атомарно-чистой* поверхности кристаллической структуры, не содержащей дефекты атомного масштаба (вакансии, примесные атомы, выход линейных дислокаций и т.д.).

В разд. 1.2.2,б рассмотрен вопрос о характере движения электрона в периодическом потенциальном поле, образованном линейной цепочкой атомов *бесконечной длины*, т.е. при отсутствии границ раздела сред (модель Кронига – Пенни). Показано, что в этом случае энергетический спектр разрешенных состояний электрона имеет вид зонной диаграммы, представленной на рис. 1.11.

В рассматриваемом случае речь идет об идеализированной кристаллической структуре, например, линейной цепочке атомов, которая ограничена с одного конца и простирается по координатному направлению x в область значений $x > 0$, а в области значений $x \leq 0$ находится вакуумная среда с постоянным значением потенциала U_0 .

Вакуумная среда необходима для обеспечения условия атомарной чистоты поверхности. Графическое отображение потенциальной функции такой кристаллической структуры приведено на рис. 2.21.

Анализ спектра энергетических состояний представленной кристаллической структуры, с учетом наличия границы раздела физических сред, впервые проведен российским ученым И.Е. Таммом (1932 г.).

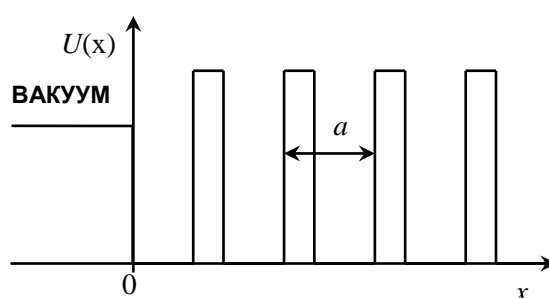


Рис. 2.21. Вид потенциальной функции для ограниченной с одной стороны кристаллической структуры

В частности, были выявлены следующие характерные моменты трансформации вида зонных диаграмм, обусловленные фактом обрыва (т.е. нарушением периодичности) кристаллической решетки:

- обрыв решетки приводит к тому, что в ограниченном кристалле появляются *новые разрешенные энергетические состояния* в тех областях энергий, которые запрещены в неограниченном кристалле;

- волновые функции электронов, расположенных на этих новых энергетических состояниях, *быстро затухают* при удалении от поверхности раздела сред как в область вакуума, так и вглубь кристалла.

Последнее обстоятельство свидетельствует о том, что вероятность обнаружения электрона, находящегося на этих новых энергетических уровнях, вдали от границы раздела сред ничтожно мала. Из чего следует, что эти электроны не могут проникать вглубь кристалла и *локализируются у поверхности раздела*. В этой связи эти новые энергетические уровни или состояния получили название *поверхностных уровней (состояний)*, или *уровней Тамма*.

Следует особо отметить, что поверхностные уровни *не являются дополнительными уровнями*, возникающими сверх того количества, которое может содержать невозмущенная (т.е. без учета наличия границы раздела физических сред) разрешенная зона (напомним, что количество уровней в разрешенной энергетической зоне определяется количеством атомов, образующих кристаллическую структуру). Эти поверхностные уровни с малой пространственной протяженностью *отщепляются от соответствующих энергетических зон*, согласно модельному представлению, приведенному на рис. 2.22.

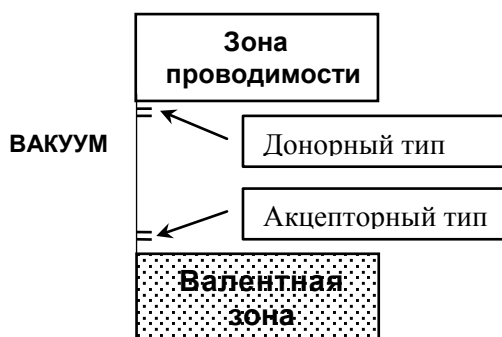


Рис. 2.22. Энергетический спектр поверхностных состояний Тамма

Поверхностные уровни Тамма, находящиеся в запрещенной зоне, могут быть как донорного типа (вблизи дна зоны проводимости), так и акцепторного типа (вблизи потолка валентной зоны).

В более общей постановке вопроса образование поверхностных уровней в запрещенной зоне наблюдается во всех случаях нарушения периодичности потенциала решетки, независимо от того обстоятельства, чем вызвано это нарушение: примесными или адсорбированными атомами, дислокациями линейного типа, границами кристаллических зерен, свободной поверхностью (уровни Тамма).

Поверхностные состояния от адсорбированных на поверхности атомов

Искусственно созданная атомарно-чистая поверхность является таковой недолго, порядка 10^{-9} с, при давлении окружающих газов 10^{-8} мм рт. ст. По истечении этого промежутка времени она покрывается частично или полностью слоем *адсорбированных* атомов или молекул различной химической природы.

Рассмотрим с позиции зонных диаграмм влияние процесса адсорбции атомов на энергетический спектр электронов. Пусть на поверхности кристаллической структуры произошел процесс хемосорбции атома типа *A* (рис. 2. 23). В результате химического взаимодействия атома *A* с поверхностными атомами кристаллической структуры их волновые функции перекрываются, что позволяет рассматривать атом *A* в качестве локальной примеси, нарушающей периодичность потенциального поля кристаллической решетки структуры. В свою очередь, нарушение периодичности потенциального поля приводит к появлению в запрещенной зоне дискретного (т.е. обладающего малой пространственной протяженностью) энергетического уровня *B* донорного или акцепторного типа.

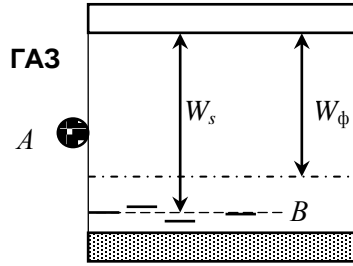


Рис. 2.23. Поверхностный уровень, инициированный адсорбированным атомом (W_ϕ – энергия Ферми; W_s – энергия поверхностного уровня)

Для определенности положим, что появившийся поверхностный уровень B имеет акцепторный тип. Положение уровня B на энергетической диаграмме зависит от физической природы атомов структуры и сорбируемой частицы A и расстояния между частицей A и поверхностью структуры. С увеличением этого расстояния уровень B поднимается вверх, и при значительном удалении частицы A от поверхности он «втягивается» в зону проводимости. Волновая функция электрона, находящегося на уровне B , имеет *ярко выраженный максимум* вблизи положения атома A , причем величина максимума возрастает по мере перемещения уровня B вниз, к валентной зоне. Благодаря близости уровня B к валентной зоне вероятность ее заселения электроном достаточно велика, что приводит к появлению в приповерхностной области кристаллической структуры *избыточного отрицательного заряда*.

Аналогичное рассмотрение можно провести и для случая, когда в результате хемосорбции атомов на поверхности кристаллической структуры образуются поверхностные состояния донорного типа, с образованием в приповерхностной области *избыточного положительного заряда*.

В общем случае вероятность того, что поверхностный уровень B будет заполнен электроном, определяется функцией распределения частиц по энергиям Ферми-Дирака (см. разд. 2.1.3,в):

$$f^{(-)} = \left(1 + e^{\frac{W_s - (-W_\phi)}{k \cdot T}} \right)^{-1} = \left(1 + e^{\frac{W_\phi - W_s}{k \cdot T}} \right)^{-1}. \quad (2.98)$$

Вероятность противоположного события (т.е. уровень B будет пустым, а адсорбированная частица A будет ионизированной), будет равна

$$f^{(+)} = 1 - f^{(-)} = \left(1 + e^{\frac{W_s - W_\phi}{k \cdot T}} \right)^{-1}. \quad (2.99)$$

Умножая приведенные вероятности заполнения (2.98) и (2.99) на поверхностную концентрацию N_a поверхностных уровней B , получим поверхностную концентрацию заряженных частиц на поверхности раздела сред:

А) для адсорбированных частиц, создающих акцепторные уровни:

$$N^{(-)} = N_a \cdot \left(1 + e^{\frac{W_\phi - W_s}{k \cdot T}} \right)^{-1}; \quad (2.100a)$$

Б) для адсорбированных частиц, создающих донорные уровни:

$$N^{(+)} = N_a \cdot \left(1 + e^{\frac{W_s - W_\phi}{k \cdot T}} \right)^{-1}. \quad (2.100б)$$

Полагая, что каждая заряженная частица (на поверхностном уровне) имеет заряд, численно равный заряду электрона q , можно определить поверхностную плотность заряда σ на границе раздела сред в виде:

А) для адсорбированных частиц, создающих акцепторные уровни:

$$\sigma^{(-)} = -q \cdot N^{(-)} = -q \cdot N_a \cdot \left(1 + e^{\frac{W_\Phi - W_s}{k \cdot T}} \right)^{-1}; \quad (2.101a)$$

Б) для адсорбированных частиц, создающих донорные уровни:

$$\sigma^{(+)} = +q \cdot N^{(+)} = +q \cdot N_a \cdot \left(1 + e^{\frac{W_s - W_\Phi}{k \cdot T}} \right)^{-1}. \quad (2.101б)$$

Из выражений (2.101a), (2.101б) следует, что в результате хемосорбции атомов на поверхности кристаллической структуры эта поверхность теряет свою электрическую нейтральность и становится электрически заряженной.

Искривление энергетических зон у границы раздела кристаллической структуры

Рассмотренные выше поверхностные заряды $\sigma^{(-)}$ или $\sigma^{(+)}$ притягивают из толщи материала заряды противоположного знака, нейтрализующего поверхностный заряд, образованный в процессе хемосорбции атомов на поверхности. В результате этого приповерхностный слой материала *обедняется* носителями заряда, имеющими один знак со знаком поверхностного заряда, и обогащается носителями заряда противоположного знака. Толщина этого *обедненного носителями заряда* слоя материала находится в обратной зависимости от концентрации основных (для данного типа материала) носителей заряда. В частности, для металлов, у которых концентрация носителей заряда чрезвычайно высока (10^{22} см^{-3}), толщина обедненного слоя не превышает несколько параметров кристаллической решетки. Для материалов полупроводникового типа ($10^6 - 10^{18} \text{ см}^{-3}$) толщина обедненного слоя может быть весьма значительной.

В практическом плане принято считать толщину обедненного слоя материала равной *дебаевской длине экранирования* L_D , т.е. расстоянию, на котором электрическое поле в этом материале (в приближении свободных собственных носителей заряда) уменьшается в e раз. В общем случае протяженность дебаевской длины экранирования определяется с помощью выражения [5]

$$L_D = \left(\frac{\epsilon_0 \cdot \epsilon \cdot k \cdot T}{e^2 \cdot n_i} \right)^{1/2}, \quad (2.102)$$

где n_i – концентрация собственных носителей заряда в веществе; ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость материала кристаллической структуры.

Составить некоторое представление о порядке величин L_D в материалах металлического и полупроводникового типа можно на основании данных, приведенных в табл. 2.17.

Т а б л и ц а 2.17. *Характерные значения дебаевской длины экранирования L_D для материалов металлического и полупроводникового типа (при $T = 300 \text{ K}$; $\epsilon = 5$)*

Параметр	Материал кристаллической структуры				
	Металл	Полупроводник			
$n_i, \text{ см}^{-3}$	10^{22}	10^{12}	10^{14}	10^{16}	10^{18}
$L_D, \text{ нм}$	≈ 0.1	10^4	10^3	10^2	10

Согласно данным табл. 2.17, в кристаллических структурах полупроводникового типа дебаевская длина экранирования может принимать значения, сопоставимые с пространственной протяженностью наноразмерных структур в направлениях с ограничениями размерного характера.

Имеющие противоположные знаки поверхностный заряд и обедненный слой образуют *двойной электрический слой*, т.е. своеобразный конденсатор, у которого одна из обкладок может иметь протяженный (объемный) характер. Тип носителей заряда (электроны, дырки), образующих обедненный слой в двойном электрическом слое, всецело определяется типом поверхностных состояний (донор, акцептор), образованных в результате хемосорбции атомов на поверхности кристаллической структуры.

На основании данных табл. 2.17 можно сформулировать ряд выводов (с позиции практических интересов наноразмерных структур) о том, что в конструкционных материалах:

а) металлического типа двойной электрический слой локализован непосредственно у границы раздела сред и поэтому его влияние на объемные параметры наноструктуры может проявиться весьма незначительным образом;

б) полупроводникового типа:

- протяженность двойного электрического слоя может существенно превосходить линейный размер наноструктуры в пространственном направлении, на которое распространяется размерное ограничение, поэтому негативное влияние двойного электрического слоя на электрические характеристики наноструктуры может иметь определяющее значение;
- для нейтрализации негативных эффектов, связанных с появлением двойного электрического слоя, необходимо использовать высоковакуумные технологии обработки материалов, исключающие возможность образования моноатомных адсорбционных покрытий на основе атомов чужеродной природы.

Анализ вида функций напряженности электрического поля $E(x)$ и электрического потенциала $\varphi(x)$ в пределах толщины обедненного слоя можно провести на основании *уравнения Пуассона* [10]:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon} \cdot \rho(x), \quad (2.103)$$

где $\rho(x)$ – функция объемной плотности распределения электрического заряда в пределах обедненного слоя ($0 < x < x_s$); x – координатное направление по нормали к плоскости раздела физических сред (рис. 2.24).

Не умаляя общности рассмотрения, а в целях упрощения анализа, примем допущения:

• функция плотности распределения электрического заряда $\rho(x)$ идентична функции плотности распределения поверхностных состояний в приповерхностной области пространства и удовлетворяет условию $\rho(x) = \rho_0 = \text{const}$;

• на всем протяжении обедненного слоя x_s , образованного фактом образования поверхностных состояний, указанные состояния «ионизованы», т.е. заняты основными носителями заряда кристаллической структуры (электронами или дырками, в зависимости от типа поверхностных состояний).

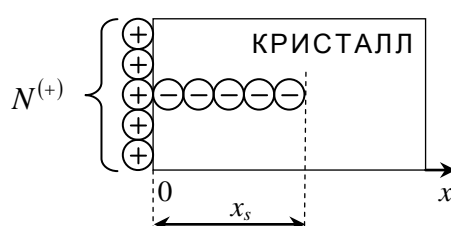


Рис. 2.24. Модельное представление двойного электрического слоя, образованного ионизированными адсорбированными атомами $N^{(+)}$

Для решения уравнения (2.103) воспользуемся граничными условиями:

$$E(0) = -\frac{d\varphi(0)}{dx} = 0; \quad \varphi(0) = 0. \quad (2.104)$$

Решениями уравнения (2.103) при граничных условиях (2.104) являются:

$$E(x) = -\frac{\rho_0}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon} \cdot x, \quad (2.105)$$

$$\varphi(x) = -\frac{\rho_0}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon} \cdot x^2. \quad (2.106)$$

Согласно выражению (2.106), диапазон изменения (по модулю) электрического потенциала $\Delta\varphi_s$ в пределах обедненного слоя $0 < x < x_s$ равен

$$\Delta\varphi_s = \varphi(x_s) = \left| -\frac{\rho_0}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon} \cdot x_s^2 \right|. \quad (2.107)$$

Для рассматриваемого случая объемная концентрация заряда ρ_0 является функцией поверхностной концентрации хемосорбированных атомов $N^{(+)}$, приводящих к появлению поверхностных состояний, и толщины обедненного слоя x_s :

$$\rho_0 = \frac{q \cdot N^{(+)}}{x_s}. \quad (2.108)$$

Подставляя ρ_0 из выражения (2.108) в выражения (2.106) и (2.107), для потенциальной функции $\varphi(x)$ и поверхностного потенциала $\Delta\varphi_s$ соответственно имеем:

$$\varphi(x) = -\frac{q \cdot N^{(+)}}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon \cdot x_s} \cdot x^2; \quad (2.109)$$

$$\Delta\varphi_s = \left| \frac{q \cdot N^{(+)}}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon} \cdot x_s \right|. \quad (2.110)$$

В табл. 2. 18 приведены значения поверхностного потенциала $\Delta\varphi_s$, соответствующего различным значениям параметров $N^{(+)}$ и x_s .

Т а б л и ц а 2.18. Зависимость $\Delta\varphi_s$ (В) от параметров $N^{(+)}$ и x_s (при $\varepsilon = 5$)

$N^{(+)}$, м^{-2}	x_s , нм					
	0.5	1.0	5.0	10	50	100
10^{12}	$1.8 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$3.6 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$
10^{13}	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$3.6 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$3.6 \cdot 10^{-3}$
10^{14}	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$3.6 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-2}$
10^{15}	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$3.6 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-2}$	0.18	0.36
10^{16}	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-2}$	0.18	0.36	1.8	3.6
10^{17}	0.18	0.36	1.8	3.6	18	36

При больших значениях концентрации поверхностных состояний $N^{(+)}$ (более 10^{15} м^{-2}) значения поверхностного потенциала $\Delta\varphi_s$ могут достигать довольно значительных величин (см. табл. 2.18), и в этом рассматриваемом случае объемная концентрация носителей заряда в слое полупроводника x_s может существенно отличаться от объемной концентрации невозмущенного материала. Потеря электрической нейтральности материала в слое x_s находит свое отражение и на

виде зонной энергетической диаграммы в диапазоне координат, находящемся в пределах этого слоя (рис. 2.25).

Появление электрически заряженной приповерхностной области x_s может привести к реализации ряда специфических эффектов относительно изменения количества и типа носителей заряда в этой пространственной области полупроводника:

- *обеднение* – возникает в том случае, когда на поверхности полупроводника появляется поверхностный заряд, совпадающий по знаку с основными носителями заряда, причем этот приповерхностный заряд не настолько велик, чтобы привести к пересечению кривой изгиба энергетических зон с уровнем Ферми;

- *инверсия* – случай, аналогичный приведенному выше, с тем лишь отличием, что при этом величина приповерхностного заряда становится настолько большой, что приводит к смене типа носителей заряда в этой области на противоположный тип ввиду пересечения кривой изгиба энергетических зон с уровнем Ферми материала;

- *обогащение* – возникает в том случае, когда на поверхности полупроводника появляется поверхностный заряд, противоположный по знаку с основными носителями заряда полупроводника, что приводит к эффекту обогащения приповерхностной области основными носителями заряда.

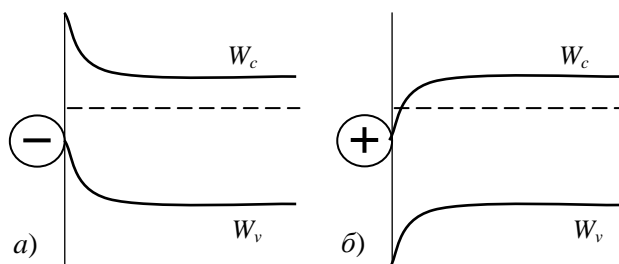


Рис. 2.25. Изгиб энергетических зон у поверхности полупроводника n -типа при зарядении поверхности отрицательными (а) и положительными (б) зарядами

Таким образом, появляющийся в области x_s пространственный заряд может существенно изменить параметры исходного полупроводника относительно его невозмущенного состояния. Это обстоятельство может иметь весьма существенное значение применительно к кристаллическим структурам наноразмерного масштаба, поскольку в них в пространственных направлениях с размерным ограничением следует ожидать значительные отклонения электропроводности от объемных показателей полупроводника.

г) Специфика баллистического транспорта носителей заряда в наноразмерных структурах

В разд. 2.1.3 рассмотрен вопрос о подвижности носителей заряда для случая макроскопических структур. В частности было отмечено то обстоятельство, что параметр подвижности (пролетного типа) является усредненной характеристикой скорости движения индивидуального носителя заряда в процессе токопрохождения. При этом, прямо или косвенно, предполагалось, что векторизованное движение индивидуального носителя заряда может быть представлено в виде последовательности дискретных элементарных пространственных перемещений на расстояния микроскопического масштаба. Эта дискретность характера перемещения носителя обусловлена элементарными процессами рассеяния векторизованной формы движения на объектах, искажающих фактор периодичности потенциальной энергии кристаллической структуры, к числу которых следует отнести наличие в структуре:

- локальных точечных дефектов в виде инородных атомов примесного характера (атомы внедрения и замещения) и вакансий;

- пространственно протяженных дефектов линейного типа (краевые и винтовые дислокации);
- пространственно протяженных дефектов поверхностного типа (границы кристаллитов, макроскопические поверхности раздела сред);
- локальных тепловых колебаний (фононов) индивидуальных атомов, образующих кристаллическую структуру.

Для макроскопических монокристаллических структур с электронным типом проводимости пространственная протяженность элементарных перемещений (пролетов без рассеяния) характеризуется параметром *длины свободного пробега* электронов, которая, в силу высокого совершенства современных промышленных полупроводниковых монокристаллов, может достигать значений $\lambda \approx 50$ нм. Находясь в условиях внешнего электрического поля с напряженностью E , электроны проводимости могут приобретать дополнительную энергию

$$\Delta W_E = q \cdot \lambda \cdot E, \quad (2.111)$$

а следовательно, и скорость векторизованного движения, равную в классическом приближении

$$v_E = \sqrt{\frac{2 \cdot q \cdot \lambda \cdot E}{m}}. \quad (2.112)$$

Для реализации этой возможности необходимо, чтобы на зонной энергетической диаграмме имелось достаточно большое количество *свободных* энергетических уровней ΔN (подробнее см. разд. 2.1.3,а; рис. 2.7), находящихся по соседству с энергетическим уровнем, на котором изначально находился ускоряемый электрическим полем электрон:

$$\Delta N = \frac{\Delta W_E}{\Delta W_1},$$

где $\Delta W_1 \approx 10^{-23}$ эВ – среднее расстояние между соседними энергетическими уровнями, расположенными в пределах разрешенной зоны.

В табл. 2.19 представлены значения количества свободных энергетических уровней ΔN , необходимых для *полной реализации* векторизованной формы движения электрона, в зависимости от значений напряженности внешнего ускоряющего электрического поля E .

Т а б л и ц а 2.19. *Зависимость параметра ΔN от E (при $\lambda \approx 10$ нм)*

E , В/м	0.1	1.0	10	100	1000
ΔN	10^{14}	10^{15}	10^{16}	10^{17}	10^{18}

Из данных табл. 2.19 следует, что для полной реализации векторизованной формы движения электрона необходимо значительное количество ($10^{14} - 10^{18}$) свободных энергетических уровней, расположенных выше начального, для обеспечения возможности ускорения электрона; или расположенных ниже – для замедления его движения.

Распространим приведенную выше методологию анализа на случай кристаллических структур, обладающих ограничениями размерного характера. Пусть в пространственном направлении с размерным ограничением атомная цепочка имеет длину $N_{\text{нано}}$. В первом приближении будем считать, что количество энергетических уровней в разрешенной зоне по данному пространственному направлению сопоставимо с $N_{\text{нано}}$, а расстояние между соседними энергетическими уровнями, как и прежде, составляет $\Delta W_1 \approx 10^{-23}$ эВ. В этом случае максимальная энергия векторизованной формы движения ансамбля электронов будет равна

$$\Delta W_E = \Delta W_1 \cdot N_{\text{нано}}, \quad (2.113)$$

а, соответственно, максимальная скорость векторизованного движения электрона равна

$$v_E = \sqrt{\frac{2 \cdot \Delta W_1 \cdot N_{\text{нано}}}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot \Delta W_1 \cdot L_{\text{нано}}}{m \cdot a}}, \quad (2.114)$$

где a – параметр кристаллической решетки; $L_{\text{нано}} = a \cdot N_{\text{нано}}$ – протяженность кристаллической структуры в пространственном направлении с размерными ограничениями.

На практике может сложиться такая ситуация, что будет выполняться условие $L_{\text{нано}} < \lambda$ (характерного значения для данного материала в макроскопическом исполнении). В этом случае движение носителей заряда будет происходить без протекания процессов рассеяния их энергии на расстоянии $L_{\text{нано}}$. Такой процесс переноса носителей заряда принято называть *баллистическим транспортом* [11]. Следует отметить, что в качестве фактора, лимитирующего скорость векторизованного движения электрона по механизму баллистического транспорта, выступают:

- λ – для случая макроскопических кристаллических тел, не подверженных влиянию пространственных размерных ограничений;
- $L_{\text{нано}}$ (или $N_{\text{нано}}$) – для случая кристаллических структур, имеющих размерные ограничения хотя бы по одному из координатных направлений.

Проведение строгого анализа скорости движения электрона в более корректной постановке вопроса предполагает учет ряда дополнительных немаловажных обстоятельств, а именно:

- зависимости скорости движения электрона $v(k)$, находящегося в разрешенной энергетической зоне, от волнового вектора k с учетом специфики движения на границе зоны, т.е. при значениях $k = \pm(\pi/a)$, (см. разд. 2.2.2,б; рис. 2.19);
- наличия поверхностей раздела физических сред, приводящих к деформации периодического потенциала кристаллической структуры в областях пространства, примыкающих к границам раздела сред (см. рис. 1.7);
- значительных отклонений функций (статистики) распределения электронов по энергиям от равновесных состояний, характерных для случая отсутствия внешнего возмущающего электрического поля;
- наличия в наноразмерной структуре достаточно протяженной (с точки зрения размерных ограничений, свойственных наноструктурам кристаллического типа) приповерхностной области, содержащей большое количество поверхностных состояний, что приводит в конечном итоге к появлению обогащенного или обедненного основными носителями заряда электрически заряженного слоя и к искривлению энергетических уровней в разрешенных зонах (см. рис. 2.25).

1.3. Физические основы квантовой информации и квантовых компьютеров

1.3.1. Физические основы квантовых вычислительных систем

а) Проблематика и тенденции развития современной вычислительной техники

Ключевые вехи в развитии технического прогресса связаны, прежде всего, с открытием новых ресурсов освоения природы, таких как новые конструкционные материалы и источники энергии. В двадцатом веке, в связи с появлением компьютеров, позволяющих проводить обработку больших информационных массивов вне человеческого мозга, к числу этих ресурсов добавилась информация.

История развития компьютерной технологии обработки информации, в свою очередь, состояла из перманентного перехода от простых физических реализаций к более сложным (шестерни → реле → электровакуумные приборы → транзисторы → микросборки → интегральные схемы → сверхбольшие интегральные схемы (СБИС)). На всем этом пути прослеживается стремление к непрерывному уменьшению габаритов вычислительных устройств, вплоть до применения элементов конструкций субатомного масштаба (в настоящее время достигнут технологический уровень производства, позволяющий в промышленных масштабах реализовать минимальный линейный размер элемента конструкции порядка 45 нм).

Следует отметить, что с точки зрения человеческого (макроскопического) восприятия природы классические законы физики являются фактически безупречными. Однако в атомных масштабах, недоступных чувственному восприятию, начинают доминировать совершенно другие, квантовые законы. Квантовые технологии обработки информации призваны дополнить, а при необходимости заменить существующие классические технологии. Уже в настоящее время можно утверждать, что эти (квантовые) технологии могут предложить гораздо больше, нежели тривиальное повышение массово-габаритных показателей вычислительных устройств. Оказывается, что они могут реализовать абсолютно новые принципы вычислительных алгоритмов, не имеющих классических аналогов.

Рассмотрим в более частной постановке проблематику классического подхода при реализации высокопроизводительных вычислительных систем. Согласно современной тенденции развития вычислительной техники тактовая частота микропроцессоров увеличивается примерно вдвое через каждые 18 месяцев (это положение известно в научно-технической практике как «закон Мура»). Увеличение быстродействия на основе методов проектирования и теоретических подходов традиционной планарной микроэлектроники достигается путем соответствующего уменьшения габаритов вычислительных устройств. Поясним это обстоятельство на примере вычислительного устройства, схематически отображенного на рис. 1.24.

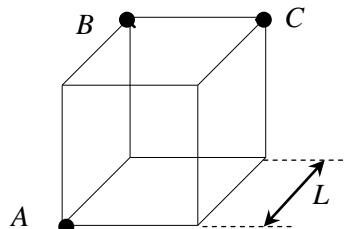


Рис. 1.24. Схематическое отображение вычислительного устройства

Не умаляя общности рассмотрения, будем считать, что вычислительное устройство в целом имеет кубическую форму, а его ребро имеет протяженность L . В точке C расположена

вычислительная ячейка, реализующая элементарную вычислительную операцию (например типа: «И»; «ИЛИ») с информационными сигналами, приходящими из ячеек, расположенных в точках A и B . Идеальным, с точки зрения отсутствия сбоев в работе, представляется случай, когда оба сигнала (из точек A и B) приходят в ячейку C одновременно (в частном аспекте под этим следует понимать одновременный приход переднего фронта электрических импульсов).

Для обеспечения синхронизации (по времени или фазе) процессов выхода информационных сигналов из ячеек A и B и их прихода в ячейку C используется генератор тактовых импульсов с частотой ν_0 . Нетрудно заметить, что при одновременном выходе сигналов из источников A и B сигнал от точки A приходит в точку C позже, чем от точки B . Максимальное расхождение во времени прибытия информационных сигналов составит: $\Delta\tau = (3 \cdot L)/c$, где c – скорость распространения электромагнитной волны в рассматриваемой физической среде.

Если принять линейный размер куба $L = 0.01$ м (отметим, что в таком кубе, при существующем уровне развития технологий, размещается $10^8 - 10^9$ элементов конструкций – структур транзисторного типа), то указанное выше значение расхождения во времени составит по порядку величины: $\Delta\tau = 10^{-8}$ с. Из последнего обстоятельства следует, что для обеспечения временного (фазового) расхождения приходящих в точку C информационных сигналов на уровне не более 10% необходима тактовая частота синхронизации вычислительных процессов порядка $\nu_0 = 10^9$ Гц (в настоящее время это значение представляется скромным показателем и рассматривается возможность перехода к частотам 10^{10} Гц).

Таким образом, можно заключить, что с позиции уровня требований к быстродействию современных вычислительных устройств электромагнитные волны распространяются в пространстве крайне «медленно». Именно ввиду наличия этого ограничительного фактора развитие быстродействующих вычислительных устройств идет по пути уменьшения размеров вычислительных ячеек, выполняющих элементарные логические операции, и сокращения длины элементов коммутации между индивидуальными ячейками (дополнительные численные данные, отражающие динамику процесса повышения степени интеграции элементов конструкций в устройствах вычислительной техники, представлены в табл. 2.1).

Первоначальный интерес к квантовым компьютерам был обусловлен традиционным стремлением использовать специфику квантовых наноразмерных систем с целью уменьшения размеров элементарных логических ячеек, вплоть до субатомного масштаба. Однако при более пристальном изучении указанных квантовых систем выяснилось, что на этом пути существуют и другие резервы повышения быстродействия вычислительных устройств, основанные на использовании специфических (не имеющих классических аналогов) квантово-механических эффектов, таких как *квантовый параллелизм* и *квантовая запутанность* (этот круг вопросов рассмотрен подробно ниже).

Выигрыш в производительности (и как следствие, в быстродействии) квантовых алгоритмов обработки информации достигается за счёт того, что при применении одной квантовой операции большое число коэффициентов суперпозиции квантовых состояний, которые в виртуальной форме содержат классическую информацию, *преобразуется одновременно* (классический аналог более скромного порядка – технология параллельных вычислений). В итоге квантовое вычислительное устройство размером L кубит (некий аналог классического понятия – «бит») может выполнять одновременно (параллельно) 2^L вычислительных операций. Этот фактор порождает уверенность в возможности

существенного повышения тактико-технических данных вычислительных средств [9]. Эта новая квантовая технология обработки информации находится в настоящее время в теоретическом плане на стадии становления. Достижения в экспериментальном плане подтверждают возможность обеспечения процессов хранения и обработки информации, закодированной в индивидуальных квантовых системах атомного масштаба.

Квантовая теория вычислений играет более фундаментальную роль в части формирования общего мировоззрения на процессы обработки информации, чем ее классический аналог, нашедший широкое распространение в современной компьютерной практике. На ее основе, возможно, будут созданы новые методы обработки таких огромных объемов информации, которые принципиально недоступны существующим классическим методам. В этой связи можно говорить о зарождении новой области научно-прикладных знаний – квантовой теории информации, представляющей собой сплав квантовой физики, теории информации и теории алгоритмов обработки информации в вычислительных средах. Ее охват простирается от установления новых представлений на природу физических законов до практического использования результатов в компьютерной и коммуникационной технике.

Такая глубина проникновения в вопросы взаимосвязи физических и информационных процессов позволит в обозримой перспективе перейти к конструктивному рассмотрению мыслительной деятельности биологических устройств, т.е. приложить полученные научно-практические наработки к проблематике установления механизмов работы мозга как вычислительной среды. В настоящее время мнения ученых существенно расходятся в вопросе о том, насколько методы хранения, отыскания и обработки информации в мозгу соответствуют методам, используемым в классической вычислительной технике. С одной стороны, имеется точка зрения, согласно которой мозг работает по заранее заданным алгоритмам, близким по своей сути к алгоритмам, применяемым в цифровых машинах. С другой же стороны, высказывается мнение, что мозг функционирует не на основе детерминированных алгоритмов, и функции его мало сходны с известными логическими и математическими алгоритмами в цифровых машинах, а наиболее существенными являются вероятностные (в том числе квантово-механические) методы анализа и модели физических сред. Продвижение в этих вопросах открывает новые горизонты в направлении создания специфических биотехнических вычислительных сред, содержащих в своем составе фрагменты известных биологических структур.

Следует отметить принципиальное отличие от ранее существовавшего, современного отношения исследователей к постулатам квантовой механики с позиции существования возможных ограничительных факторов (принцип неопределенности Гейзенберга, вероятностная трактовка волновых функций), накладываемых ею на физические системы. Когда физико-технические аспекты вычислительных операций систематически исследовались в семидесятых годах прошлого века, имелись серьезные опасения в том, что квантово-механические эффекты могут привести к фундаментальным ограничениям на точность и однозначность, с которой реальные физические объекты могут реализовать свойства битов информации, логических ячеек и т.д., составляющих основу абстрактной теории информации. Как выяснилось, эти опасения оказались беспочвенными. Квантовая механика не только не устанавливает никаких ограничений на то, какие классические вычисления могут быть реализованы в природе, а более того, разрешает их все и предоставляет новые способы вычислений, которые не могут быть выполнены с помощью классических схем реализации компьютеров.

Нельзя не упомянуть еще об одном принципиальном аспекте квантовых вычислений, имеющем непосредственное отношение к практике математических доказательств. Считается, что сама процедура проведения вычисления по классической схеме, приводящая к однозначному конечному результату, эквивалентна доказательству того, что *наблюдаемый результат* является одним из возможных вариантов результатов вычислений. Это представляется очевидным лишь в том случае, когда операции компьютера описываются математически строго и в этой связи могут быть переориентированы в доказательство некой математической теоремы.

Такое жестко детерминированное представление вычислительных процессов было уместным в классическом случае (при полном отсутствии интерференционных эффектов, свойственных квантовой механике), *когда можно было пошагово проследить за ходом процесса вычислений*. Подобный шаговый режим контроля позволяет, в принципе, произвести строгое математическое доказательство в виде конечной последовательности предложений, каждое из которых является

либо аксиомой, либо следует из предыдущих предложений в соответствии со стандартными правилами формирования логических умозаключений (*детерминированная* логика). К сожалению, в настоящее время приходится отказаться от такого привлекательного в логическом плане представления и рассматривать сам *процесс квантового вычисления как форму доказательства* математических концепций и положений. Это заключение следует из того, что в будущем квантовые компьютеры будут доказывать теоремы такими специфическими методами, которые человеческий мозг (представляющий собой макроскопическую систему) не будет в состоянии проверить, следуя традиционному методу «шаг за шагом» [9].

б) Когерентная квантовая интерференция отдельных микрочастиц

Ключевым фундаментальным понятием классической теории информации является представление об элементарной единице информации – «бит». С точки зрения физико-технической реализации понятие «бит» отражает систему, которая может находиться в двух *устойчивых и различных состояниях*. Эти состояния должны быть *разделены высоким потенциальным барьером, чтобы исключить возможность спонтанных переходов системы из одного состояния в другое* (например, под воздействием различных дестабилизирующих факторов флуктуационного характера, возникающих в процессе штатных режимов эксплуатации изделия).

В качестве типичного представителя единичного элемента такой информационной системы можно рассматривать двухпозиционный (бинарный) механический переключатель, в котором отдельным его позициям предписывается строго определенное состояние, условно обозначаемое посредством ограниченного набора символьных позиций, например: «0» – «1»; «нет» – «да»; «верно» – «неверно»; «А» – «Б»; «закрото» – «открыто» и т.д.

В принципе аналогичным переключателем, но атомного масштаба, можно считать и единичный атом, если он может находиться в двух *различимых квантовых состояниях*. Однако в связи с тем, что данная система является типичным представителем квантово-механических объектов, здесь появляется определенный нюанс, получивший название *когерентной суперпозиции* квантовых состояний. Под этим понимается возможность возникновения новых состояний, которые не имеют классических аналогов и в которых система *одновременно представляет* оба состояния – «0» и «1». Именно в этом квантовом феномене состоит принципиальное отличие элементарной единицы квантовой информации «кубит» от традиционной единицы информации «бит», нашедшей широкое распространение в классических вычислительных устройствах. В качестве носителя «кубита» может выступать практически любая квантовая система, имеющая, по меньшей мере, два взаимодополняющих состояния (т.е. удовлетворяющая условию нормировки вероятностей появления отдельных исходов). Можно предложить множество вариантов практической реализации подобных систем, часть из которых уже успешно прошла экспериментальную апробацию [9].

Такая ситуация, реализующая «кубит» в квантовой системе, при которой физический параметр может принимать одновременно два разных значения, настолько непривычна (с позиций традиционной классической физики), что целесообразно пояснить этот принципиально важный момент на примере простого мысленного эксперимента, схема которого представлена на рис. 1.25,а.

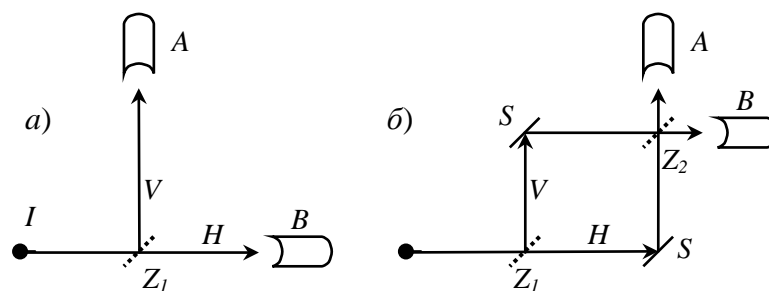


Рис. 1.25. Схематическое отображение интерференции одной микрочастицы

Пусть фотон (в принципе это может быть любая микрочастица) вылетает из источника I и попадает на полупрозрачное зеркало Z_1 , после чего появляются две возможные траектории его последующего движения – V и H . Что можно сказать точно, так это то, что фотон не расщепляется на зеркале на два объекта и будет зарегистрирован с *равной вероятностью* одним из детекторов A или B . Получается, что фотон пролетает по направлениям V или H случайным образом (в соответствии с постулатами классической физики). Однако в действительности это не так! Может показаться очевидным, что фотон в *каждом конкретном эксперименте* находится или на пути V , или на пути H . Но это тоже не соответствует действительности. На самом деле фотон одновременно движется по двум путям V и H , что может быть продемонстрировано с помощью эксперимента, схема которого отображена на рис. 1.25,б.

В этом новом эксперименте два обычных зеркала S расположены так, что оба пути следования фотона (V и H) пересекаются на втором полупрозрачном зеркале Z_2 . Несколько забежав вперед, отметим, что с помощью оптической схемы рис. 1.25,б можно наблюдать весьма неожиданный, исключительно квантовый эффект – *одночастичной интерференции*.

Предположим, что конкретный фотон (см. рис. 1.25,б) двигался после прохождения полупрозрачного зеркала Z_1 вдоль пути H . Тогда из сравнения с рис. 1.25,а следует, что оба детектора должны регистрировать фотон с одинаковой вероятностью. То же самое наблюдалось если бы фотон двигался вдоль пути V . Следовательно, если бы фотон двигался строго по одному пути (неважно V или H), каждый из детекторов A и B срабатывал бы в половине случаев прохождения фотона. Однако в реальности наблюдается совершенно иная картина: фотон *всегда попадает* на детектор A и *никогда не попадает* на детектор B .

Если один из путей (V или H) перекрыть непроницаемым экраном, то попадание фотона в детекторы A и B становится равновероятным. Отсюда следует неизбежный вывод, что фотон перемещается одновременно по двум путям.

Таким образом, *перекрытие любого из путей* (рис. 1.25,б) *приводит к освещению детектора B*. Когда же оба пути открыты (V и H), фотон неведомым способом получает информацию, которая не позволяет ему однозначно попасть в детектор B . *Эта информация распространяется вдоль другого пути со скоростью света*, отражаясь от зеркал точно так же, как распространяется фотон. Это свойство *квантовой интерференции*, которое можно объяснить существованием гипотетических невидимых «двойников» фотона, оказывающих влияние на движение наблюдаемых фотонов, можно распространить и на все типы известных микрочастиц.

Для последующего рассмотрения важно отметить тот факт, что *вероятностный* характер исхода первой оптической системы (рис. 1.25,а) полностью устраняется с помощью второй оптической схемы (рис. 1.25,б), обеспечивающей предельно *детерминированное* поведение микрочастицы. Проблематика квантовых вычислительных процессов непосредственно связана с созданием таких условий, при которых обеспечивается синхронизация индивидуальных эффектов квантовой интерференции (протекающих с участием упомянутых выше, не наблюдаемых воочию, «двойников» микрочастиц) для случая более чем одной микрочастицы.

С точки зрения реализации квантовых вычислительных процессов, весьма показательным является эксперимент, схематическое отображение которого представлено на рис. 1.26. По своей сути это тот же эксперимент, что и отображенный на рис. 1.25,б, с тем лишь отличием, что на одном из путей движения фотона расположен элемент задержки во времени в виде тонкой стеклянной пластинки P заданной толщины. Так как исход процесса интерференции между фотоном и его невидимым «двойником» зависит от точных времен их прибытия в детектор, то можно подобрать толщину стеклянной пластинки (и соответственно время задержки движения фотона) таким образом, чтобы фотон достоверно оказывался в детекторе B , а не как это было ранее в детекторе – A . Таким образом можно реализовать систему, в которой состояние квантовой системы становится управляемым, т.е. приобретает детерминированный характер в части обеспечения необходимого исхода. Последнее обстоятельство представляет большой практический интерес.

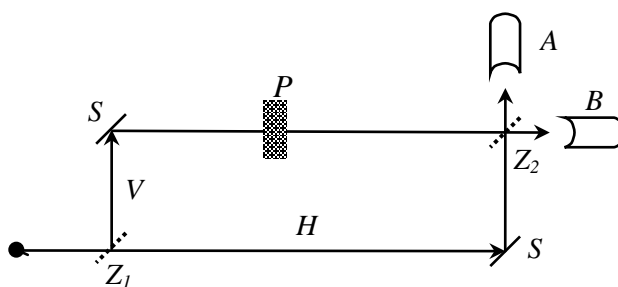


Рис. 1.26. Схематическое отображение квантовой интерференции с элементом задержки во времени

Точно так же, как фотон может находиться в когерентной суперпозиции оптических путей (V и H), так и «кубит» может быть *синтезирован* в виде суперпозиции двух логических (квантовых) состояний, условно представленных в виде «0» и «1». Отметим еще раз суть принципиального различия между «битом» и «кубитом». В «бите» состояние системы *однозначно определено*: «0» или «1». В «кубите» же состояние системы «размазано» в том смысле, что в нем одновременно содержатся оба состояния «0» и «1», представленные в *известной пропорции*. Масштаб представительства состояний «0» и «1» в «кубите» описывается исключительно на основе вероятностных представлений. Именно с этими значениями вероятностей путь движения фотона будет обнаружен детекторами A или B в оптической схеме, представленной на рис. 1.25,а. В этом смысле проявление вероятностного способа описания состояния системы можно рассматривать в качестве негативного сдерживающего психологического фактора на пути построения квантовых вычислительных систем.

Не имеет никакого смысла сетовать на вероятностный характер представления состояния квантово-механических систем, поскольку это представление отслеживает природу физической картины мира. Скорее всего, следует принять во внимание ту точку зрения, что реалии физических проявлений намного обширнее, чем те, которые доступны непосредственному наблюдению.

в) Общие принципы реализации квантовых вычислительных систем

Любой физический процесс, использующий квантовые эффекты для выполнения определенных вычислительных операций, является по своей сути *квантовым алгоритмом* обработки информации. Отличительная особенность квантовых алгоритмов от классических алгоритмов состоит в том, что в квантовом случае:

- элементы памяти в компьютере содержатся не в форме записи в традиционных информационных единицах «бит», а в форме «кубит», обладающих свойством *когерентной*

одночастичной интерференции, что приводит к вероятностной интерпретации параметров состояния ячейки памяти;

- способ обработки информационных массивов в своей методологической основе автоматически реализует принцип параллельных вычислений путем *суперпозиции чисел*, что позволяет рассчитывать на существенное повышение, в перспективе, параметров быстродействия и производительности средств вычислительной техники;

- каждый конкретный «кубит» в квантовой вычислительной системе, содержащей совокупность взаимосвязанных «кубитов», не несет сам по себе никакой информации, пока один из них не будет подвергнут процедуре измерения его состояния в базисе «0 – 1». (Т.е. индивидуальные «кубиты» не обладают изначально никаким смысловым содержанием, аналогичным понятию «бит»);

- в качестве основы математического аппарата при анализе логических операций используются *унитарные преобразования*, а не Булева алгебра (Преобразование считается унитарным, если оно сохраняет норму. В упрощенной интерпретации речь идет о соблюдении принципа нормирования параметров, характеризующих вероятность появления индивидуальных исходов (квантовых состояний): $\sum P_i = 1$, где P_i – вероятности появления событий (исходов), составляющих полную группу).

С учетом вышеизложенных моментов квантовый компьютер можно рассматривать как своего рода «*программируемый интерферометр*», в котором различные вычислительные пути (в частности, в этом качестве выступают оптические пути типа, представленного на рис. 1.25) спланированы таким образом, что их управляемая интерференция приводит к однозначному конечному результату.

В развитие идеи об использовании фактора суперпозиции чисел, который выступает в качестве одного из ключевых позитивных моментов квантовых вычислительных устройств, рассмотрим конкретный пример реализации 3-«битного» регистра памяти на основе классических и квантовых представлений. Классический 3-битный регистр памяти может находиться в одном из восьми устойчивых состояний и тем самым хранить в точности *одно* из восьми различных чисел – {000, 001, 010, 011, ..., 111}. В квантовом 3-битном регистре памяти может находиться *одновременно* до восьми чисел в состоянии квантовой суперпозиции элементарных состояний. При добавлении «кубитов» в регистр памяти его емкость, с точки зрения объема хранения информации, возрастает экспоненциально. В общем случае N «кубитов» могут хранить *одновременно* до 2^N чисел. Таким образом, регистр памяти, выполненный всего лишь на основе 50 «кубитов», может хранить одновременно количество чисел, эквивалентное объему памяти современных (классических) компьютеров 100 Гб. (При $N = 250$ регистр памяти может хранить одновременно количество чисел, превосходящее количество атомов в видимой части Вселенной!).

С точки зрения специфики методологии выполнения квантовых вычислительных операций следует отметить следующие характерные моменты:

- обращение к регистру памяти квантового компьютера выделяет одно число из всей совокупности хранящихся в ней 2^N чисел (информационных единиц), находящихся в состоянии квантовой суперпозиции;

- нетривиальные квантовые вычислительные операции, основанные на принципах когерентной интерференции, производятся одновременно на всем массиве, хранящихся в памяти компьютера чисел.

Как упоминалось выше, индивидуальные «кубиты» выполняются на основе физических объектов атомного масштаба. Перевод их состояния (в частности энергетического), условно представляемого

(0 – 1), осуществляется посредством использования факторов внешнего возмущающего воздействия (например – лазерными импульсами). В результате такого воздействия начальная суперпозиция закодированных чисел переходит в новую суперпозицию. В процессе эволюции *каждое число* из общего количества совокупности чисел в квантовой суперпозиции одновременно подвергается управляющему воздействию, что обеспечивает проведение значительного объема вычислений за один шаг работы в *параллельном режиме* обработки информации.

Таким образом, квантовый компьютер может за один шаг вычислений произвести операцию над массивом объемом в 2^N чисел, результатом которой будет новая суперпозиция всех этих чисел, представляющих совокупность выходных данных процесса вычисления. Для того чтобы выполнить аналогичную задачу на компьютере классического типа, ему необходимо последовательно произвести 2^N вычислительных операций или использовать (для обеспечения одношагового режима обработки всего массива начальных и промежуточных информативных данных) такое же количество параллельно работающих процессоров. Именно исходя из вышеизложенных моментов следуют те ожидаемые преимущества в сокращении времени обработки информации и необходимого объема памяти при использовании квантовых вычислительных устройств.

Структуры атомного масштаба, реализующие «кубиты», являются очень уязвимыми с точки зрения обеспечения их помехоустойчивости к воздействию внешних неблагоприятных факторов окружающей среды. Эти факторы могут вызвать дестабилизацию процессов когерентной интерференции (*квантовая декогерентность*) и тем самым полностью нарушить как вычислительные операции, так и сохранность информации в виде квантовой суперпозиции состояний «кубита». Фактор декогерентности состояния квантовой системы можно представить как следствие своеобразного «перепутывания» квантовых состояний рассматриваемой системы с квантовыми состояниями окружающей среды (с позиции классической физики, выступающей в качестве термостата).

Проблематика помехоустойчивости информационных и измерительных средств имеет фундаментальный характер и является актуальной и для классических компьютеров, однако ее масштабы в этом случае будут гораздо меньше, чем для квантовых компьютеров. Последнее находит свое объяснение в том, что технические устройства, реализующие понятие «бит», по своей сути (несмотря на малые размеры), являются все же макроскопическими системами (к примеру, транзисторная структура с линейным размером 0.1 мкм содержит в своем составе порядка 10^9 атомов). Ввиду того обстоятельства, что элементы конструкций классических компьютеров имеют, как правило, макроскопические объемы, то у них энергия управляющих воздействий, на много порядков превосходит энергию шумовой (дестабилизирующей) составляющей, сравнимой с энергетическим масштабом тепловых флуктуаций: $kT = 0.025$ эВ (при $T = 300$ К). В квантовых компьютерах в качестве исполнительных устройств, реализующих «кубиты», выступают индивидуальные микрочастицы (электрон, ион, атом, фотон и т.д.), и в этом случае влияние шумовой составляющей может быть весьма значительным (поэтому неслучайно, что ряд экспериментальных апробаций элементов конструкций квантовых компьютеров производится при температурах, близких к абсолютному нулю).

Эффективным направлением решения проблемы декогерентности является использование методов квантового *исправления* или *коррекции* набегающих ошибок. Они основаны на том принципе, что состояние единичного «кубита» можно закодировать в перепутанных состояниях нескольких «кубитов» (этот подход близок по своей принципиальной сути к методам резервирования, достаточно широко используемым в классических компьютерах). Однако в случае квантовых компьютеров, в связи с большей чувствительностью самих перепутанных состояний к фактору декогерентности, необходим более тонкий компромисс между процессами неизбежного добавления дополнительных ошибок и их исправления.

Существует ряд других альтернативных способов борьбы с проявлением процесса декогерентности квантовых систем, но они имеют достаточно сложную физическую природу и их

понимание требует специальную физико-математическую подготовку (гораздо шире традиционных курсов подготовки инженерных кадров технических направлений). В этой связи они не рассматриваются в рамках настоящего пособия.

г) *Символьный формализм представления квантовых состояний и процессов*

Как показано выше, при рассмотрении физических основ квантовой механики в качестве основополагающих представлений фигурируют амплитуда вероятности ПМВ де Бройля и волновые функции $\Psi(x, y, z, t)$ (см. разд. 1.1.). Поскольку в дальнейшем изложении эти волновые представления используются достаточно широко, в целях удобства рассмотрения будет применено их сокращенное символьное обозначение – «скобки Дирака». Использование скобок Дирака приводит к существенному сокращению формы записи и повышению наглядности представления промежуточных и конечных результатов анализа.

Рассмотрим сущность и методологию практического использования скобок Дирака [1] на ряде характерных примеров, представляющих интерес в свете тематики квантовых компьютеров.

Пример № 1. «Прохождение одной микрочастицы через экран с одной щелью».

Допустим, что микрочастица испускается из точки s и в конечном итоге попадает в точку x . Согласно общим принципам квантовой механики, для описания этого процесса необходимо определить *амплитуду вероятности* сложного события – «частица покидает s и частица попадает в x ». В символьном отображении с помощью скобок Дирака этот же процесс (как совокупность независимых событий) отображается в виде

$$\phi(s, x) = \langle \text{Частица попадает в точку } x \mid \text{Частица покидает точку } s \rangle. \quad (1.87)$$

Следует отметить, что выражение (1.87) представляет собой всего-навсего *некоторое комплексное число, квадрат которого равен вероятности реализации данного сложного события*. Для «расшифровки» смыслового значения выражения (1.87) его следует читать справа – налево, т.е. микрочастица сначала покидает точку s , а затем переходит в точку x .

Скобки $\langle \rangle$ в выражении (1.87) являются символьным эквивалентом тривиальной фразы – «амплитуда вероятности того, что микрочастица вылетает из точки s и попадает в точку x ». Выражение *справа* от вертикальной черты всегда задает *начальное условие* рассматриваемого процесса, а выражение *слева* – *конечное условие* процесса. В более лаконичном представлении амплитуду вероятности, отображенную в (1.87), принято записывать в виде

$$\langle x \mid s \rangle. \quad (1.88)$$

Если на пути движения микрочастицы имеется достаточно узкая щель, через которую она должна непременно пройти для последующего попадания в точку x , то весь путь микрочастицы можно разбить на два независимых участка: участок « s – щель»; участок «щель – x » (рис. 1.27).

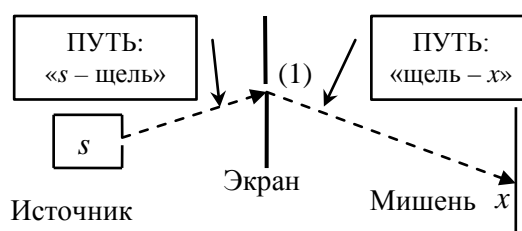


Рис. 1.27. Прохождение микрочастицы через одиночную щель

Когда микрочастица перемещается по такой определенной двухступенчатой траектории, то амплитуда (т.е. вероятность) для этого пути будет равна *произведению амплитуд* отдельных участков траектории:

$$\langle x|s \rangle_{(1)} = \langle x|1 \rangle \cdot \langle 1|s \rangle, \quad (1.89)$$

где $\langle 1|s \rangle$ – амплитуда прохождения участка пути «источник – щель»; $\langle x|1 \rangle$ – амплитуда прохождения участка пути «щель – мишень».

Степень детализации описания процесса может быть расширена путем включения в рассмотрение более полного круга факторов, стоящих на пути реализации процесса прохождения микрочастицы. К примеру, выражение (1.89) можно представить и в таком развернутом виде:

$$\langle x|s \rangle_{(1)} = \langle x|1 \rangle \cdot \langle 1|1 \rangle \cdot \langle 1|s \rangle, \quad (1.90)$$

где $\langle 1|1 \rangle$ – амплитуда прохождения микрочастицей щели в экране (см. рис. 1.27).

Пример № 2. «Прохождение одной микрочастицы через экран с двумя щелями».

Согласно [1] следует тот факт, что если микрочастица может достигнуть некоторой точки пространства с помощью двух различных независимых путей (условно «1» и «2») прохождения, то вероятность P_{1-2} ее обнаружения в данной точке равна *квадрату модуля от суммы амплитуд вероятностей* этих вариантов путей. Следует отметить, что исходя из представлений классической физики, следует ожидать сумму вероятностей прохождения отдельных вариантов путей. Физическую сущность этого расхождения составляет учет явления интерференции индивидуальных вероятностных волн де Бройля:

$$P_{1-2} = |\varphi_1(x, y, z, t) + \varphi_2(x, y, z, t)|^2. \quad (1.91)$$

С помощью символов Дирака для случая двух щелей на экране амплитуду процесса перехода микрочастицы от точки s к точке x можно отобразить в следующей лаконичной форме:

$$\langle x|s \rangle_{(1-2)} = \langle x|s \rangle_1 + \langle x|s \rangle_2, \quad (1.92)$$

или, с учетом выражения (1.90), можно представить этот процесс и в более развернутом (детализированном) представлении:

$$\langle x|s \rangle_{(1-2)} = \langle x|1 \rangle \cdot \langle 1|1 \rangle \cdot \langle 1|s \rangle + \langle x|2 \rangle \cdot \langle 2|2 \rangle \cdot \langle 2|s \rangle. \quad (1.93)$$

В зависимости от целевых постановок практических задач, процесс детализации рассмотрения может быть продолжен дальше. В частности, принимая во внимание фактор конечной протяженности щелей, можно поставить вопрос о конкретизации интервала щели, через который проходит микрочастица.

Пример № 3. «Прохождение n микрочастиц через экран с одной щелью».

Пусть имеется n не взаимодействующих между собой микрочастиц, которые испускаются из различных точек пространства s_i (где i – натуральное число, пробегающее ряд значений в диапазоне величин $\{1, \dots, n\}$) и, проходя через одну щель на экране, попадают соответственно в различные точки пространства x_i . В этом случае амплитуда вероятности сложного процесса, состоящего из совокупности отдельных независимых процессов перемещения отдельных микрочастиц, будет равна произведению амплитуд вероятности отдельных процессов:

$$\langle x_1, x_2, \dots, x_n | s_1, s_2, \dots, s_n \rangle_{(1)} = \prod_{i=1}^n [\langle x_i | 1 \rangle \cdot \langle 1 | s_i \rangle]. \quad (1.94)$$

В выражении (1.94) фактор отсутствия взаимодействия между микрочастицами нашел свое отражение в отсутствии интерференционных составляющих.

Пример № 4. «Представление квантового состояния единичного кубита».

В предыдущих примерах рассмотрено использование формализма скобок Дирака для описания не только состояний системы (начального и конечного), но и отображения пути ее эволюции в процессе перехода от начального состояния к конечному состоянию системы. В рамках задач вычислительной техники используется более узкая постановка вопроса, а именно представление только информационного состояния системы (элементарной ячейки памяти).

Информационное состояние ячейки памяти в современных вычислительных устройствах описывается в «битовом» представлении, что предполагает *однозначную* трактовку состояния системы, условно отображаемую символами «1» или «0». Эта однозначность при определении состояния информационной ячейки обусловлена тем обстоятельством, что эти ячейки памяти являются (по физической сути используемых принципов записи информации) объектами рассмотрения классической физики, основанной на детерминированных подходах.

В случае использования в качестве носителя информации «кубита» указанная однозначность состояния ячейки памяти не имеет места ввиду специфики квантово-механических принципов записи информации. Поскольку кубит является типичным представителем квантово-механических объектов (здесь уместно напомнить как о принципе неопределенностей Гейзенберга, так и вероятностном (волновом) представлении квантовых объектов и процессов), его состояние может быть описано на основе вероятностных представлений.

Если состояние кубита (условно «0» или «1») определено со стопроцентной достоверностью (предельный случай), то такое идеализированное состояние рассматривается как *базисное состояние*, и его принято обозначать в символьном виде с помощью модифицированных скобок Дирака, соответственно $|0\rangle$ или $|1\rangle$. В общем случае (т.е. в реальных квантово-механических системах) состояние кубита $|Q\rangle$ располагается где-то между идеализированными базовыми состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$ и в этой связи его принято представлять в символьном виде:

$$|Q\rangle = a \cdot |0\rangle + b|1\rangle, \quad (1.95)$$

где $|a|^2$ и $|b|^2$ – соответственно вероятности обнаружения (посредством проведения процедуры диагностики состояния кубита) альтернативных исходов: $|0\rangle$ или $|1\rangle$.

Поскольку базовые состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ составляют полную группу исходов при проведении процедуры диагностики состояния кубита, то параметры a и b должны удовлетворять очевидному условию нормировки:

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (1.96)$$

Важно отметить, что после проведения процедуры диагностики состояния кубита он может перейти во вполне определенное квантовое состояние, т.е. происходит устранение начальной неопределенности и поэтому кубит переходит в разряд информационных объектов, описываемых подходами классической физики. Таким образом, можно считать, что сам факт проведения процедуры «правильной» диагностики состояния кубита может привести к *устранению начальной неопределенности* физической системы, на основе которой реализован кубит.

Для иллюстрации этого момента рассмотрим конкретный пример кубита. Пусть начальное квантовое состояние кубита (т.е. до проведения процедуры диагностики его состояния) описывается с помощью выражения

$$|Q\rangle = \frac{2}{6} \cdot |0\rangle + \frac{4}{6}|1\rangle, \quad (1.97)$$

где $\frac{2}{6} = a$; $\frac{4}{6} = b$ (см. выражение (1.95)).

Запись вида (1.97) отражает тот факт, что базисное состояние $|0\rangle$ представлено в кубите с вероятностью $\left(\frac{2}{6}\right)^2 \approx 11\%$, а базисное состояние $|1\rangle$ – с вероятностью $\left(\frac{4}{6}\right)^2 \approx 89\%$. После проведения процедуры диагностики может получиться так, что кубит перейдет в новое квантовое состояние, которое будет определяться выражением

$$|Q\rangle = 1 \cdot |0\rangle + 0 \cdot |1\rangle, \quad (1.98)$$

т.е. при проведении последующей процедуры диагностики базовое состояние $|0\rangle$ будет обнаружено со 100 % вероятностью, а базовое состояние $|1\rangle$ будет иметь нулевую вероятность обнаружения.

Пример № 5. «Представление квантового состояния системы из n кубитов».

Рассмотрим общие принципы анализа информационной емкости n кубитов на примере простой системы, состоящей всего из двух кубитов. Согласно вышеизложенному, диагностика квантового состояния каждого из кубитов позволит в итоге определить его состояние в классическом приближении «0» или «1». В целом у системы из двух кубитов имеется четыре классических состояния («00», «01», «10», «11»), которым можно поставить в соответствие четыре квантовых базисных состояния: $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$. Таким образом, общее квантовое состояние системы, состоящей из двух кубитов, можно выразить в виде суммы базисных состояний:

$$|Q\rangle = a \cdot |00\rangle + b \cdot |01\rangle + c \cdot |10\rangle + d \cdot |11\rangle, \quad (1.99)$$

где $|a|^2, |b|^2, |c|^2, |d|^2$ – соответственно вероятности обнаружения (до проведения процедуры диагностики) базовых состояний квантовой двух-кубитой информационной системы: $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$.

После проведения процедуры диагностики состояния рассматриваемой системы ее квантовое состояние может быть представлено в виде (приведен один из возможных вариантов исхода процедуры диагностики):

$$|Q\rangle = 0 \cdot |00\rangle + 1 \cdot |01\rangle + 0 \cdot |10\rangle + 0 \cdot |11\rangle. \quad (1.100)$$

Полученные результаты можно без труда распространить на случай информационной системы (блока памяти вычислительного устройства), содержащей в своем составе n кубитов. Необходимо отметить, что процедура диагностики затрагивает *сразу весь массив* исходных данных емкостью 2^n , находящихся в вычислительной среде. Последнее обстоятельство обеспечивает беспрецедентный *параллелизм* вычислительных операций, который не имеет своего аналога в классических системах обработки информации. Этот параллелизм открывает новые возможности в повышении ключевых тактико-технических показателей вычислительной техники, в частности, он позволяет:

- существенно *повысить быстрдействие вычислительных процессов* при обработке чрезвычайно больших массивов информационных потоков, а следовательно, повысить параметры производительности вычислительных систем;
- существенно *снизить количество индивидуальных ячеек памяти*, необходимых для хранения информации, а следовательно, и для практической реализации блоков памяти перспективных высокопроизводительных вычислительных систем.

Приведенные выше примеры позволяют перейти к рассмотрению общих принципов и концепции квантовых вычислительных процессов.

д) Суперпозиция квантовых состояний как основа вычислительных операций

Общая теория алгоритмов квантовых вычислительных процессов находится на стадии своего становления. В настоящее время можно лишь с уверенностью говорить только о некоторых общих

подходах к решению этой проблематики и ряде оригинальных алгоритмов частного характера, которые, тем не менее, способны пролить свет на концептуальную основу квантовых вычислительных процессов.

Рассмотренный выше принцип когерентной квантовой интерференции (суперпозиции) квантовых состояний играет ключевую роль как в вопросах постановки большинства мысленных экспериментов квантовой механики, так и квантовой информации и реализации вычислительных алгоритмов. С позиции рассматриваемой проблематики к подобному мысленному эксперименту следует отнести эксперимент с «двумя щелями». Необходимыми составляющими этого базового эксперимента являются: источник микрочастиц, экран с двумя щелями и экран, на котором формируется интерференционная картина. Физическая природа этой интерференционной картины отражает волновые квантово-механические свойства микрочастиц, испускаемых источником. С позиции практических интересов создания квантовых вычислительных устройств важно отметить, что эффект интерференции наблюдается для микрочастиц различного типа: фотоны, электроны, атомы, нейтроны. С точки зрения представлений квантовой механики, рассматриваемая интерференционная картина является примером представленной выше *когерентной интерференции* (см. пункт (б) настоящего раздела), которая может быть отображена с помощью волнового представления в виде

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle), \quad (1.101)$$

где фрагменты $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ – описывают квантовые состояния в том случае, если открыта только щель (1) или щель (2); $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = 0.5$ – отражает тот факт, что вероятности прохождения микрочастицей щелей (1) и (2) приняты одинаковыми (50 %).

Важным обстоятельством в эксперименте с двумя щелями является тот факт, что интерференционная картина наблюдается и в случае прохождения всего лишь одной микрочастицы (*одночастичная интерференция* – при которой частица «интерферирует» сама с собой). Этот феномен не имеет классического аналога и в этой части расходится со «здравым смыслом», который, воспринимая ее в качестве локализованного объекта, пытается ответить на вопрос – «через какую же щель проходит микрочастица?». С позиции квантовой механики эксперимент, поставленный с целью ответить на этот вопрос, приводит к взаимодействию «измерительного (диагностического) прибора» с объектом, в результате которого происходит эффект *декогерентности*, т.е. к потере интерференции. Таким образом, ответ на поставленный вопрос устраняет *начальную неопределенность* состояния квантовой системы и переводит ее в разряд *детерминированных* объектов классической физики. Последнее обстоятельство представляется важным с позиции взаимодействия макроскопического наблюдателя (оператора) с вычислительным устройством, использующим квантово-механические принципы обработки информации.

В этой связи рассмотренное выше символьное представление кубита (см. выражение (1.95)) описывает *когерентную суперпозицию* квантовых состояний, для которых существует понятие *базиса* ($|a|^2 + |b|^2 = 1$), а не просто «механическую» смесь независимых состояний – (0) или (1).

Рассмотрим процесс реализации декогерентности состояния квантовой системы на конкретном примере использования *преобразования Адамара* – одного из основных алгоритмических приемов в науке о квантовой информации [9]. Пусть имеется одиночный кубит, у которого начальное информативное состояние определяется выражением

$$|Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle). \quad (1.102)$$

Как показано выше (см. выражение (1.101)), подобная форма описания кубита означает, что индивидуальные состояния (0) и (1) представлены в кубите с вероятностью обнаружения 50 %. По своей сути преобразование Адамара является специфическим оператором H , воздействие которого на кубит проявляется следующим образом:

$$H|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad H|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (1.103)$$

Знак минус во втором выражении не должен вызывать недоразумение, поскольку физическим смыслом обладает только квадрат амплитуды $1/\sqrt{2}$.

Применим преобразование Адамара в форме (1.103) непосредственно к самому кубиту (1.102):

$$\begin{aligned} H|Q\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (H|0\rangle + H|1\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|0\rangle + |1\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle. \end{aligned} \quad (1.104)$$

Из выражения (1.104) следует, что в результате воздействия преобразования Адамара на кубит последний (с *неопределенным* начальным состоянием) переходит в новое конечное квантовое состояние, которому соответствует 100% содержание состояния $|0\rangle$, т.е. имеет место *полная определенность* состояния кубита.

Следует обратить особое внимание на тот факт, что к конечной форме выражения (1.104) *неприменимы* обычные «арифметические» операции, и в частности сложение математических фрагментов:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \neq \frac{2}{\sqrt{2}}|0\rangle. \quad (1.105)$$

Последнее обусловлено тем обстоятельством, что это выражение отражает всего лишь фактор суперпозиции индивидуальных квантовых состояний. В этой связи смысловое содержание выражения (1.104) можно трактовать следующим образом: «да, действительно имеют место два независимых исхода измерения, но они оба имеют одинаковый конечный результат».

е) Общие физико-технические принципы преобразования информационного состояния кубитов

Рассмотрим общие физико-технические принципы преобразования информационного состояния кубитов на примере ряда базовых элементов, составляющих основы квантовых вычислительных сред.

Базовый элемент на основе деления входных сигналов

Рассмотрим одну из базовых экспериментальных операций в физике квантовой информации на примере простого делителя света, который делит луч света в отношении 50/50. В качестве такого делителя используется полупрозрачное зеркало, которое с вероятностью 50 % может как отразить, так и пропустить наклонно падающий на зеркальную поверхность единичный фотон (отметим, что такие делители в настоящее время реализованы не только для фотонов, но и для широкого круга других микрочастиц).

Для общности рассмотрения возьмем случай *двух наклонно входящих* в делитель фотонов (падающих сверху и снизу относительно зеркальной плоскости), как это представлено на рис. 1.28.

Микрочастица, падающая по наклонной (относительно полупрозрачной зеркальной поверхности делителя «50/50») траектории на делитель сверху или снизу, может в дальнейшем появиться либо в верхнем, либо в нижнем полупространстве, с одной и той же вероятностью ее

обнаружения, а именно, в точности равной 50 %. Подобрав соответствующим образом фазовое действие делителя, можно таким образом реализовать процесс прохождения микрочастицы, чтобы выполнялась процедура преобразования Адамара (см. выражение (1.103)).

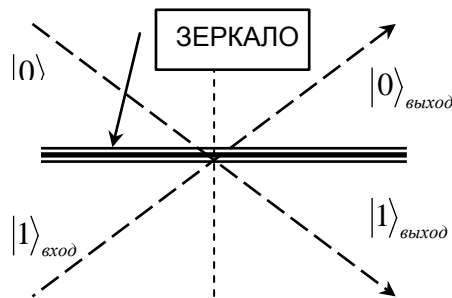


Рис.1.28. Схематическое отображение делителя 50/50

Для случая одной частицы, состояние на входе кубита, реализующего делитель оптического луча «50/50», можно представить в виде

$$|Q\rangle_{\text{вход}} = \alpha \cdot |0\rangle_{\text{вход-сверху}} + \beta \cdot |1\rangle_{\text{вход-снизу}}, \quad (1.106)$$

где α и β – соответственно амплитуда вероятности обнаружения частицы, падающей на делитель сверху и снизу.

В результате действия делителя получается конечное состояние кубита, отображаемое в виде

$$|Q\rangle_{\text{выход}} = H|Q\rangle_{\text{вход}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot [(\alpha + \beta) \cdot |0\rangle_{\text{выход-сверху}} + (\alpha - \beta) \cdot |1\rangle_{\text{выход-снизу}}]. \quad (1.107)$$

В соответствии с выражением (1.107) можно сформулировать ряд практически важных выводов:

- амплитуда вероятности обнаружить прошедший (выходящий) фотон в верхнем полупространстве составляет $(\alpha + \beta)$;
- амплитуда вероятности обнаружить прошедший (выходящий) фотон в нижнем полупространстве составляет $(\alpha - \beta)$;
- если амплитуды удовлетворяют условиям $\alpha = 0$ или $\beta = 0$, то вероятности обнаружения выходящей микрочастицы в верхнем или нижнем полупространстве будут одинаковы;
- если амплитуды удовлетворяют условию $\alpha = \beta$, то вероятность обнаружения выходящей микрочастицы в верхнем полупространстве становится равной единице, т.е. при этом условии происходит снятие начальной неопределенности состояния кубита и оно становится строго однозначно определенным.

Можно использовать последовательность с двумя одинаковыми делителями 50/50 (интерферометр Маха-Цандера, рис. 1.29).

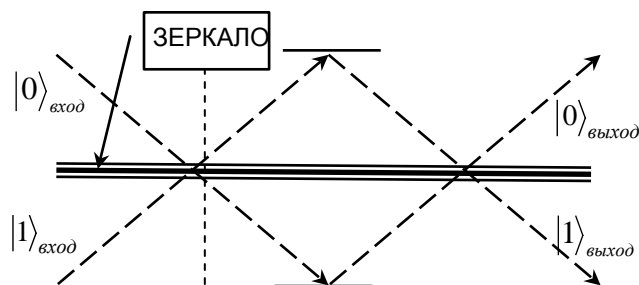


Рис.1.29. Интерферометр Маха-Цандера

В случае двойного применения преобразования Адамара суммарное действие системы на входные сигналы сводится к тождественному преобразованию:

$$|Q\rangle_{\text{выход}} = HH|Q\rangle_{\text{вход}} = |Q\rangle_{\text{вход}}. \quad (1.108)$$

Интересно отметить, что когда на интерферометр Маха-Цандера подается всего один входной сигнал (например: верхний канал – $\alpha = 1$, а нижний входной канал – «пустой»), то:

- на выходе системы микрочастица *всегда* будет обнаружена наверху (реализация детерминированного состояния кубита);
- между делителями 50/50 микрочастица с одинаковой вероятностью может быть обнаружена как сверху, так и снизу (состояние кубита максимально неопределенное).

Базовый элемент на основе вариации фазы входного сигнала

Следующим базовым квантовым логическим элементом является сочетание преобразователя Адамара и фазовращателя (рис. 1.30).

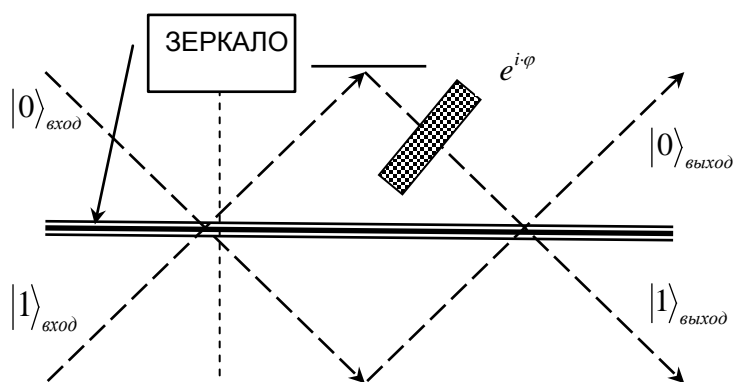


Рис.1.30. Интерферометр Маха-Цандера с фазовращателем

В качестве фазовращателя (фотонов) может выступать стеклянная пластинка конечной толщины. Физическая суть фазовращателя состоит в том, что он производит изменение фазы у одного из пучков. В символическом представлении его действие можно отобразить в виде (на примере верхнего входного пучка)

$$\Phi|0\rangle = e^{i\cdot\varphi} \cdot |0\rangle, \Phi|1\rangle = |1\rangle. \quad (1.109)$$

Кубит по схеме, представленной на рис. 1.30, описывается согласно выражениям (1.108) и (1.109) в виде

$$|Q\rangle_{\text{выход}} = H\Phi H|Q\rangle_{\text{вход}}. \quad (1.110)$$

Если на входе этого кубита присутствует один пучок ($\alpha = 1, \beta = 0, |Q\rangle_{\text{вход}} = |0\rangle$), то выражение (1.110) трансформируется к виду

$$H\Phi H|0\rangle = \frac{1}{2} \left[(e^{i\cdot\varphi} + 1) \cdot |0\rangle + (e^{i\cdot\varphi} - 1) \cdot |1\rangle \right]. \quad (1.111)$$

Согласно выражению (1.111) можно сделать ряд выводов относительно состояния кубита в зависимости от фазового угла φ :

- если фазовый угол $\varphi = 0$, то значение (состояние) кубита строго определено и равно логической позиции «0»;
- если фазовый угол $\varphi = \pi$, то значение кубита также строго определено и равно логической позиции «1»;

- фазовый угол φ может выступать в роли фактора, способного переключать состояние кубита между логическими позициями «0» и «1»;
- при промежуточных значениях фазового угла $0 < \varphi < \pi$ вероятность состояния «0» равна значению $\cos^2(\varphi/2)$, а вероятность состояния «1» – $\sin^2(\varphi/2)$.

Базовый элемент по обеспечению перепутывания состояний индивидуальных кубитов

Рассмотрим более сложную в аппаратном плане схему, состоящую из двух рассмотренных выше кубитов с фазовращателем и нового элемента – источника микрочастиц S (рис. 1.31). Источник S синхронно испускает пару микрочастиц, обладающих противоположным импульсом, таким образом, что частица, летящая налево (условно №1), обнаруживается в верхнем пучке, а частица (условно №2), летящая направо, будет обнаружена в нижнем пучке. И наоборот, если частица №1 обнаружена в нижнем пучке, то частица №2 будет в верхнем пучке.

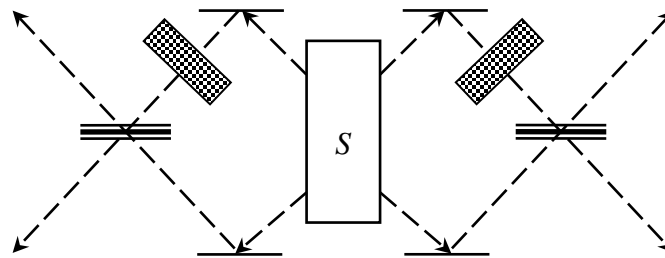


Рис.1.31. Система, реализующая перепутывание квантовых состояний двух кубитов

В рамках принятого формализма кубитов можно считать, что эти микрочастицы несут противоположные значения логических переменных – «0» или «1». В используемом символическом представлении указанное двухчастичное состояние системы в общем случае можно отобразить в следующем виде:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle_1 |1\rangle_2 + e^{i\chi} \cdot |1\rangle_1 |0\rangle_2 \right], \quad (1.112)$$

где χ – разность фаз у испускаемых источником S микрочастиц, в дальнейшем принятая равной нулю.

Выражение (1.112) описывает такое специфическое состояние системы, которое получило название *перепутанного состояния*. Главной особенностью такого перепутанного состояния является то, что ни один из двух кубитов (справа и слева) не имеет изначально определенного значения. Но как только один из этих кубитов будет подвергнут процедуре измерения, то сразу «выяснится» определенное значение у другого кубита. Подобная «чувствительность» системы на внешнее возбуждение (т.е. измерения состояния одного из кубитов в системе) тем более неожиданно с классической точки зрения, если учесть тот факт, что в пространственном отношении оба кубита могут быть разнесены на очень большие расстояния.

Аналогичным образом можно создать перепутывание для произвольного количества кубитов. К примеру, частный случай перепутывание квантовых состояний трех кубитов (состояние Гринберга-Хорна-Цайлингера (ГХЦ)) можно описать с помощью выражения (при разности фаз $\chi = 0$)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle_1 |0\rangle_2 |0\rangle_3 + |1\rangle_1 |1\rangle_2 |1\rangle_3 \right], \quad (1.113)$$

И в этом случае, как только состояние одного из кубитов будет определено, два других кубита приобретут строго определенное значение.

С практической точки зрения представляется немаловажным, что существует достаточно много физико-технических систем, создающих перепутанные состояния. Это реализуется, в частности, при прохождении распада частиц со спином равным нулю на две микрочастицы со спином $1/2$, при условии сохранения внутреннего момента импульса системы в целом. В этом случае спины возникающих частиц имеют противоположные знаки и квантовое состояние такой системы можно представить в виде

$$\psi_{1-2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \right], \quad (1.114)$$

где с помощью стрелок указаны квантовые состояния, соответствующие различным направлениям спина у микрочастиц.

1.3.2. Экспериментальные методы реализации квантовых компьютеров

а) Проблематика экспериментальной реализации квантовых компьютеров

В предыдущем разделе были рассмотрены общие теоретические аспекты, которые могут быть положены в основу практической реализации квантовых компьютеров. Согласно вышеизложенным материалам следует, что для реализации хотя бы одного логического элемента и вычислительной среды в целом необходимо:

- чтобы имелась система сильно взаимодействующих квантовых систем (образующих совокупность кубитов и элементов перепутывания квантовых состояний), выполненных на основе физических структур атомного масштаба;
- каждый индивидуальный кубит представлял собой автономную двухуровневую квантовую систему, в том смысле что обладал бы двумя устойчивыми и различимыми квантовыми состояниями;
- используемые для построения кубитов атомные структуры были бы практически абсолютно изолированы от неблагоприятного возмущающего воздействия факторов внешней среды.

В настоящем разделе представлен ряд экспериментальных методов (как возможных направлений на пути создания квантовых компьютеров), демонстрирующих принципиальные и технические аспекты реализации вычислительных сред на основе квантово-механических принципов. В современной экспериментальной практике наиболее широкое распространение получили методы, которые, несмотря на ряд пересечений в объектных и физических аспектах, можно с некоторой долей условности отнести к принципиально отличимым классам:

- квантовая электродинамика атомов в резонаторах (метод КЭР);
- ядерный магнитный резонанс (метод ЯРМ);
- ионные ловушки линейного типа.

У всех представленных выше экспериментальных методов есть свои достоинства и недостатки, в части возможности перекрытия всего диапазона практических аспектов, возникающих при создании квантовых вычислительных сред.

Эксперименты по КЭР являются прекрасным способом реализации (демонстрации) основных квантовых логических операций как таковых, однако осуществление большого массива операций вызывает существенные трудности принципиального и технического характера. В рамках методологии КЭР индивидуальные атомы (или ионы в магнитной ловушке), расположенные внутри оптического резонатора, рассматриваются в качестве двухуровневой системы, которая взаимодействует с внешним квантовым гармоническим осциллятором, выступающим в качестве внешнего управляющего фактора.

Решение проблемы увеличения масштабов вычислительных операций представляется более обещающим при использовании метода линейных ионных ловушек. В этом методе основная проблема заключается в создании сильно охлажденной цепочки ионов в ловушке линейного типа. Эту цепочку атомов можно рассматривать в качестве набора (регистра) индивидуальных кубитов, внешнее управление которым обеспечивается с помощью сфокусированного лазерного пучка. Решая успешно масштабный фактор, этот метод испытывает определенные ограничения в плане расширения номенклатуры элементарных логических операций.

Метод ЯРМ использует квантовые переходы между подуровнями атомных ядер в результате их взаимодействия с внешним магнитным полем. Этим методом продемонстрирована возможность выполнения небольшой последовательности элементарных квантовых (логических) операций на кубитах, в качестве которых выступают ядерные спины внутри отдельных молекул. Чрезвычайное разнообразие известных в настоящее время молекулярных систем расширяет практические возможности этого метода реализации вычислительных процессов.

Существует ряд альтернативных подходов к созданию квантовых вычислительных сред на основе твердотельных устройств (аналогов современных интегральных схем). Предпочтительность этих подходов с точки зрения функциональных возможностей твердотельных устройств не вызывает сомнений. Однако весьма скромные практические результаты и стремление разработчиков как правило, реализовать полные аналоги существующих систем (основанных на классических принципах) до наноразмерного масштаба расходятся с проблематикой задач настоящего раздела.

Ниже будут продемонстрированы основные принципы создания квантовых вычислительных сред на примере метода КЭР.

б) Эксперименты по созданию вычислительных сред методом КЭР

Метод КЭР исследовался как в оптическом, так и микроволновом диапазоне. Основные физико-технические принципы проведения экспериментов в этих диапазонах достаточно близки. И в том, и в другом случае атом (или ион в электромагнитной или электростатической ловушке) представляет собой двухуровневую квантовую систему, взаимодействующую с внешним квантовым гармоническим осциллятором. В первом случае энергетическое состояние двухуровневого атома связывается с параметрами электромагнитной волны в резонаторе. Во втором случае – различные внутренние энергетические состояния индивидуального иона связываются с колебательными степенями свободы иона, находящегося в электромагнитной ловушке.

Поскольку в обоих случаях имеет место взаимодействие индивидуальных микрочастиц с электромагнитным полем, это взаимодействие может быть представлено гамильтонианом H одинакового вида (в упрощенной постановке, гамильтониан, для консервативных физических систем представляет собой полную энергию системы, то есть в классическом представлении сумму кинетической и потенциальной энергий системы) [9]:

$$H = -\frac{\hbar \cdot \Omega}{2 \cdot \pi} (a^- \cdot \sigma^+ + a^+ \cdot \sigma^-), \quad (1.115)$$

где a^+ и a^- – операторы рождения (+) и гибели (-) квантового осциллятора в системе; Ω – постоянная связи; σ^+ и σ^- – весовые операторы, повышающие или понижающие вероятность образования двухуровневой энергетической системы.

По своей физической сути, гамильтониан (1.115) отражает процессы генерации и рекомбинации фотонов (для случая атомной системы) или фононов (для случая ионной системы), благодаря которым происходит изменение начального энергетического состояния исходных микрочастиц (атомов или ионов). Несмотря на существенные различия в экспериментальном плане, атомно-резонаторные и ионно-ловушечные методы описываются в рамках единых

теоретических представлений и моделей. И в том, и другом случае предполагается, что в качестве необходимых ключевых моментов экспериментальной практики выступает следующий круг факторов:

- обеспечение *точного равенства собственных частот* гармонического осциллятора, выступающего в роли инициатора энергетического возмущения и квантового перехода в рассматриваемой двухуровневой атомной (ионной) системе;
- реализация *режима сильной связи*, при котором взаимодействие, представленное выражением (1.115), выступает в качестве доминирующего процесса над всеми остальными возможными паразитными процессами релаксации системы и, в частности, такими как спонтанное излучение, фотон-фононное затухание и фазовая декогерентность, обусловленная влиянием теплового шума;
- достаточная, с точки зрения реализации элементарной вычислительной процедуры, *продолжительность метастабильного состояния* атомной (ионной) системы, находящейся в возбужденном квантовом состоянии;
- высокая степень *низкотемпературной* (порядка 0.6 К) стабилизации рабочей зоны, в которой происходит квантовый переход;
- обеспечение *высокой добротности резонатора* ($10^8 - 10^9$), ответственного за реализацию энергетического взаимодействия между внешним гармоническим осциллятором и атомной системой, испытывающей квантовый переход.

Суть метода КЭР состоит в том, что единичные атомы поставляются в резонатор, в котором они выступают в роли своеобразных антенн, поглощающих энергию единичного кванта электромагнитного излучения. В качестве таких атомов выступают циркулярные ридберовские атомы [10], имеющие достаточно долгоживущие энергетические состояния, с значениями главных квантовых чисел n_g порядка 50 (этому состоянию можно поставить в соответствие символьное отображение $|g\rangle$). Под воздействием кванта электромагнитного излучения указанный атом переходит в новое квантовое состояние $|e\rangle$ со значением $n_e = 51$, в результате чего его энергия возрастет на величину $\Delta W_{g \rightarrow e}$, равную (в рамках модели «микрочастица в потенциальном ящике», см. выражение (1.23)):

$$\Delta W_{g \rightarrow e} = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot L^2} \cdot (n_e^2 - n_g^2). \quad (1.116)$$

Устойчивая работа рассматриваемой системы возможна лишь в том случае, если выполняется очевидное условие:

$$\Delta W_{g \rightarrow e} \gg W_T, \quad (1.117)$$

где $W_T \approx k \cdot T$ – среднее значение тепловой энергии атома, выступающей в роли возмущающего дестабилизирующего фактора.

Из выражений (1.116) и (1.117) следует условие для допустимых (критических) температурных режимов $T_{критч}$ проведения экспериментов по методу КЭР:

$$T_{критч} \leq \frac{\Delta W_{g \rightarrow e}}{k} = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot k \cdot L^2} \cdot (n_e^2 - n_g^2). \quad (1.118)$$

Оценка величины $T_{критч}$ (при $L = 10^{-10}$ м, $n_g = 50$, $n_e = 51$, $m = 10^{-26}$ кг), проведенная с помощью выражения (1.118), приводит к значениям температуры порядка 50 К (именно по этой причине в экспериментальной практике метода КЭР, как правило, используются криостаты с температурой 0,6 К (температура жидкого гелия)).

Общая схема экспериментальной установки, реализующей метод КЭР в миллиметровом диапазоне длин волн, представлена на рис. 1.32 [9].

Типичная совокупность этапов эксперимента, проводимого по методу КЭР, состоит из последовательности процессов прохождения одного или двух атомов, разделенных между собой точно определенным (фиксированным) интервалом времени. Путь движения атомов – от источника микрочастиц O через блок резонатора C к блокам детектирования квантовых состояний указанных атомов – D_e и D_g .

Указанный процесс прохождения атомов повторяется многократно, с периодом порядка 10^{-3} с, продолжительность которого намного превышает время затухания внешних электромагнитных колебаний в резонаторе C . Таким путем достигается такое состояние системы, что при запуске очередной партии атомов резонатор C «постоянно» находится в невозмущенном состоянии. Невозмущенное стартовое состояние резонатора C является необходимым условием, реализующим индивидуальную вычислительную операцию при эксперименте по методу КЭР.

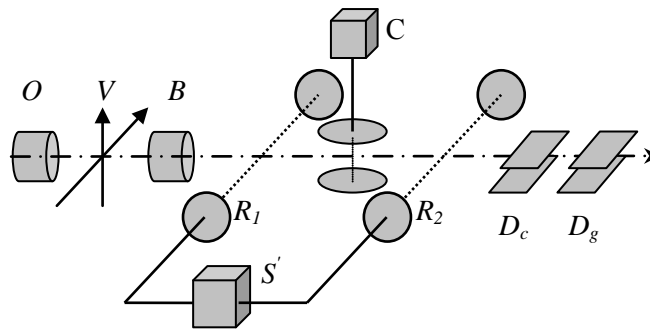


Рис.1.32. Схема установки в эксперименте с атомом в резонаторе

До входа в резонатор C атомы проходят через вспомогательный резонатор R_1 , в котором микроволновый импульс, поступающий от источника S_{1-2} , производит перемешивание квантовых состояний атома $|g\rangle$ и $|e\rangle$. После прохождения резонатора C производится вторичное перемешивание состояний $|g\rangle$ и $|e\rangle$ во вспомогательном резонаторе R_2 .

Атомы, испущенные источником микрочастиц O , отбираются по скоростям в зоне V . Отселектированные по скоростям в зоне V атомы приготавливаются в блоке B в одном из квантовых состояний $|g\rangle$ или $|e\rangle$ при помощи последовательности лазерных импульсов и адиабатических переходов в радиочастотном диапазоне частот.

Резонатор C настроен в резонанс с атомным переходом $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$, т.е. его резонансная частота $\nu_{рез}$ выбирается из условия:

$$\nu_{рез} = \frac{\Delta W_{g \rightarrow e}}{h} = \frac{h}{8 \cdot m \cdot L^2} \cdot (n_e^2 - n_g^2). \quad (1.119)$$

В наиболее простой постановке эксперимента по методу КЭР определяются вероятности квантового перехода $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$ при размещении индивидуального атома в резонаторе C (при этом вспомогательные резонаторы R_1 и R_2 не задействованы). Диагностика состояния атома производится для различных времен взаимодействия τ между атомом и электромагнитным полем резонатора. Значение τ может варьироваться либо изменением скорости прохождения атомами активной зоны резонатора C , либо настройкой частоты атомного перехода в резонанс с модой электромагнитного поля за некоторую часть пролетного времени. При этом процессе обмена энергией между частицей и полем обратимая эволюция квантовых пареходов $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$ между

базовыми квантовыми состояниями $|g\rangle$ и $|e\rangle$ сопровождается процессами *испускания и поглощения единичных фотонов*. Попутно следует отметить тот немаловажный факт, что последнее обстоятельство служит прямым доказательством возможности квантования электромагнитного поля.

Помимо доказательства квантования энергии электромагнитного поля, эксперимент, представленный выше, свидетельствует о том, что резонансное взаимодействие квантового состояния атома с модой электромагнитного поля превалирует над процессами релаксации (диссипации), обусловленными тепловыми флуктуационными факторами. В этой связи результирующий эффект, т.е. перепутывание состояний в системе «атом – поле», может быть использовано для управляемого манипулирования процессом квантового перепутывания, составляющего основу квантовых вычислительных операций.

Фактор перепутывания квантовых состояний между атомом и электромагнитным полем позволяет реализовать ряд базовых устройств, предназначенных для целей создания квантовых вычислительных систем, и прежде всего элемента памяти на основе одного кубита. Такая память может быть создана при записи информации первым атомом и ее чтении с помощью второго атома,двигающегося вслед первому атому. Первый атом, находящийся в квантовом состоянии $|e\rangle$, попадает в пустой резонатор C и находится там в течение времени взаимодействия τ , удовлетворяющего условию $\nu_{рез} \cdot \tau = \pi$. За это время взаимодействия атом переходит в квантовое состояние $|g\rangle$, оставляя однофотонное состояние в резонаторе C . Второй атом, входящий в резонатор C в квантовом состоянии $|g\rangle$, поглощает это однофотонное состояние и при отсутствии процессов спонтанного распада покидает резонатор C в квантовом состоянии $|e\rangle$. В этом эксперименте кубит, реализованный (в качестве носителя информации) на основе однофотонного поля, в своих конечных состояниях распределяется между квантовыми состояниями двух атомов. В промежуточном состоянии поле в резонаторе C является квантовой суперпозицией вакуумного и однофотонного состояний. Рассмотренный тип процессов (систем) является базовым при реализации логических элементов методом КЭР.

Для выполнения операций, представляющих интерес для квантовых вычислений, необходимо манипулировать со значительным количеством кубитов (порядка нескольких десятков). Это условие существенно ограничивает возможность практического использования метода КЭР, поскольку серьезные трудности в проблематике декогерентности начинаются в рамках этого метода уже при последовательности всего лишь из трех атомов. В этой связи эксперименты по методу КЭР следует рассматривать более в качестве эффективных подходов при исследовании вопросов декогерентности, диагностики квантовых состояний и перепутывания квантовых состояний, нежели в качестве физико-технической базы построения в обозримой перспективе квантовых вычислительных сред.

СТРУКТУРА, СОДЕРЖАНИЕ И ОФОРМЛЕНИЕ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Общие положения

Лабораторная работа – небольшой научный отчет, обобщающий проведенную студентом работу, которую представляют для защиты для защиты преподавателю. К лабораторным работам предъявляется ряд требований, основным из которых является полное, исчерпывающее описание всей проделанной работы, позволяющее судить о полученных результатах, степени выполнения заданий и профессиональной подготовке студентов.

В отчет по лабораторной работе должны быть включены следующие пункты:

- титульный лист;
- цель работы;
- краткие теоретические сведения;
- описание экспериментальной установки и методики эксперимента;
- экспериментальные результаты;
- анализ результатов работы;
- выводы.

Требования к содержанию отдельных частей отчета по лабораторной работе

Титульный лист является первой страницей любой научной работы и для конкретного вида работы заполняется по определенным правилам. Для лабораторной работы титульный лист оформляется следующим образом.

В верхнем поле листа указывают полное наименование учебного заведения и кафедры, на которой выполнялась данная работа.

В среднем поле указывается вид работы, в данном случае лабораторная работа с указанием курса, по которому она выполнена, и ниже ее название. Название лабораторной работы приводится без слова *тема* и в кавычки не заключается.

Далее ближе к правому краю титульного листа указывают фамилию, инициалы, курс и группу учащегося, выполнившего работу, а также фамилию, инициалы, ученую степень и должность преподавателя, принявшего работу.

В нижнем поле листа указывается место выполнения работы и год ее написания (без слова *год*).

Образец написания титульного листа лабораторной работы приведен в прил. 1.

Цель работы должна отражать тему лабораторной работы, а также конкретные задачи, поставленные студенту на период выполнения работы. По объему цель работы в зависимости от сложности и многозадачности работы составляет от нескольких строк до 0,5 страницы.

Краткие теоретические сведения. В этом разделе излагается краткое теоретическое описание изучаемого в работе явления или процесса, приводятся также необходимые расчетные формулы. Материал раздела не должен копировать содержание методического пособия или учебника по данной теме, а ограничивается изложением основных понятий и законов, расчетных формул, таблиц, требующихся для дальнейшей обработки полученных экспериментальных результатов. Объем литературного обзора не должен превышать 1/3 части всего отчета.

Описание экспериментальной установки и методики эксперимента. В данном разделе приводится схема экспериментальной установки с описанием ее работы и подробно излагается методика проведения эксперимента, процесс получения данных и способ их обработки. Если используются стандартные пакеты компьютерных программ для обработки экспериментальных результатов, то необходимо обосновать возможность и целесообразность их применения, а также подробности обработки данных с их помощью. Для лабораторных работ, связанных с компьютерным моделированием физических явлений и процессов, необходимо в этом разделе описать математическую модель и компьютерные программы, моделирующие данные явления.

Экспериментальные результаты. В этом разделе приводятся непосредственно результаты, полученные в ходе проведения лабораторных работ: экспериментально или в результате компьютерного моделирования определенные значения величин, графики, таблицы, диаграммы. Обязательно необходимо оценить погрешности измерений.

Анализ результатов работы. Раздел отчета должен содержать подробный анализ полученных результатов, интерпретацию этих результатов на основе физических законов. Следует сравнить полученные результаты с известными литературными данными, обсудить их соответствие существующим теоретическим моделям. Если обнаружено несоответствие полученных результатов и теоретических расчетов или литературных данных, необходимо обсудить возможные причины этих несоответствий.

Выводы. В выводах кратко излагаются результаты работы: полученные экспериментально или теоретически значения физических величин, их зависимости от условий эксперимента или выбранной расчетной модели, указывается их соответствие или несоответствие физическим законам и теоретическим моделям, возможные причины несоответствия.

Отчет по лабораторной работе оформляется на писчей бумаге стандартного формата А4 на одной стороне листа, которые сшиваются в скоросшивателе или переплетаются. Допускается оформление отчета по лабораторной работе только в электронном виде средствами Microsoft Office.

Если по специальному лабораторному практикуму требуется оформить в конце семестра общий отчет по всему циклу лабораторных работ, посвященных исследованию одного и того материала разными методами, оформляются также и отдельные отчеты по каждой работе цикла по мере их выполнения. На основе отчетов по каждой работе в конце семестра оформляется итоговый отчет, в котором основное внимание должно быть уделено анализу результатов, полученных в разных лабораторных работах.

СТРУКТУРА, СОДЕРЖАНИЕ И ОФОРМЛЕНИЕ КУРСОВЫХ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ РАБОТ

Общие положения

Курсовая работа представляет собой небольшой научный отчет по проделанной научно-исследовательской работе или самостоятельно изученной теме. Ее выполнение требует от студента не только знаний общей и специальной литературы по теме, но и умения проводить исследования, увязывать вопросы теории с практикой, делать обобщения, выводы, находить области применения полученных результатов.

Написание курсовой работы осуществляется под руководством научного руководителя. Студент совместно с руководителем уточняет круг вопросов, подлежащих изучению и экспериментальной проверке, составляет план исследования, определяет структуру работы, сроки выполнения, определяет необходимую литературу и другие материалы.

Структура курсовой работы должна способствовать раскрытию избранной темы и отдельных ее вопросов. Содержание работы следует иллюстрировать схемами, таблицами, диаграммами, графиками, рисунками и т.д. Курсовая работа должна быть не только содержательной и самостоятельной, но и правильно оформлена. Курсовая работа выполняется на писчей бумаге стандартного формата А4 на одной стороне листа, которые сшиваются в скоросшивателе или переплетаются.

Общий объем работы должен быть в пределах 20-40 страниц рукописного или 15-25 страниц печатного текста. В тексте не должно быть сокращенных слов за исключением общепринятых.

Курсовая работа должна включать в себя следующие разделы:

- титульный лист;
- оглавление;
- введение;
- литературный обзор;
- постановка задачи;
- экспериментальная установка и методика эксперимента;
- экспериментальные результаты и обсуждение;
- выводы;
- список литературы.

Студент защищает курсовую работу перед комиссией, которая определяет уровень теоретических знаний и практических навыков студента, соответствие работы предъявленным к ней требованиям.

Курсовая работа должна быть защищена до начала сессии. На защите студент должен кратко (7-10 мин) изложить содержание работы, дать исчерпывающие ответы на вопросы и замечания членов комиссии.

При ответе необходимо использовать иллюстративный материал. Это могут быть заранее подготовленные плакаты (формат не менее А3) или иллюстрации на прозрачных пленках. Если необходимо продемонстрировать работу программы, то можно использовать для этой цели компьютер.

После выступления студента зачитывается отзыв научного руководителя о представляемой работе, который студент обязан предоставить на защиту. Отзыв должен быть подписан научным руководителем и заверен печатью организации, где выполнялась данная работа. Наличие отзыва не требуется в случае, если на защите присутствует научный руководитель, который в устной форме представляет отзыв и оценку, которой, по его мнению, может быть оценена работа студента.

Требования к содержанию отдельных частей отчета по курсовой работе

Титульный лист курсовой работы также как и лабораторной работы является ее первой страницей и заполняется следующим образом.

В верхнем поле листа указывают, к какому министерству или ведомству принадлежит высшее учебное заведение, например, «Федеральное агентство по образованию». Далее пропускают несколько строк и указывают полное наименование учебного заведения и кафедры, на которой проводится защита данной работы.

В среднем поле указывается вид работы, в данном случае курсовая работа, и ниже ее название. Название курсовой работы приводится без слова *тема* и в кавычки не заключается.

Далее ближе к правому краю титульного листа указывают фамилию и инициалы, курс и группу учащегося, выполнившего работу, фамилию и инициалы, ученую степень и должность научного руководителя работы.

В нижнем поле листа указывается место выполнения работы и год ее написания (без слова *год*).

Образец написания титульного листа курсовой работы приводится в прил. 2.

Оглавление помещается в курсовой работе после титульного листа. В нем приводятся все заголовки работы и номера страниц, с которых они начинаются. Заголовки оглавления должны точно повторять заголовки в тексте. Сокращать или давать их в другой формулировке, последовательности и соподчиненности по сравнению с заголовками в тексте нельзя.

Заголовки одинаковых ступеней рубрикации необходимо располагать друг под другом. Заголовки каждой последующей ступени смещают на три – пять знаков вправо по отношению к заголовкам предыдущей ступени. Все заголовки начинают с прописной буквы без точки в конце. Последнее слово каждого заголовка соединяют отточием с соответствующим ему номером страницы в правом столбце оглавления.

Введение. Во введении обычно обосновывается актуальность выбранной темы, цель и содержание поставленных задач, формулируется объект и предмет исследования, указывается избранный метод (или методы) исследования, сообщается, в чем заключается теоретическая значимость и прикладная ценность полученных результатов. По объему введение составляет 1 или 2 страницы.

Литературный обзор в курсовой работе представляет собой краткое теоретическое описание изучаемого в работе явления или процесса. Литературный обзор должен показать основательное знакомство исследователя со специальной литературой, его умение систематизировать источники, критически их рассматривать, выделять существенное, оценивать ранее сделанное другими исследователями, определять главное в современном состоянии изученности темы. Поскольку курсовая работа обычно посвящается сравнительно узкой теме, то обзор следует делать только по вопросам выбранной темы, а не по всей проблеме в целом. Однако все, сколько-нибудь ценные публикации, имеющие прямое и непосредственное отношение к теме курсовой работы, должны быть названы и критически оценены. Объем литературного обзора не должен превышать 1/3 части всей курсовой работы.

Литературный обзор может иметь заголовок, отражающий его конкретное содержание.

Постановка задачи. От описания научной проблемы и доказательства того, что та часть этой проблемы, которая является темой данной работы, еще не получила своей разработки и освещения в специальной литературе, переходят к формулировке цели предпринимаемого исследования с указанием конкретных задач, которые предстоит решить в соответствии с этой целью. Это обычно делается в форме перечисления (изучить..., описать..., установить..., вывести формулу... и т.п.).

Экспериментальная установка и методика эксперимента. В данном разделе приводится схема экспериментальной установки с описанием ее работы.

Здесь подробно описывается методика проведения эксперимента, процесс получения данных и способ их обработки. Если используются стандартные пакеты программ, то необходимо обосновать возможность и целесообразность их использования, а также подробности обработки данных с их помощью.

Экспериментальные результаты и обсуждение. В этом разделе приводятся непосредственно результаты, полученные в ходе проведения научного исследования: полученные значения величин, графики, таблицы,

диаграммы. Проводится их подробный анализ, обсуждается соответствие полученных результатов известным литературным данным и существующим теоретическим моделям.

Выводы. В выводах кратко сообщается, что сделано в работе, излагаются основные результаты анализа.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П. КОРОЛЕВА»
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

Кафедра «Наноинженерия»

ТЕХНИЧЕСКИЙ ОТЧЕТ

по лабораторной работе № 1

**«ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ»**

(дисциплина «**Физические основы электроники**»)

Выполнил:

ст. гр 527

Иванов И.И.

Дата представления отчета: 18.10.2012

Принял:

доцент каф. «Наноинженерия»

Саноян А.Г.

Дата защиты: «_____» _____ 2012 г.

СТРУКТУРА, СОДЕРЖАНИЕ И ФОРМА ОФОРМЛЕНИЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Общие положения

Лабораторная работа – небольшой научный отчет, обобщающий проведенную студентом работу, которую представляют для защиты преподавателю. К лабораторным работам предъявляется ряд требований, основным из которых является полное, исчерпывающее описание всей проделанной работы, позволяющее судить о полученных результатах, степени выполнения заданий и профессиональной подготовке студентов.

В отчет по лабораторной работе должны быть включены следующие пункты:

1. титульный лист установленного образца;
2. цель работы;
3. краткие теоретические сведения;
4. описание экспериментальной установки и методики эксперимента;
5. экспериментальные результаты;
6. анализ результатов работы;
7. выводы.

Требования к содержанию отдельных частей отчета по лабораторной работе

Титульный лист является первой страницей любой научной работы и для конкретного вида работы заполняется по определенным правилам. Для лабораторной работы титульный лист оформляется следующим образом.

В верхнем поле листа указывают полное наименование учебного заведения и кафедры, на которой выполнялась данная работа.

В среднем поле указывается вид работы, в данном случае лабораторная работа с указанием курса, по которому она выполнена, и ниже ее название. Название лабораторной работы приводится без слова *тема* и в кавычки не заключается.

Далее ближе к правому краю титульного листа указывают фамилию, инициалы, курс и группу учащегося, выполнившего работу, а также фамилию, инициалы, ученую степень и должность преподавателя, принявшего работу.

В нижнем поле листа указывается место выполнения работы и год ее написания (без слова *год*).

Образец написания титульного листа лабораторной работы приведен в приложении. 1.

Цель работы должна отражать тему лабораторной работы, а также конкретные задачи, поставленные студенту на период выполнения работы. По объему цель работы в зависимости от сложности и многозадачности работы составляет от нескольких строк до 0,5 страницы.

Краткие теоретические сведения. В этом разделе излагается краткое теоретическое описание изучаемого в работе явления или процесса, приводятся также необходимые расчетные формулы. Материал раздела не должен копировать содержание методического пособия или учебника по данной теме, а ограничивается изложением основных понятий и законов, расчетных формул, таблиц, требующихся для дальнейшей обработки полученных экспериментальных результатов. Объем литературного обзора не должен превышать 1/3 части всего отчета.

Описание экспериментальной установки и методики эксперимента. В данном разделе приводится схема экспериментальной установки с описанием ее работы и подробно излагается методика проведения эксперимента, процесс получения данных и способ их обработки. Если используются стандартные пакеты компьютерных программ для обработки экспериментальных результатов, то необходимо обосновать возможность и целесообразность их применения, а также подробности обработки данных с их помощью. Для лабораторных работ, связанных с компьютерным моделированием физических явлений и процессов, необходимо в этом разделе описать математическую модель и компьютерные программы, моделирующие данные явления.

Экспериментальные результаты. В этом разделе приводятся непосредственно результаты, полученные в ходе проведения лабораторных работ: экспериментально или в результате компьютерного моделирования определенные значения величин, графики, таблицы, диаграммы. Обязательно необходимо оценить погрешности измерений.

Анализ результатов работы. Раздел отчета должен содержать подробный анализ полученных результатов, интерпретацию этих результатов на основе физических законов. Следует сравнить полученные результаты с известными литературными данными, обсудить их соответствие существующим теоретическим моделям. Если обнаружено несоответствие полученных результатов и теоретических расчетов или литературных данных, необходимо обсудить возможные причины этих несоответствий.

Выводы. В выводах кратко излагаются результаты работы: полученные экспериментально или теоретически значения физических величин, их зависимости от условий эксперимента или выбранной расчетной модели, указывается их соответствие или несоответствие физическим законам и теоретическим моделям, возможные причины несоответствия.

Отчет по лабораторной работе оформляется на писчей бумаге стандартного формата А4 на одной стороне листа, которые сшиваются в скоросшивателе или переплетаются.

Допускается оформление отчета по лабораторной работе только в электронном виде средствами Microsoft Office.

Если по специальному лабораторному практикуму требуется оформить в конце семестра общий отчет по всему циклу лабораторных работ, посвященных исследованию одного и того материала разными методами, оформляются также и отдельные отчеты по каждой работе цикла по мере их выполнения.

На основе отчетов по каждой работе в конце семестра оформляется итоговый отчет, в котором основное внимание должно быть уделено анализу результатов, полученных в разных лабораторных работах.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени академика С.П. КОРОЛЕВА»
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

Кафедра: «Наноинженерия»

А.Г. САНОЯН

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ**

(Экзаменационные вопросы)

Специальность 211000 – «Конструирование и технология электронных средств»

Код учебного плана СГАУ: 211000.1.62-2011-О-П-4г00м

1. Зонная структура твердых тел. Чем отличаются металл, диэлектрик и полупроводник с точки зрения зонной теории?
2. Образование энергетических зон в твердом теле. Разрешенные и запрещенные зоны.
3. Волновой вектор и закон дисперсии.
4. Понятие дырки в модели энергетических зон и электронных связей.
5. Типы кристаллических решеток. Обратная решетка, индексы Миллера кристаллографических плоскостей и направлений.
6. Закон дисперсии свободных носителей в полупроводниках.
7. Приближение эффективной массы. Анизотропия эффективной массы.
8. Прямозонные и непрямозонные полупроводники с точки зрения зонной структуры и закона дисперсии.
8. Многодолинные полупроводники. Зонная структура наиболее важных полупроводников Si, Ge, GaAs.
9. Собственные и примесные полупроводники. Примеси акцепторного и донорного типа.
10. Почему нельзя увеличить одновременно концентрацию электронов и дырок в полупроводнике путем одновременного введения примесей донорного и акцепторного типа? Компенсация.
11. Основные и неосновные носители. Закон действующих масс.
12. Чему равна концентрация не основных носителей, если концентрация основных носителей известна?
13. Статистика свободных носителей при тепловом равновесии: функция распределения, уровень химического потенциала.
14. Связь химического потенциала с концентрацией электронов и дырок.
15. Вырожденные и невырожденные полупроводники. Критерий применимости классической статистики.
16. Понятие "эффективная плотность состояний". Как оценить ее по порядку величины?
17. Почему N_c зависит от температуры?
18. Эффективная масса для расчета плотности состояний в прямозонных и не прямозонных полупроводниках.
19. Условие электронейтральности. Расчет концентрации свободных носителей в полупроводниках.
20. Температурная зависимость химического потенциала в собственном полупроводнике.
21. При какой концентрации доноров (акцепторов) полупроводник можно считать собственным?
22. Температурная зависимость химического потенциала в примесном полупроводнике донорного (акцепторного) типа при низких температурах.
23. Понятие подвижности, ее связь с эффективной массой и временем релаксации.
24. Проводимость, ее связь с подвижностью носителей. Понятие эффективной массы для расчета проводимости в полупроводнике с анизотропным законом дисперсии.
25. Механизмы рассеяния и подвижность. Подвижность в случае действия нескольких механизмов рассеяния.
26. Дрейф в электрическом поле. Механизмы насыщения дрейфовой скорости.
27. Явление перехода электронов в боковые долины в GaAs. Эффект Ганна.
28. Диффузия свободных носителей. Соотношение Эйнштейна.
29. Основные уравнения, описывающие движение свободных носителей.
30. Связь между коэффициентом диффузии и подвижностью. Диэлектрическая релаксация.
31. Дрейф и диффузия неравновесных носителей в полупроводниках: основное уравнение.
32. Амбиполярный коэффициент диффузии и подвижность.
33. Специфические свойства системы Si-SiO₂, позволившие занять кремнию ведущее положение в микроэлектронике.

34. - 36 Основные элементы планарной технологии на кремнии: выращивание монокристаллов, изготовление пластин, создание диэлектрического покрытия, фотолитография, селективное травление, легирование (ионное и термодиффузия), металлизация, скрайбирование.
37. Порядок построения зонной диаграммы контакта металл - полупроводник (работа выхода, электронное сродство, уровень химического потенциала).
38. Запирающий контакт металл - полупроводник Шотки: зонная диаграмма в приближении области обеднения, ход электрического поля и потенциала в области объемного заряда.
39. Емкость обратно смещенного барьера Шотки. Определение концентрации легирующей примеси и высоты барьера из измерений вольт-фарадной характеристики.
40. Вольт - амперная характеристика идеального барьера Шотки.
41. Омический контакт к полупроводнику: идеальный омический контакт Шотки и туннельный контакт.
42. Зонная диаграмма р-п перехода. Внутреннее электрическое поле и потенциал в зависимости от уровня легирования. Толщина слоя обеднения в р- и п-областях.
43. Обратно смещенный р-п переход: энергетическая диаграмма, электрическое поле, емкость.
44. Туннельный и лавинный пробой обратно смещенного р-п перехода: стабилитрон.
45. Вольт-амперная характеристика р-п перехода: дырочная и электронная компоненты тока.
46. Явление инжекции неосновных носителей зарядов.
47. Биполярный транзистор: энергетическая диаграмма, принцип работы.
48. Основные параметры, характеризующие работу биполярного транзистора: коэффициенты инжекции и переноса тока через базу. Коэффициент передачи транзистора по току в схеме с ОБ и коэффициент усиления по току в схеме с ОЭ.
49. Система металл - окисел - полупроводник: энергетическая диаграмма в случаях обогащения, обеднения и инверсии.
50. Емкость структуры металл-окисел-полупроводник в зависимости от напряжения.
51. Накопление заряда в МОП структуре в режиме "инверсия". Приборы с зарядовой связью.
52. Полевой транзистор с изолированным затвором на основе структуры металл-окисел-полупроводник (МОП-транзистор).
53. Транзисторы на основе структур GaAs-AlGaAs с высокоподвижным электронным газом: зонная диаграмма, принцип работы.
54. Принцип работы силовых транзисторов со статической индукцией с вертикальным каналом.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ имени академика
С.П. КОРОЛЕВА»
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ)

Кафедра: «Наноинженерия»

А.Г. САНОЯН

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ**

(Варианты тестовых заданий)

Специальность 211000 – «Конструирование и технология
электронных средств»

Код учебного плана СГАУ: 211000.1.62-2011-О-П-4г00м

ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ К РАЗДЕЛУ №1

1.1 Вероятностные волны де Бройля.

1) Вычислить длину волны де Бройля для газовых молекул в объеме, имеющим комнатную температуру.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
Тип молекулы	H ₂	O ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ O	OH

2) Определить энергию (в электрон вольтах), которую необходимо дополнительно сообщить электрону, чтобы его длина волны де Бройля λ уменьшилась в n раз от начального значения λ_0 .

n	λ_0 . нм.							
	1	10	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁸	10 ¹⁰
10	№1	№2	№3	№4	№5	№6	№7	№8
100	№9	№10	№11	№12	№13	№14	№15	№16

Примечание: во внутренних позициях таблицы приведен порядковый № варианта.

3) Из катодной трубки на диафрагму с узкой прямоугольной щелью нормально к плоскости диафрагмы направлен поток моноэнергетических электронов. Определить анодное напряжение трубки, если известно, что на экране, отстоящем от щели на расстоянии - L , ширина центрального дифракционного максимума $D=100$ мкм. Ширину щели диафрагмы принять равной 0,01 мм.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
L , м.	0.5	0.1	0.2	0.5	1.0	2.0

4) Определить отношение длин волн де Бройля для электрона и протона, прошедших одинаковую ускоряющую разность потенциалов U .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
------------	---	---	---	---	---	---

U, кВ.	10^{-2}	10^{-1}	1.0	10	10^2	10^3
--------	-----------	-----------	-----	----	--------	--------

5) Кинетическая энергия микрочастицы равна удвоенному значению ее энергии покоя ($2m_0 \times c^2$). Вычислить длину волны де Бройля для случаев:

№ варианта	1	2	3	4	5	6
Тип микрочастицы	электрон	протон	H	O	OH	CO

1.2. Соотношение неопределенностей.

6) Определить величину фазового объема приходящегося на индивидуальную микрочастицу в импульсном подпространстве, при известных значениях неопределенностей координат расположения микрочастицы $\Delta x = \Delta y = \Delta z$.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
ΔX , м.	1.0	10^{-2}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-8}	10^{-10}

7) Оценить минимальную кинетическую энергию электрона, при его движении внутри одномерного потенциального ящика, имеющего протяженность L .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
L , мкм.	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	1.0	10

8) Используя соотношение неопределенности определить наименьшую погрешность в определении скорости электрона и протона, если координаты центра масс этих частиц могут быть установлены с неопределенностью ΔX .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
ΔX , мкм.	10^{-10}	10^{-6}	10^{-2}	1.0	10	100

9) Какова должна быть кинетическая энергия электрона в моноэнергетическом пучке, используемого для проведения

микроскопических исследований структуры с линейными размерами L .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
L , мкм.	10^{-11}	10^{-10}	10^{-9}	10^{-8}	10^{-4}	10^{-2}

10) Используя соотношение неопределенностей, оценить протяженность одномерного потенциального ящика, в котором задана минимальная энергия электрона E_{min} .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
E_{min} , эВ.	0.1	1.0	10	10^3	10^4	10^6

11) Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии составляет $\Delta t \approx 10^{-8}$ с. При переходе атома в нормальное состояние испускается фотон, средняя длина волны λ которого равна n нм. Оценить ширину $\Delta\lambda$, излучаемой веществом спектральной линии, если ее уширение не происходит за счет других процессов (воспользоваться дополнительным соотношением принципа неопределенности: $\Delta\varepsilon \cdot \Delta t = h$, где ε - энергия кванта света).

№ варианта	1	2	3	4	5	6
n .	200	500	1000	2000	5000	10000

12) Для приближенной оценки минимальной энергии электрона в атоме водорода можно предположить, что неопределенность радиуса электронной орбиты и неопределенность импульса электрона на такой орбите соответственно связаны следующим образом: $\Delta r \approx r$ и $\Delta p \approx p$. Используя эти соотношения, найти значение радиуса электронной орбиты, соответствующего минимальной энергии электрона в атоме водорода (в приближении концепции свободных частиц).

13) Моноэнергетический пучок электронов в электронном литографе высвечивает на фотошаблоне пятно

радиусом $r \approx 0.1$ мкм. Пользуясь соотношением неопределенностей, найти, во сколько раз неопределенность Δx координаты электрона в направлении, перпендикулярном направлению движения электронного луча, меньше размера r пятна. Длину электронного луча принять равной 0.6 м, а ускоряющее напряжение - $U = n$ кВ.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
n .	0.1	1.0	10	20	50	100

1.3. Энергетическое состояние микрочастицы в потенциальном ящике.

14) Частица находится в одномерном, прямоугольном потенциальном ящике с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти величину разности ΔW между соседними энергетическими уровнями энергии $W(n_i)$ частицы для случаев: $n_1 = 1$; $n_2 = 2$; $n_3 = 3$; $n_5 = 5$; $n_\infty = \infty$.

15) Электрон находится в бесконечно глубоком, одномерном, прямоугольном потенциальном ящике шириной $L = n$ нм. Определить (в электрон-вольтах) наименьшую разность энергетических уровней электрона, находящегося в этом потенциальном ящике.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
n .	0.1	0.5	1.0	10	50	100

16) Частица находится в возбужденном состоянии ($n = 3$). в бесконечно глубоком, одномерном, прямоугольном потенциальном ящике шириной L . Определить, в каких точках интервала $0 < x < L$ плотность вероятности нахождения частицы принимает максимальное и минимальное значения.

17) В прямоугольной потенциальной яме шириной L с абсолютно непроницаемыми стенками находится частица в основном энергетическом состоянии. Найти вероятность

местонахождения этой частицы в интервале длин $\left(\frac{L}{4}\right) < x < \left(\frac{3L}{4}\right)$.

18) Частица в бесконечно глубоком, одномерном, прямоугольном потенциальном ящике находится в основном состоянии. Какова вероятность обнаружения частицы в правой четверти ящика?

19) Амплитудная волновая функция, описывающая движение электрона в основном состоянии атома водорода, имеет вид: $\phi(r) = A \cdot \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$, где A — некоторая постоянная; a — первый борковский радиус орбиты. Найти для основного состояния атома водорода наиболее вероятное расстояние электрона от ядра атома.

20) Электрон находится в бесконечно глубоком, одномерном, прямоугольном потенциальном ящике шириной L . В каких точках в интервале значений $0 < x < L$ плотности вероятности нахождения электрона расположенного на втором и третьем энергетических уровнях будут одинаковы?

21) Волновая функция, описывающая движение электрона в основном состоянии атома водорода, имеет вид: $\phi(r) = A \cdot \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$, где A — некоторая постоянная; a — первый борковский радиус орбиты. Найти для основного состояния атома водорода среднее значение потенциальной энергии.

1.4. Зонные энергетические диаграммы твердого тела.

22) Какова вероятность нахождения электрона на самом нижнем энергетическом уровне зоны проводимости полупроводника при температуре 300 К.

№ варианта	1	2	3	4
Тип полупроводника	Ge	Si	InSb	InAs
ΔW , Эв	0.66	1.12	0.18	0.35

23) Определить долю свободных электронов в металле (при температуре $T = 300$ К), энергии которых заключены в интервале значений: $1/2 \cdot W_{\max} - W_{\max}$.

24) Германиевый кристалл, ширина запрещенной зоны в котором равна $\Delta W = 0,66$ эВ, нагревают от температуры $t_1 = 0^\circ\text{C}$ до температуры t_2 . Во сколько раз возрастет его удельная проводимость?

№ варианта	1	2	3	4	5	6
$t_2, ^\circ\text{C}$	10	20	50	100	150	300

25) При нагревании кремниевого кристалла от температуры $t_1 = 0^\circ$ до температуры $t_2 = 10^\circ\text{C}$ его удельная проводимость возрастает в 2,28 раза. По приведенным данным определить ширину ΔW запрещенной зоны в кремнии.

26) Найти минимальную энергию W_{min} , необходимую для образования пары электрон—дырка в кристалле GaAs, если его удельная электропроводность σ изменяется в 10 раз при изменении температуры от 3°C до 20°C .

27) Сопротивление кристалла PbS при температуре $T_1 = 20^\circ\text{C}$ равно $R_1 = 104$ Ом. Определить его сопротивление R_2 при температуре $T_2 = 80^\circ\text{C}$.

28) Определить долю свободных электронов в металле при температуре $T = 10$ К, энергии которых отличаются от максимальной на n %.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
$n, \%$	1	5	10	20	30	50

29) Определить долю свободных электронов в металле при температуре $T = 100$ К, значения энергии которых отличаются от максимальной на n %.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
$n, \%$	1	5	10	20	30	50

30) Определить долю свободных электронов в металле при температуре $T = 10$ К, энергия которых заключена в интервале значений от 0 до $1/n W_{max}$.

№ варианта	1	2	3	4	5	6
n	1	0.5	0.2	0.1	0.05	0.005

31) Определить длину волны излучаемого кванта света λ (в вакууме) для случая прохождения процессов рекомбинации в собственных полупроводниках.

№ варианта	1	2	3	4
Тип полупроводникового материала	Si	Ge	InSb	GaAs
Ширина запрещенной зоны (при $T = 300$ К), эВ.	1.21	0.72	0.17	1.42

ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ К РАЗДЕЛУ №2

2.1. Подвижность носителей заряда в кристаллических структурах.

1) Подвижность носителя заряда при пролетном механизме его движения описывается выражением:

$$\mu_{\text{прол}} = \frac{\lambda \cdot q}{2 \cdot \sqrt{3 \cdot k \cdot m \cdot T}}. \text{ Определить значения подвижности}$$

$\mu_{\text{прол}}$ при различных длинах свободного пробега λ для случая ансамбля электронов, находящегося в кристаллической структуре при температуре 300 К.

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
λ , нм.	1	2	5	10	20	50	100	200

2) Определить среднюю скорость движения носителя заряда (при механизме перемещения пролетного типа: $\lambda = 10$ нм; $T = 300$ К) при различных значениях напряженности электрического поля - E .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
E , В/м.	1	10	10^2	10^4	10^6	10^8

3) Определить величину отношения векторизованной (при пролетном механизме движения) скорости v_E и броуновской v_T при различных значениях λ ($E = 10^3$ В/м.; $T = 300$ К).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
λ , нм.	0.5	1	2	5	10	20	50	100

4) Подвижность носителя заряда в кристаллической структуре при прыжковом механизме его движения

описывается

выражением:

$$\mu_{\text{прыжок}} = \frac{\nu_0 \cdot q \cdot a^2}{k \cdot T} \cdot \exp\left(-\frac{W_a}{k \cdot T}\right).$$

Определить значения подвижности $\mu_{\text{прыжок}}$ при различных значениях W_a для случая: $a = 10^{-10}$ м.; $T = 300$ К. $\nu_0 = 10^{15}$ Гц.

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
W_a , эВ.	0.5	1.0	1.25	1.5	2.0	2.5	3.0	5.0

5) Определить среднюю скорость движения носителя заряда (при механизме перемещения прыжкового типа: $a = 10^{-10}$ м.; $T = 300$ К.; $\nu_0 = 10^{15}$ Гц.) при различных значениях напряженности электрического поля - E .

№ варианта	1	2	3	4	5	6
E , В/м.	1	10	10^2	10^4	10^6	10^8

6) Определить величину отношения векторизованной (при прыжковом механизме движения) скорости v_E и броуновской v_T при различных значениях W_a ($a = 10^{-10}$ м.; $T = 300$ К.; $\nu_0 = 10^{15}$ Гц.).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
W_a , эВ.	0.1	0.2	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0

7) Коэффициент прозрачности D для случая потенциального барьера конечной толщины определяется выражением:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{4 \cdot \pi \cdot d}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m_e \cdot (U_0 - W)}\right),$$

где D_0 - постоянный коэффициент, близкий по порядку величины единице. Построить зависимость $D = \varphi(d)$ при известных значениях параметра $(U_0 - W)$.

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
$(U_0 - W)$, эВ.	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	1.0	2.0	3.0

8) Определить скорость движения носителя заряда (электронов) в различных полупроводниковых материалах при различных значениях напряженности электрического поля: E (В/м)=а) 10^2 ; б) 10^3 ; в) 10^4 ; г) 10^6 .

№ варианта	1	2	3	4	5
Тип полупроводника	Si	Ge	InSb	GaAs	InSb
Подвижность, $\text{м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$.	0.135	0.382	7.74	8.35	26.3

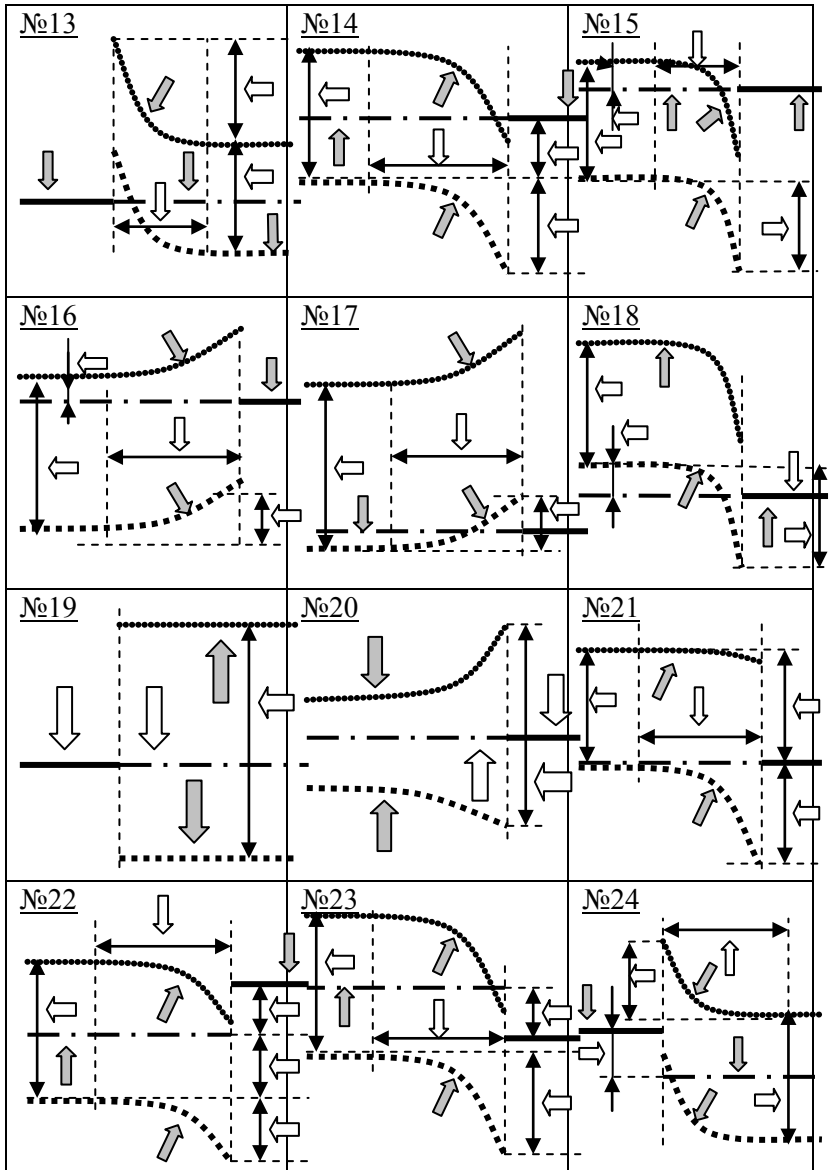
9) Определить время прохождения носителями заряда (электроны) слоя полупроводникового материала толщиной d при значениях напряженности электрического поля: E (В/м)= а) 10^2 ; б) 10^3 ; в) 10^4 ; г) 10^6 .

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8	9
d , $\mu\text{м}$	0.01	0.05	0.1	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	20.0

Примечание: при решении воспользоваться данными и результатами задачи № 8.

2.2. Контактные явления в кристаллических структурах.

10) Провести анализ представленных ниже зонных энергетических диаграмм контактных твердотельных систем, выполненных на основе металлов и полупроводников (методология анализа представлена в приложении №3).



11) Построить зонные энергетические диаграммы для контактных твердотельных систем, выполненных на основе

металлов и полупроводников (методология построения диаграмм представлена в приложении №3).

Вариант № 1 Система “ $M_1 - M_2$ ”		Вариант № 2 Система “ $M_1 - M_2$ ”		
А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1.0 \text{ эВ.}$ $d = 10$ А.	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4.0 \text{ эВ.}$ $d = 20$ А.	А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В. ; } U_2 = + 3 \text{ В.}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В. ; } U_2 = + 2 \text{ В.}$	
В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4.0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4.0 \text{ эВ.}$ $d = 30$ А.	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $d = 40 \text{ А.}$	В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4.0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В. ; } U_2 = - 4 \text{ В.}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В. ; } U_2 = - 5 \text{ В.}$	
Вариант № 3 Система “ $M_1 - M_2 - M_3$ ”				
А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 4 \text{ эВ.}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 6 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 0 \text{ эВ.}$
Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 4 \text{ эВ.}$	Ж). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	З). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	И). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	К). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$
Вариант № 4 Система “ $M_1 - M_2 - M_3$ ”.				
А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$		Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$		

В) $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ}.$ $U_1 = 5 \text{ В.}; U_2 = 4 \text{ В.};$ $U_3 = -3 \text{ В}$		Г) $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 2} = 2 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ}.$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 0 \text{ В.};$ $U_3 = 2 \text{ В}$	
Д) $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 2} = 2 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ}.$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 6 \text{ В.};$ $U_3 = -1 \text{ В}$		Е) $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ}; W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ}.$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 2 \text{ В.};$ $U_3 = -1 \text{ В}$	
Вариант № 5 Система «М–П/П _г »			
А). $W_M = 4.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ}.$	Б). $W_M = 1.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$	В). $W_M = 1.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 4.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ}.$	Г). $W_M = 0.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 0.5 \text{ эВ}.$
Д). $W_M = 2.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 0 \text{ эВ}.$	Е). $W_M = 1 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ}.$	Ж). $W_M = 2.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 3.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$	З). $W_M = 2 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ}.$
Вариант № 6 Система «М–П/П _д ».			
А). $W_M = 4.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ}.$	Б). $W_M = 1.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$	В). $W_M = 1.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 4.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ}.$	Г). $W_M = 0.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 0.5 \text{ эВ}.$
Д). $W_M = 2.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 1.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 0 \text{ эВ}.$	АЕ). $W_M = 1 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ}.$	Ж). $W_M = 2.5 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 3.0 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$	З). $W_M = 2 \text{ эВ}.$ $W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ}.$ $\Delta W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ}.$
Вариант № 7 Система «М – П / П _а »			

А). $W_M = 4.5 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 1.0 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 3 \text{ эВ.}$	Б). $W_M = 1.5 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 1.0 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 2 \text{ эВ.}$	В). $W_M = 1.5 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 4.0 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 1 \text{ эВ.}$	Г). $W_M = 0.5 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 1.0 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 0.5 \text{ эВ.}$
Д). $W_M = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 1.0 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 0 \text{ эВ.}$	АЕ). $W_M = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 2 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 1 \text{ эВ.}$	Ж). $W_M = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 3.0 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 2 \text{ эВ.}$	З). $W_M = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi / \Pi} = 2 \text{ эВ.}$ $\Delta W_{\Pi / \Pi} = 3 \text{ эВ.}$

Вариант № 8 Системы “ M_1 - Π/Π_i - M_2 ”

А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$	В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$	Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 6 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$
Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 4 \text{ эВ.}$	Ж). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 1 \text{ эВ.}$	З). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 1 \text{ эВ.}$	И). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 1 \text{ эВ.}$	К). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 1 \text{ эВ.}$

Вариант № 9 Система “ M_1 - Π/Π_a - M_2 ”

А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$	В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$	Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 8 \text{ эВ.}$ $W_{\Pi/\Pi} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$
---	---	---	---	---

<p>Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 4 \text{ эВ.}$</p>	<p>Ж). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>З). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>И). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>К). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>
<p>Вариант № 10 Система “M_1-П/П_д-M_2”</p>				
<p>А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 2 \text{ эВ.}$</p>	<p>В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$</p>	<p>Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 8 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$</p>
<p>Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 4 \text{ эВ.}$</p>	<p>Ж). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>З). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>И). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>	<p>К). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.}$</p>
<p>Вариант № 11 Система “M_1-П/П₁-M_2”.</p>				
<p>А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$</p>		<p>Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$</p>		
<p>В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 5 \text{ В. ; } U_2 = 4 \text{ В. ; } U_3 = - 3 \text{ В}$</p>		<p>Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = 2 \text{ В}$</p>		
<p>Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 6 \text{ В. ; } U_3 = - 1 \text{ В}$</p>		<p>Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В. ; } U_2 = 2 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$</p>		
<p>Вариант № 12 Система “M_1-П/П_д-M_2”.</p>				
<p>А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 2 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$</p>		<p>Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ;}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$ $U_1 = 3 \text{ В. ; } U_2 = 0 \text{ В. ; } U_3 = - 2 \text{ В}$</p>		

В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 5 \text{ В.}; U_2 = 3 \text{ В.}; U_3 =$ $- 3 \text{ В}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 0 \text{ В.}; U_3 =$ $- 2 \text{ В}$
Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 6 \text{ В.}; U_3 =$ $- 2 \text{ В}$	Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 2 \text{ В.}; U_3 =$ $- 3 \text{ В}$
Вариант № 13 Система “М ₁ -П/П _а -М ₂ ”	
А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 0 \text{ В.}; U_3 =$ $- 2 \text{ В}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 0 \text{ В.}; U_3 =$ $- 2 \text{ В}$
В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 1 \text{ эВ.};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 5 \text{ В.}; U_2 = 4 \text{ В.}; U_3 =$ $- 3 \text{ В}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 0 \text{ В.}; U_3 =$ 2 В
Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 2 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 6 \text{ В.}; U_3 =$ 1 В	Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ}; W_{\text{П/П}} = 3 \text{ эВ};$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В.}; U_2 = 2 \text{ В.}; U_3 =$ $- 1 \text{ В}$

2.3. Транспорт носителей заряда в наноразмерных структурах.

12) Определить скорость векторизованного движения микрочастиц, находящихся во внешнем электрическом поле при значениях параметров: $q = 10^{-19}$ Кл; $m = 10^{-20}$ кг; $\lambda = 10^{-8}$ м (в рамках классического приближения, воспользоваться выражением (2.112)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
$E, \text{ В/м.}$	10	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7	10^8

13) Определить значения максимальной скорости векторизованного движения носителя заряда в направлении пространственного ограничения наноразмерной структуры с протяженностью L при значениях параметров: $m = 10^{-20}$ кг; a

$= 10^{-10}$ м; $\Delta W_1 = 10^{-23}$ эВ. (воспользоваться выражением (2.114)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
L , нм.	0.5	1.0	5	10	20	50	100	500

14) Определить значения дебаевской длины экранирования L_D для кристаллических структур полупроводникового типа (воспользоваться выражением (2.102)).

№ варианта	1	2	3	4	5
ε	2	4	6	8	10

15) Оценить масштабы значений вероятностей реализации энергетических переходов в наноразмерных структурах (в рамках представлений об активационном характере процессов), стимулированных влиянием внешнего электрического поля (воспользоваться выражением (2.85), при: $q = 10^{-19}$ Кл; $T = 300$ К).

E , В/м	λ , нм.							
	1	10	10^2	10^3	10^4	10^5	10^8	10^{10}
10^2	№1	№2	№3	№4	№5	№6	№7	№8
10^4	№9	№1	№1	№1	№1	№1	№1	№1
		0	1	2	3	4	5	6
10^6	№1	№1	№1	№2	№2	№2	№2	№2
	7	8	9	0	1	2	3	4
10^8	№2	№2	№2	№2	№2	№3	№3	№3
	5	6	7	8	9	0	1	2
10^{10}	№3	№3	№3	№3	№3	№3	№3	№4
0	3	4	5	6	7	8	9	0

16) В направлении размерного ограничения наноструктура кристаллического типа представляет собой атомную цепочку в количестве N атомов. Оценить масштаб флуктуационных вариаций термодинамических параметров наноструктуры при различных значениях длины атомной цепочки наноструктуры - N (воспользоваться выражением (2.79)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
------------	---	---	---	---	---	---	---	---

N	5	10	20	50	100	200	500	1000
-----	---	----	----	----	-----	-----	-----	------

17) Определить значения частной статистической энтропии размещения атомов в пределах регулярной наноструктуры при различных значениях количества - атомных ячеек N и размещаемых атомов - n (воспользоваться выражением (2.80)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
N	5	10	15	20	25	30	35	40
n	3	7	10	12	6	9	14	8

18) Определить вероятность реализации макросостояния системы i^{20} типа (т.е. размещения n микрочастиц в объеме A и размещения $(N-n)$ микрочастиц - в объеме B .) (воспользоваться выражением (2.81)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
N	5	10	15	20	25	30	35	40
n	3	7	10	12	6	9	14	8

19) Определить значения поверхностного потенциала $\Delta\varphi_s$ в зависимости от поверхностной концентрации адсорбированных атомов $N^{(+)}$ акцепторного типа и протяженности участка изгиба энергетической разрешенной зоны x_s у поверхности раздела сред, при: $\varepsilon = 10$; $q = 10^{-19}$ Кл (воспользоваться выражением (2.110)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
$N^{(+)}, \text{см}^{-2}$	10^4	10^5	10^6	10^7	10^8	10^9	10^{10}	10^{11}
$x_s, \text{нм}$	0.5	1.0	5.0	10	20	50	100	500

20) Определить значения критической напряженности электрического поля - $E_{кр}$ для модели подвижности носителей заряда пролетного типа, при условии справедливости допущения вида: $v_T \gg v_E$ (воспользоваться выражением (2.11)).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
------------	---	---	---	---	---	---	---	---

$T, ^\circ\text{C}$	100	200	300	400	500	600	800	1000
$\lambda, \text{HM.}$	5.0	10	50	100	5.0	10	50	100