

32.85я73

Д40

Министерство образования и науки Республики Казахстан  
Костанайский социально-технический университет  
имени академика Зулхарнай Алдамжар



Джаманбалин К.К.



# Физика наноструктурных материалов

Лауреаты Нобелевской премии и  
великая квантовая революция

Учебно-методическое пособие

Костанай

Министерство образования и науки Республики Казахстан  
Костанайский социально-технический университет  
имени академика Зулхарнай Алдамжар

Джаманбалин К.К.

## Физика наноструктурных материалов

*Лауреаты Нобелевской премии и  
великая квантовая революция*

Учебно-методическое пособие

- 358048 -

Костанай ӘЛЕУМЕТТІК-ТЕХНИКАЛЫҚ  
УНИВЕРСИТЕТІ  
2015 КІТАПХАНА  
БИБЛИОТЕКА  
КОСТАНАЙСКИЙ СОЦИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

УДК 004.9 (075.8)

ББК 32.85 я73

Д 40

Учебно-методическое пособие «Физика наноструктурных материалов» рассмотрено и рекомендовано к изданию на заседании кафедры «Физика и информационные технологии», протокол № 11 от «28» июня 2015г.

Рецензент:

Доктор технических наук, профессор Баймухамедов М.Ф.

Джаманбалин К.К.

Д 40 Физика наноструктурных материалов: Учебн.-метод. пособие /  
К.К.Джаманбалин. - Костанай, КСТУ им. акад. З.Алдамжар, 2015. - 62 с.

ISBN 978-601-7125-74-5

Учебно-методическое пособие предназначено для студентов и магистрантов Костанайского социально-технического университета имени академика Зулхарнай Алдамжар специальности: 6М060400 – физика, 6М070400 – вычислительная техника и программное обеспечение.

В учебно-методическом пособии приведены фундаментальные физические эффекты, имеющие место в наноразмерных наноструктурах. Рассмотрены процессы туннелирования наночастиц через потенциальный барьер, зонная структура в кристаллах с квантовыми точками и квантовыми ямами в гетеропереходах, а также технологические методы создания квантово-размерных структур.

УДК 004.9 (075.8)

ББК 32.85 я73

ISBN 978-601-7125-74-5

© КСТУ им. академика З. Алдамжар, 2015

## Содержание

1. От классической механики до квантовой революции.....	4
2. Физические явления в наноструктурах.....	7
3. Туннелирование наночастиц через потенциальный барьер.....	15
4. Квантовые эффекты в наноразмерных структурах.....	21
5. Теория одноэлектронного туннелирования.....	28
6. Зонная структура в кристаллах с квантовыми точками и квантовыми ямами. Гетеропереходы.....	31
7. Квантовые колодцы в гетероструктурах.....	37
8. Технологические методы создания квантово-размерных структур.....	43
9. Классификация приборных структур одноэлектроники.....	47
10. Зонная диаграмма светодиода на основе двойной гетероструктуры.....	49
11. Квантовые характеристики светодиодов с квантовыми ямами.....	54
Заключение.....	56
Приложение.....	58

## 1. От классической механики до квантовой революции

Тысячелетний марафон развития атомистических представлений завершился в двадцатых годах прошлого века, дополнившись и обновившись на основе новых представлений о фундаментальной делимости не только вещества, но и энергии. Возникла новая квантовая физическая реальность окружающего Мира.

Для физиков реальность не могла оставаться прежней после очередного революционного переворота в естествознании, когда микромир перешел под власть *квантовой механики*. Согласно квантовой теории, служащей ныне фундаментом для множества современных технологий, энергия имеет дискретную природу ( $E = h\nu$ ), частицы могут быть волнами, объект может одновременно находиться в нескольких местах, пока кто-то не попытается измерить его параметры. Эти парадоксальные положения квантовой физики известны давно, с двадцатых годов прошлого столетия, но и сейчас не утихает полемика о глубинной природе этих явлений.

Квантовая физика породила квантовую химию, а та, в свою очередь – квантовую биохимию и генетику. Так, с пятидесятих годов минувшего столетия стало понятно, как выглядят и функционируют гены – основа основ разумной белковой жизни во Вселенной. Квантовая теория *Большого Взрыва*, в результате которого возникли элементарные частицы, атомы, звезды, планеты и галактики, была также выдвинута в середине прошлого века. Одно время казалось, что свод основных законов природы надежно установлен. Но вот пришло третье тысячелетие нашей эры и принесло открытие темной энергии, вместе с темной материей составляющих основу Вселенной, отбросив ученых опять далеко от финишной черты окончательного знания.

В современной фундаментальной физике сложилась напряженная ситуация. Многие ведущие физики современности, в частности С.Хокинг, И.Пригожин, Ж.Алферов отмечали, что затянувшийся кризис в физической теории является признаком революционных потрясений в науке. Вполне

возможно, что ключевой идеей, ведущей к «великому объединению» гравитации и квантовой теории, может стать переосмысление взглядов на природу такого привычного понятия, как физическое время, рассматриваемое сейчас в квантовой теории лишь как классический параметр. Кроме того, если вспомнить историю, то еще великий Альберт Эйнштейн убедительно показал, что наши понятия времени и пространства во много иллюзорны.

В своей книге «Краткая история времени: От большого взрыва до черных дыр» (СПб.: Амфора, 2001.) Стивен Хокинг замечает в заключение: «Если мы действительно откроем полную теорию, то со временем ее основные принципы станут доступны пониманию каждого, а не только нескольким специалистам. И тогда все мы, философы, ученые и просто обычные люди, сможем принять участие в дискуссии о том, почему так произошло, что существуем мы и существует Вселенная. И если будет найден ответ на такой вопрос, это будет полным триумфом человеческого разума, ибо тогда нам станет понятен замысел Бога».

---

*Стивен Уильям Хокинг родился 8 января 1942 года в Оксфорде, Великобритания. Является гениальным физиком и одним из самых известных ученых нашего времени. В юности он заболел нейромоторным заболеванием, полностью лишившим его возможности двигаться. К тому же он практически перестал говорить, его с трудом понимали только самые близкие люди. Затем он лишился голоса. Сейчас он (с большим трудом!) общается с другими людьми с помощью компьютера.*

---

В физике Стивеном Хокингом сделаны два крупнейших теоретических открытия. Во-первых, он показал, что черные дыры, объекты, возникающие при катастрофически сильном сжатии материи, из-за квантовых эффектов должны излучать энергию. Это излучение получило название Хокингского излучения (эффект Хокинга), которые приводят к медленному квантовому «испарению» черных дыр.

Второе теоретическое открытие связано с так называемыми сингулярностями пространства-времени. *Сингулярности* – это области, где гравитация столь сильна, что приливные гравитационные силы (растягивающие и сжимающие объекты) стремятся к бесконечности. Эти силы в сингулярности разрушают любые объекты. Хокинг показал, что сингулярности неизбежно возникают внутри черных дыр, и именно с сингулярности началось расширение Вселенной.

Несомненно, возрождение интереса к основам квантовой механики связано с колоссальными успехами в области экспериментальных исследований квантовых эффектов. Здесь важно подчеркнуть только одно: все новые опыты только подтверждают квантовую теорию (квантовую механику и квантовую оптику). Ни малейших отклонений от существующей теории не обнаружено.

В книге Олега Фейгина «Великая квантовая революция» (М.: Эксмо, 2009) рассматриваются актуальные вопросы одной из самых выдающихся научных теорий XX века – квантовой физики. Описываются квантовые идеи, без которых невозможно понять особенности современной картины мира: квантовая телепортация, квантовые компьютеры, квантовая криптография и другие квантовые явления.

За порогом третьего тысячелетия физика не только проникла в удивительнейшие глубины атомов, ядер и элементарных частиц, но и подошла к таинственным границам фундамента Мироздания, за которым скрывается основа окружающей нас действительности.

Быстро развиваются нанотехнологии, обещая произвести переворот в радиоэлектронике, продвинуть далеко вперед гелиоэнергетику, приборостроение, автоматику. Настоящим научным чудом кажутся уверенные шажки человекообразного робота, а на очереди уже создание фантастических квантовых компьютеров. Эти сверхбыстродействующие электронные вычислительные машины смогут производить сложнейшие расчеты за ничтожно малое время.

## 2. Физические явления в наноструктурах

Оказывается, многие свойства твердых тел (температура плавления, электропроводность, область прозрачности, магнетизм и др.) при уменьшении кристалла до размеров **10-20** нм и меньше начинают зависеть от размера частицы. Таким образом, появляется возможность создавать новые материалы не путем изменения химического состава компонентов, а в результате регулирования размеров и формы частиц, составляющих систему.

*Наноструктурами* называют структуры, у которых, по крайней мере, один размер составляет несколько межатомных расстояний. Квантово-механические явления в таких структурах являются доминирующими, что определяет их специфические электронные, оптические, магнитные и другие свойства.

Особенностью всех свойств наноструктур обуславливается электронным строением поверхности и объема, которое отличается от электронного строения макроскопических объектов. Наиболее полную информацию об электронном строении наночастиц можно получить с помощью квантово-механических расчетов.

Что же заставило физиков работать над созданием *квантовой теории*? Прежде всего, желание понять природу необъяснимых с позиций классической науки явлений. Первые неразрешимые проблемы возникли при решении задач о взаимодействии излучения с веществом – **явлении фотоэффекта** – *падающий на металлическую (полупроводниковую) поверхность свет выбивает из нее электроны, движение которых и приводит к появлению фототока.*

Необъяснимым оставалось, почему фототок возникал лишь тогда, когда частота падающего света превышала строго определенного для каждого металла величину. В 1905 г. А.Эйнштейн, развивая квантовую гипотезу Планка, предположил, что электромагнитное излучение не просто испускается порциями – оно и поглощается веществом тоже в виде порций –

световых квантов (фотонов). В итоге Эйнштейн вывел уравнение фотоэффекта:

$$h\nu = A + mV^2/2$$

где  $m$  – масса электрона,  $V$  – скорость электронов,  $A$  – работа выхода электрона из металла.

При этом фотоэффект возможен, если  $h\nu(\text{кр}) = A$ ,  $\nu(\text{кр})$  «красная граница» - минимальная частота света, при которой возможен фотоэффект.

---

*Альберт Эйнштейн (1879-1955) – великий немецкий физик. Создатель теории относительности, квантовой теории и статистической физики. Разрабатывая основы квантовой теории, Эйнштейн ввел представление о дискретной структуре поля излучения и на этой основе вывел законы фотоэффекта, а также объяснил люминесцентные и фотохимические закономерности. Специальная теория относительности и квантовая теория излучения явились основой квантовой электродинамики, квантовой теории поля, атомной и ядерной физики. За открытие законов фотоэффекта и работы в области теоретической физики ему была присуждена Нобелевская премия по физике 1921 году.*

---

Физические явления в наноструктурах необходимо рассматривать с поведения носителей заряда (электронов и дырок) в них.

И так известно, что вся живая и мертвая материя состоит из атомов, атомы - из атомных ядер и электронных оболочек, а ядра – из протонов и нейтронов. А почему орбитальные электроны не падают на атомное ядро? Такой вопрос возник 1911 году, когда Эрнест Резерфорд предложил планетарную модель атома, построенную по аналогии с устройством Солнечной системы. Роль Солнца в ней выполняет атомное ядро, роли планет – орбитальные электроны, которые удерживают электростатическое притяжение к ядру, а устойчивость обеих систем обеспечивает центробежная сила. Но при ближайшем рассмотрении, оказывается, что в отличие от

Солнечной системы планетарная модель атома Резерфорда устойчивостью не обладает.

*Проблема: электрон движется с ускорением следовательно, излучает, следовательно, теряет энергию, следовательно, падает на ядро.*

---

*Эрнест Резерфорд (1871-1937) – британский физик родом из Новой Зеландии. Лауреат Нобелевской премии по химии за 1908 год. Экспериментально доказал наличие крошечного плотного и тяжелого ядра внутри сравнительно большого и почти пустого атома. Создатель известной школы физики: 12 учеников Резерфорда стали нобелевскими лауреатами. Среди них физик из России Петр Леонидович Капица.*

---

Дело в том, что электрон открыл Джозеф Джон Томсон в 1897 году и моменту создания планетарной модели атома о нем уже довольно много узнали. В частности, согласно классической электродинамике, электрон, движущийся с ускорением, должен испускать электромагнитное излучение. Если электрон движется по прямой в какой-либо среде, ионизируя ее атомы, то он тормозится ею (отрицательное ускорение) и испускает тормозное излучение. Двигаясь по прямой (например, по окружности), электрон испытывает центростремительное ускорение и испускает (в том числе в вакууме) так называемое синхротронное излучение.

Таким образом, согласно классической физике, орбитальный электрон планетарной модели атома Резерфорда должен терять энергию на излучение, то есть тормозиться и, в конце концов, падать на ядро. Значит, планетарная модель атома неустойчива, и этот недостаток модели Резерфорд исправить не смог. Не ответил он и на другой вопрос: почему атом испускает линейчатый (дискретный) спектр излучения? Вращающийся и постепенно тормозящийся электрон может испускать только излучение с непрерывным спектром.

### *Постулаты Бора*

• *Атомы имеют ряд стационарных состояний соответствующих определенным значениям энергий:  $E_1, E_2 \dots E_n$ . Находясь в стационарном состоянии, атом энергии не излучает.*

• *В стационарном состоянии атома электроны движутся по стационарным орбитам.*

• *Излучение или поглощение энергии атомом происходит при переходе его из одного стационарного состояния в другое.*

В 1913 году Бор усовершенствовал планетарную модель атома Резерфорда, сформулировав два постулата, которые противоречили классическим законам и представлениям. Он ввел в модель понятие о стационарных круговых орбитах, находясь на которых электроны, хотя и вращаются вокруг ядра, но почему-то не излучают. И значит, не теряют энергию, потому не тормозятся и не падают на ядро. Радиусы  $r$  этих орбит определяются соотношением

$$mVr = nh/2\pi, \quad (1)$$

где  $m$  – масса электрона,  $V$  – его скорость; вся левая часть соотношения – это момент количества движения электрона;  $n$  – целое число (1,2,3...), которое было названо главным числом, а  $h$  – постоянная величина, введенная Максом Планком, выдвинувшим идею квантования энергии. Соотношение (1) было названо Первым постулатом Бора. С точки зрения классической физики это соотношение выглядит просто как ничем не оправданное квантование момента количества движения. Однако оказалось, что постулат был придуман Бором гениально: он позволил ответить на вопрос о происхождении дискретного спектра атомного излучения.

Согласно Второму постулату Бора, энергия атома может измениться только при скачкообразном переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую. При этом изменение энергии атом  $\Delta E$  происходит строго определенными порциями-квантами:

$$\Delta E = h\nu, \quad (2)$$

где  $\nu$ - излучаемая (или поглощаемая) частота.

Используя оба постулата, Бор рассчитал спектр излучения атома водорода, который был уже точно измерен и хорошо известен. Совпадение оказалось полным: погрешность не превышала 0,001%. Затем Бор ввел еще один постулат о квантовании проекции момента количества движения и еще одно квантовое число - орбитальное. Это позволило ему количественно объяснить тонкую структуру оптического спектра. Потом он постулировал вначале магнитное ( $m$ ) квантовое число и объяснил особенности поведения атома в магнитном поле, а затем - квантование собственного момента количества движения электрона и вычислил значение его магнитного момента. Однако даже после этого признания заслуг Бора неприятие придуманных им постулатов классическими физиками сохранилось. К тому же и сама теория Бора оказалась непоследовательной и даже отчасти противоречивой. Постулированные последовательности квантовых чисел со временем пришлось ограничить специальными запретами (правилами отбора), а в случае с магнитным моментом электрона возникло явное противоречие: его расчетное значение оказалось вдвое меньше экспериментального (правда, ровно вдвое). Причина этой непоследовательности в общем-то очень успешной теории заключалась в том, что, введя в нее совершенно новый принцип квантования, Бор при описании движения частиц продолжал использовать классическую физику, чего делать было нельзя. Об особенностях поведения микрочастиц заговорили только ближе к концу 1920-х годов. Тогда начал появляться новый, радикально отличающийся от классического, способ описания движения элементарных частиц.

---

*Нильс Хенрик Давид Бор (1885-1962) – выдающийся датский физик. Создал квантовую теорию атома, а затем участвовал в разработке основ квантовой механики. В 1936 году сформировал фундаментальное для ядерной физики представление о характере протекания ядерных реакций,*

*предложив модель составного ядра. В 1939 году развил теорию деления ядер – процесса, в котором происходит освобождение огромных количеств ядерной энергии. Лауреат Нобелевской премии по физике 1922 года.*

---

Поведение подвижных носителей заряда (электронов и дырок) в наноразмерных структурах определяются квантовыми эффектами, поскольку они не могут быть описанными законами классической физики.

Квантовая механика, в отличие от классической учитывает двойственную корпускулярно-волновую природу частиц и квантуемость, т.е. скачкообразное, дискретное измерение их многих характеристик.

### ***Законы фотоэффекта***

- *Фототок насыщения пропорционален световому потоку, падающему на металл  $I_n \sim h\nu = A + mV^2/2$*
- *Кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а зависит от его частоты.*
- *Для каждого вещества существует определенное значение частоты  $\nu_0$ , называемое красной границей фотоэффекта.*

При построении теории внешнего фотоэффекта Эйнштейн (1905) предположил, что свет не только испускается и поглощается квантами, но и распространяется как поток особых частиц – фотонов, несущих на себе дискретную порцию энергии, равную  $h\nu$ . На основе квантовых представлении о свете Эйнштейн объяснил не только фотоэффект, но и другие физические явления, которые не поддавались описанию с точки зрения электромагнитной теории света.

### ***Корпускулярно-волновой дуализм, соотношение неопределенностей***

- *И кванты света, и частицы (электроны) проявляют как свойства частиц, так и свойства волн*
- *Волновой процесс не определяется в одной точке пространства и в определенный момент времени:*

$$\Delta x \Delta p_x > \hbar$$

$$\Delta E \Delta t > \hbar$$

- соотношение неопределенностей Гейзенберга

Было также признано то, что свет имеет двойственную (корпускулярно-волновую) природу, поскольку между полной энергией частицы и частотой существует связь, которая свидетельствует о том, что двойственная природа справедлива не только для фотонов, но для любых других микрочастиц.

### ***Природа волнового процесса?***

- Состояние частицы описывается его волновой функцией  $\psi(x, y, z, t)$
- Волновая функция – комплексная величина  $\psi = A e^{i\varphi}$ ,  $A$  – амплитуда,  $\varphi$  – фаза,  $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i \sin\varphi$ ,  $i^2 = -1$
- Вероятность  $\Delta W$  найти частицу в объеме  $\Delta V$  есть  $\Delta W = \Delta |\psi|^2 \Delta V = A^2 \Delta V$
- Для стационарных состояний с определенным значением энергии зависимость волновой функции от времени есть  $\psi(x, t) = \psi(x) e^{iWt}$

Гипотеза о корпускулярно-волновом дуализме приобрела универсальный характер и была использована Э.Шрёдингером для получения основного уравнения квантовой механики – Уравнения Шрёдингера.

---

***Эрвин Шредингер (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, родился в Вене. Учился в Венском университете, до второго курса не посещал лекций по теоретической физике, однако докторскую диссертацию защитил именно по этой специальности. Разработал свою теорию волновой механики, которая и поныне является фундаментальной основой всей современной квантовой механики. В 1927 году занял должность заведующего кафедрой теоретической физики Берлинского университета, сменив на этом посту Макса Планка. В 1933 году получил Нобелевскую премию.***

---

Для описания движения микрочастиц со всеми присущими только им особенностями, было составлено уравнение еще одним основателем квантовой механики – австрийским физиком Эрвином Шредингером. В качестве одного из наглядных примеров решения уравнения Шредингера рассмотрим вопрос поведения орбитальных электронов атома – *почему они не падают на ядро?* Вопрос школьный, но вызывает интерес даже у студентов.

Поэтому, для любознательных рекомендую прочитать статью «Привлекательный мир микрофизики», опубликованную в журнале «Наука и жизнь», 2015. -№ 9. - С.98-104.

Дело в том, что уравнение Шредингера для атомных имеет решение только при тех значениях энергии, которые совпадают со значениями, вытекающими из постулата Бора. При других значениях энергии оно просто не имеет решений.

Электрон движется в атоме по квантовомеханическим законам. У него нет классической круговой траектории, он не испытывает центростремительного ускорения и, следовательно, не излучает, не теряет энергию на излучение и не тормозится из-за этого. Ничего из того, что ему полагается по законам классической физики, он не делает. Поэтому и не падает на ядро.

Попытки создания наноразмерных структур привели к новой теории квантово-размерных эффектов.

### 3. Туннелирование наночастиц через потенциальный барьер

Одним из самых таинственных и притягательных разделов физики уже долгое время (практически с момента возникновения) остается *квантовая механика*.

В классической механике Галилея и Ньютона макроскопические частицы описываются координатами в пространстве, скоростями движения и зависимости этих величин от времени. По мере дальнейшего развития классической физики, а именно исследования по атомному строению вещества, вскоре столкнулись с серьезными проблемами. И решение этих проблем классической физики положило начала квантовой механики.

*Отцы великой квантовой революции.*

Изначально этапами развития квантовой механики были:

- Открытие М.Планком его формулы для излучения абсолютно черного тела;
- Квантовая природа фотоэффекта в истолковании А.Эйнштейна на основе понятия о фотонах;
- Формулировка Н.Бором его постулатов о стационарных атомных системах и о частоте света, испускаемого системой при переходе из одного стационарного состояния в другое.
- Гипотеза, выдвинутая Луи де Бройлем – все микроскопические объекты – частицы, атомы и даже молекулы – обладают корпускулярно-волновым дуализмом, что и свет.

Результаты научных исследований неотделимы от личности их автора, а квантовая физика началась с Макса Планка. М.Планк выдвинул замечательный постулат: *вещество не может испускать энергию иначе как конечными порциями, пропорционально частоте этого излучения  $E=h\nu$ .*

---

*Макс Планк (1858-1947) – выдающийся немецкий физик. Имя Планка заслуженно вошло в золотой фонд человеческой культуры. Область научных изысканий была весьма обширна: термодинамика сложных систем и лучистой энергии, приведшая его к статистической физике и к открытию кванта действия; развитие понятия энтропии; работы по релятивистской термодинамике. Открытие универсальной мировой постоянной – кванта действия, носит его имя – величайшая ему награда. В 1920 году ему была присуждена Нобелевская премия.*

---

А. Эйнштейн обобщил гипотезу М.Планка о дискретности излучения, предположив, что электромагнитное излучение состоит из *квантов* – дискретных порций, назывных позднее *фотонами*.

*Квантовое ограничение*, о котором говорилось выше, возникает, когда свободное движение электронов в одном из направлений оказывается ограниченным *потенциальными барьерами*, образующими наноструктуру, в которой электроны находятся. Прохождение носителей заряда через потенциальные барьеры имеет место исключительно посредством их *туннелирования*, что и обеспечивает перенос носителей из одной области нанозлектронного прибора в другую.

*Туннелирование* означает перенос частицы через область, ограниченную потенциальным барьером, высота которого больше полной энергии данной частицы.

Такой эффект невозможен с точки зрения классической механики. Однако оно имеет место для квантовых частиц, которым, как было определено выше, присущ корпускулярно-волновой дуализм.

Согласно принципу *неопределенности Гейзенберга*: произведение неопределенностей координаты и соответствующей компоненты импульса в некоторый момент времени не может быть меньше постоянной Планка:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

$\Delta$ - оператор Лапласа. Оператор  $\Delta$ — это математический рецепт, следуя которому мы преобразуем одну функцию в другую. Преобразование может быть умножением на некоторое число, дифференцированием  $d/dx$  либо взятием второй производной  $d^2/dx^2$ , либо какой-нибудь другой математической операций. Для физики особый интерес представляет взаимосвязь между оператором и множеством его *собственных функций*. По определению, действие оператора на собственную функцию воспроизводит ту же самую функцию, умноженную на некоторое число. Это число называется *собственным значением* данного оператора. В квантовой механике наблюдаемые численные значения любой физической величины по определению являются собственными значениями соответствующего этой величине оператора.

*Это соотношение показывает, что нельзя одновременно точно определить и координату, соответствующую компоненту импульса частицы. Отсюда следует, что о положении частицы в пространстве в каждый момент времени приходится судить только с некоторой долей вероятности.*

Австрийский физик Э.Шредингер составил уравнение, описывающее движение частицы с помощью некой функции  $\psi$  (пси-функции). Эта функция характеризует состояние частицы-волны в определенных условиях и называется *волновой функцией*.

**Уравнение Шредингера** для движущейся свободной частицы ( $U=0$ ) имеет вид:

$$-\hbar^2/2m\Delta\psi(x)/\Delta x^2 + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$U$  — энергия частицы во внешнем поле,  $U=0$  (свободная частица)

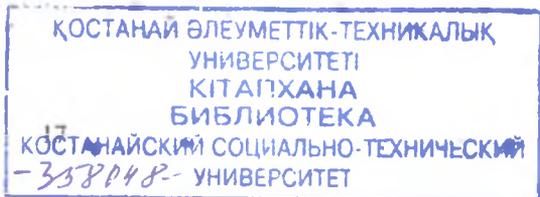
Решение данного уравнения имеет вид:

$$\Psi = Ae^{i(kx-wt)} - \text{бегущая волна}$$

Частица в потенциальной яме (квантовый размерный эффект)

$$\Psi = A\sin kx$$

Учет граничных условий:



$\Psi(0) = \psi(L) = 0$ , следовательно,  $kL = n\pi$

$$E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$$

$$E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2/2mL^2,$$

$n = 1, 2, 3, \dots$  квантовое число, обозначающее квантовое состояние.

Таким образом, электрон, помещенный в ограниченную область пространства, шириной  $L$ , может занимать только дискретные энергетические уровни. Самое низкое состояние имеет энергию

$$E_1 = \pi^2 \hbar^2/2mL^2,$$

которая всегда больше нуля. Ненулевая минимальная энергия отличает квантово-механическую систему от классической, для которой энергия частицы, находящейся на дне потенциальной ямы, тождественно равна нулю. Кроме того, разрешенные значения энергии для электрона оказываются квантованными и пропорциональны  $n^2$ .

Рассмотрим взаимодействие квантовой частицы с потенциальными барьерами, в частности, практический случай, когда квантовая частица взаимодействует с прямоугольным потенциальным барьером шириной  $a$ , высота которого больше ее энергии ( $E < U_0$ ). По классическим представлениям, если частица имеет энергию  $E$  меньше высоты потенциального барьера  $U_0$ , то частица отражается от барьера независимо от его формы и ширины. Наоборот, если энергия частицы больше высоты потенциального барьера ( $E > U_0$ ), то частица проходит над ним.

Рассмотрение этого процесса с позиций квантовой механики, то есть на основании решения уравнения Шредингера, дает иные результаты. Возьмем вначале случай одномерного прямоугольного барьера шириной  $a$  (см. рис.1).

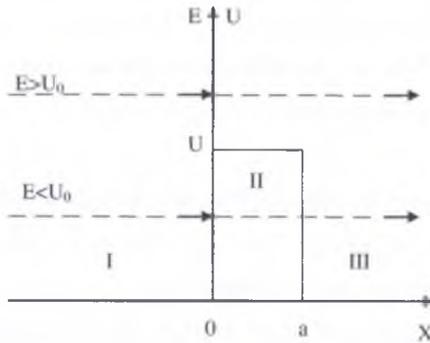


Рис.1 - Прохождение частицы через прямоугольный потенциальный барьер

Для областей I и III, где частица свободна ( $U=0$ ), решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi(x)/\Delta x^2 + 2m(E-U)\psi(x)/\hbar^2 \quad (1)$$

имеет вид:

$$\Psi_I(X) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (2)$$

$$\Psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x}, \quad (3)$$

где  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ;  $A_1, B_2, A_3$  – постоянные, определяющие соответственно амплитуды падающей, отраженной и прошедшей барьер волн (в области III нет причины для возникновения волны, возвращающейся назад к барьеру, и  $B_3=0$ ).

Для области II (область потенциального барьера) решение уравнения Шредингера выглядит следующим образом:

$$\Psi_{II}(X) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad (4)$$

где  $k_2 = (2m(E-U))^{1/2}/\hbar$ ;  $A_2, B_2$  – постоянные, определяющие амплитуды волн, движущихся в противоположных направлениях.

На основании выполнения условий непрерывности  $\psi$  - волновой функции и ее первой производной на границах областей I, II и III и что  $k_2$  является мнимой величиной:  $k_2 = (2m(E-U_0))^{1/2}/\hbar = ik$ , где  $k = (2m(U_0-E))^{1/2}/\hbar$ ,

а также полагая  $B_2 = 0$  (отражением от второй границы барьера можно пренебречь при условии достаточно высокого и широкого потенциального барьера), получаем выражение для коэффициента прозрачности в случае прямоугольного потенциального барьера:

$$D = |A_3|^2/|A_1|^2 = 16k_1^2 k^2 \exp(-2ka)/(k_1^2 + k^2) = D_0 \exp(-2a\{2m(U_0 - E)\}^{1/2})/\hbar.$$

Причем  $D_0$  имеет величину порядка единицы.

Так как вероятность прохождения электрона через весь барьер равна произведению вероятностей прохождения через каждый узкий прямоугольный барьер.

Таким образом, для высокого ( $E < U_0$ ) потенциального прямоугольной формы коэффициент прозрачности  $D > 0$ , то есть имеется вероятность проникновения частицы сквозь такой барьер.

#### 4. Квантовые эффекты в наноразмерных структурах

Квантовые размерные эффекты в электронных структурах имеют место тогда, когда длина свободного пробега электрона соизмерима с длиной волны де Бройля  $\lambda$  для электронов, ибо квантово-размерные эффекты обусловлены волновой природой электронов.

В наноразмерных областях поведение электронов определяется отражением электронных волн от границ раздела таких областей, интерференцией электронных волн, прохождением волн сквозь потенциальные барьеры. Этими явлениями объясняются квантово-размерные эффекты в наноструктурах, например квантование энергии электронов, пространственно ограниченных в своих перемещениях, прохождение электронов сквозь нанометровые диэлектрические слои, квантование сопротивления нанопроволок и др.

##### *Гипотеза де Бройля*

- *С движущейся частицей связан волновой процесс*
- *Объясняет правила квантования в атоме Бора*
- *Ничего не говорит о природе этих волн.*

Длина волны де Бройля для электрона, движущегося в кристалле со скоростью  $v$ , имеет значение:

$$\lambda = h / m^* v = h / \sqrt{2 m^* E_{кин}}, \quad (1)$$

где  $m^*$  - эффективная масса электрона,

$E_{кин}$  - его кинетическая энергия.

Поскольку свет имеет двойственную (корпускулярно-волновую) природу, то модуль импульса фотона  $p = |p|$  может быть выражен через соответствующую длину волны  $\lambda$

$$p = h / \lambda.$$

В квантовой механике данная формула записывается в векторной форме:

$$p = \hbar k,$$

где величина  $\mathbf{k}$  называется *волновым вектором*.

Рассмотрим свободные электроны в кристаллах.

Свободными считаются электроны, которые могут не только перемещаться по кристаллу, но и изменять свою энергию под внешним воздействием.

В металлах при не слишком высоких температурах свободными можно считать только электроны с энергиями вблизи уровня Ферми  $E_F$ . Поэтому для свободных электронов

$$E_{\text{кин}} \approx E_F \approx 5 \text{ эВ} = 8 \times 10^{19} \text{ Дж} \quad (2)$$

$$\text{В металлах } m^* \approx m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ кг,}$$

где  $m_0$  - масса электрона. Подставляя значения  $E_{\text{кин}}$  и  $m_0$  формулу для  $\lambda$ , получим  $\lambda \approx 0,55 \text{ нм}$  - порядок размера постоянной кристаллической решетки.

В полупроводниках  $E_{\text{кин}} \approx kT = 0.026 \text{ эВ}$  (при комнатной температуре). Эффективная масса электрона в различных полупроводниковых материалах изменяется в широких пределах. Например, для кремния  $m^* = 0,92m_0$ , для GaAs  $m^* = 0,068m_0$ , для висмута (полуметалл)  $m^* = 0,01 m_0$  следовательно, для этих материалов  $\lambda = 8; 30; 80 \text{ нм}$  соответственно.

Так как длина волны де Бройля для свободных электронов в полупроводниках значительно больше, чем в металлах, то квантово-размерные эффекты технологически легче осуществить на полупроводниках. Поэтому исследование этих эффектов и формирование наноструктур для применения в электронике проводится преимущественно на полупроводниках.

Следует отметить, что квантово-размерные эффекты можно наблюдать при условии, что средняя длина свободного пробега электронов превышает размер рассматриваемой области, ее границы имеют высокую степень совершенства, а отражения волны де Бройля от границ можно считать зеркальными.

1. Любая наноразмерная частица обладает объемными свойствами в трех направлениях:  $x, y, z$ , и представляет *трехмерную систему (3D)* (рис.2).

Свободный электрон, движущийся в **трехмерной системе (3D)**, имеет кинетическую энергию, величина которой, в соответствии с пространственными компонентами его импульса  $p_x, p_y, p_z$ , составляет

$$E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2m^*, \quad (3)$$

или, в волновом представлении

$$E = (\hbar^2 / 2m^*) (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (4)$$

где  $m^*$  - эффективная масса электрона (в твердых телах она обычно меньше, чем масса покоя электрона  $m_0$ );  $\hbar$  - приведенная постоянная Планка ( $\hbar = h/2\pi$ );  $k_x, k_y, k_z$  - пространственные компоненты волнового вектора.

Плотность электронных состояний при этом является непрерывной функцией энергии:

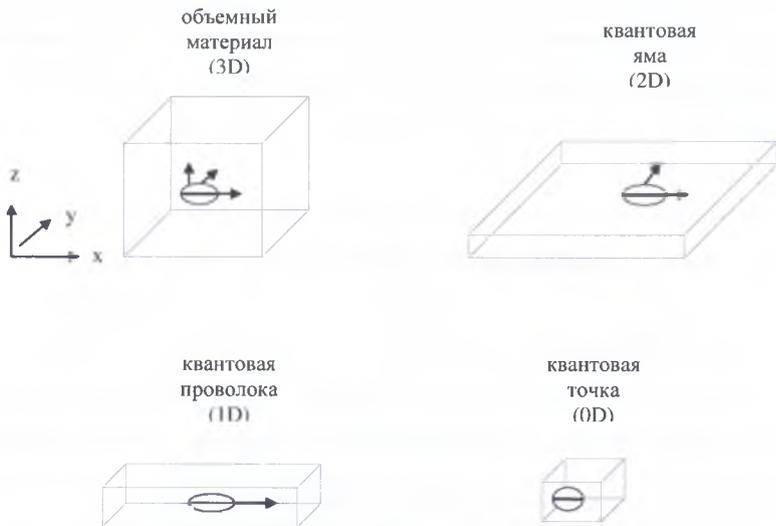
$$n_{3D}(E) = (m^* \sqrt{2m^* E}) / \pi^2 \hbar^3 \quad (5)$$

При этом соответствующие разрешенные значения волнового вектора дискретны и равны

$$k_n = 2\pi/\lambda_n = n\pi/a,$$

где  $a$  - ширина потенциальной ямы.

Ограничение движения электронов (дырок) в наноразмерной структуре, приводящее (вследствие их квантово-волновой природы) к ненулевому минимальному значению их энергии и к дискретности энергий разрешенных состояний, называют **квантовым ограничением**. В твердых телах квантовое ограничение может быть реализовано в трех пространственных направлениях. Количество направлений, в которых эффект квантового ограничения отсутствует, используется в качестве критерия для классификации элементарных наноразмерных структур по трем группам: квантовые пленки, квантовые шнуры и квантовые точки.



**Рис.2 - Схематическое представление фрагментов трехмерного (3D), двухмерного (2D), одномерного (1D), нульмерного нанобъекта**

**2. Квантовые ямы** представляют собой двухмерные (2D) структуры, в которых квантовое ограничение действует только в одном направлении  $z$  и не ограничено в направлениях  $x$  и  $y$ .

В наноразмерной структуре свободное движение электрона ограничено, по крайней мере, в одном направлении. В данном направлении (пусть это будет направление вдоль оси  $x$ ) потенциальная энергия электрона может быть представлена в виде бесконечно глубокой потенциальной ямы. Если ширина ямы вдоль оси  $x$  равна  $a$ , то в области  $0 < x < a$  электрон имеет нулевую потенциальную энергию. Бесконечно высокий потенциальный барьер делает невозможным нахождение электрона за границами этой области.

Таким образом, волновая функция электрона должна обращаться в нуль на границах потенциальной ямы, т. е. при  $x = 0$  и  $x = a$ . Такому условию отвечает лишь ограниченный набор волновых функций.

Это - стоячие волны с длиной  $\lambda$ , определяемой соотношением

$$\lambda_n = 2a/n, \quad (n=1,2,\dots) \quad (6)$$

Соответствующие разрешенные значения волнового вектора дискретны и равны

$$k_n = 2\pi/\lambda_n = n\pi/a \quad (7)$$

Как следствие, энергии разрешенных энергетических состояний электрона в яме тоже оказываются дискретными. Спектр этих состояний имеет вид

$$E_n = (\hbar^2 k_n^2) / 2m^* = (\hbar^2 \pi^2 n^2) / (2m^* a^2) \quad (8)$$

Целое число  $n$  является квантовым числом, обозначающим квантовое состояние. Таким образом, электрон, помещенный в ограниченную область пространства, может занимать только дискретные энергетические уровни. Самое низкое состояние имеет энергию

$$E_1 = (\hbar^2 \pi^2) / (2m^* a^2) \quad (9)$$

которая всегда больше нуля. Ненулевая минимальная энергия отличает квантово-механическую систему от классической, для которой энергия частицы, находящейся на дне потенциальной ямы, тождественно равна нулю. Кроме того, разрешенные значения энергии для электрона оказываются квантованными и пропорциональны  $n^2$ .

Принцип неопределенности  $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$  тоже приводит нас к выводу о ненулевом значении минимальной энергии электрона в потенциальной яме.

Для того чтобы удовлетворить принципу неопределенности  $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$  (в нашем случае  $\Delta x = a$ ), неопределенность импульса электрона должна быть  $\Delta p \geq \hbar/2a$ , что отвечает минимальному изменению энергии  $\Delta E = (\Delta p)^2 / 2m^* = \hbar^2 / 8m^* a^2$ , которое (с точностью до множителя  $\pi^2/4$ ) соответствует приведенному выше выражению для  $E_1$ .

Электроны в квантовых ямах обычно называют **двухмерным электронным газом(2D)**.

Таким образом, **квантовая яма** представляют собой двухмерные (2D) структуры, в которых квантовое ограничение действует только в одном направлении  $z$  и не ограничено в направлениях  $x$  и  $y$ .

**Квантовые проволока** - это одномерные (1D) структуры (рис.2). В отличие от квантовой ямы они имеют не один, а два манометровых размера, в направлении которых и действует эффект квантового ограничения. Носители заряда могут свободно двигаться только в одном направлении - вдоль оси шнура. Таким образом, и вклад в энергию носителя заряда дают кинетическая составляющая вдоль одного направления и квантованные значения в двух других направлениях:

$$E = (\hbar^2 p^2 m^2) / (2m^* l_y^2) + (\hbar^2 \pi^2 n^2) / (2m^* l_z^2) + (\hbar^2 k_x^2) / (2m^*), \quad (10)$$
$$m=1,2,\dots, n=1,2$$

Согласно данной формуле энергия электрона, связанная с движением вдоль осей  $y$  и  $z$ , должна квантоваться, как в одномерных потенциальных ямах шириной  $l_y$  и  $l_z$ .

Полную энергию электрона можно представить в следующем виде:

$$E = \hbar^2 k_x^2 / 2m^* + E_{mn}$$

где  $E_{mn}$  - энергия размерных уровней.

Положение каждого из них зависит от двух квантовых чисел  $m$  и  $n$ , а также от величин  $l_y$  и  $l_z$ .

**Квантовые точки** - это нульмерные (0D) структуры (рис.2), в которых движение носителей заряда ограничено во всех трех направлениях. В каждом из этих направлений энергия электрона оказывается квантованной.

Квантовая точка - это новое понятие современной физики, представляющая собой область наноразмерной структуры, в которой можно управлять движение одиночным электроном, представляющая собой одноэлектронный транзистор. Эта особенность квантовых точек открывает перед физиками и инженерами огромные возможности для миниатюризации полупроводниковых устройств и снижения их энергопотребления.

Энергия свободных электронов должна квантоваться для движений во всех трех направлениях. Энергетический спектр электронов в квантовой точке полностью дискретен, как у отдельного атома. Энергия равна:

$$E_{dmp} = \hbar^2 \pi^2 d^2 / 2m^* l_x^2 + \hbar^2 \pi^2 m^2 / 2m^* l_y^2 + \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2m^* l_z^2 \quad (11)$$

где  $d, m, n, = 1, 2, 3, \dots, l_x, l_y, l_z$  – размеры области в трех измерениях.

Энергетический спектр электронов состоит из отдельных размерных уровней.

$E_{dmp}$ . Величина  $E_{dmp}$  зависит от трех квантовых чисел и размеров  $l_x, l_y, l_z$ .

Рассмотренные наноразмерные структуры, представляющие практический интерес, должны располагаться на какой-либо подложке и иметь контакт с другими структурами и функциональными элементами. Более того, приборные применения требуют комбинации нескольких элементарных структур. Но, несмотря на появление в сложных комбинированных структурах новых квантово-механических эффектов, определяющую роль в них продолжает играть квантовое ограничение.

## 5. Теория одноэлектронного туннелирования

**1. Кулоновская блокада туннелирования.** Кулоновской блокадой называется отсутствие тока через туннельный переход при наличии внешнего напряжения, если туннелированию электронов препятствует их кулоновское взаимодействие.

Рассмотрим туннельный переход «металл (M1)-диэлектрик (D)-металл (M2)» (рис.3). Пусть первоначально система не заряжена. Систему можно рассматривать как конденсатор с некоторой ёмкостью  $C$ . Если перенести электрон  $e$  с пластины M1 на M2, то конденсатор окажется

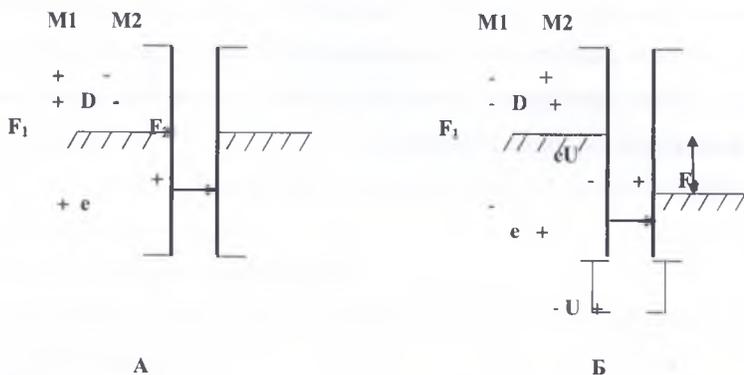


Рис. 3 - Схема механизма кулоновской блокады при туннелировании электрона

заряжённым. Перенос заряда требует энергии  $E$ , так как происходит против сил взаимодействия с положительным зарядом, возникающим на пластине M1(рис.3 А). Эта энергия равна энергии заряжённого конденсатора:

$$\Delta E = e^2/2C$$

Величина  $E$  называется энергией одноэлектронной зарядки. Если приложить к пластинам напряжение  $U$  (как это показано на рис.3.Б) и постепенно увеличивать его, то на пластинах станут накапливаться заряды, при этом до некоторого значения  $U = U(k)$  туннельный ток через переход не

возникает, так как работа сил поля источника напряжения при перемещении электрона с пластины M1 на пластину M2 по величине остаётся меньше работы против кулоновских сил отталкивания, иными словами, протеканию туннельного тока препятствует кулоновская блокада.

Блокада будет «прорвана», когда напряжение  $U$  достигнет значения  $U(k)$ , определяемого соотношением:

$$e U(k) = e^2/2C, \text{ т.е. } U(k) = e/2C$$

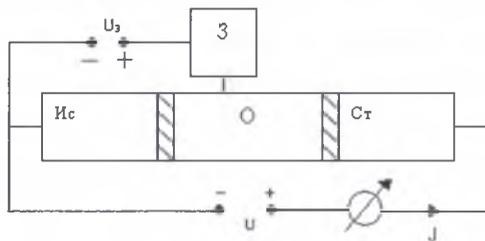
Напряжение  $U(k)$  называется напряжением кулоновской блокады. После прорыва блокады туннелирует один электрон, затем снова накапливается заряд на пластинах. Электроны туннелируют через переход по одному.

Наблюдение эффекта кулоновской блокады возможно в условиях, когда энергия теплового движения электронов недостаточна для преодоления блокады, т.  $\Delta E \gg kT$ , или

$$C \ll e^2/2kT$$

## 2. Кремниевый одноэлектронный транзистор.

Изучив эффект кулоновской блокады, целесообразно перейти к рассмотрению наиболее простой структуры одноэлектронного транзистора. При этом следует подчеркнуть, что такой транзистор похож на полупроводниковый полевой транзистор, имеет также три электрода, называемые истоком (Ис), стоком (Ст) и затвором (з). Структура и схема включения транзистора показаны на рис.4.



**Рис.4 - Структура одноэлектронного транзистора, включающая два электрода (Ис), (Ст) и расположенный между ними в диэлектрической среде (SiO<sub>2</sub>) наноструктурок (о) при наличии разности потенциалов между электродами**

Проводящий канал транзистора (наноструктурок, наночастица) отделен от стока и истока туннельными барьерами из тонких слоев изолятора. Чтобы транзистор мог работать при комнатной температуре, размеры острова не должны превышать 10 нм. Высота потенциального барьера приблизительно равна 0,17 эВ. Материалом для островка (о) служит отдельный кластер аморфного кремния SiO<sub>2</sub>, поверхность которого оксидирована при низкой температуре для создания тонкого барьерного слоя. Если приложить напряжение между истоком и стоком транзистора, то ток протекать не будет, поскольку электроны вследствие кулоновской блокады находятся на наночастице. Для протекания тока необходимо увеличить потенциал на управляющем электроде – затворе. Только когда потенциал на затворе станет больше некоторого порогового значения, блокада прорывается, и электрон способен пройти через барьер – в цепи исток-сток начинает протекать туннельный ток. Таким образом, управляя потенциалом на затворе, можно пропускать через барьеры одиночные электроны. Количество электронов в наночастице должно быть не более 10. Это может быть достигнуто в квантовых структурах с размером порядка 10 нм.

По этому принципу работает широко распространенный МОП-транзистор (металл-окисел-полупроводник), в которых переключение осуществляется изменением потенциала управляющего электрода.

## 6. Зонная структура в кристаллах с квантовыми точками и квантовыми ямами. Гетеропереходы

Для дальнейшего рассмотрения особенностей квантово-размерных элементов, в частности квантовых точек, необходимо привести некоторые оценочные величины, позволяющие представить их размеры, плотность и другие параметры.

При этом в первую очередь важно построение энергетической зонной структуры.

В классической механике энергия частицы может принимать любое значение, говорят, что энергетический спектр классической частицы является непрерывным. Принципиальное отличие квантовой механики от классической состоит в том, что энергетический спектр частицы может быть как непрерывным, так и дискретным. При определенных обстоятельствах энергия частицы может принимать ограниченный набор значений. Поясним это на примере. На рис. 5А изображена одномерная прямоугольная потенциальная яма:

- если энергия частицы превышает значения  $U(0)$ , то частица может свободно перемещаться вдоль оси  $X$ ,
- если же энергия частицы меньше значения  $U(0)$ , то частица локализована в яме.

В классической механике энергия частицы в этом случае имеет любое значение от 0 до  $U(0)$ , а в квантовой механике существует конечное число уровней энергии (минимум один в такой одномерной задаче).

Число уровней зависит от ширины потенциальной ямы  $L$ , высоты потенциального барьера  $U(0)$  и массы частицы. Если мы будем увеличивать ширину ямы, число уровней энергии в яме будет расти (рис.5 В). При этом уровни будут располагаться все ближе и ближе друг к другу. В пределе, когда яма станет бесконечно широкой, энергетический спектр станет непрерывным.

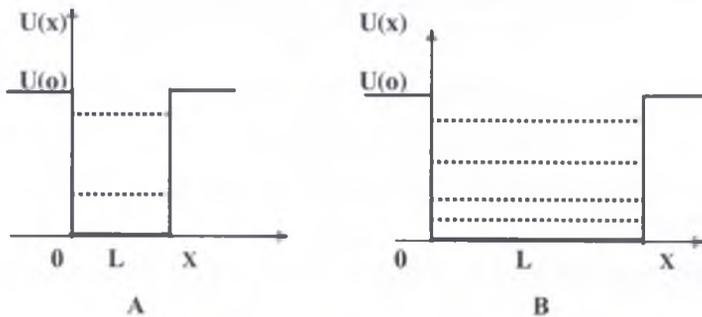


Рис.5 – А - одномерная прямоугольная потенциальная яма,  $U(x)$  – потенциальная энергия, В - прямоугольная потенциальная яма отличается от случая А только большей шириной  $L$

Для свободной частицы с эффективной массой  $m^*$ , движение которой в кристалле в направлении оси  $X$  ограничено непроницаемыми барьерами, разрешенные значения волновых векторов  $k$  имеет вид

$$k = n\pi/L = 2\pi/\lambda(n)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $\lambda$ -длина волны частицы, а энергия основного состояния по сравнению с состоянием без ограничения возрастает на величину

$$\Delta E = \hbar^2 \pi^2 / 2 m^* L^2$$

Это увеличение энергии называется энергией равномерного квантования. Поэтому рассмотренный эффект часто называют **квантово-размерным эффектом**.

Рассмотрим теперь гетеропереходы с квантовыми ямами.

- Гетеропереходом называется контакт двух различных по химическому составу полупроводников (они различаются ширинами запрещенных зон, постоянными кристаллической решетки и др. параметрами).

- Гетероструктурой называется полупроводниковая структура с несколькими гетеропереходами.

Жорес Иванович Алферов и его группа в Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе в 60-е годы прошлого века исследовали гетероструктуры на основе арсенида галлия GaAs- именно соединения типа  $A^{III}B^V$ . Оказалось, что гетеропереходы типа арсенид галлия /арсенид галлия-алюминия ( $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ) могут быть близкими к идеальным, то есть иметь малое число дефектов и дислокаций на гетерогранице. В двойных гетероструктурах  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  эффективность излучательной рекомбинации и внутренний квантовый выход излучения – достигает 99,7%.

Этот результат доказал, что на основе гетероструктур можно создать эффективные светодиоды и полупроводниковые лазеры. За эти работы Ж.И. Алферов удостоен Нобелевской премии 2000 года.

Область рекомбинации электронно-дырочных пар ограничено шириной  $d$  узкозонной области. Современными методами выращивания полупроводниковых пленок ее можно сделать очень тонкой, в несколько атомных слоев, то есть порядка нанометров. Поскольку на таких малых расстояниях необходимо учитывать волновые свойства электронов, то есть применять квантовую механику, подобные структуры называют квантовыми ямами. Энергии электронов и дырок в квантовых ямах начинают зависеть от ширины ямы  $d$ . В квантовых ямах, вследствие их малой ширины, концентрация инжектированных электронов и дырок при данной плотности электрического тока оказывается значительно большей, чем в обычном p-n-переходе. Соответственно существенно увеличиваются вероятность излучательной рекомбинации и внутренний квантовый выход излучения.

Все материалы, из которых делают гетероструктуры, относятся к центральной части периодической системы элементов (табл. 1).

**Таблица 1. Центральная часть Периодической таблицы элементов.  
Показаны элементы II – VI групп, которые широко  
используются в современной технологии  
гетероструктур.**

II	III	IV	V	VI
	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sb	Te	Hg

Каждый элемент III группы может вступать в соединение с любым элементом V группы. При этом возникает соединение элементов III и V групп, так называемые AIII BV. Наиболее часто используемое в технике соединение – арсенид галлия GaAs.

Для получения твердых растворов могут использоваться два или большее число отдельных соединений. Например – соединение: алюминий – галлий – мышьяк,



где  $x$  – доля узлов элементов III группы, занятых атомами Al, а

$(x - 1)$  – доля узлов элементов, занятых атомами Ga.

В гетероструктурах с квантовыми ямами средний узкозонный слой имеет толщину порядка нескольких сотен ангстрем, что приводит к расщеплению электронных уровней вследствие эффектов размерного квантования.

Идея использования структур с гетеропереходами в полупроводниковой электронике была выдвинута Г.Кремером и Ж.И.Алферовым, которые сформулировали концепцию полупроводниковых лазеров на основе двойной гетероструктуры  $\text{Al}(x)\text{Ga}(1-x)\text{As} - \text{GaAs}$ , и в 2000 г. получили Нобелевскую премию. Исследование свойств гетероперехода GaAs/AlGaAs и совершенствование технологии выращивания структур –

дало возможность реализовать режим лазерной генерации при комнатной температуре.

На рис.6 изображена двойная гетероструктура. Проведем мысленный эксперимент: будем уменьшать толщину среднего слоя.

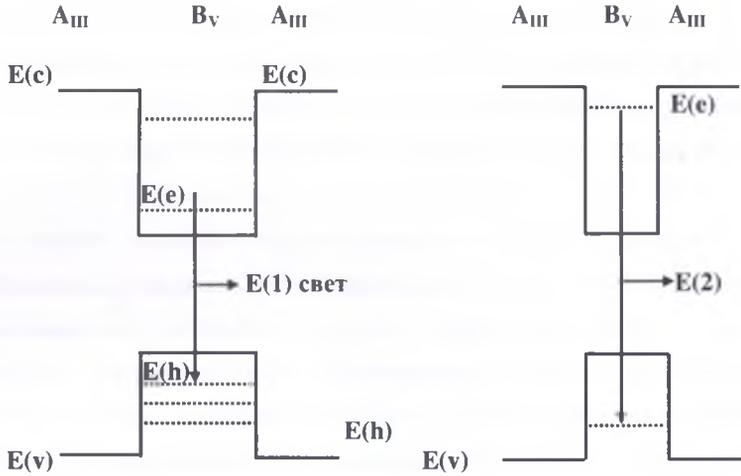


Рис.6. Энергетическая зонная диаграмма двойной гетероструктуры

$E(c)$  и  $E(v)$  – края зоны проводимости и валентной зоны.

$E(e)$  и  $E(h)$  – уровни размерного квантования для электронов и

дырок.  $E(1)$  и  $E(2)$  – энергия испускаемого фотона при рекомбинации электрона и дырки.

Ситуация с точностью до наоборот отвечает описанной выше для одномерной потенциальной ямы: для тонких слоев начинает проявляться эффекты размерного квантования, непрерывный спектр «сменяется» дискретным набором уровней энергии.

- Каков характерный размер (в данном случае толщина слоя), при котором начинает играть существенную роль квантовомеханические эффекты?

- Он должен быть сопоставим с длиной волны электрона (дырки), которая вблизи дна зоны проводимости –  $E(c)$  (потолка  $E(v)$ ) составляет

десятки постоянных решеток, т.е. толщина слоя должна быть в пределах одного – двух десятков нанометров.

- Подобные гетероструктуры с тонкими (несколько нанометров) слоями называют «квантовыми ямами».

- Энергетический спектр определяет спектр излучения структуры и энергия испускаемого фотона [ $E(1)$  и  $E(2)$ ] испускаемого при рекомбинации электрона и дырки определяется уже не только ширинами запрещенных зон  $E(g)$  материалов А и В, но и шириной слоя (потенциальной ямы, поэтому  $E(2) > E(1)$ ).

Исследование свойств гетероперехода GaAs / AlGaAs и усовершенствование технологии выращивания структур дало возможность реализовать непрерывный режим лазерной генерации при комнатной температуре и создать полупроводниковый лазер на двойной гетероструктуре. При этом инверсная населенность для получения стимулированного излучения достигнута инжекционным способом. Инжекцией называют процесс введения неравновесных носителей заряда. Образование неравновесных носителей заряда в зоне проводимости возможно, например в результате облучения фотонами или частицами с энергией большей  $E(g)$ . Концентрацию носителей заряда, вызванную термическим возбуждением, называют равновесной.

## 7. Квантовые колодцы в гетероструктурах

Нанотехнология - эта область науки о нанообъектах, процессах и явлениях, происходящих на уровне размеров 1-100 нм. В этой области наблюдаются эффекты, чувствительные как к отдельным атомно-молекулярным уровням энергии, так и к коллективным свойствам тел.

Развитие науки о нанокластерах и наносистемах и методов их исследования привело к созданию нанотехнологии, наноматериалов и наноустройств, отличающихся уникальными свойствами и перспективами применения. При этом прослеживается тенденция перехода от изолированных одиночных нанокластеров к наносистемам и наноструктурам, затем к наноматериалам.

*Нанокластер состоит из атомов на поверхности и из атомов внутри кластера, причем для нанокластеров с размерами несколько нанометров большая часть атомов находится на поверхности.*

В последнее десятилетие двадцатого века произошло выделение таких понятий, как нанокластер, наноструктура, и связанных с ними явлений в отдельную область физики-химии. Это произошло главным образом в результате значительного прогресса в получении и исследовании нанообъектов, возникновения новых наноматериалов, нанотехнологий и наноустройств. Синтезированы новые гигантские нанокластеры ряда металлов, фуллерены и углеродные нанотрубки.

Сегодня невозможно представить современную физику наноструктур без полупроводниковых гетероструктур. Полупроводниковые гетероструктуры, и в особенности двойные гетероструктуры, включая квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки, являются сегодня предметом исследований ученых, работающих в области нанотехнологий.

В конкретных приборных структурах, например, светодиодов носители тока в полупроводнике могут создаваться примесями. Создание в полупроводниках областей с требуемым типом основных носителей

(электроны или дырки) предполагает легирование этих областей донорными или акцепторными примесями. Для светодиодов применимы соединения типа  $A^{III}B^V$  (GaAs, GaP, CaN, InP).

Если вместо атомов пятой группы (например, азота N в GaN) в решетке кристалла стоит атом примеси шестой группы (например, кислород), то лишний электрон легко отрывается от положительно заряженного иона. Примесь в таком случае называется донором.

Если вместо атомов третьей группы (например, галлия из GaN) в решетке кристалла стоит атом примеси второй группы (например, магния), то для добавления нужной валентной связи атом Mg легко принимает на себя электрон от соседних атомов и создает дырку, которая отрывается от отрицательного иона примеси. Примесь в таком случае называется донором.

Основной элемент гетероструктуры – гетеропереход, представляющий собой контакт двух химически различных полупроводниковых материалов с различной шириной запрещенной зоны. На гетеропереходе происходит скачкообразное изменение свойств материалов, его образующих. Основной для приборных применений физический параметр, который испытывает скачок – положение края зоны. Величина этого скачка для зоны проводимости обозначается  $\Delta E_c$ , а для валентной зоны -  $\Delta E_v$ . Разность этих параметров равна разности ширин запрещенных зон двух материалов

$$\Delta E_g = \Delta E_c - \Delta E_v.$$

Обычно по мере увеличения концентрации образующихся свободных носителей заряда их подвижность снижается из-за усиления рассеяния носителей на ионизированных примесях за счет кулоновского взаимодействия с ними. Поэтому необходимость достижения большой концентрации подвижных носителей заряда вступает в противоречие с возможностью обеспечить их высокой подвижностью. Между тем высокочастотные полупроводниковые приборы требуют больших концентраций носителей заряда с максимально возможной подвижностью.

Эта проблема решается в наноструктурах, в которых область полупроводника, где генерируются носители заряда, и область, где осуществляется их перенос, пространственно разделены.

Для этого используются гетероструктуры, образованные полупроводниками с различной шириной запрещенной зоны. В легированной структуре донорная примесь обычно вводится в полупроводник с большей шириной запрещенной зоны. Структура сохраняет свою электрическую нейтральность до тех пор, пока электроны находятся у своих донорных атомов. Как только электроны покидают донорные атомы (вследствие тепловой активации при  $T > 0$  К), они пересекают границу раздела и переходят в соседнюю область с более низкой потенциальной энергией. Там электроны теряют свою энергию и оказываются захваченными в приграничной области, поскольку не имеют возможности преодолеть потенциальный барьер  $A E_c$  и вернуться обратно. Эти электроны оказываются пространственно отделенными от сильно легированной донорной примеси области полупроводника, откуда они поступили. Скатившиеся в потенциальную яму электроны индуцируют электростатический потенциал, который (наряду с притяжением положительно заряженными ионами примеси) «прижимает» их к границе между материалами А и В. В результате у границы гетероперехода для электронов образуется *квантовый колодец* с примерно треугольным пространственным профилем распределения потенциала.

Ширина этого колодца имеет порядок нескольких нанометров. В нем энергетические уровни для поперечного (вдоль оси  $x$ ) движения электронов оказываются квантованными, как и в прямоугольных квантовых колодцах. Заняты только нижние энергетические уровни. Однако электроны на этих уровнях сохраняют свободу для движения в двух других направлениях, т. е. в плоскости, параллельной плоскости гетероперехода. Каждый такой уровень представляет собой дно одной из двумерных подзон размерного квантования. Так в слаболегированном узкозонном полупроводнике у

границы гетероперехода образуется *двухмерный электронный газ* (2DEG).

Электроника на гетероструктурах широко используется в телекоммуникационных системах, основанных на лазерах с двойной гетероструктурой, светодиодах и биполярных транзисторах. Солнечные элементы на гетероструктурах широко используется как в космосе, так и на земле.

Основоположником создания гетероструктур и приборов на их основе является известный российский физик Ж.И.Алферов.

---

*Жорес Иванович Алферов – лауреат Нобелевской премии за 2000 год.*

*В 1968-1969 гг. были практически реализованы все основные идеи управления электронными и световыми потоками в классических гетероструктурах на основе системы  $n\text{-AlGaAs}$ . Мы получили принципиально важные фундаментальные результаты, такие как односторонняя эффективная инжекция. Эффект "сверхинжекции", диагональное туннелирование, электронное и оптическое ограничения в двойной гетероструктуре, ставшей вскоре основным элементом исследований низкоразмерного электронного газа в полупроводниках. Ж.Алферову удалось реализовать основные преимущества использования гетероструктур в полупроводниковых приборах: лазерах, светодиодах, солнечных батареях, диодах и транзисторах. Самым значительным было, конечно, создание низкопороговых, работающих при комнатной температуре лазеров на двойной гетероструктуре (ДГС), предложенной нами еще в 1963 г.*

---

Идея использования гетеропереходов в полупроводниковой электронике была выдвинута на заре развития электроники. Важный шаг был сделан сразу же после создания лазеров на  $p\text{-}n$  - переходах, когда концепция лазера на двойной гетероструктуре. Удачная комбинация ряда свойств, т.е. малые эффективные массы и большая ширина запрещенной зоны,

эффективная излучательная рекомбинация и резкий край оптического поглощения вследствие "прямой" зонной структуры, высокая подвижность электронов в абсолютном минимуме зоны проводимости и ее сильное уменьшение в ближайшем минимуме в точке (100) уже в то время обеспечивала для GaAs достойное место в физике полупроводников и электронике.

Так как максимальный эффект может быть получен при использовании гетероперехода между полупроводником, выступающим в качестве активной области прибора, и более широкозонным материалом, наиболее перспективными системами, рассматривавшимися в то время, были GaP-GaAs и AlAs-GaAs.

Для "совместимости" материалы пары должны удовлетворять первому — и самому важному — условию: иметь наиболее близкие значения постоянных решетки. Поэтому гетеропереходы в системе AlAs-GaAs были предпочтительнее.

Первоначальные попытки создать ДГС были связаны с решеточно-несогласованной системой GaAsP. Однако из-за несоответствия параметров решетки лазерная генерация, как и в лазерах на гомопереходах, могла осуществляться только при температуре жидкого азота. Тотчас же стало ясно, что твердые растворы  $Al_xGa_{1-x}As$  являются химически устойчивыми и подходящими для изготовления долгоживущих гетероструктур и приборов.

Изучение фазовых диаграмм и кинетики роста в этой системе, а также разработка модифицированного метода жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ), пригодного для роста гетероструктур, вскоре привели исследовательскую группу, возглавляемую академиком Алферовым Ж.И. к созданию первой решеточносогласованной AlGaAs - гетероструктуры.

В это же время группа Алферова Ж.И. создала большую часть наиболее важных приборов, в которых были реализованы основные преимущества гетероструктур:

— низкопороговые ДГС-лазеры, работающие при комнатной температуре;

- высокоэффективные светодиоды на одиночной гетероструктуре;
- солнечные элементы на гетероструктурах;
- биполярные транзисторы на гетероструктурах;
- тиристорные р-п-р-п - переключатели на гетероструктурах.

## 8. Технологические методы создания квантово-размерных структур

Глобальная тенденция уменьшения размеров элементов ИС сочетается в то же время с другими отчетливо наблюдаемыми тенденциями развития:

- для кремниевой технологии резко увеличивается размер исходных пластин: в настоящее время уже реально используются пластины диаметром 300 мм;

- планарная (т. е. “двухмерная”) технология постепенно становится трехмерной (3D) и на первый план выходят задачи, становящиеся в некоторых странах предметом национальных программ, в частности, программа многоуровневой металлизации;

- все более актуальной становится программа создания и применения гетероструктур, сочетающих не только использование дополнительных к полупроводниковым, например, на кремниевой основе, материалов (проводники, диэлектрики), но и других полупроводников, например Si-Ge структур.

Выше перечисленные требования и тенденции развития заставляют обращать внимание на опыт и идеи, накопленные в ходе разработки других физико-технологических направлений, к которым относится ионный синтез, т.е. создание гетероструктур при внедрении в подложку, например кремниевую пластину, ионов другого вещества, что может приводить к образованию химического соединения. Типичными примерами таких соединений кремния могут служить силициды, оксиды и нитриды кремния, и, наконец, карбид кремния.

Особенности процесса ионного синтеза:

- процесс образования кремний-кислородных связей происходит непосредственно при облучении, тогда как внедрение ионов азота в обычных условиях (комнатная температура, средние плотности ионного тока) приводит к миграции атомов азота и накоплению пузырей;

- сплошной стехиометрический слой образуется при

высокотемпературных обработках, однако для создания столообразного профиля распределения новой фазы с резкими границами необходимы тепловые обработки после имплантации при температурах вблизи точки плавления кремния;

– возникающие по обе стороны от захороненного слоя структурные дефекты и поля упругих напряжений требуют пристального внимания и специальных усилий для преодоления связанных с этим проблем.

Ионный синтез слоев переходных металлов (Ni, Cr, Co, Mn, Ti, Pt, Pd, Mo, W) разработан и исследован в различных вариантах технической реализации, включая прямую имплантацию ионов металла в кремниевую подложку, вбивание атомов металла из нанесенной на поверхность Si-пластин металлической пленки путем облучения ее ионами либо нейтрального по электрической активности в кремнии вещества ( $\text{Si}^+$ ,  $\text{Ag}^+$ ).

Для исследования квантово-размерных структур применяется ряд методов:

- Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ);
- Атомно-силовая микроскопия (АСМ);
- Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ);
- Сверхвысоковакуумная отражательная электронная микроскопия (СВВ ОЭМ);
- Электронная оже-спектроскопия (ЭОС);
- Комбинационное рассеяние света (КРС);
- Вторичная электронная масс-спектрометрия (ВИМС).

Реальной демонстрацией преимуществ систем с квантовыми точками можно считать обнаружение в системе Si-Ge чрезвычайно высокого значения сечения фотопоглощения ( $2 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2$ ), что превышает, по крайней мере, на порядок известные значения сечения фотоионизации для локальных центров в кремнии и на три порядка аналогичную величину для квантовых точек в системе InAs/GaAs. Эти данные свидетельствуют о перспективности использования систем с квантовыми точками для создания фотодетекторов, в

том числе ИК-диапазонов. Другой интересной экспериментально установленной особенностью таких систем является обнаружение фототока, генерированного фотонами с энергией меньше ширины запрещенной зоны кремния, в гетероструктурах Ge/Si с самоорганизующимися квантовыми точками. Энергия электронного перехода в таких структурах должна определяться разницей между шириной запрещенной зоны Si (1,12 эВ) и энергией дырочного состояния в Ge-KT (0,43 эВ), то есть равняться 700 мэВ, что согласуется с экспериментальным значением положения линии в спектре фототока (примерно 730 мэВ).

Гетероструктуры с квантово-размерными элементами в настоящее время получают главным образом с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Эта методика, отличающаяся дороговизной, к сожалению, вплоть до настоящего времени была практически единственной успешно применяемой для формирования таких структур. Наибольшие успехи были получены при создании квантово-размерных систем на полупроводниках  $A^{III}B^V$  и на твердых растворах Si-Ge. При этом во всех случаях авторы, стремящиеся к созданию пространственно-упорядоченных систем, обращают внимание на то, что реальные успехи к настоящему времени связаны с использованием эффектов *самоорганизации* полупроводниковых наноструктур в гетероэпитаксиальных полупроводниковых системах. Таким образом, были реализованы идеальные гетероструктуры с квантовыми точками с высоким кристаллическим совершенством, высоким квантовым выходом излучательной рекомбинации и высокой однородностью по размерам (~ 10 %).

Другой интенсивно исследуемой гетеросистемой с квантовыми точками является твердый раствор Si-Ge, где квантово-размерные эффекты получены в структурах со следующими параметрами: поверхностная плотность равнялась  $(3 \cdot 10^{11} + 5 \cdot 10^{11}) \text{ см}^{-2}$ , а средний размер кластера германия пирамидальной формы составил 15 нм (в основании пирамиды), высота пирамиды 1,5 нм, разброс размеров не превышал 17 %. Как уже упоминалось

выше, принципиальным моментом в создании таких упорядоченных структур является *самоорганизация*.

## 9. Классификация приборных структур одноэлектроники

Структуры на основе эффекта одноэлектронного туннелирования (кулоновской блокады) являются перспективными для создания широкого спектра твердотельных приборов, в том числе интегральных схем нового поколения сверхвысокой степени интеграции. При этом их можно классифицировать их физическим принципам.

В основе классификации лежат следующие принципы.

А. На основе выделения характерных активных областей приборов различаются следующие классы одноэлектронных структур.

- **Однотуннельные приборы.** Такие структуры содержат только один туннельный переход. Примером может служить одноэлектронный диод, содержащий  $p-n$  - переход с вырожденным газом носителей заряда, в котором туннельный переход подсоединен к источнику напряжения через конденсатор.

- **Цепочки туннельных переходов.** К этому классу относятся структуры, содержащие два и более туннельных перехода в активной области, соединенные последовательно. Один из наиболее изученных приборов, относящихся к этому классу, — одноэлектронный транзистор. Он содержит два туннельных перехода, отделяющих очень малый “островок” полупроводника от областей истока и стока.

- **Матрицы туннельных переходов.** Структуры этого класса содержат в активной области последовательное и параллельное соединение туннельных переходов в плоскости.

- **Массивы туннельных переходов.** Такие структуры содержат последовательное и параллельное соединение туннельных переходов в различных измерениях.

Каждому из отмеченных классов может быть поставлена в соответствие определенная размерность, а именно: однотуннельным приборам — нульмерный элемент (0D); цепочкам туннельных переходов —

одномерный массив (1D); матрицам — двухмерный (2D) и массивам туннельных переходов — трехмерный массив элементов (3D).

Каждый из отмеченных классов структур (соответствующей размерности) может быть представлен определенным видом принципиальной структурной схемы. Приведем структурные схемы приборов, относящихся к перечисленным классам.

1) Бокс (однотуннельный прибор). Структурная схема этого прибора соответствует нульмерной размерности 0D. В качестве островка выступает промежуточный электрод между туннельным переходом и конденсатором затвора.

2) Транзистор (цепочка туннельных переходов) содержит два туннельных перехода, соединенные последовательно, и островок между ними. Управление током через структуру осуществляется посредством затвора.

3. Микроперемычка (матрица туннельных переходов)? соответствует размерности 2D. Структура содержит двухмерный массив островков. Управление током через структуру осуществляется зарядом, расположенным над островками.

**В.** Так как обычно одноэлектронные структуры состоят из различных материалов, можно выделить следующие виды одноэлектронных структур по материалам островков:

1. Металлические;
2. Полупроводниковые;
3. Диэлектрические;
4. Органические;
5. Композиционные.

Таким образом, известные в настоящее время одноэлектронные приборные структуры можно отнести к определенному классу, виду и разновидности.

## 10. Зонная диаграмма светодиода на основе двойной гетероструктуры

В настоящее время полупроводниковые гетероструктуры представляют собой основу многочисленных исследований фундаментальных физических свойств, а также разнообразных приборных приложений. С одной стороны, фундаментальные исследования зачастую приводят к созданию методов и технологий, имеющих практическое значение. Так, например, метод селективного легирования полупроводниковых гетероструктур первоначально был разработан в рамках фундаментальных исследований свойств *двухмерного электронного газа* (рассматривали в разделе «квантовые колодцы в гетероструктурах»). В результате такого плодотворного взаимодействия, физика и технология полупроводниковых гетероструктур, в короткие сроки достигли высокой степени совершенства и играют определяющую роль в развитии таких направлений как лазерная техника, электронная техника для систем телекоммуникаций и связи, светотехника.

В качестве конкретного примера рассмотрим физическую основу светоизлучающих диодов, или так называемых светодиодов.

*Светодиодом* называют полупроводниковый диод, в котором используется явление электролюминесценции, т.е. преобразование электрической энергии в энергию светового излучения за счет рекомбинации электронов и дырок. При рекомбинации имеет место возврат электронов в валентную зону, а разность энергии, соответствующая ширине запрещенной зоны, выделяется в виде кванта света (фотона).

Параметром светодиода является длина волны излучения света  $\lambda$ , определяющая цвет свечения. Диапазон видимого света  $\lambda = 0,4...0,7$  мкм соответствует энергиям  $\Delta E = 1,3...1,8$  эВ.

Так как длина волны излучаемого света связана с разностью энергий

уровней электронов  $\Delta E$  соотношением

$$\lambda = hc/\Delta E ,$$

где  $c$  – скорость света.

Выразив  $\Delta E$  в электрон-вольтах,  $\lambda$  в микрометрах, можем получить простое соотношение  $\lambda = 1,234/\Delta E$ . Например, для арсенида галлия GaAs, у которого  $\Delta E = 1,43$  эВ, длина волны излучаемого света порядка 0,9 мкм, поэтому из арсенида галлия изготавливают светодиоды инфракрасного диапазона.

В середине XX века появились светодиоды из разных полупроводниковых соединений типа  $A^{III}B^V$ :

- красные – на основе гетероструктур GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ ;
- желтовато-зеленые – на основе фосфида галлия, легированного азотом GaP:N.

Но более двадцати лет не удавались создать эффективные синие и фиолетовые светодиоды. Решающий шаг в создании синих светодиодов на основе нитрида галлия GaN сделали японские ученые в конце 1980 года. В октябре 2014 года *Нобелевская премия по физике* за изобретение ярких синих светодиодов, которые обеспечили создание *светодиодов белого свечения для освещения*, была присуждена И.Акасаки, Х.Аmano и Ш.Накамуре.

Работа нобелевских лауреатов, с одной стороны, посвящена решению фундаментальных задач о квантовых структурах малой размерности в твердых телах, а с другой – произвела революцию в вопросах *освещения и экономии электроэнергии* на освещение в будущем.

Таким образом, в начале XXI века на основе соединений  $A^{III}B^V$  были созданы эффективные светодиоды на весь видимый диапазон длин волн.

Рассмотрим физическую диаграмму так называемого p-n – перехода в случае создания неравновесных носителей заряда, т.е при подаче на такой переход напряжения. В результате внешнего воздействия в полупроводнике будет нарушено равновесное состояние носителей заряда.

Энергетическая зонная диаграмма р-п-перехода при прямом токе представлена на рис.7. Если в полупроводнике возбуждены неравновесные носители тока (электроны и дырки), то для восстановления равновесия электроны должны переходить из состояния с высокой энергией (в зоне проводимости) в пустые состояния с более низкой энергией (дырки в валентной зоне), осуществляя рекомбинацию электронно-дырочных пар.

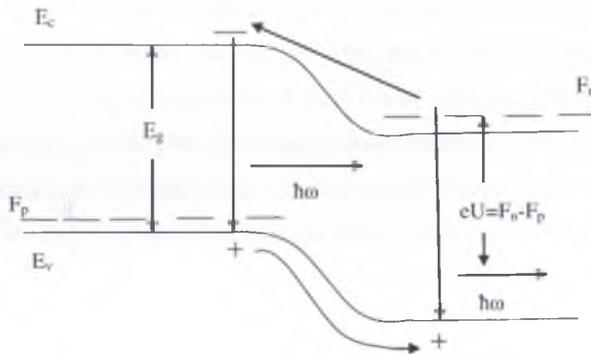


Рис. 7. Энергетическая диаграмма р-п-перехода при прямом токе

Положительное напряжение приложено к контакту диода со стороны р-области. При такой полярности потенциальный барьер между р- и п-областями уменьшается, дырки перетекают (инжектируются) и диффундируют в область, а электроны — в р-область. Стрелками показана инжекция электронов и дырок при прямом токе через переход и их последующая рекомбинация с излучением квантов света  $h\omega$ . Величина  $E_g$  на графике — ширина запрещённой зоны, то есть энергия, необходимая для создания электронно-дырочной (р-п) пары.

Если в полупроводнике возбуждены неравновесные носители тока (электроны и дырки), то для восстановления равновесия электроны должны переходить из состояния с высокой энергией (в зоне проводимости) в пустые состояния с более низкой энергией (дырки в валентной зоне), осуществляя *рекомбинацию электронно-дырочных пар*.

Электроны при этом должны передать энергию возбуждения либо квантам света  $h\nu$  (излучательная рекомбинация), либо тепловым колебаниям кристаллической решетки (безизлучательная рекомбинация). Вероятность излучательной рекомбинации зависит от энергетического спектра электронов в полупроводнике.

На рис.8 представлена энергетическая диаграмма двойной гетероструктуры с p-p переходом p-GaN/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/ n-GaN при прямом токе. Из этой диаграммы видно, что некоторой области вблизи p-p – перехода неравновесные носители тока перетекают (инжектируются) из одной области в другую (электроны в p – область, дырки – в r – область) и рекомбинируют. Часть рекомбинации идет с излучением квантов света  $h\nu$  (инжекционная электролюминесценция) – энергия электрического тока преобразуется в энергию излучения.

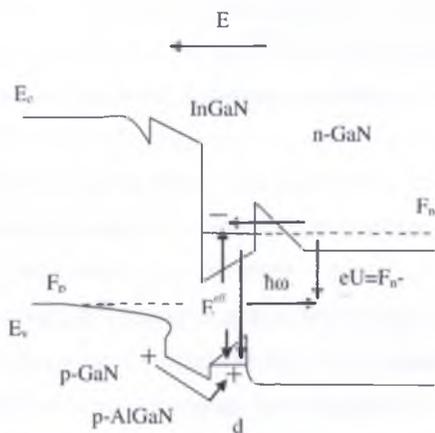


Рис. 8 - Энергетическая диаграмма двойной гетероструктуры с p-p-переходом p-GaN/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/ n-GaN при прямом токе

Дырки из области инжектируются в область In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N с меньшей шириной запрещенной зоны встречают потенциальный барьер, ограничивающий их проникновение в p- область. А электроны из p- области инжектируются в область In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N и встречают потенциальный барьер, ограничивающий их проход в r- область.

Энергия квантов излучения близка к разности энергий между дном зоны проводимости  $E_c$  и потолком валентной зоны  $E_v$ . Эта разность – ширина запрещенной зоны  $E_g$  – важнейший параметр полупроводника. Если величина  $E_g = E_c - E_v$  соответствует видимой части спектра длины волн

$\lambda = 400 \dots 800$  нм; энергии  $\hbar\omega = (3,1 \dots 1,6) \text{ эВ}$ , то излучательная рекомбинация в диоде может стать источником света.

В группе соединений типа  $A^{III}B^V$  есть полупроводники (GaAs, GaN и близкие к ним твердые растворы типа  $Al_xGa_{1-x}As$  и  $In_xGa_{1-x}N$ ), в которых вероятность излучательной рекомбинаций очень велика.

Чем выше концентрация неравновесных электронно-дырочных пар, тем более вероятна излучительная рекомбинация.

## 11. Квантовые характеристики светодиодов с квантовыми ямами

Важнейшее преимущество светодиодов в сравнении с традиционными лампами – высокая эффективность преобразования электрической энергии в световую. При этом усилия исследователей в первую очередь были направлены на создание *p-n – гетероструктур* с активной областью, в которую с максимальной эффективностью инжектируются электронно-дырочные пары, то есть на увеличение коэффициента инжекции, или электрической эффективности структуры светодиодов  $\eta_{el}$ . В этой активной области с множественными квантовыми ямами InGaN/AlGaIn/GaN необходимо обеспечить близкую к 100% внутреннюю *квантовую эффективность* излучения  $\eta_i$ .

Простую гетероструктуру с одной квантовой ямой в ходе исследований и разработок заменили более сложными многослойными *p-n-гетероструктурами*, увеличив число квантовых ям в активной области до четырёх—шести. Это позволило усилить рабочий ток и полный поток излучательной рекомбинации, а также исключить безызлучательные туннельные токи через активную область. Чтобы повысить внутренний квантовый выход излучения  $\eta_i$ , необходимо уменьшить концентрацию проникающих дислокаций, возникающих из-за деформаций на границах структуры с подложкой. Этого можно достичь, вырастив в слое *n-GaN* между подложкой и активной областью «буферную сверхрешётку» из нескольких квантовых ям и барьеров, на гетерограницах которой дислокации станут поворачивать и заканчиваться.

Излучение, выходящее из активной области во внешнюю среду, количественно характеризует коэффициент оптического вывода излучения  $\eta_{opt}$ . Показатель преломления полупроводников *n* велик (для GaN в синей области  $n = 2,46$ ), и на зеркальной поверхности происходит полное внутреннее отражение света. Поэтому поверхности, через которые выходит свет, делают шероховатыми. Для увеличения  $\eta_{opt}$  необходимо также

уменьшать площадь электрических контактов, подведённых к кристаллу, что противоречит требованию возможно меньшего их сопротивления (для увеличения  $\eta_{ei}$ ). Конструкции и геометрию контактов разрабатывают, находя компромисс между этими требованиями.

Внешний квантовый выход излучения, то есть отношение числа вышедших из светодиода квантов к числу электронов, прошедших через светодиод, равен произведению внутреннего квантового выхода излучения на коэффициент оптического вывода;  $\eta_{ext} = \eta_i * \eta_{opt}$ . Эту величину можно достаточно точно измерить.

Эффективность светодиода характеризуется также коэффициентом полезного действия  $\eta_w$  — отношением мощности излучения к потребляемой электрической мощности. Он равен произведению внешнего квантового выхода, излучения  $\eta_{ext}$  на коэффициент инжекции

$$\eta_{ei} : \eta_w = \eta_{ei} * \eta_i * \eta_{opt}$$

Эффективность белых светодиодов — световая отдача  $\eta_\Phi$  — зависит от коэффициента преобразования энергии света в люминофоре  $\eta_{conv}$  и световой эффективности  $K$  для данного спектра, пропорциональной чувствительности к нему зрения:

$$\eta_\Phi = K * \eta_{ei} * \eta_i * \eta_{opt} * \eta_{conv}$$

В 2010 году величина внешнего квантового выхода  $\eta_{ext}$  в синей области спектра достигла максимума — около 70%, а сейчас дошла до 80%. В фиолетовой и красной областях величина  $\eta_{ext}$  падает. Что является в настоящее время предметом исследований ученых.

## Заключение

Возникновение и развитие полупроводниковой микро- и нанoeлектроники стало возможным благодаря фундаментальным достижениям в области современной квантовой теории твердого тела.

Квантовая механика – раздел теоретической физики, изучающий законы движения микро- и наночастиц и их систем. На ней базируются многие современные отрасли техники. Сюда относятся микро-, опто- и нанoeлектроника, лазерная, плазменная и эллионная технология, солнечная, атомная и термоядерная энергетика. В мире элементарных частиц, атомов и наноструктур законы квантовой механики играют решающую роль.

Квантовая механика обогатила фундаментальную физику новым взглядом на окружающий нас мир. Квантовая механика показывает, что обратимый во времени мир, описывается уравнением Шредингера, есть также мир непознаваемый. А вот точка зрения С. Хокинга отражает традиционные представления о том, что должно быть высшей целью физики. Ученые вынуждены признать, что мы никогда не сможем поставить последнюю точку в познании мира.

Как ни странно, роль творческого начала в науке часто недооценивалась. Всякий знает, что если бы Шекспир, Бетховен или Ван Гог умерли вскоре после своего рождения, то никто другой не смог бы повторить их свершений. Верно ли аналогичное утверждение применительно к ученым? Разве кто-нибудь еще не смог бы открыть классические законы движения, не будь Ньютона? В этом противопоставлении литературы, музыки и изобразительного искусства, с одной стороны, и науки – с другой стороны, есть своя правда, резон. Наука – дело коллективное. Решение научной проблемы, чтобы оно было приемлемым, должно удовлетворять точным критериям и требованиям. Однако эти ограничения отнюдь не исключают творческого начала, но напротив, бросает ему вызов. Научное творчество – не только полет фантазии и формулировка симметричных во времени

законов, которые привели к построению величественного здания классической физики, увенчанного великими достижениями физики XX века – квантовой механики и общей теории относительности. В этом и состоит загадочная красота физики.

**Лауреаты Нобелевской премии и  
великая квантовая революция.**

---

**Макс Планк** (1858-1947) – выдающийся немецкий физик. Имя Планка заслуженно вошло в золотой фонд человеческой культуры. Область научных изысканий была весьма обширна: термодинамика сложных систем и лучистой энергии, приведшая его к статистической физике и к открытию кванта действия; развитие понятия энтропии; работы по релятивистской термодинамике. В 1920 году ему была присуждена Нобелевская премия. Искренний и честный сын своего времени и своего народа, он был неустанным тружеником науки. Открытие универсальной мировой постоянной – кванта действия, носит его имя – величайшая ему награда.

---

**Эрнест Резерфорд** (1871-1937) – британский физик родом из Новой Зеландии. Лауреат Нобелевской премии по химии за 1908 год. Экспериментально доказал наличие крошечного плотного и тяжелого ядра внутри сравнительно большого и почти пустого атома. Создатель известной школы физики: 12 учеников Резерфорда стали нобелевскими лауреатами. Среди них физик из России Петр Леонидович Капица.

---

**Альберт Эйнштейн** (1879-1955) – великий немецкий физик. Создатель теории относительности, квантовой теории и статистической физики. Разрабатывая основы квантовой теории, Эйнштейн ввел представление о дискретной структуре поля излучения и на этой основе вывел законы фотоэффекта, а также объяснил люминесцентные и фотохимические закономерности. Специальная теория относительности и квантовая теория излучения явились основой квантовой электродинамики, квантовой

теории поля, атомной и ядерной физики. За открытие законов фотоэффекта и работы в области теоретической физики ему была присуждена Нобелевская премия по физике 1921 году.

---

**Нильс Хенрик Давид Бор** (1885-1962) – выдающийся датский физик. Создал квантовую теорию атома, а затем участвовал в разработке основ квантовой механики. В 1908 году он окончил университет в Копенгагене и стажировался в Кембридже у Дж.Томсона и в Манчестере у Э.Резерфорда. В 1916 году получил кафедру теоретической физики в Копенгагене, а с 1920 года и до конца жизни руководил созданным им Институтом теоретической физики в Копенгагене, который носит его имя.

В 1936 году сформировал фундаментальное для ядерной физики представление о характере протекания ядерных реакций, предложив модель составного ядра. В 1939 году развил теорию деления ядер – процесса, в котором происходит освобождение огромных количеств ядерной энергии. Лауреат Нобелевской премии по физике 1922 года.

---

**Эрвин Шредингер** (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, родился в Вене. Учился в Венском университете, до второго курса не посещал лекций по теоретической физике, однако докторскую диссертацию защитил именно по этой специальности. Разработал свою теорию волновой механики, которая и поныне является фундаментальной основой всей современной квантовой механики. В 1927 году занял должность заведующего кафедрой теоретической физики Берлинского университета, сменив на этом посту Макса Планка. В 1933 году получил Нобелевскую премию. В 1944 году Шредингер опубликовал книгу «Что такое жизнь?», которая сформировала мировоззрение целого поколения ученых-биофизиков и где он предсказал существование генетического кода, скрытого в молекулах жизни.

---

---

*Стивен Уильям Хокинг родился 8 января 1942 года в Оксфорде, Великобритания. Является гениальным физиком и одним из самых известных ученых нашего времени. В 1962 году Хокинг окончил Оксфордский университет и начал занятия теоретической физикой. В юности он заболел нейромоторным заболеванием, полностью лишившим его возможности двигаться. К тому же он практически перестал говорить, его с трудом понимали только самые близкие люди. Затем он лишился голоса. Сейчас он (с большим трудом!) общается с другими людьми с помощью компьютера. На данный момент он занимает должность профессора математики в Кембриджском университете – должность, которую три столетия назад занимал Исаак Ньютон.*

---

*Жорес Иванович Алферов – лауреат Нобелевской премии за 2000 год за разработку полупроводниковых гетероструктур и создание быстрых опто- и микроэлектронных компонентов. Директор Санкт-Петербургского Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

*В 1968- 1969 гг. были практически реализованы все основные идеи управления электронными и световыми потоками в классических гетероструктурах на основе системы  $n\text{-AlGaAs}$ . Мы получили принципиально важные фундаментальные результаты, такие как односторонняя эффективная инжекция, эффект "сверхинжекции", диагональное туннелирование, электронное и оптическое ограничения в двойной гетероструктуре, ставшей вскоре основным элементом исследований низкоразмерного электронного газа в полупроводниках. Ж.Алферову удалось реализовать основные преимущества использования гетероструктур в полупроводниковых приборах: лазерах, светодиодах, солнечных батареях, диодах и транзисторах. Самым значительным было, конечно, создание низкопороговых, работающих при комнатной*

*температуре лазеров на двойной гетероструктуре (ДГС), предложенной нами еще в 1963 г. В 1971 г. за работы по ДГС (двойные гетероструктуры) - лазерам мне была присуждена Золотая медаль Франклиновского института в США.*

---

Джаманбалин К.К.

Учебно-методическое пособие

**Физика наноструктурных материалов**

Подписано в печать 01.11. 2015 г.  
Формат 60x84 1/16. Печать офсетная.  
Объем 4,3 п.л. Тираж 300 экз.

Отдел оперативной печати  
Костанайского социально-технического университета  
г. Костанай, ул. Герцена, 27