

Дәріс 3.

Наноқұрылымдардың сызықты өлшемдері бойынша классификациясы: нөл-, бір-, екі- және үшөлшемдік құрылымдар.

Дәрістің жоспары:

- 1 Наноқұрылымды материалдардың сызықтық өлшемдері бойынша жіктелуі
- 2 Кванттық нүкте, кванттық шұңқыр, кванттық талшықтың анықтамасы
- 3 Кванттық нүктенің қалыптасу механизмі

Наноқұрылымды материалдарға құрылымдық өлшемі 100 нм ден аспайтын объектілер жатады. Дәннің өте кішкентай өлшемі бірегей физикалық, химиялық, механикалық және т.б. қасиеттерінің өзгерісіне әкеледі, сонымен қатар материалтану, қатты дене физикасы, биология және де перспективті технология саласындағы мамандардың қызығушылығын арттырады. Үлгі өлшемінің жоғары мәннен мысалы метрден немесе сантиметрден өте кішкентай өлшемге баяу өзгеруінен оның өлшемі басында өзгеріссіз қалады, ал 100 нм аралығына дейін өзгергенде үлгінің қасиеті радикалды өзгереді.

Егер де үлгінің өлшемі бір бағытта наноөлшемді диапазонда жатып, қалған екі бағытта үлкен өлшемде қала беретін болса онда алынатын құрылым **кванттық шұңқыр (КШ)** деп аталады. Егер үлгі екі диапазонда наноөлшемді болып ал үшінші бағытта үлкен өлшемде қала берсе онда оны **кванттық талшық (КТ)** деп атайды. Шекті жағдайы, егер барлық үш өлшемде наноөлшемді диапазонда жататын болса онда оны **кванттық нүкте (КН)** деп атайды. «Квантты» эпитеті наноқұрылымдарда қолданылу себебі, ультракіші масштабтарда үлгі қасиетінің квантты-механикалық табиғаты өзгереді.

Кванттық-өлшемдік эффект қозғалысы тек бір, екі немесе үш бағытта шектелген заряд тасымалдаушылардың энергияларының квантталуымен байланысты.

Шалаөткізгішті кванттық нүктелерді алудың жолы әр түрлі: олар литография көмегімен планарлы шалаөткізгішті гетероқұрылымдардың көмегімен алынуы мүмкін, соңғы кездері қарқынды дамып келе жатқан әдістер өте көп, яғни көптеген әдістермен алуға болады.

Кванттық нүктелер, кванттық шұңқырлар, кванттық талшықтар тек қана гетероқұрылымдардың шегінде алынады. Мысалы, GaAs және GaAlAs қосылысынан. Егер қаттыденелі құрылым біртекті болатын болса, онда мұндай құрылымда кванттық нүктелер, сондай ақ шұңқырлар, талшықтар алынбайды.

КН, КШ, КТ наноэлектроника үшін жаңа элемент базасы ретінде қолданылуы мүмкін. Наноэлектроникада жаңа элемент базасы ретінде қолдану үшін ең алдымен кванттық нүктедегі электрондармен басқара білу маңызды. Бұл үшін қалыптасу механизмін түсіну керек және осы құрылымның негізгі сипаттамаларын анықтау керек. Кванттық нүктелер, шұңқырлар, талшықтар квантты-механикалық объектілер. Бұл құрылымда бөлшектер саны, яғни электрондар саны шектеулі, сондықтан біз квантты статистика әдісін қолдана алмаймыз. Сондықтан, бұл наноқұрылымдардың қасиеті мен сипатын Шредингер тендеуі арқылы анықтаймыз. Егер, қасиеті мен сипатын ШТ арқылы анықтайтын болсақ, онда қалыптасу механизмі үшін әсерлесу потенциалы маңызды роль атқарады, яғни бұл жағдайда кванттық нүктедегі электрондардың қамалу потенциалын анықтауымыз керек. Ал кванттық нүктеде электрондардың қамалуы, яғни электр зарядтарының қамалуы шектелген көлемде орындалады.

Қатты денелі ортада дененің электрлік қасиеті фундаменталды қасиеті ортаның диэлектрлік өтімділігімен сипатталады. Сондықтан, КН түзілуінде қаттыденелі ортаның диэлектрлік өтімділігі маңызды роль атқарады. Сонымен қатар, көптеген эксперименттер нәтижесінен белгілі, КН тек қана гетероқұрылымды қосылыстар нәтижесінде түзіледі. КН түзілу кезінде ортаның диэлектрлік өтімділігінің әр түрлі болуын ескеруіміз керек. КН екі электронның қалыптасу механизмін анықтау үшін, бірінші шекараның диэлектрлік өтімділігін ϵ_1 және екінші ортаның диэлектрлік өтімділігін ϵ_2 , деп белгілейміз, ал КН өзінің

диэлектрлік өтімділігін ε_d деп белгілейміз. Егер де жоғарыда айтылған мәліметтерге сүйенетін болсақ онда $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$.

КН құрылған әр бір қыр бірнеше химиялық элементтерден тұрады. Көп жағдайда есептеулерді оңайлату үшін ол қырды тегіс деп есептейді. Әсіресе, КН түзілуінде GaAs және GaAlAs қосылысында тор периоды бірдей (почти одинаковы). GaAs және GaAlAs келісілген торлы гетероқұрылымды құруға мүмкіндік береді. Бұл өте маңызды өйткені біршама қалың мөлшерден асып кеткен жағдайда айналадағы материалдың тор периодынан шығуы тиімді, немесе қосымша тор периодын құруы мүмкін бола бастайды.

Кванттық нүктеде электрондардың қалыптасу механизмін қарастырған кванттық-механикалық эффектілер маңызды роль атқарады. Кванттық шұңқыр диэлектрлік қасиеті жағынан біртекті, ал жалпы жүйе біртекті емес, және де бұндай жағдайда тангенциалды потенциалдың туындауының үзіліссіз шарты орындалады. Бұл жуықтаулар эффективті бейнелеу зарядын енгізуге келтіреді. Негізі бейнелеу зарядын енгізу диэлектриктердің қасиетін зерттегенде электростатика курсынан жақсы танымал әдіс. Сондықтан, ұстау потенциалын қалыптастыруда бейнелеу заряды маңызды роль атқарады дейміз және де бұл бейнелеу заряды гетероқұрылым қабаттарының диэлектрлік өтімділігінің үлкен айырмашылығының салдарынан себепші болады.

Бір жағынан КН түзілуіндегі қатты денелі қосылыстар электрлі нейтрал болады, яғни егер электронды КН түзілетін болса онда қосылыс қырларында оң зарядтар туындауы керек, ал олардың қосындысы электрондардың санына тең болуы керек. Бір жағынан КН жасанды атом деп атайтындығы да осыдан. Ал осы оң зарядтардың шамасы келесі түрде анықталады:

$$Z_1 = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_d}{\varepsilon_1 + \varepsilon_d} \tilde{Q},$$

мұндағы - бейнелеу зарядының эффективті мәні. Егер де орта біртекті болатын болса, онда бейнелеу заряды нөлге тең болатынын көреміз, және сәйкесінше бұндай жағдайда КН алу мүмкін еместігін көрінеді, яғни қарастырып отырған құрылымда КН түзілмейді. Сондықтан, төртденелі кулондық жүйені қарастыруға болады, ол екі электроннан және екі бейнелеу зарядынан тұрады деп есептейміз. Бұл жағдайда, екі бейнелеу зарядын енгіземіз, оның мәні:

$$Z_3 = \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_d)}{\varepsilon_1 + \varepsilon_d} \cdot Q^{(1)}; \quad Z_4 = \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_d)}{\varepsilon_2 + \varepsilon_d} \cdot Q^{(2)},$$

Бейнелеу зарядын енгізу ол электрондардың КН қамалу потенциалын түсіндіреді, және де бұл эффект КН электрондардың диэлектрлік конфайнменті деп аталады.

Конфайнмент дегеніміздің өзі – ұстау деген мағынаны білдіреді. Кванттық наноқұрылымдар үшін конфайнмент негізгі роль атқарады, конфайнментті параболалық потенциалмен моделдеуге болады, бұл жағдайда Конның жалпылама теориясы бойынша электрон-электронды әсерлесуі жүйенің оптикалық қасиетіне әсер етпейді. Параболалық потенциал арқылы кіші өлшемді құрылымдарды сипаттауға болады.

Аз ғана электрон санына ие КН атом моделі деп қарастыруға болады, бұнда ядро аналогы ретінде оң зарядталған бейнелеу зарядын алауға болады.

Электрондардың КН қалыптасу механизмін анықтау үшін көп қабатты жүйені қарастыру керек, жоғарыда қарастырып кеткеніміздей төрт дененеден тұратын жүйені қарастыруымызға болады. Аспан денелерінің механикасында көп дене есебі көптеп кездеседі, біздің қарастырып отырған жүйеміз де осы көп дене есебіне сәйкес келеді.

m_1, m_2, m_3, m_4 – массалары, ал $-Z_1e, -Z_2e, Z_3e, Z_4e$ – сәйкесінше бөлшектердің заряды. Бұл жағдайда жүйе гамильтонианын келесі түрде жазамыз: Кванттық теорияда гамильтониан – толық энергия жүйесінің операторы болып табылады.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 m_j \dot{\vec{r}}_j^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} * \\ * \frac{Z_1 Z_3}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_4}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_4|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} * \\ * \frac{Z_2 Z_3}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_2 Z_4}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_4|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_3 Z_4}{|\vec{r}_3 - \vec{r}_4|},$$

КН екі электрон қамалған, және олар бір бірімен жұпты кулонды әсерлесумен әсерлеседі. Көптеген эксперименттерден белгілі, КН электрондардың қамалуы шекті көлемде орын алады. Бұл КН электрондардың қалыптасуы кезінде электрондардың арасында ұстап тұратын кулонды тебілу күштері туындайды. Сонымен қатар, КН электрондар қатты байланысқан гантель тәріздес болады деп жорамалдауға болады. Осындай жорамалдардан энергетикалық спектрін анықтауда адиабаталық жуықтауды қолдануға болады. Адиабаталық жуықтау, кванттық жүйені сипаттайтын кванттық механика есептерін шешудің жуықтау әдісі болып саналады. Адиабата терминінің өзі қатаң түрде бұның өлшемі энергия болып табылады.

Сонымен қатар соңғы жылдары кішіөлшемді жүйелерде спинтроника деп аталатын бағыт қарқынды дамып келеді. Спинтроника дегеніміз – бұл кванттық электрониканың, ақпаратты бейнелеу үшін бөлшектің зарядымен қатар, оның меншікті механикалық моментінің болуынан туындайтын спиіні де қолданылатын саласы. Атомда электрондардың спиндік те, зарядтық та еркіндік дәрежелері болады. Релятивистік емес кванттық механикада бұл еркіндік дәрежелері бір-біріне тәуелді емес, сондықтан энергияның атомдық деңгейлері көптеген рет азғындалған болып табылады.

Релятивистік эффектiлер спин-орбиталдық әсерлесуге (СОӨ) алып келеді де, оның салдарынан азғындалу біршама кеміп, атомдық спектрлерде жұқа құрылым пайда болады. СОӨ – жүйенің энергия деңгейлерінің жұқа ыдырауына алып келетін, қозғалыс мөлшерінің орбиталды және спиндік моменттерінің шамасы мен олардың өзара орналасуына тәуелді бөлшектердің өзара әсерлесуі.

Наноэлектроникада жаңа элементтік база ретінде қолдануға болатындықтан, кванттық нүктелердің қасиеттерін қадағалау және реттеу мүмкіндігі зор қызығушылық туғызуда.

Екі электрондық кванттық нүкте елеулі ерешеліктерін және күрделі комплекстерді қадағалауға болатын осындай жүйелердің ең қарапайым мысалы болады. Қазіргі заманғы жартылай өткізгіштік электроникада төмен өлшемдік электрондық жүйелерді қолдануда наноқұрылымдардағы электрондардың қозғалысын реттеп отыру негізгі мәселе болып отыр. Мұндай реттеу электронның электр зарядына сыртқы электр өрісімен не электрон спиіне сыртқы магнит өрісімен әсер беру арқылы жүзеге асырылады. Электрондарды магнит өрісіне орналастырғанда, олардың спинары өріс бағыты бойымен орналасады. Паули принципіне сәйкес бір энергия деңгейінде екі бірдей электрон бір мезгілде орналаса алмайды да, электрондардың біреуі не жоғары жатқан энергия деңгейіне ауысады, не кванттық шұңқырдан немесе кванттық нүктеден шығып кетеді.

Осы әсерлесу көмегімен КН-гі электронның орналасуын реттеуге болады, яғни КН-гі электрондардың қозғалысы оның спиіне әсер беру арқылы реттелгені. Осы процестің негізінде наноқұрылымдарда электрондық ауысу, атап айтсақ бір электрондық ауысу, жүргізуге болады. Нанотехнологияларды игеруімен элементтік базалардың дамуы электрондық құрылымдардың активті облыстарының өлшемі атомдық өлшемдерге және электронның еркін жүру ұзындығымен шамалас болуына алып келеді. Сондықтан, наноэлектроникада бір электрондық эффектiлерге негізделген кванттық электроника аса маңызды роль атқарады. Бір электрондық ауысуларда «бір электрон – ақпараттың бір биті» идеясы жүзеге асырылады. Осы идеяның ары қарай дамуы – спинтроника, онда ақпараттың элементар тасымалдаушысы электронның спиі болып табылады.

Бұдан, төмен өлшемді құрылымдарда, атап айтқанда КН-де, электрондардың өзара байланысуы рашба-потенциалмен, яғни КН-де спин-орбиталдық әсерлесу кернеулігі электрондардың зарядымен анықталатын кулондық әсерлесуінен асып түседі деген сұрақ туындайды.

КН-де электрондардың итеру және ұстау потенциалдары компенсацияланатын ара қашықтық болатындығын болжап, КН-де электрондардың әсерлесуі тек спин-орбиталдық әсерлесуімен анықталады.

Бұдан спин-орбиталдық әсерлесудің эффективті байланыс константасы K_{SO} электронның эффективті массасының нақты бір мәндеріндегі заряд бейнелерінің суммасы Z_{tot} –ке тәуелділігі аналитикалық анықталады. Электронның эффективті массасы $m^*=0,042m_e$ болатын *InGaAs* структурасы үшін спин-орбиталдық әсерлесудің эффективті константасы анықталған: $K_{SO}=1,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м. Параметрлерінің $\varepsilon=3$ и $Z_{tot}=0,68$ мәндерінде, біздің аналитикалық нәтижемізден $K_{SO}=1,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м мәнін аламыз.

Спин-орбиталдық әсерлесу константасының бейнелердің зарядтарына және электрондардың ара қашықтығына тәуелділігі зерттелген. КН-де диэлектрлік өтімділіктің төмен мәндерінде спин-орбиталдық әсерлесудің байланыс константасы күрт өсе бастайды. Z_{tot} әсерінен электрондар КН-де қамалып, Z_{tot} мәні артқанда электрондардың x ара қашықтықтары кемиді. Бірақ, бұл кемулер КН-ің диэлектрлік өтімділігіне кері пропорционал болатыны анықталды. Диэлектрлік өтімділіктің белгілі мәндерінде, яғни нақты нанокұрылым үшін x артуымен K_{SO} кемиді.

Дәрісті бекіту сұрақтары:

1. Кванттық нүктенің жасанды атом деп аталуын түсіндіріңіз.
2. Конфайнмент деген ұғымды қалай түсінесіз?
3. Неліктен кванттық нүктені тек гетерокұрылым негізінде түзілетіндігін түсіндіріңіз.
4. Кванттық нүктенің спин-орбиталдық әсерлесу қандай параметрлерге тәуелді.

Әдебиеттер:

1. Кобояси Н. Введение в нанотехнологию. М.: БИНОМ. 2005, -134 с.
2. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. (Синергетика: от прошлого к будущему). М.: КомКнига, 2006, -592 с.
3. Пул-мл. Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии, (Мир материалов и технологий). М.: Техносфера, 2006, -336 с.
4. Андриевский Р.А., Рагуля А.В. Наноструктурные материалы. М.: «Академия», 2005, -192 с.