

*Московский Государственный Университет  
имени М. В. Ломоносова  
Научно-Образовательный Центр по нанотехнологиям*

Межфакультетский курс лекций

## **«Фундаментальные основы нанотехнологий»**

**Лекция 2. Особенности физических взаимодействий на наномасштабах. Квантовая механика нанобъектов.**

**Тимошенко Виктор Юрьевич**

профессор, Физический факультет МГУ

# Основные физические взаимодействия



# Силы электрические и гравитационные

ЭЛЕКТРОСТАТИКА

$$F = k \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{R^2}$$

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon}$$

$$\epsilon_0 = 8,854187817 \times 10^{-12} \frac{\text{Кл}^2}{\text{Н} \cdot \text{м}^2}$$

$$F_E = q_2 E$$

$$E = k \cdot \frac{q_1}{R^2}$$

ГРАВИТАЦИЯ

$$F = G \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{R^2}$$

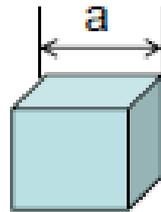
$$G = -6,673 \times 10^{-11} \frac{\text{м}^3}{\text{кг} \cdot \text{с}^2}$$

$$F_T = mg$$

$$g = G \frac{M_3}{R_3^2} = 9,8 \frac{\text{м}}{\text{с}^2}$$

# Оценка величины силы тяжести для нанообъекта

$$F_T = mg$$



$$a = 10 \text{ нм} = 10^{-8} \text{ м}$$

$$V = a^3 = 10^{-24} \text{ м}^3$$

$$m = \rho V = 7874 \text{ кг/м}^3 \cdot 10^{-24} \text{ м}^3 = 7,874 \times 10^{-21} \text{ кг}$$

$$F_T \approx 8 \times 10^{-20} \text{ Н}$$

$$F_E = q_2 E \quad q_2 = e = 1,602217646 \times 10^{-19} \text{ Кл}$$

$$E \approx \frac{8 \times 10^{-20}}{1,6 \times 10^{-19}} = 0,5 \frac{\text{В}}{\text{м}}$$



В большинстве случаев гравитационное взаимодействие пренебрежимо мало по сравнению с электромагнитным.

$$E \approx \frac{1,5}{0,05} = 30 \frac{\text{В}}{\text{м}}$$

## Сравнение величин силы тяжести и поверхностного натяжения



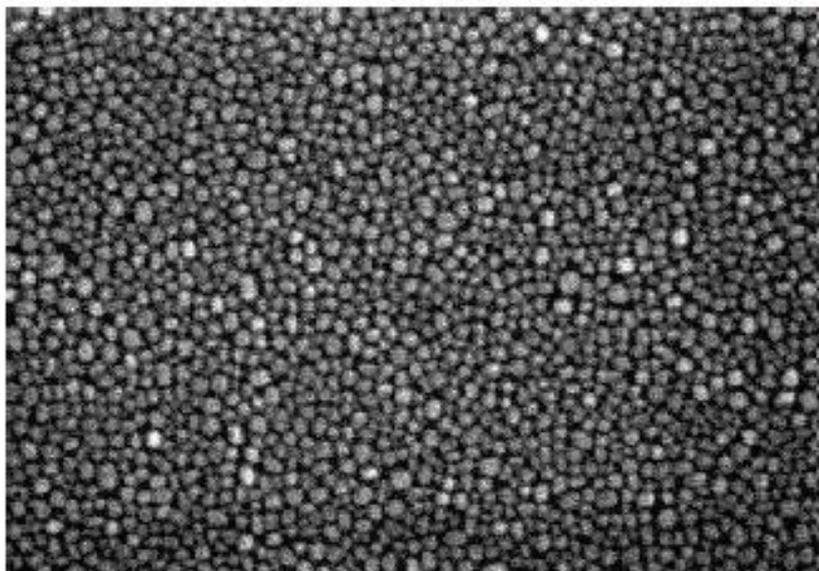
$$\Gamma = \frac{\text{Гравитация}}{\text{Пов. натяжение}} = \frac{\rho g (4\pi r^3 / 3)}{\sigma (2\pi r)} = \frac{2\rho g r^2}{3\sigma}$$

$$\rho = 10^3 \text{ кг/м}^3, \sigma = 78 \times 10^{-3} \frac{\text{Н}}{\text{м}}$$

$$r = 1 \text{ м} \Rightarrow \Gamma \approx 8,5 \times 10^4$$

$$r = 1 \text{ мм} \Rightarrow \Gamma \approx 8,5 \times 10^{-2}$$

$$r = 1 \text{ нм} \Rightarrow \Gamma \approx 8,5 \times 10^{-14}$$

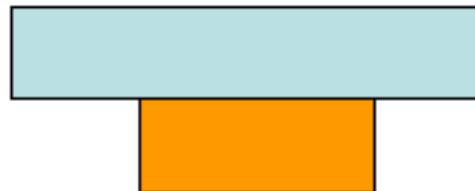
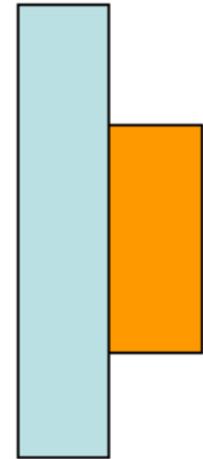
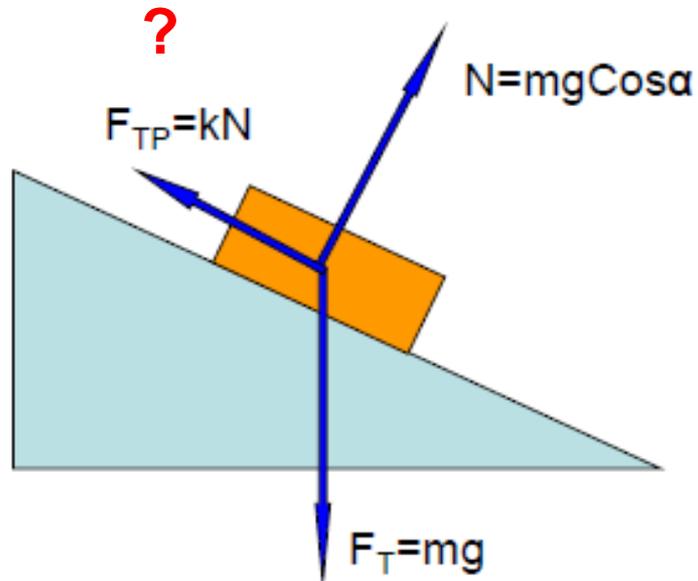


— 200 nm

Общее свойство тонких пленок –  
гранулярная структура.

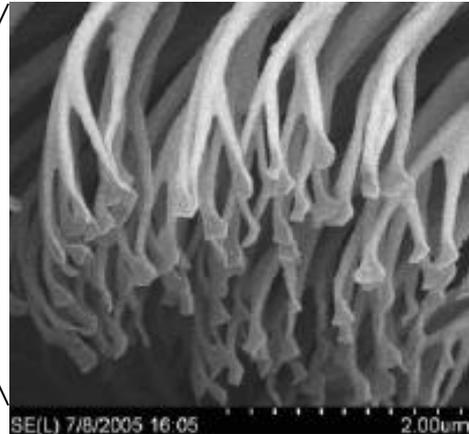
Тонкие однородные пленки могут  
быть получены за счет  
взаимодействия материала пленки  
с подложкой -эпитаксиальный рост.

# Сила трения для нанообъектов



Площадь соприкасающихся поверхностей определяет величину их взаимодействия (силы трения).

# Эффект геккона



- прикрепляется и открепляется пальцами за время в несколько миллисекунд к почти любой поверхности (исключение - тефлон);
- перемещается по шероховатым и гладким поверхностям с любой пространственной ориентацией;
- способность к зацеплению не изменяется со временем и под действием загрязняющих материалов;
- пальцы не склеиваются друг с другом и обладают способностью к самоочистке;
- лапа отсоединяется от поверхности без приложения видимых усилий;
- двумя передними лапами ящерица геккон, имея собственный вес около 50 г, может удерживать вес более 2 кг.

Измерения, проведенные для отдельной щетинки на пальце ящерицы показали, что для преодоления ее адгезии к поверхности необходимо приложить усилие в **200 мкН**.

Общее количество щетинок составляет около  $6,5 \cdot 10^6$  на каждой лапе, что эквивалентно усилию по ее отрыву в **1300 Н**.

Для удержания на поверхности ящерице достаточно использовать 2000 щетинок на каждой лапе, т.е. менее 0,04% от их общего количества.

Изменяя угол наклона и тем самым силу взаимодействия щетинок на пальцах, геккон может передвигаться.

**Уникальные свойства лап геккона объясняются межмолекулярными взаимодействиями – силами Ван-дер-Ваальса.**

# Силы Ван-дер-Ваальса

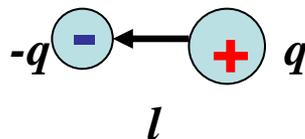
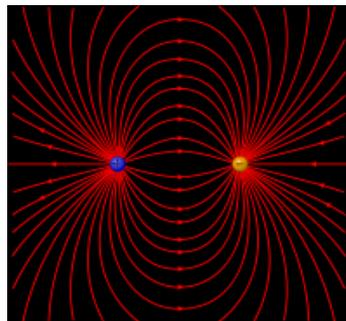
*К ван-дер-ваальсовым силам относятся силы взаимодействия между диполями (постоянными и индуцированными).*

*Природа – электромагнитное взаимодействие связанных зарядов.*

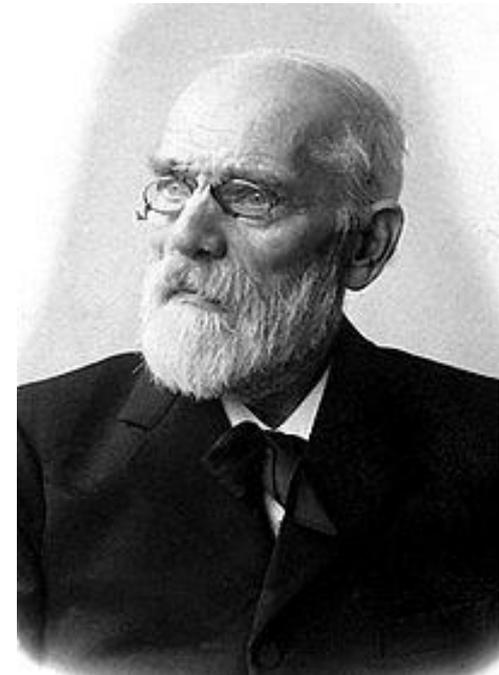
*Соответствующая энергия взаимодействия: 0.8 — 8 кДж/моль*

*Произведение вектора проведённого от отрицательного заряда к положительному, на абсолютную величину зарядов называется дипольным моментом:*

$$\vec{d} = q\vec{l}.$$



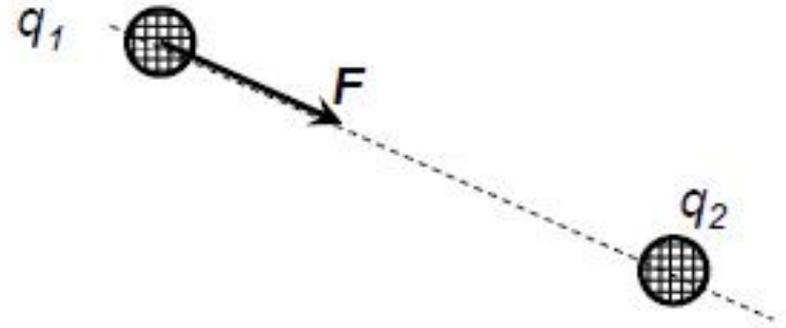
**Ян Дидерик Ван-дер-Ваальс**  
*Johannes Diderik van der Waals*  
(1837-1923)



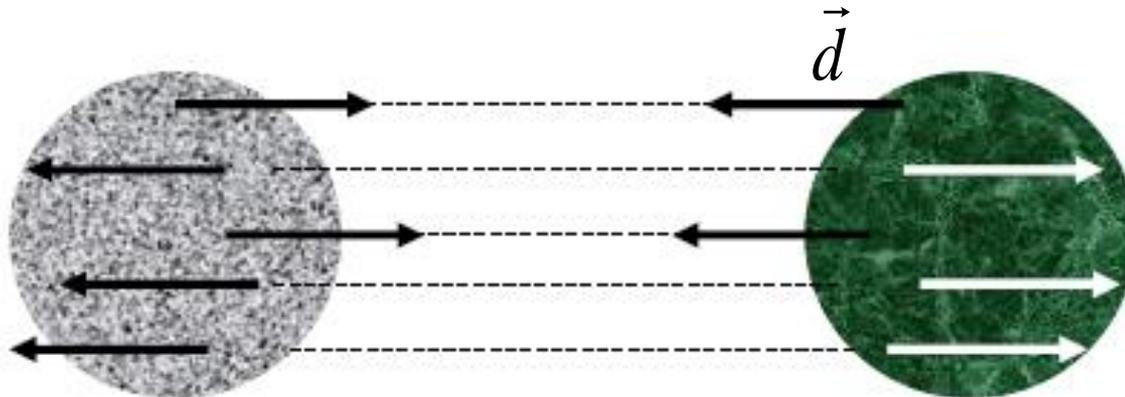
Нобелевская премия по физике 1910 г. «за работу над уравнением состояния газов и жидкостей»

# Взаимодействие точечных зарядов - Закон Кулона

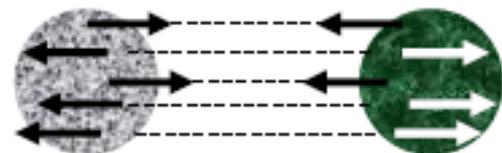
$$F = k \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{R^2}$$



# Взаимодействие незаряженных объектов (атомов, молекул, наночастиц)



## Потенциал взаимодействия:



$$U(r) = U_{\text{притяжение}}(r) + U_{\text{отталкивание}}(r) = \frac{-A}{r^m} + \frac{B}{r^n} = - \int F(r) dr$$

$U_{\text{притяжение}}(r)$  Взаимодействие Ван-дер-Ваальса

$r = \text{расстояние}$

$U_{\text{отталкивание}}(r)$  Взаимодействие Паули

$A, B, m, n$  – константы

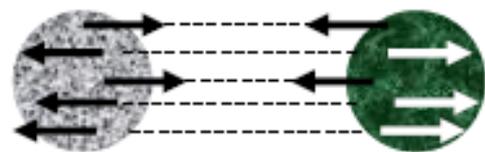
## Сила взаимодействия:

$$F(r) = \frac{-dU(r)}{dr} = \int k(r) dr$$

Коэффициент упругости (жесткость):

$$k(r) = \frac{-d^2U(r)}{dr^2} = \frac{dF(r)}{dr}$$

## Потенциал Леннарда-Джонса



$$U_{\text{ЛД}}(m=6, n=12) = \frac{-A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} = 4E_B \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

### Сила взаимодействия:

$$F_{\text{ЛД}}(m=6, n=12) = \frac{-6A}{r^7} + \frac{12B}{r^{13}}$$

$r$  – расстояние

$A, B, m, n$  – константы

$k_B = 1,38 \times 10^{-23}$  Дж / К

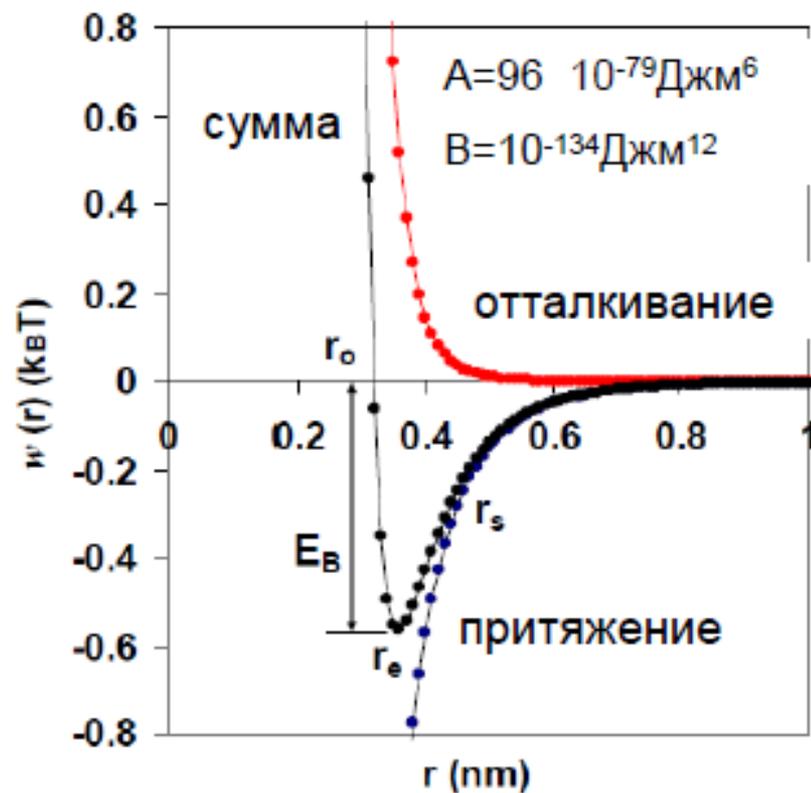
$T$  – температура а(К)

$E_B$  – связывающая энергия

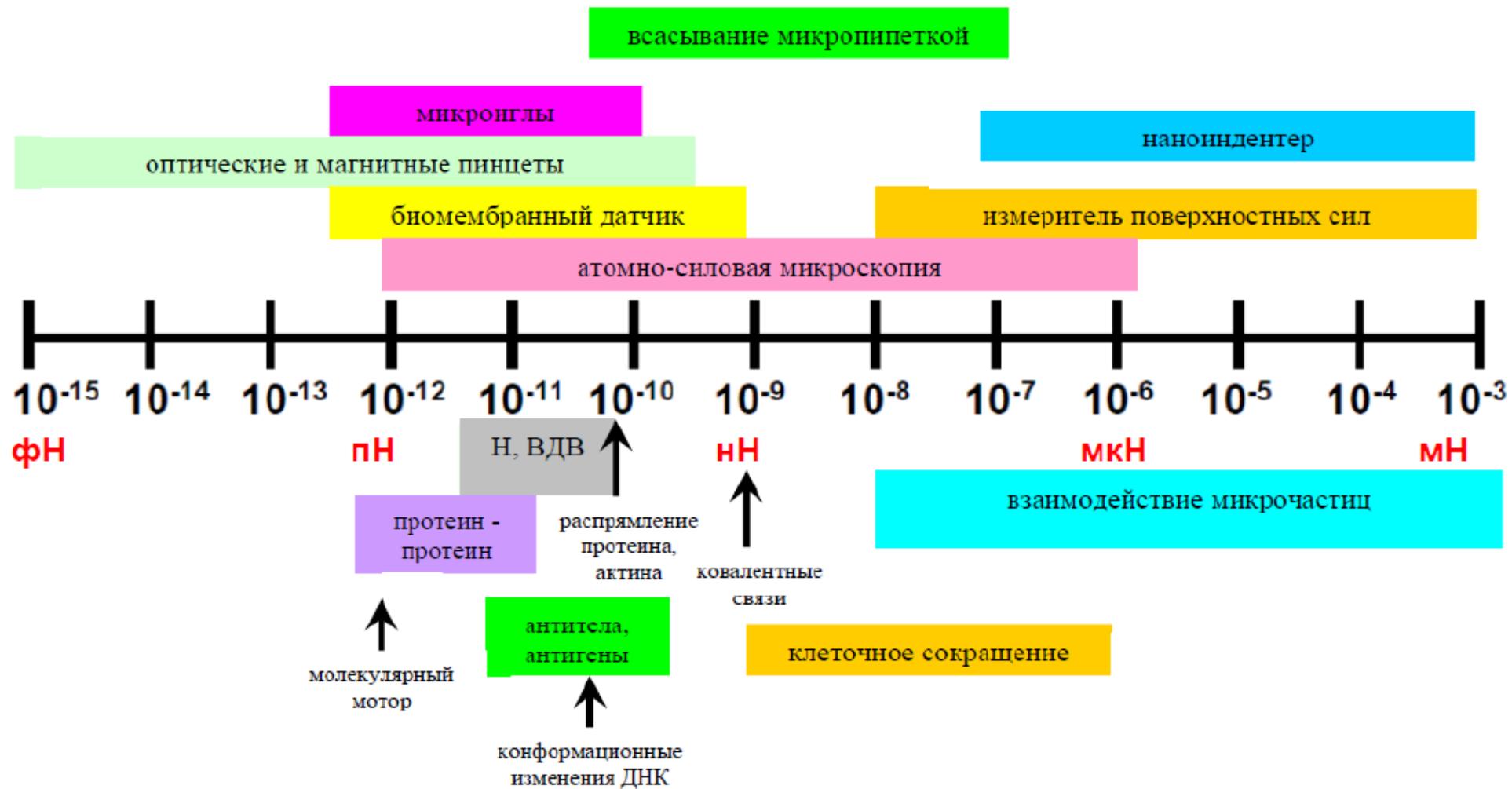
$r_s$  – точка перегиба  $F(r_s) = \min$

$r_e$  – равновесное расстояние  $F(r_e) = 0, U(r_e) = \min$

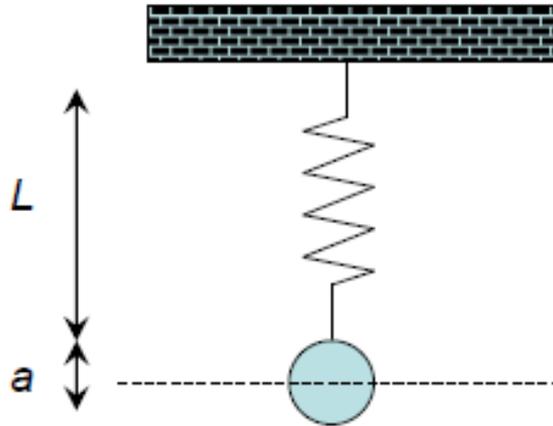
$r_0 = \sigma$   $U(r_0) = 0, F(r_0) = \infty$



# Величины сил в наномеханических системах



# Механические колебания в наносистемах



$$\omega = (k / m)^{1/2}$$

$$T = 2\pi / \omega$$

$$a \approx L \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} m \propto L^3 \\ k \propto L \end{array} \right\rangle \Rightarrow \omega \propto L^{-1}$$

Как правило амплитуда колебаний в наноразмерных системах оказывается сопоставимой с их линейными размерами. Поэтому приближение гармонического осциллятора оказывается неверным, и для анализа колебательных процессов необходим учет изменения параметров системы.

Когда представления  
классической физики не  
подходят для описания  
взаимодействий на  
наномасштабах?

# История физики твердого тела

8 июня 1912 г. в Баварской Академии наук в Мюнхене слушался доклад “Интерференция рентгеновских лучей”.

В первой части доклада Лауэ выступил изложением элементарной теории дифракции рентгеновских лучей на периодическом атомном ряду.

Во второй части – Фридрих и Книппинг сообщили о первых экспериментах по дифракции рентгеновских лучей в кристаллах.

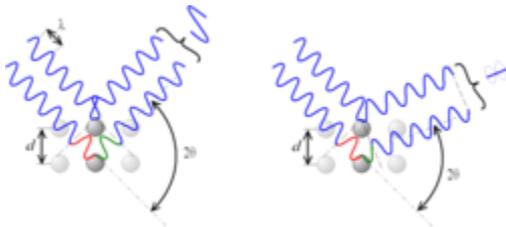
Макс фон Лауэ  
(Max von Laue) 1879-1960



Нобелевская премия по физике 1914 г. «за открытие дифракции рентгеновских лучей на кристаллах»

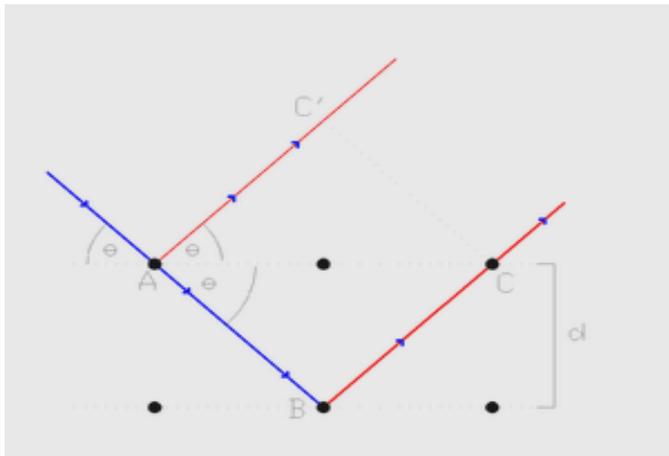
# Еще из истории физики твердого тела

В **1913 г.** У.Л.Брэггом с помощью рентгеновского дифракционного анализа были определены структуры кристаллов **KCl, NaCl, KBr и KI.**



$$n\lambda = 2d \cdot \sin \theta$$

Формула Брэгга-Вульфа



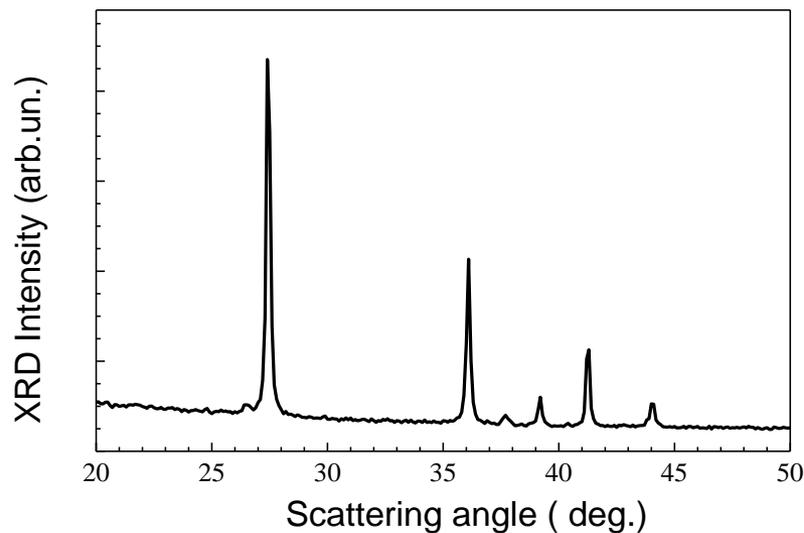
Сэр Уильям Лоренс Брэгг  
(*Sir William Lawrence Bragg*)  
1890 — 1971



*Нобелевская премия по физике 1915 г. (совместно со своим отцом Уильямом Генри Брэггом). Самый молодой нобелевский лауреат по физике за всю историю премии.*

# Рассеяние рентгеновских лучей и температура кристалла

П.Дебай : «Я пришел к заключению, что четкость интерференционных линий не должна изменяться, а их интенсивность должна уменьшаться с увеличением угла рассеяния; причем, чем выше температура, тем этот процесс должен быть заметнее»



Пётёр Йóзеф Вильгéльм Деба́й  
(1884-1966)



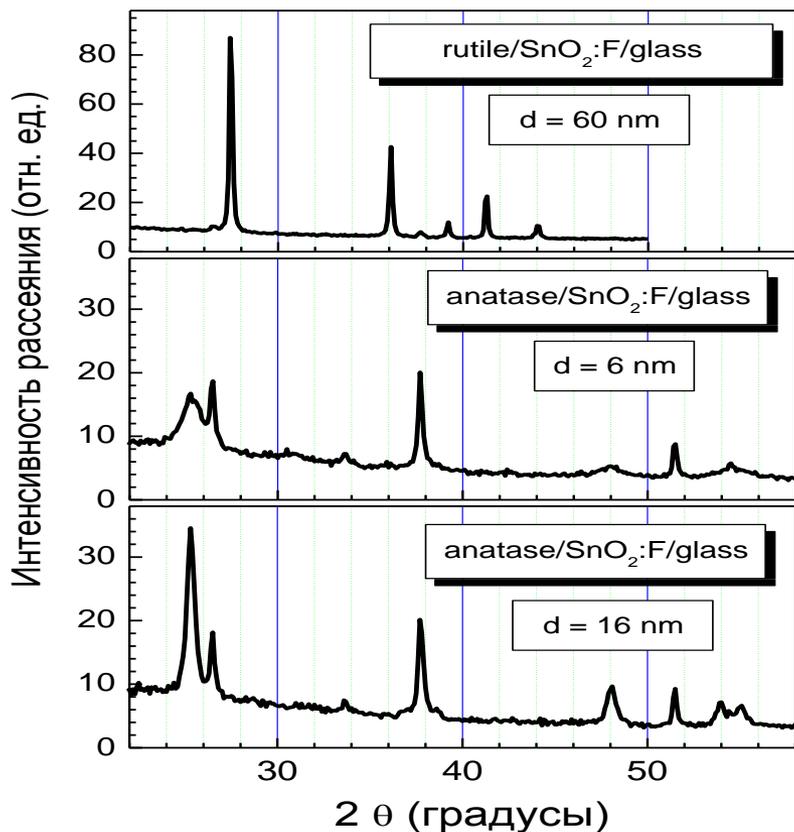
Лауреат [Нобелевской премии по химии](#) 1936 г.

# XRD и размеры кристаллов

Формула Дебая-Шеррера

Для ширины пика рассеяния рентгеновских лучей (X-ray diffraction, XRD) в нанокристаллах:

$$d = A\lambda / (\Delta\theta \cdot \cos\theta)$$

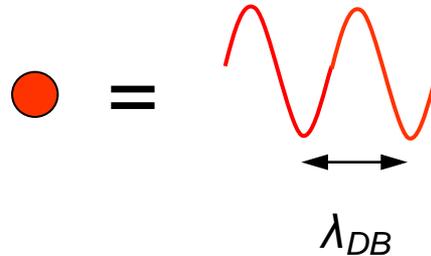


Пауль Шеррер  
(*Paul Scherrer*)  
1890 - 1969,  
швейцарский физик-  
экспериментатор

# Основные идеи и принципы квантовой механики

Волновые свойства частиц:

Корпускулярно-волновой дуализм



Длина волны де Бройля:

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$$

$h = 6.62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с - постоянная Планка

$p$  – импульс ( для частицы:  $p = mv$  )

Например,

1) Свободный электрон  $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31}$  кг при  $T_{\text{комн}} = 300$  К :

$$\lambda_{DB} \approx 3 \text{ нм}$$

2) Микроб с  $m = 10^{-15}$  кг ,  $v = 1$  мкм/с :  $\lambda_{DB} \approx 0.001 \text{ нм}$



Луи де Бройль  
(de Broglie)  
1892-1987

# Основы квантовой механики

## Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Для координаты и импульса:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

*! Размер волны не измерить точно на длинах:*

$$\Delta x \geq h / \Delta p_x \geq \lambda_{DB}$$

Для энергии и времени:

$$\Delta E \Delta t \geq h$$

*! Энергию волны не измерить точно на временах, меньше периода волны :*

$$\Delta t \geq h / \Delta E \geq 1/\nu = T$$

$$E = E_0 + \Delta E$$

*! Энергия частицы-волны не равна 0,  
даже если ее энергия покоя  $E_0 = 0$  !*

# Основы квантовой механики

## Волновая функция и уравнение Шредингера

Состояние частицы описывается волновой функцией:

$$\Psi(x, y, z, t)$$

Волновая функция имеет комплексный характер:  $\Psi = Ae^{i\varphi}$ ,

$A$  – амплитуда,  $\varphi$  – фаза,  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$ ,  $i = \sqrt{-1}$

Вероятность  $\Delta w$  найти частицу  
в объеме  $\Delta V$  :

$$\Delta w = |\Psi|^2 \Delta V = A^2 \Delta V !$$

**Уравнение Шредингера** (для частицы массой  $m$  в стационарном поле с потенциальной энергией  $U(x)$ ):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (U(x) - E)\Psi = 0$$

Если  $U(x) = \text{const}$ , то получим уравнение колебаний (!) :

$$\Psi'' + \Omega^2 \Psi = 0$$

$$\Omega = \sqrt{2m(E - U)}/\hbar$$

# Основы квантовой механики

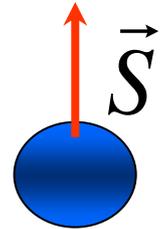
## Спин частицы и принцип Паули

Многие частицы обладают собственным моментом количества движения - спином .

Для электрона его значение равно:

или просто  $s = \frac{1}{2}$  , в единицах  $\hbar$  .

$$S = \frac{1}{2} \hbar = \frac{h}{4\pi}$$



Проекция спина электрона на некоторую ось z принимает значения:  $s_z = -\frac{1}{2}; +\frac{1}{2}$

! Спину соответствует собственный магнитный момент, а значит появляется добавочная энергия частицы в магнитном поле !

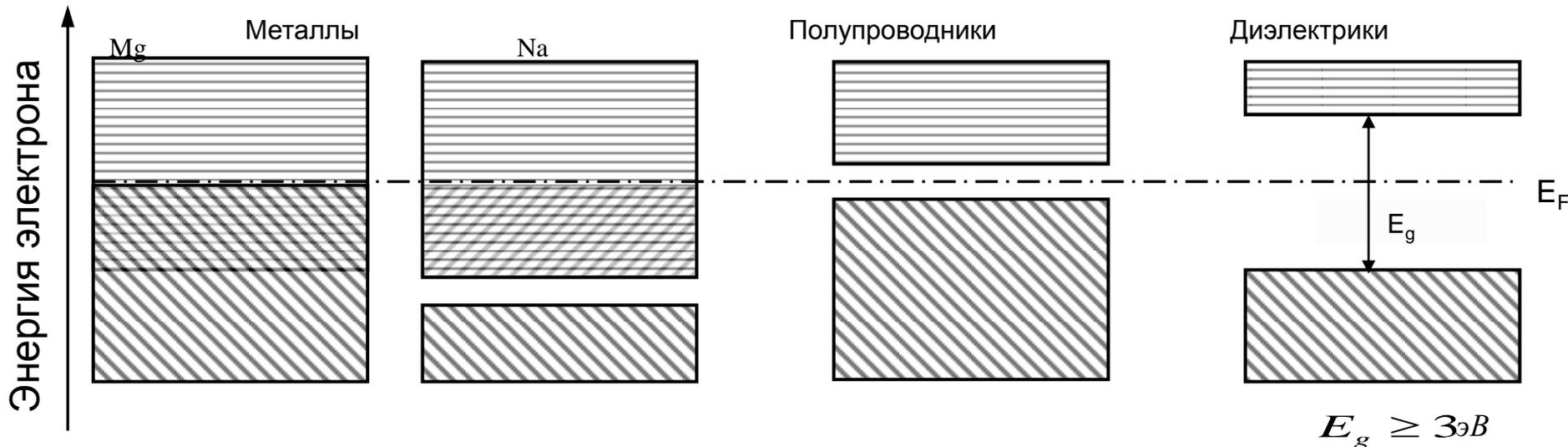
**Принцип Паули:** в атоме в каждом состоянии с квантовыми числами  $(n, l, m)$  может находиться не более 2-х электронов с противоположными проекциями спина.

! Принцип Паули позволяет объяснить внутреннюю структуру атомов и обосновать построение периодической системы элементов Д.И.Менделеева.

# Элементы квантовой теории твердых тел

## Виды твердых тел и квазичастиц

По своим электронным свойствам твердые тела подразделяются на **металлы, полупроводники и диэлектрики**, что схематично можно представить на упрощенной **зонной схеме**:



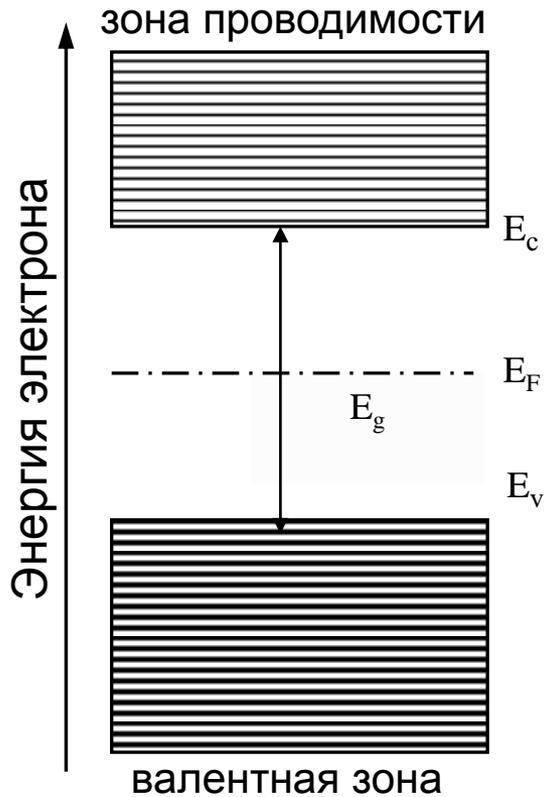
Вследствие взаимодействий с большим числом атомов в твердом теле существуют не изолированные свободные электроны, а квазичастицы: электроны проводимости ( $q_e = -e = -1.6 \cdot 10^{-19}$  Кл) и незаполненные места в валентной зоне - дырки ( $q_h = e = 1.6 \cdot 10^{-19}$  Кл).

Эффективные массы электронов и дырок:  $m^* = (0.1 - 2)m_0$

Колебания атомов в твердом теле соответствует квазичастицы – фононы.

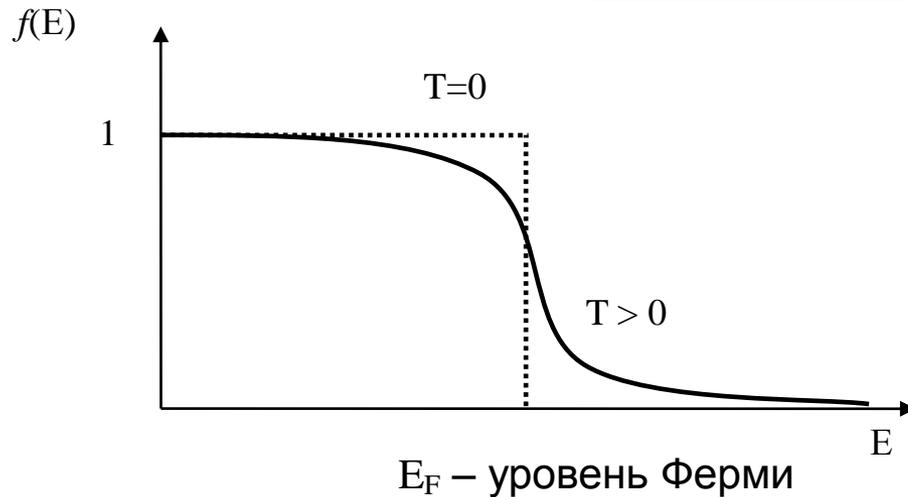
# Элементы квантовой теории твердых тел

## Упрощенная зонная диаграмма полупроводника и функция заполнения состояний



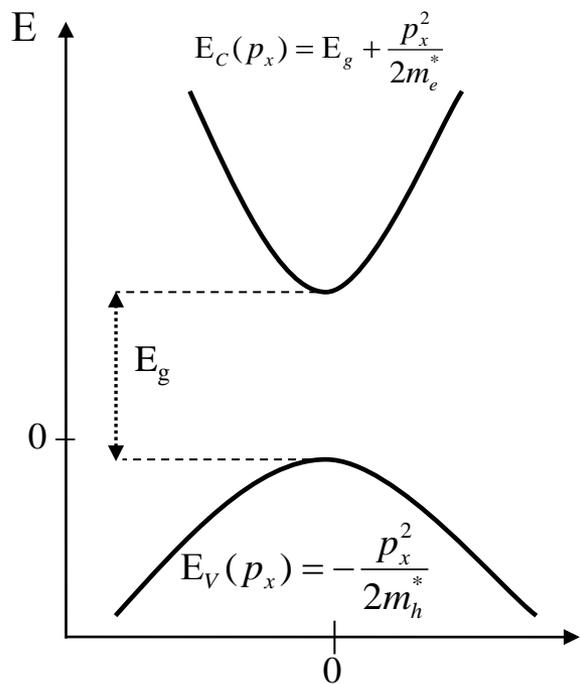
Статистика Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1}$$



Электроны имеют полуцелый спин, они подчиняются статистике Ферми-Дирака.

# Зависимость энергии электрона от квазиимпульса вблизи краев зон в полупроводниковом кристалле (законы дисперсии для прямозонного полупроводника)



$p_x$  – проекция квазиимпульса

$$E_C(\vec{p}) = E_g + \frac{p^2}{2m_e^*} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

$$E_V(\vec{p}) = -\frac{p^2}{2m_h^*} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

Квазиимпульс :  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

Квазиволновой вектор:  $\vec{k}$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda_e} \Rightarrow p = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_e} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda_e} = \frac{h}{\lambda_e}$$

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r})$$

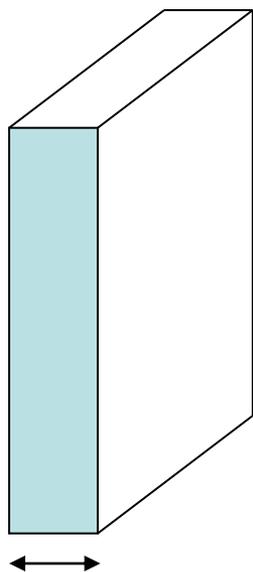
$$\lambda_e \rightarrow \lambda_{DB}$$

Электрон в кристалле – квазичастица-волна, которые иногда называются блоховскими волнами, по имени ученого Ф.Блоха.

# Основные типы идеальных твердотельных наноструктур

2D

Квантовая  
яма



$d$

1D

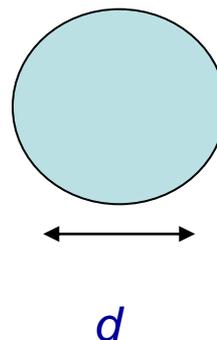
Квантовая  
нить



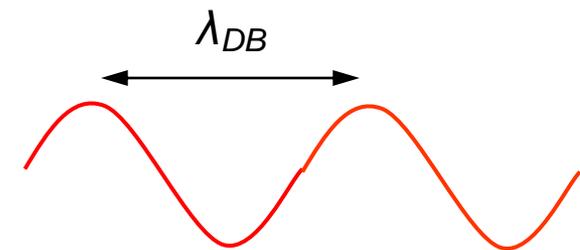
$d$

0D

Квантовая  
точка



$d$



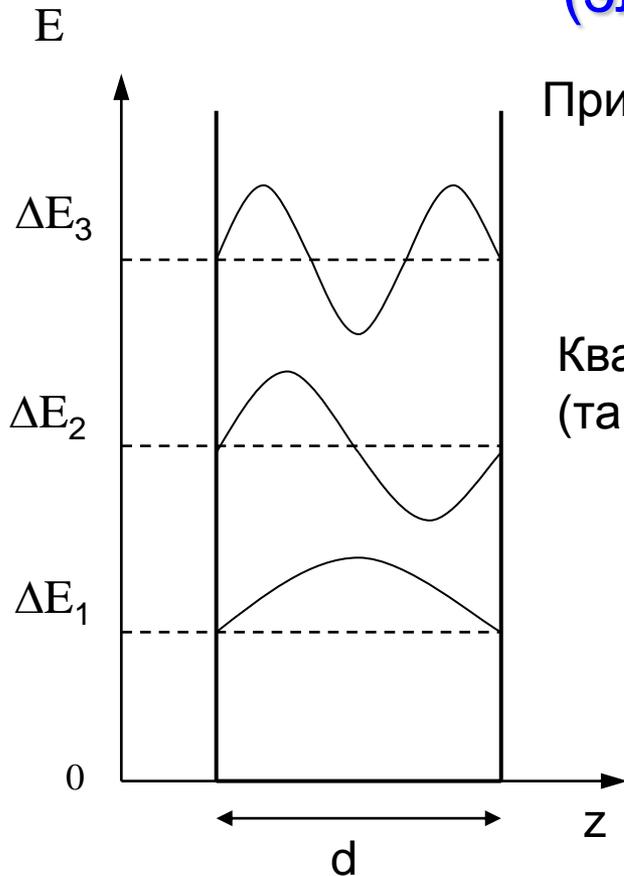
$$d \sim \lambda_{DB} = h / p$$

$p$  – квазиимпульс  
электрона или  
дырки в кристалле

Для электрона в полупроводнике с  $m_e^* = (0.1-1) m_0$  :  $3 \text{ нм} < \lambda_{DB} < 30 \text{ нм}$

В наноструктурах с минимальными размерами 1 -100 нм электроны, дырки и другие квазичастицы будут испытывать ограничения при движении, что приводит к квантовому размерному эффекту.

# Квантовый размерный эффект для электронов в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (электрон в квантовой яме)



При отражении от стенок ямы возникают стоячие волны:

$$\frac{1}{2} n \lambda_e = d \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Квазиимпульс  $p_e$  в направлении  $z$  квантуется (так называемое *вторичное квантование*)

$$p_{ez} = \frac{h}{\lambda_e} = \frac{h}{2d} n$$

Квантово-размерная добавка к энергии частицы:

$$\Delta E_{en} = \frac{p_{ez}^2}{2m_e^*} = \frac{h^2}{8m_e^* d^2} n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* d^2} n^2$$

Уровни размерного квантования  $n = 1, 2, 3, \dots$  с энергиями :  $\Delta E_1, \Delta E_2, \Delta E_2, \dots$

# Квантовый размерный эффект в квантовой яме (прямозонный полупроводник)

Полная энергия электрона:  $E_e(\vec{p}) = E_e(\hbar\vec{k})$

$$E_e(\vec{p}) = E_c(p_x, p_y) + \Delta E_e = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_e^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* d^2} n^2$$

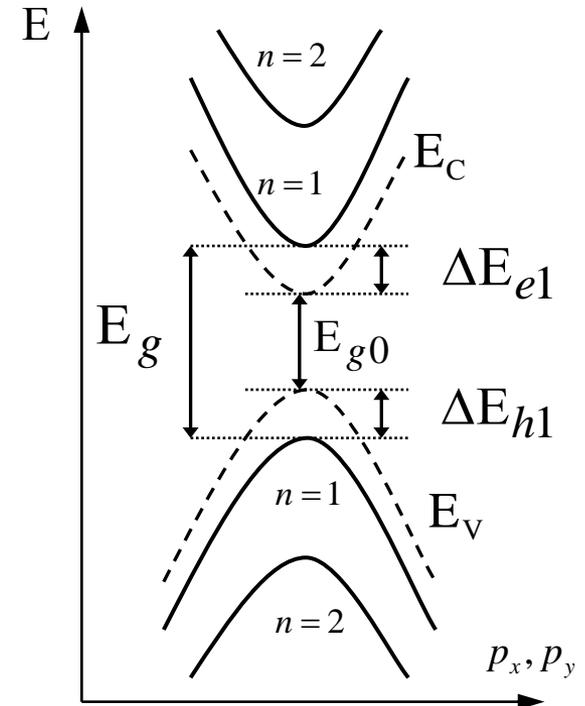
Полная энергия дырки:

$$E_h(\vec{p}) = E_v(p_x, p_y) + \Delta E_h = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_h^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_h^* d^2} n^2$$

Квантово-размерное увеличение ширины запрещенной зоны (n=1):

$$E_g = E_{g0} + \Delta E_g = E_{g0} + \frac{\pi \hbar^2}{2d^2 m_r^*}$$

Приведенная масса:  $\frac{1}{m_r^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$



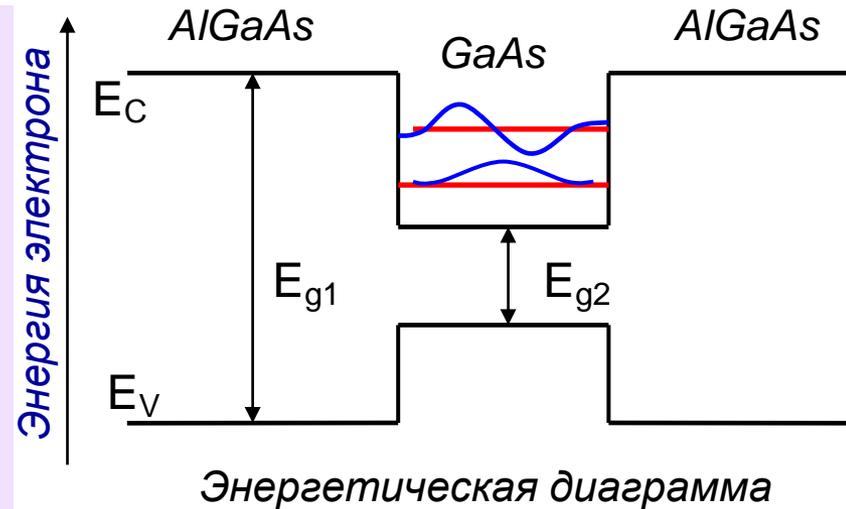
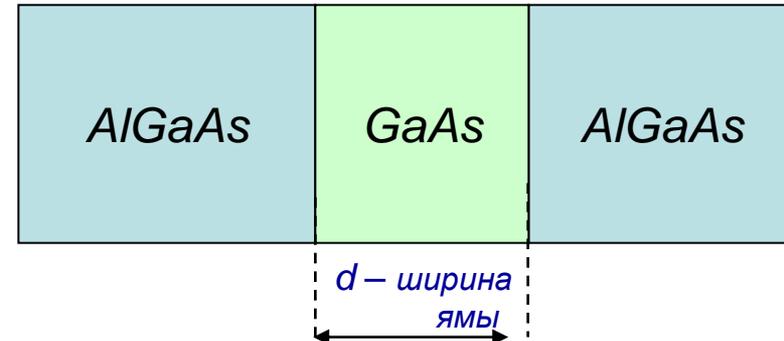
Квантово-размерная добавка к ширине запрещенной зоны возрастает обратно пропорционально квадрату ширины квантовой ямы  $d$ .

# Квантовые ямы в полупроводниковых гетероструктурах

*Гетероструктура* – структура из двух различных полупроводников (с разной шириной запрещенной зоны  $E_g$ ). *Запрещенная зона* – энергетический зазор между заполненными и незаполненными разрешенными энергетическими зонами в твердом теле.

Квантовая яма образуется в слое полупроводника с узкой запрещенной зоной, заключенном между двумя полупроводниками, обладающими более широкой запрещенной зоной:  $E_{g1} > E_{g2}$ . Обычно  $d = 2-10$  нм. *Меняя  $d$ , можно изменять электронные и оптические свойства гетероструктур.*

Схематичное изображение двойной гетероструктуры:



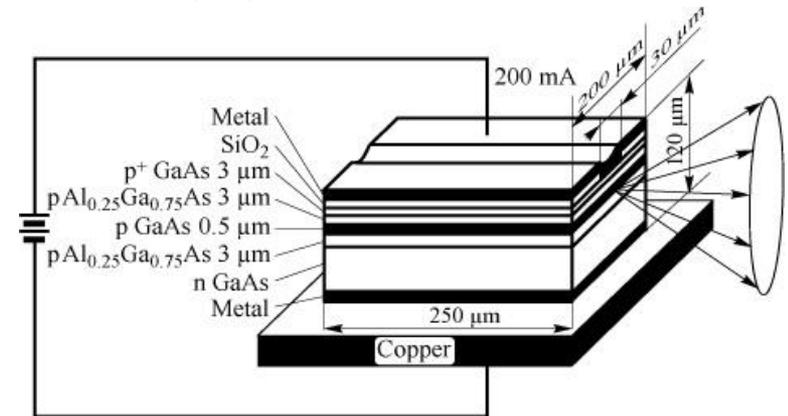
*Использование двойной полупроводниковой гетероструктуры с узким (единицы нм) слоем полупроводника позволяет создавать квантовые ямы и ветоизлучающие оптоэлектронные устройства (светодиоды и лазеры).*

# Полупроводниковые лазеры

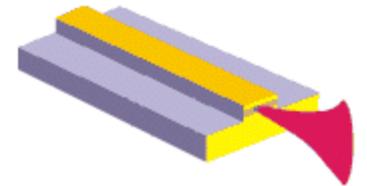
В полупроводниковом лазере (лазерном диоде) используется явление вынужденных оптических переходов, что дает усиление сигнала электролюминесценции при отражении от стенок резонатора, образованного специально подготовленными боковыми гранями.

С целью уменьшения пороговой плотности тока  $J_{th}$  были реализованы лазеры на гетероструктурах (с одним гетеропереходом: n-GaAs-p-GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$ ; и с двумя гетеропереходами:  $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$ ).

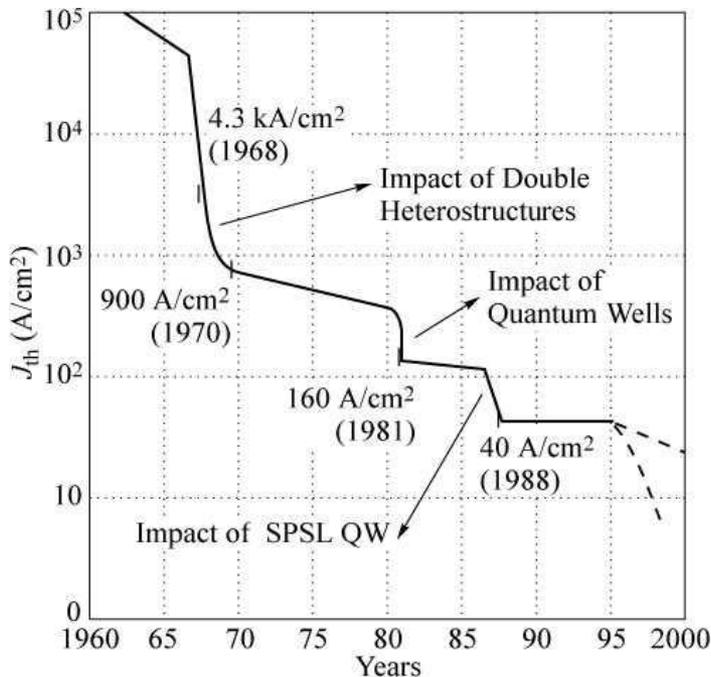
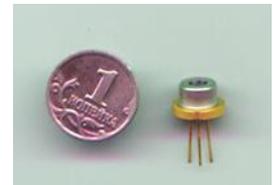
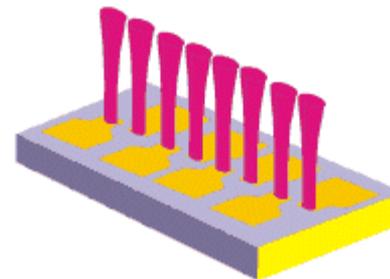
Полупроводниковые лазеры на гетероструктурах



Полосковые лазеры



Вертикальные лазеры:



# Контрольные вопросы к Лекции 2

1. Какие из основных физических взаимодействий наиболее значимы для свойств нанобъектов?
2. Что такое силы Ван-дер-Ваальса?
3. Что такое корпускулярно-волновой дуализм?
4. Что такое спин частицы и на что он влияет?
5. Какие электронные состояния существуют в твердых телах согласно квантовой теории?
6. Что такое квантовый размерный эффект?
7. Как образуется полупроводниковая гетероструктура и где она может использоваться?