# Введение в нанотехнологии

Виталий Эдуардович Гасумянц

Почта: [vgasum@yandex.ru](mailto:vgasum@yandex.ru) (Прислать список)

Литература: Введение в нанотехнлогии Марголин, Жабрев, Лукьянов

Основы нанотехнологий Кузнецов, Нанотворцев, Жабрев

Физические основы (авторство кафедры)

## Лекция 1

### Что такое нанотехнологии?

Это область фундаментальной и прикладной науки и техники, имеющая дело с совокупностью теоретического обоснования, и практических методов исследования, анализа и синтеза, а также методов производства и применения продуктов с заданной атомной структурой путем контролируемого манипулирования отдельными атомами и молекулами.

### Немного истории

Ричард Фейнман (1959 г.)

По мере уменьшения размеров будет происходить изменение свойств и физических явлений.

Норио Танигути (1974 г.) — японский физик, впервые предложивший термин «нанотехнологии».

Минимальный объект, который можно увидеть с помощью излучений равен одной длине волны этого излучения (1–0.5 микрона).

Ким Эрик Дрекслер — известный американский ученый, «отец нанотехнологий»

### Классификация наноматериалов

(картинка...)

### Классификация твердых тел

Существуют различные классификации.

1. По степени упорядоченности в расположении атомов.
   1. Кристаллические (все атомы жестко расположены друг относительно друга)
   2. Аморфные (порядка нет)
   3. Стеклообразные (промежуточная стадия, на относительно большом масштабе кристаллическая решетка, а дальше аморфная)
2. По способности проводить электрический ток.
   1. Диэлектрики
   2. Проводники (металлы напр.)
   3. Полупроводники
3. По размерности.
   1. Объемные (3D системы)
   2. Двумерные
   3. Одномерные
   4. Нульмерные (Квантовые системы)
4. И так далее.

### Атомарная структура твердых тел

1. Аморфные

Атомы расположены в разных точках произвольным образом. Отсутствует упорядочение в решетку.

1. Стеклообразные

Характеризуются ближним порядком расположения атомов. Атомы расположены упорядоченным образом в локальных областях материала.

1. Кристаллические

Атомы в любых разных точках расположены одинаковым образом. Можно ввести понятие кристаллической решетки. Обладают дальним порядком расположения.

### Симметрия кристаллических твердых тел

Важнейшее отличительное свойство кристаллов — наличие пространственной периодичности в расположении атомов (наличие атомарной ячейки)

Структура элементарной ячейки кристалла характеризуется 3-мя элементарными векторами трансляции — a1, a2, a3

Два типа симметрии:

1. Симметрия элементарной ячейки — совокупность преобразований пространства (элементов симметрии), переводящих ячейку в саму в себя. Точечная группа симметрии.
2. Трансляционная симметрия — симметрия кристалла относительно сдвигов в пространство на определенные расстояния в заданных направлениях. Бесконечное периодическое расположение микроскопического элемента структуры.

Семейство векторов трансляций — T = n1a1+n2a2+n3a3 (n1, n2, n3 — целые числа)

Дефекты всегда будут существовать. Производство стремится к сокращению этих дефектов.

Различные вещества кристаллизуются в решетки различного типа:

* По сложности
* По химической связи
* Типу симметрии
* По размеру элементарной ячейки

Чем определяется тип и размер решетки?

Один из основных общих принципов, лежащих в основе всех происходящих процессов, является **принцип минимизации энергии.**

Любая система стремится перейти в состояние с минимально возможным значением энергии, которое является ее наиболее устойчивым состоянием.

Потенциал Леннарда-Джонса

### Симметрия элементарной ячейки

Тип симметрии ячейки зависит от соотношения длины ее ребер и углов между ними.

Самая симметричная решетка — кубическая, самая не симметричная — триклинная.

Примеры структур реальных кристаллов:

Металлы: железо (кубическая объемоцентрированная), медь (кубическая гранецентрированная)

Полупроводники

Кремний, Германий – полупроводники из одного вещества. (структура типа алмаза)

Арсенид галия

### Следствия

1. Трансляционная симметрия. Свойства кристаллов в точках, смещенных друг относительно друга на любой из векторов трансляции, является абсолютно одинаковыми

* Возможность введения для описания свойств кристаллов **обратного пространства**.

x см -> к см^-1

Преобразование Фурье.

Свойства обратного пространства:

* Обратное пространство, как и прямое обладает периодичностью.

T = n1a1+n2a2+n3a3 => G = n1g1+n2g2+n3g3 gi = 2pi/ai

* Все точки обратного пространства, смещенные на любой G, являются эквивалентными.

1. Симметрия элементарной ячейки. Она определяет симметрию физических свойств кристалла.

* Многие коэффициенты, характеризующие физические свойства кристалла, не являются скалярными величинами.

Пример: закон Ома

U = RI => E(вект) = (ро)\*j(вект)

E(вект) — напряженность поля

Ро — удельное сопротивление

j(вект) — плотность тока

Удельная характеристика не зависит от геометрических свойств материала.

j(вект) = (jx,0,0) => Ex =pxxjx

j(вект) = (0,jy,0) => Ey =pyyjy

j(вект) = (0,0,jz) => Ex =pzzjz

a != b != c

* Ex != Ey != Ez

### Электрическая проводимость твёрдых тел

1. Проводники — вещества, в которых есть свободные электрические заряды (электроны). Количество свободных зарядов очень велико (в металлах — порядка числа атомов). Свободные заряды под действие электрического поля могут перемещаться по объему
2. Диэлектрики — вещества, в которых свободные электрические заряды практически отсутствуют. Они состоят из электрически нейтральных атомов молекул. Заряженные частицы являются связанными и не могут свободно перемещаться по объему.
3. Полупроводники — вещества, в которых есть свободные электрические заряды, но их количество существенно меньше, чем в проводниках, и сильно зависит от температуры.

При очень низких температурах нелегированные полупроводники являются диэлектриками.

С повышением температуры число электронов и проводимость растет.

### Уровни энергии электрона в изолированном атоме

Электроны в атомах располагаются на **атомных орбиталях**, последовательно заполняя их.

**Атомная орбиталь** — область наиболее вероятного расположения электрона в пространстве вблизи атома.

В квантовой механике вид орбиталей может быть получен путем решения уравнения Шредингера для электрона, находящегося под действием кулоновского потенциала протона. Результат — главное квантовое число. **Энергия электрона принимает дискретные значения** (в квантовой механике).

### Зонная структура кристаллических тел

Одиночные атомы далеко друг от друга (ток не потечет)

В изолированном атоме электрон может иметь только дискретные значения энергии.

=>

сдвигаем атомы в кристалл (ток потечет, электрон будет бегать по кристаллу)

Атомный уровень энергии расщепляется в диапазон возможных энергий — **зону**.

Энергетический спектр электрона в любом кристалле представляет собой последовательное чередование разрешенных и запрещенных энергетических зон.

**Металлы**

ЭпсилонF — энергия Ферми — величина уровня верхней по энергии зоны, в которой есть электроны, и она заполнена частично.

При T = 0K металл имеет огромное количество электронов.

С ростом температуры количество электронов не изменится.

**Диэлектрики**

Верхняя по энергии зона с электронами заполнена полностью.

При T = 0K свободные электроны полностью отсутствуют.

С ростом температуры кол-во электронов практически не появится.

**Полупроводники**

Интервал энергий, отделяющий полностью заполненную зону от следующей разрешенной **достаточно мал**.

При T = 0K в полупроводнике свободные электроны полностью отсутствуют.

С ростом температуры число свободных электронов последовательно возрастает.

Зоны в полупроводниках:

* Зона видимости
* Запрещенная зона
* Валентная зона

### Основные свойства металлического состояния

* Упорядочены в кристаллическую решетку
* Каждый атом отдает валентный электрон
* Решетка сформирована ионами
* Валентные электроны становятся общими и образуют электронный газ

Особенности свойств электронов в металлах

* Число электронов очень велико. Действие зарядов ионов на выделенный электрон экранировано другими электронами. Потенциал очень мал.

Электроны в металле могут рассматриваться как **свободный электронный газ.**

## Лекция 2

### Как описывать электроны в кристаллах

Описать свойства частиц микромира в рамках классической механики принципиально невозможно.

Пример:

* Электрон в атоме водорода

….

Выводы:

Электрон в ряде опытов «проявляет» не свойства частицы, а волновые свойства.